

# **Spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie an magnetischen Nanostrukturen: Fe/W(110)**

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
des Fachbereichs Physik  
der Universität Hamburg

vorgelegt von  
**André Kubetzka**  
aus Oldenburg

Hamburg  
2002

Gutachter der Dissertation:

Prof. Dr. Roland Wiesendanger

Prof. Dr. Jürgen Kötzler

Gutachter der Disputation:

Prof. Dr. Roland Wiesendanger

Prof. Dr. Wilfried Wurth

Datum der Disputation:

29.4.2002

Vorsitzender des Promotionsausschusses:

Prof. Dr. F.-W. Büßer

gewidmet: Christel Mielenz und Marga Kubetzka



# Inhaltsangabe

Diese Arbeit befaßt sich mit spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie (SP-STM/-STS) an magnetischen Nanostrukturen und ultradünnen Filmen bei tiefen Temperaturen und im Ultrahochvakuum. Schwerpunkt der Untersuchungen ist das System Fe/W(110), das im Bedeckungsbereich um zwei atomare Lagen Fe eine überraschende Komplexität der magnetischen Domänenstrukturen zeigt. Diese ergibt sich sowohl aus der Nanostruktur der untersuchten Filme, als auch aus deren intrinsischen Eigenschaften. Die angewandte Technik eignet sich dabei in besonderer Weise für eine Charakterisierung, da strukturelle, elektronische und magnetische Eigenschaften auf der Nanometerskala simultan untersucht und direkt korreliert werden können.

Neben ferromagnetischen Tunnelspitzen kommen dabei erstmals auch antiferromagnetische zum Einsatz, die wegen ihres verschwindenden Streufeldes das Problem einer Beeinflussung der zu untersuchenden Probe lösen, und damit die Untersuchung selbst weichmagnetischer Materialien und superparamagnetischer Teilchen ermöglichen. Ferner zeigt sich, daß selbst mit nichtmagnetischen Tunnelspitzen die Abbildung von Domänenwänden möglich ist, da diese lokal eine Änderung der elektronischen Struktur der Oberfläche bewirken. Schließlich wird an einer antiferromagnetischen Monolage Mn/W(110) demonstriert, daß SP-STM letztlich eine magnetische Abbildung auf der atomaren Skala ermöglicht.

## Abstract

In this work spinpolarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy (SP-STM/-STS) is employed to investigate magnetic nanostructures and ultrathin films at low temperatures and in ultrahigh vacuum. The main subject is the system Fe/W(110), which, in the coverage regime of about two atomic layers Fe, exhibits a surprising complexity of magnetic domain structures. This complexity arises from the films' nanostructure, as well as from their intrinsic magnetic properties. SP-STM proves to be an ideal tool for characterisation, since structural, electronic, and magnetic properties can be investigated simultaneously on the nanometer scale and correlated directly.

Along with ferromagnetic tips, for the first time antiferromagnetic tips are employed, which, due to their vanishing stray field, solve the problem of an influence on the sample, and thereby enable the investigation of soft magnetic materials and superparamagnetic particles. Furthermore, it is shown that even nonmagnetic tips allow an imaging of domain walls, since the walls locally modify the electronic structure of the surface. Finally, an antiferromagnetic monolayer Mn/W(110) is imaged, which demonstrates that SP-STM has ultimately a resolution at the atomic scale.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Einführung in den Magnetismus</b>	<b>3</b>
2.1	Einleitung . . . . .	3
2.2	Stoner-Modell des Ferromagnetismus . . . . .	4
2.3	Mikromagnetismus . . . . .	5
2.3.1	Energiterme . . . . .	6
2.3.2	Energieminimierung . . . . .	8
2.3.3	Zeitliche Entwicklung . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Rastertunnelmikroskopie</b>	<b>11</b>
3.1	Übersicht . . . . .	11
3.2	Eindimensionaler Tunneleffekt . . . . .	12
3.3	Topographie der Oberfläche . . . . .	14
3.4	Spektroskopie der lokalen Zustandsdichte . . . . .	16
3.5	Spinpolarisiertes Tunneln . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Abbildungsmodi des SP-STM</b>	<b>22</b>
4.1	Topographischer Modus . . . . .	22
4.2	Spektroskopie . . . . .	24
4.3	Karten der differentiellen Leitfähigkeit . . . . .	27
4.4	Nichtmagnetische Spitzen . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>32</b>
5.1	UHV-Kammersystem . . . . .	32
5.2	Magnetkryostat . . . . .	32
5.3	Das Rastertunnelmikroskop . . . . .	34
5.4	Substrat- und Spitzenpräparation . . . . .	34
<b>6</b>	<b>Magnetische Nanostrukturen: Fe/W(110)</b>	<b>38</b>
6.1	Bisherige Ergebnisse . . . . .	38
6.2	DL-Streifen am Übergang zum geschlossenen Film . . . . .	41
6.3	Streifendomänen . . . . .	45
6.3.1	Modellierung . . . . .	45
6.3.2	360°-Domänenwände im <i>B</i> -Feld . . . . .	46
6.3.3	Richtung der 180°-Domänenwände . . . . .	50

6.3.4	Chiralität . . . . .	52
6.4	Antiferromagnetische und ferromagnetische Spitzen . . . . .	54
6.5	Nichtmagnetische Spitzen . . . . .	59
6.6	Fe DL-Inseln auf W(110) . . . . .	64
6.6.1	Bedeckungsabhängigkeit der Domänenstruktur . . . . .	65
6.6.2	Kopplung zur umgebenden Monolage . . . . .	67
<b>7</b>	<b>2D Antiferromagnetismus: 1 ML Mn/W(110)</b>	<b>71</b>
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>75</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>77</b>
	<b>Publikationen</b>	<b>81</b>

# Akronyme

<b>AF</b>	antiferromagnetisch
<b>DL</b>	Doppellage = zwei atomare Lagen
<b>FM</b>	ferromagnetisch
<b>LEED</b>	Niederenergie-Elektronenbeugung
<b>ML</b>	Monolage = eine atomare Lage
<b>MOKE</b>	Magneto-optischer Kerreffekt
<b>RT</b>	Raumtemperatur $\approx 20^\circ\text{C} = 293\text{ K}$
<b>SEM</b>	Rasterelektronenmikroskop, -mikroskopie
<b>SOC</b>	Spin-Bahn-Kopplung
<b>SP</b>	spinpolarisiert
<b>STM</b>	Rastertunnelmikroskop, -mikroskopie
<b>STS</b>	Rastertunnelspektroskopie
<b>TH-Modell</b>	Tersoff-Hamann-Modell [18]
<b>TOM</b>	Torsions-Oszillation-Magnetometrie
<b>UHV</b>	Ultrahochvakuum ( $< 10^{-9}$ mbar)



# Kapitel 1

## Einleitung

Die kollektive Ordnung der magnetischen Momente in einem Festkörper ist ein quantenmechanisches Phänomen, das von der kurzreichweitigen sogenannten Austauschwechselwirkung der atomaren Spins hervorgerufen wird. Für die Untersuchung grundlegender magnetischer Eigenschaften ist daher ein magnetisches Abbildungsverfahren mit atomarer Auflösung von prinzipieller Bedeutung und wird um so wichtiger, je kleiner die magnetischen Strukturen sind, d.h. je kleiner die Skala ist, auf der sich die Magnetisierung ändert. Offensichtlich wird der Nutzen eines solchen Verfahrens bei der Untersuchung antiferromagnetischer Materialien, bei denen benachbarte Atome entgegengesetzte magnetische Momente besitzen.

Magnetismus in reduzierten Dimensionen hat sich in den vergangenen Jahren – nicht zuletzt wegen der technologischen Bedeutung in Hinblick auf magnetische Speichermedien – zu einem Schwerpunkt der Grundlagenforschung entwickelt. Die Fortschritte in der Vakuumtechnik und bei den Präparationsverfahren ermöglichen dabei heute die gezielte Erzeugung von magnetischen Nanostrukturen, die im Vergleich zu Volumenkristallen eine Vielzahl neuer magnetischer Eigenschaften und Phänomene zeigen [1]. Von besonderem Interesse ist dabei das Wechselspiel von Struktur, elektronischen und magnetischen Eigenschaften.

Die in dieser Arbeit angewandte Technik der spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie (SP-STM) ist eine Weiterentwicklung der von BINNIG und ROHRER 1982 zum ersten Mal eingesetzten Rastertunnelmikroskopie [2]. Statt nichtmagnetischer Spitzen wird bei der SP-STM ein Spitzenmaterial verwendet, das am Fermi-Niveau eine nichtverschwindende Spinpolarisation aufweist, beispielsweise ein ferromagnetisches Material. Der Tunnelstrom wird dadurch abhängig vom Spin der tunnelnden Elektronen und damit von der Spinpolarisation und der Magnetisierungsrichtung der Oberfläche. Das ermöglicht die Abbildung der Domänenstruktur einer Oberfläche mit der aus konventionellen STM-Messungen bekannten hohen Ortsauflösung.

Trotz der konzeptionellen Einfachheit dieses Ansatzes hat es seit dem ersten Nachweis spinpolarisierten Tunnelns mit dem STM durch WIESENDANGER *et al.* 1990 [3] in den darauf folgenden Jahren kaum Fortschritte bei der magnetischen Abbildung auf der Nanometerskala gegeben. Basierend auf den Arbeiten von BODE *et al.* [4] hat sich SP-STM erst in den letzten Jahren zu einer routinemäßig eingesetzten Technik entwickelt. Die Zahl der weltweit publizierten SP-STM-Untersuchungen ist aber selbst heute noch extrem gering. Dies liegt zum einen an den technischen Schwierigkeiten einer *in vacuo* Spitzenpräparation und zum anderen an der Notwendigkeit einer zweifelsfreien Trennung des magnetischen Signals von elektronischen und topographischen Effekten.

Die hier vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 werden die Grundlagen des

Magnetismus und der mikromagnetischen Theorie dargestellt, um eine theoretische Basis für die Diskussion und Modellierung der untersuchten Systeme zu schaffen. Es folgt in Kapitel 3 eine Einführung in die Theorie der Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie, die einen Abschnitt über das spinpolarisierte Tunneln einschließt. Davon ausgehend werden in Kapitel 4 vier unterschiedliche Meßmodi, die die Abbildung magnetischer Strukturen mit dem STM erlauben, vorgestellt und kritisch beleuchtet. Dabei zeigt sich, daß quantitative Aussagen über die Spinpolarisation der Oberfläche in der Regel schwierig und nur unter speziellen Voraussetzungen möglich sind. Nach einer kurzen Darstellung des experimentellen Aufbaus und der für SP-STM notwendigen technischen Voraussetzungen in Kapitel 5 folgt dann in Kapitel 6 der Kernteil dieser Arbeit, die Darstellung der Untersuchungen an 1–3 Monolagen (ML) Fe/W(110). Schwerpunkte sind dabei die Eigenschaften von Domänenwänden im Nullfeld und in externen Magnetfeldern, sowie die Abhängigkeit der Domänenstruktur von der Nanostruktur der Filme. In vielen Fällen liefern dabei bereits einfache mikromagnetische Modellrechnungen eine adäquate Beschreibung der magnetischen Strukturen. Die vielleicht überraschendste experimentelle Entdeckung ist die Chiralität (Händigkeit) der sich zwischen 1.5 und 2 ML Fe ausbildenden Streifendomänen. Mögliche Ursachen dafür werden diskutiert. Parallel zur Untersuchung der Oberflächen ist es notwendig und auch möglich, auf die Eigenschaften und Unterschiede ferromagnetischer, antiferromagnetischer und nichtmagnetischer Tunnelspitzen einzugehen. Den Abschluß bildet die Abbildung einer antiferromagnetischen Monolage Mn/W(110) in Kapitel 7, wodurch demonstriert wird, daß die angewandte Methode letztlich ein laterales magnetisches Auflösungsvermögen auf der atomaren Skala besitzt.

## Kapitel 2

# Einführung in den Magnetismus

Elektrische und magnetische Felder sind innerhalb der Maxwell-Gleichungen nicht symmetrisch: Während elektrische Ladungen die Quellen des elektrischen Feldes darstellen, gibt es keine entsprechenden freien magnetischen Ladungen, nur magnetische Dipole. Dennoch hält die Suche nach magnetischen Monopolen in der Elementarteilchenphysik seit einer Vorhersage von 1931 durch P.A.M. DIRAC [5] an, bisher jedoch ohne Erfolg.

Ich möchte im folgenden eine kurze Einführung in den Magnetismus des Festkörpers geben und anschließend die Grundzüge mikromagnetischer Theorie erläutern, soweit mir dies zum Verständnis dieser Arbeit notwendig erscheint.

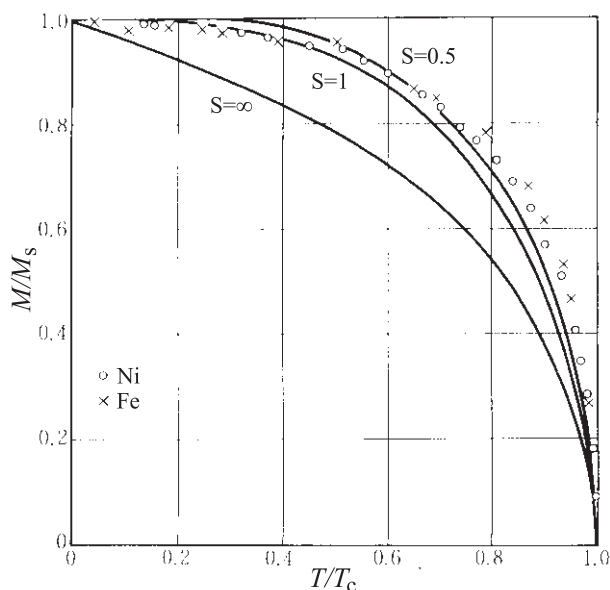
### 2.1 Einleitung

Die magnetischen Eigenschaften von Festkörpern werden durch ihre elektronische Struktur bestimmt. Man kann im wesentlichen drei Klassen unterscheiden: diamagnetische und paramagnetische Materialien und solche, die unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  eine spontane, langreichweitige magnetische Ordnung aufweisen. Dia- und paramagnetische Stoffe zeigen bei keiner Temperatur eine spontane Magnetisierung. Unterscheiden lassen sie sich anhand ihrer Reaktion auf ein externes Magnetfeld  $H$ . Erstere besitzen keine permanenten magnetischen Momente. Im externen Feld wird jedoch eine Magnetisierung  $M$  induziert, die dem Feld entgegengerichtet ist, ihre Suszeptibilität  $\chi$  ist negativ und temperaturunabhängig:

$$\chi := \frac{\partial M}{\partial H}, \quad \chi_{\text{dia}} < 0 \quad (2.1)$$

Die Ursache sind induzierte Kreisströme der Elektronen in abgeschlossenen Schalen (Lamor-Diamagnetismus) oder quasifreier Elektronen (Landau-Diamagnetismus) [6]. Bereits diese Form des Magnetismus, die in allen Materialien auftritt, ist quantenmechanischer Natur, denn nach dem Bohrvan Leeuwen Theorem [7] ist die Magnetisierung eines Systems klassischer Ladungen unabhängig vom Magnetfeld identisch Null. Besitzt der Festkörper permanente magnetische Momente, z.B. aufgrund nicht vollständig gefüllter Elektronenschalen, ist der diamagnetische Anteil in der Regel vom Paramagnetismus überdeckt: Die bei  $H = 0$  thermisch ungeordneten (lokalisierten) Momente werden im Feld zunehmend ausgerichtet ( $\chi_{\text{para}} > 0$ ), und es gilt im thermodynamischen Gleichgewicht im Limit kleiner Felder  $H$  das experimentell gut erfüllte Curie-Gesetz:

$$\chi_{\text{para}}(T) \propto \frac{1}{T} \quad (2.2)$$



**Abbildung 2.1:** Normierte Magnetisierung  $M/M_s$  aufgetragen über die reduzierte Temperatur  $T/T_c$ , berechnet in Molekularfeldnäherung für Spins  $s = 0.5, 1$  und  $\infty$  (klassisch), sowie experimentelle Daten für Ni und Fe. (Abb. nach Ref. [8]).

Die Suszeptibilität von Leitungselektronen in Metallen ist dagegen temperaturunabhängig und kann unter Vernachlässigung ihrer Bahnbewegung durch die Aufspaltung der Energieniveaus für die beiden Spinrichtungen parallel und antiparallel zum Feld  $\Delta E = \pm \mu_B \mu_0 H$  beschrieben werden (Pauli-Paramagnetismus).

Im Gegensatz zum Paramagnetismus, bei dem vorausgesetzt wird, daß die magnetischen Momente nur mit dem externen Feld und nicht miteinander wechselwirken, sind die Elektronenspins und damit die magnetischen Momente in ferromagnetischen Materialien korreliert. Ursache ist die sogenannte Austauschwechselwirkung, die über das Pauliprinzip eine Abhängigkeit der *elektrostatischen* Energie von der relativen Spinrichtung bewirkt. Phänomenologisch wurde Ferromagnetismus bereits 1907 von WEISS durch die Postulierung eines effektiven Feldes  $H_m \propto M_s$  (Molekularfeld) beschrieben, das ähnlich wie das externe  $H$ -Feld beim Paramagnetismus für eine parallele Ausrichtung der Spins sorgt. Die sich daraus ergebende Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung  $M_s$  ist in Abb. 2.1 dargestellt. Oberhalb der Curie-Temperatur  $T_c$  verschwindet die Magnetisierung aufgrund thermischer Fluktuationen, und der Ferromagnet verhält sich paramagnetisch. Die Suszeptibilität wird dann durch das Curie-Weiss-Gesetz beschrieben:

$$\chi(T) \propto \frac{1}{T - \theta}, \quad \theta = T_c. \quad (2.3)$$

In realen Systemen ist dagegen  $\theta > T_c$  und (2.3) gilt nur für  $T \gg T_c$ . Die Ursache ist, daß die Fernordnung zwar *per definitionem* bei der Curie-Temperatur  $T_c$  verschwindet, die Nahordnung der magnetischen Momente jedoch zunächst in sogenannten *Spinblocks* oberhalb  $T_c$  erhalten bleibt.

## 2.2 Stoner-Modell des Ferromagnetismus

Es gibt eine Vielzahl statistischer, quantenmechanischer und (semi)klassischer Modelle, die den Ferromagnetismus des Festkörpers beschreiben. Das vielleicht einfachste, das die Bandstruktur des Kristalls berücksichtigt, und sich daher besonders zur Beschreibung der ferromagnetischen  $3d$ -

Übergangsmetalle (Fe, Co, Ni) eignet, ist das Stoner-Modell. Dieses läßt sich aus der Dichtefunktionaltheorie ableiten und kann insbesondere das Auftreten von Ferromagnetismus bei den drei genannten Metallen und deren nichtganzzahlige magnetische Momente  $\mu(T = 0)$  von  $2.2\mu_B$ ,  $1.7\mu_B$  und  $0.6\mu_B$  erklären [9, 10]. Im Stoner-Modell beschreibt man den energetischen Unterschied zwischen Majoritäts- und Minoritätselektronen durch einen zusätzlichen konstanten Term im Austausch-Korrelationspotential  $V_{xc}$ , der proportional zur Magnetisierung ist:

$$V_{xc}^{\pm}(\vec{r}) = V_{xc}^0(\vec{r}) \mp \frac{1}{2}IM, \quad M = \int_{V_{\text{Atom}}} [n^+(\vec{r}) - n^-(\vec{r})] d\vec{r}. \quad (2.4)$$

Dabei ist  $M$  das magnetische Moment pro Atom (in Einheiten von  $\mu_B$ ) und  $I$  das sogenannte Austauschintegral (Stonerparameter), das in erster Näherung eine intraatomare (elementspezifische) Größe ist, d.h. unabhängig von der lokalen Umgebung des Atoms [10]. Da  $IM$  räumlich konstant ist, ergeben sich die Zustandsdichten für die beiden Spinrichtungen durch eine einfache Verschiebung der nichtmagnetischen Zustandsdichte  $n^0$ :

$$n^{\pm}(E) = n^0(E \pm \frac{1}{2}IM). \quad (2.5)$$

Durch Integration über alle besetzten Zustände unterhalb  $E_F$  erhält man die Zahl der Elektronen  $N$  und das magnetische Moment  $M$ :

$$N = \int^{E_F} \{n^0(E + \frac{1}{2}IM) + n^0(E - \frac{1}{2}IM)\} dE \quad (2.6)$$

$$M = \int^{E_F} \{n^0(E + \frac{1}{2}IM) - n^0(E - \frac{1}{2}IM)\} dE. \quad (2.7)$$

Da  $n^0(E)$  aus nichtmagnetischen Rechnungen bekannt ist und  $N$  durch die Bedingung der Ladungsneutralität festgelegt ist, sind (2.6) und (2.7) zwei Bestimmungsgleichungen für die zwei Unbekannten  $E_F$  und  $M$ . Hieraus läßt sich das Stoner-Kriterium für das Auftreten von Ferromagnetismus, d.h. für eine Lösung mit  $M \neq 0$  ableiten:

$$In^0(E_F) > 1. \quad (2.8)$$

Ferromagnetismus setzt also ein großes Austauschintegral  $I$  und eine hohe Zustandsdichte  $n^0(E_F)$  am Fermi-Niveau  $E_F$  voraus, dann wird der unmagnetische Fall instabil gegenüber dem ferromagnetischen. Dabei stellt sich ein energetisches Gleichgewicht durch die Absenkung der Austauschenergie und die Erhöhung der kinetischen Energie durch die Umbesetzung von Elektronen in zuvor unbesetzte Majoritätszustände ein. Ist der Überlapp der Wellenfunktionen und damit die Bandbreite am Fermi-Niveau groß, ist  $n^0(E_F)$  klein und der magnetische Zustand energetisch ungünstig. Entscheidend ist also ein gewisser Grad an Lokalisation der Elektronen am Atomort. Ein System quasifreier Elektronen zeigt daher keine Tendenz zum Ferromagnetismus.

## 2.3 Mikromagnetismus

Nach dem bisher Gesagten läßt sich lediglich das Auftreten einer spontanen Magnetisierung unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  verstehen. Zur Beschreibung experimentell beobachteter Phänomene wie der Hysterese, der Ausrichtung der Magnetisierung an kristallographischen Achsen, oder der Bildung von Bereichen unterschiedlicher Magnetisierungsrichtungen (Domänen), ist die

Austauschwechselwirkung alleine nicht ausreichend. Hierzu ist die Annahme weiterer Energieterme notwendig, die ich im folgenden kurz beschreiben möchte. Der magnetische Zustand eines Körpers ergibt sich dann zum einen aus seinem Ausgangszustand (Vorgeschichte) bzw. den Randbedingungen und zum anderen aus einer Minimierung der Gesamtenergie unter Berücksichtigung aller relevanten Terme. Im Mikromagnetismus wird dabei die Magnetisierung  $\vec{M}(\vec{r})$  in der Regel als ein sich räumlich kontinuierlich ändernder Vektor konstanter Länge,  $|\vec{M}| = M_s$ , beschrieben, ohne daß die atomare Struktur und die zumindest teilweise Lokalisierung der magnetischen Momente an den Atompositionen berücksichtigt wird. Die Kristallstruktur spiegelt sich lediglich in den Symmetrieeigenschaften der Energieterme wider. Das ist letztlich für die in dieser Arbeit experimentell untersuchten Systeme – einzelne atomare magnetische Lagen und Nanostrukturen – zugegebenermaßen eine grobe Vereinfachung. Wünschenswert wäre statt einer klassischen Kontinuumsbeschreibung eine vollständige quantenmechanische Behandlung, was wiederum aufgrund der Größe der Systeme und der Komplexität der Wechselwirkungen hoffnungslos erscheint. Einen Kompromiß stellen in dieser Beziehung klassische Modelle dar, die explizit die atomare Struktur des Gitters berücksichtigen [11]. Auf der anderen Seite ist der Mikromagnetismus eine gut entwickelte Theorie, die das Verständnis einer Vielzahl magnetischer Phänomene ermöglicht. Inwieweit er auch auf *nanomagnetische* Systeme anwendbar ist, wird ein Vergleich mit dem Experiment zeigen.

### 2.3.1 Energieterme

Die wichtigsten Energieterme sind neben der Austauschenergie die magnetische Kristallanisotropie, die Energie des Körpers im selbst erzeugten Magnetfeld (Streufeldenergie) und die Energie aufgrund eines externen Feldes (Zeemanenergie). Hinzu kommt die magnetoelastische Energie, die die Wechselwirkung von Magnetisierungsrichtung und einer Verzerrung des atomaren Gitters beschreibt. Ihr Beitrag ist, verglichen mit den anderen Energietermen, in der Regel klein und soll hier vernachlässigt werden.

#### Austauschenergie

Die Austauschwechselwirkung wurde zuerst 1928 von HEISENBERG [12] beschrieben und hat als Hamiltonoperator mit den Spinoperatoren  $s_i, s_j$  die Form [7]

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j, \quad J_{ij} = 2 \int \varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_j^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \varphi_i(\vec{r}_2) \varphi_j(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (2.9)$$

Dabei ist  $J_{ij}$  das Austauschintegral der betrachteten Wellenfunktionen  $\varphi_i, \varphi_j$ .  $J_{ij} > 0$  bedeutet ferromagnetische Kopplung, während für  $J_{ij} < 0$  eine antiparallele Ausrichtung der Spins energetisch günstiger ist. Da  $J_{ij}$  von einem Überlapp der Wellenfunktionen abhängt (direkter Austausch), ist die Wechselwirkung kurzreichweitig, im Gegensatz zur Theorie von WEISS. Beim Heisenbergmodell geht man von lokalisierten Spins an den Atompositionen aus und berücksichtigt bei der Summation in (2.9) in der Regel nur nächste Nachbarn mit einem einheitlichen  $J$ . Vereinfachend kann man  $s_i s_j$  als Skalarprodukt klassischer Vektoren auffassen und das Modell mit einem effektiven  $J$  auch auf Systeme anwenden, die das Kriterium vollständig lokalisierter Spins (und magnetischer Momente) nicht erfüllen (vgl. Ref. [11]). Die Austauschenergie läßt sich dann durch eine einfache Summation über alle benachbarten Gitterplätze  $i, j$  berechnen:

$$E_{\text{ex}} = -J \sum_{i,j} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j. \quad (2.10)$$

Dieser Ausdruck hängt wie (2.9) nur von der relativen Orientierung der Spins ab, ist also isotrop bezüglich der kristallographischen Achsen. Betrachtet man die Magnetisierung  $\vec{M}$  als kontinuierliche Variable, schreibt man die Austauschenergie üblicherweise in der Form [13]

$$E_{\text{ex}} = A \int (\nabla \vec{m})^2 dV, \quad \vec{m}^2 = 1, \quad (2.11)$$

mit  $\vec{m} = \vec{M}/M_s$  und der Austauschkonstanten  $A$  (*exchange stiffness constant*). Dieser Ausdruck läßt sich als Taylorentwicklung aus (2.10) ableiten, ist also bei kleinen Winkeln zwischen benachbarten Spins eine gute Näherung des Heisenbergmodells. Für kubische Kristalle gilt dabei die Beziehung  $A = JS^2c/(2a)$  [14], mit dem Spin  $S$ , der Gitterkonstanten  $a$  und  $c = 1, 2$  und  $4$  für sc-, bcc- und fcc-Kristallstruktur.

### Anisotropie

Die magnetische Anisotropie beschreibt die Abhängigkeit der Energie eines Ferromagneten von der Richtung der Magnetisierung. Ursache der Kristallanisotropie – auch magnetokristalline Anisotropie genannt – ist die Spin-Bahn-Wechselwirkung, die über eine Wechselwirkung von Elektronenspin und -orbital eine Kopplung der Magnetisierung an das Kristallgitter vermittelt. Die Anisotropie aufgrund der äußeren Form des ferromagnetischen Körpers (Formanisotropie) resultiert dagegen aus dessen Streufeld. Phänomenologisch beschreibt man die Kristallanisotropie in einer geraden Potenzreihenentwicklung nach  $\cos \theta$  oder  $\sin \theta$  bezüglich der Hauptachsen, unter Berücksichtigung der Kristallsymmetrie. Es sei hier nur der Fall einer uniaxialen Anisotropie betrachtet. Die Anisotropieenergie läßt sich dann in der Form

$$E_{\text{aniso}} = \int K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + \dots dV \quad (2.12)$$

schreiben, mit den Anisotropiekonstanten erster und zweiter Ordnung  $K_1$  und  $K_2$ , und dem Winkel  $\theta$  zwischen Magnetisierung und kristallographischer Hauptachse, z.B. der  $c$ -Achse in hcp-Kristallen. Berücksichtigt man lediglich den ersten Term, bezeichnet man die entsprechende Achse ( $\theta = 0$ ) für  $K_1 > 0$  als magnetisch leichte Richtung (*easy axis*), da dies die Richtung mit der niedrigsten Energie ist. Für  $K_1 < 0$  ist dagegen die Anisotropieenergie für  $\theta = 0$  am größten, und man nennt die Achse magnetisch hart und die Ebene senkrecht dazu magnetisch leichte Ebene.

### Zeemanenergie

Die magnetische Feldenergie läßt sich in zwei Teile unterteilen: die Energie aufgrund eines externen Feldes  $\vec{B}$  oder  $\mu_0 \vec{H}$  (Zeemanenergie) und die Streufeld- oder Demagnetisierungsenergie. Der erste Teil, die Energie des Vektorfeldes der Magnetisierung  $\vec{M}$  im externen Feld, läßt sich als Integral über den magnetischen Körper schreiben:

$$E_{\text{zeeman}} = - \int_V \vec{B} \cdot \vec{M} dV. \quad (2.13)$$

Ist das externe Feld homogen, hängt diese Energie nur vom Gesamtmoment ab, nicht von den Details einer etwaigen Domänenstruktur.

### Streifeldenergie

Der zweite Teil ist die Energie des magnetischen Körpers im selbst erzeugten Feld, und wird magnetostatische Selbstenergie, Demagnetisierungs- oder Streifeldenergie genannt. Aus der Feldgleichung  $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$ <sup>1</sup> und dem Fehlen freier magnetischer Ladungen ( $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ ) läßt sich das Streifeld  $\vec{H}_d$  als von der Divergenz der Magnetisierung erzeugt darstellen:

$$\nabla \cdot \vec{H}_d = -\nabla \cdot \vec{M}. \quad (2.14)$$

Die rechte Seite der Gleichung hat dabei die Bedeutung einer magnetischen Ladungsdichte, die innerhalb und außerhalb des Körpers das Feld  $\vec{H}_d$  erzeugt. Der Unterschied zur Elektrostatik besteht allein darin, daß es keine *freien* magnetischen Ladungen gibt. Die Feldenergie ergibt sich entweder durch eine Integration von  $\vec{H}_d^2$  über den gesamten Raum oder entsprechend (2.13) über den ferromagnetischen Körper:

$$E_d = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{überall}} \vec{H}_d^2 dV = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{H}_d \cdot \vec{M} dV. \quad (2.15)$$

Die Streifeldenergie ist die Ursache für das Auftreten von Domänen in endlichen ferromagnetischen Körpern. Ohne diesen Energieterm wäre eine einheitliche Magnetisierung entlang der leichten magnetischen Achse immer die energetisch günstigste Konfiguration. Die erste Schreibweise in (2.15) macht dagegen deutlich, daß  $E_d$  für eine Konfiguration minimal ist, die das Auftreten magnetischer Ladungen, insbesondere an den Grenzflächen, vollständig vermeidet (*pole avoidance principle*). Dies ist die Ursache, warum ferromagnetische Materialien häufig kein oder nur ein schwaches äußeres Magnetfeld aufweisen.

Als ein Beispiel für die aus dem Streifeld resultierende Formanisotropie sei der Fall eines unendlich ausgedehnten ebenen Films mit einer homogenen Magnetisierung  $\vec{M}$  betrachtet. Für das Streifeld  $\vec{H}_d$  und die Streifeldenergiedichte  $e_d$  ergibt sich aus (2.14) und (2.15) [13]:

$$H_d = -M_s \cos \theta \cdot \vec{n} \quad (\text{innerhalb des Films, 0 sonst}) \quad (2.16)$$

$$e_d = -\frac{\mu_0}{2} \vec{H}_d \cdot \vec{M} = \frac{\mu_0}{2} M_s^2 \cos^2 \theta \quad (2.17)$$

mit dem Einheitsvektor  $\vec{n}$  senkrecht zur Filmebene und dem Winkel  $\theta$  zwischen  $\vec{M}$  und  $\vec{n}$ . Ein solcher Film erzeugt kein *äußeres* Streifeld und die Energiedichte hat die Form einer uniaxialen Anisotropie mit der Filmmormalen als harter Achse.  $K_d = \mu_0 M_s^2 / 2$  bezeichnet man daher auch als Streifeld-Anisotropiekonstante. In dünnen Filmen mit senkrechter Anisotropie kann man damit die effektive Anisotropie mit  $K_{\text{eff}} = K_1 - K_d$  abschätzen. Das ist insbesondere zweckmäßig bei der Bestimmung von Domänenwandbreiten, wenn man die Berechnung von  $E_d$  nicht explizit ausführen möchte. Das Auftreten von Domänen läßt sich in dieser Beschreibung natürlich nicht erklären.

### 2.3.2 Energieminimierung

Magnetische Grund- bzw. Gleichgewichtszustände lassen sich durch eine Minimierung der Gesamtenergie unter Berücksichtigung aller relevanten Energieterme und etwaiger Randbedingungen bestimmen. Eines der prominentesten Beispiele – und eines der wenigen, die sich analytisch lösen lassen – ist die planare 180°-Blochwand in einem unendlichen, uniaxialen Medium, die zwei Domänen entgegengesetzter Magnetisierung trennt. Dabei ist die Vorüberlegung, daß die Magnetisierung

<sup>1</sup>Im SI-System nach Sommerfeld haben  $H$  und  $M$  die gleiche Einheit A/m. Eine Gegenüberstellung der unterschiedlichen Einheitensysteme findet sich beispielsweise in Ref. [15].



innerhalb der Wand parallel zur Wandebene rotieren wird, da nur in diesem Fall wegen  $\nabla \cdot \vec{M} = 0$  kein Streufeld erzeugt wird, und Austausch- und Anisotropieenergie nicht von der Rotationsebene abhängen. Die Energie pro Einheitsfläche der Wand läßt sich dann schreiben als:

$$\gamma_w = \int_{-\infty}^{\infty} A \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + K \cos^2 \varphi dx, \quad (2.18)$$

mit den Randbedingungen  $\varphi(-\infty) = \pi/2$  und  $\varphi(\infty) = -\pi/2$ . Aus der Eulergleichung und anschließender Integration läßt sich die spezifische Wandenergie  $\gamma_w$  bestimmen, sowie das Domänenwandprofil, das diese Energie minimiert [13]:

$$\gamma_w = 4\sqrt{AK} \quad (2.19)$$

$$\sin \varphi = \tanh(x/l), \quad l = \sqrt{A/K}. \quad (2.20)$$

$l$  ist eine für den Ferromagneten charakteristische Länge, auf der sich die Richtung der Magnetisierung ändert, und wird als Austauschlänge bezeichnet. Obwohl der größte Teil der Rotation in einem begrenzten Bereich stattfindet, ist diese Wand streng genommen in  $x$ -Richtung unendlich weit ausgedehnt. Die Breite der Wand muß daher definiert werden. In der Literatur üblich sind  $w := 2l = 2\sqrt{A/K}$  oder  $w := \pi l$ . Ich werde durchgehend die erste Definition verwenden, und die Breite experimentell bestimmter Wandprofile durch einen Fit von (2.20) an die Daten bestimmen.

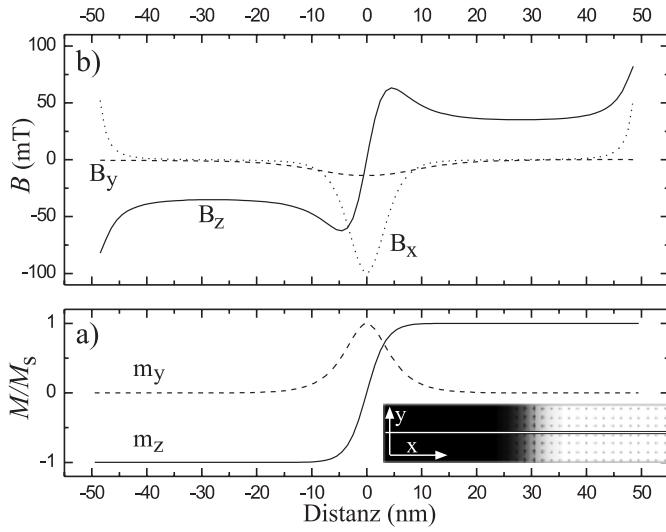
Das Profil in (2.20) stellt ein Gleichgewicht her zwischen der Austauschenergie, die eine möglichst langsame Rotation bewirkt, und der Anisotropie, die eine möglichst schnelle Rotation durch die schwere Richtung verursacht. Dieses Gleichgewicht ist jedoch indifferent, da weder die laterale Position noch der Azimutwinkel der Wandebene in einem unendlichen Medium ausgezeichnet ist. Ferner ist dies auch nicht der energetische Grundzustand: die Wand wird lediglich durch die Randbedingungen erzwungen. Energetisch günstiger ist eine homogene Magnetisierung entlang der leichten Achse, denn dann ist in (2.18)  $\gamma_w = 0$ . Das liegt allerdings nur daran, daß das Streufeld durch die Bedingung der unendlichen Ausdehnung (keine Grenzflächen) in dieser Beschreibung nicht berücksichtigt wird.

### 2.3.3 Zeitliche Entwicklung

Eine alternative Vorgehensweise beim Modellieren magnetischer Systeme ist, mit einer Ausgangskonfiguration  $\vec{M}(\vec{r})$  zu beginnen, und die zeitliche Entwicklung mit Hilfe der Gleichung von LANDAU und LIFSHITZ [16] zu berechnen. Dabei bewegt sich das System schrittweise entlang eines Pfades maximaler Abnahme der Gesamtenergie, bis ein Gleichgewichtszustand erreicht ist. Gleichgewichtszustände zeichnen sich dadurch aus, daß das effektive Drehmoment, das auf die Magnetisierung wirkt, an allen Punkten  $\vec{r}$  verschwindet, bzw. einen vorgegebenen Grenzwert unterschreitet. Die so erreichten Endzustände hängen natürlich von der Wahl des Ausgangszustandes ab, und sind in der Regel metastabil, entsprechen also nicht unbedingt dem energetischen Grundzustand. Die Existenz metastabiler Zustände ist jedoch gerade eine Grundeigenschaft ferromagnetischer Systeme. Ohne diese gäbe es weder Hysterese noch Remanenz, denn das System würde im externen Nullfeld immer den gleichen Zustand einnehmen.

Nach Refs. [16, 17] läßt sich die zeitliche Änderung der Magnetisierung in der folgenden Form schreiben:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{\text{eff}} - \frac{\gamma \alpha}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{\text{eff}}). \quad (2.21)$$



**Abbildung 2.2:** a) Magnetisierung in  $x$ -Richtung innerhalb des  $100 \times 20 \times 0.4$  nm Bereiches (Kleines Bild: Aufsicht). b) Streufeld  $\vec{B}$  der  $180^\circ$ -Blochwand entlang der in (a) eingezeichneten Linie, 1 nm oberhalb der Oberfläche.

Der erste Term beschreibt eine Präzession der Magnetisierung um ein effektives Feld  $H_{\text{eff}}$ , mit der gyromagnetischen Konstanten  $\gamma$ . Der zweite Term sorgt für eine Relaxierung von  $\vec{M}$  in Richtung von  $H_{\text{eff}}$ , mit der dimensionslosen Dämpfungskonstanten  $\alpha$ . In Verallgemeinerung der Landau-Lifshitz-Gleichung ist das externe Feld  $H$  hier durch ein effektives  $H_{\text{eff}}$  ersetzt worden, das durch die Gesamtenergie  $E(\vec{M})$  bestimmt wird, die wiederum alle relevanten Wechselwirkungen beschreibt [17]:

$$\vec{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E}{\partial \vec{M}} \quad (2.22)$$

Die zeitliche Entwicklung läßt sich dann durch eine schrittweise numerische Integration von (2.21) berechnen. Hierzu ist eine Diskretisierung des kontinuierlichen Körpers in ein Gitter ausreichend kleiner Zellen notwendig, in denen die Magnetisierung als homogen beschrieben wird. Abbildung 2.2 zeigt das Ergebnis einer solchen Berechnung, die mit dem (frei erhältlichen) Programm OOMMF [17] durchgeführt wurde. Als Ausgangskonfiguration wurde eine  $180^\circ$ -Blochwand auf einem Bereich von  $100 \times 20 \times 0.4$  nm definiert und das System lediglich relaxiert, bis die maximale Änderung in allen Zellen ( $1 \times 1 \times 0.4$  nm) den Wert von  $0.1^\circ/\text{ns}$  unterschritten hatte. Dabei wurde  $M_s = 2 \cdot 10^6$  A/m,  $A = 1.5 \cdot 10^{-11}$  J/m und eine senkrechte leichte Achse mit  $K_1 = 3.5 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup> festgelegt. Abb. 2.2(a) zeigt eine Aufsicht auf die Magnetisierungsverteilung (kleines Bild) und einen Schnitt entlang der eingezeichneten Linie. Aus einem Fit mit  $\tanh(x/(w/2))$  ergibt sich eine Wandbreite von  $w = 7.1$  nm. Die oben angesprochene einfache Abschätzung mit  $w \approx 2\sqrt{A/(K_1 - K_d)} = 7.8$  nm ist damit in passabler Übereinstimmung. Abb. 2.2(b) zeigt das Streufeld  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}_d$  entlang der gleichen Linie, 1 nm über der Oberfläche. Dieses ist direkt über der Wand mit  $B_x \approx -100$  mT am größten. Verglichen mit dem maximal möglichen Feld an einer einzelnen Grenzfläche,  $\mu_0 M_s/2 \approx 1.25$  T, oder dem Feld innerhalb des Films,  $\mu_0 M_s \approx 2.5$  T, ist dies jedoch ein sehr kleiner Wert. Ursache ist die geringe Dicke des Films. Auch die senkrechte Komponente  $B_z$  oberhalb der Domänen ist vergleichsweise klein, und letztlich eine Folge der lateralen Begrenzung des Films (vgl. (2.16)), was sich auch dadurch bemerkbar macht, daß das Streufeld zu den Seiten hin zunimmt.

## Kapitel 3

# Rastertunnelmikroskopie

In diesem Kapitel sollen die wichtigsten theoretischen Konzepte der Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie vorgestellt werden. Der Übersichtlichkeit halber möchte ich mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse dieses Abschnittes beginnen.

### 3.1 Übersicht

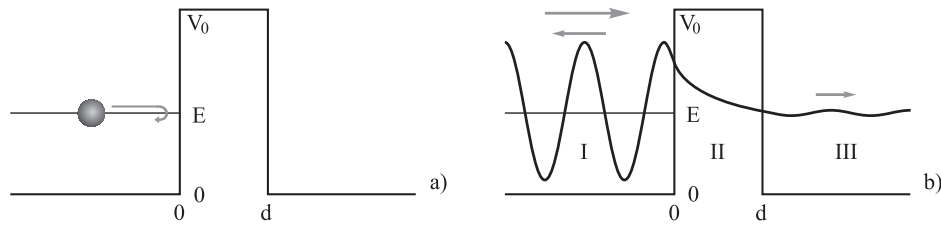
Gemessen an seinem Auflösungsvermögen und seiner Vielseitigkeit ist das Rastertunnelmikroskop (STM) konzeptionell ein verblüffend einfaches Instrument: In einem STM wird an die zu untersuchende (leitfähige) Oberfläche eine Spannung  $U$  von einigen Zehntel Volt angelegt und eine metallische Spitze so weit angenähert, bis kurz vor dem mechanischen Kontakt ein quantenmechanischer Tunnelstrom  $I$  von wenigen pA bis einigen nA zu fließen beginnt. Die Spitze ist an einem piezoelektrischen Stellelement befestigt, das die präzise Bewegung der Spitze in alle drei Raumrichtungen erlaubt. Im sogenannten *topographischen Betriebsmodus* wird der Tunnelstrom durch die Regelung der  $z$ -Position der Spitze konstant gehalten, während die Spitze zeilenweise über die Probe geführt wird. Die so abgetastete Kontur  $z(x, y)$  bezeichnet man als die Topographie der Oberfläche. Im Rahmen des Modells von TERSOFF und HAMANN (TH-Modell) [18] kann diese im Grenzfall kleiner Spannungen als Fläche konstanter Zustandsdichte der Oberfläche am Fermi-Niveau  $E_F$  interpretiert werden. Neben dieser Art der direkten Abbildung der Oberflächenkontur lassen sich im sogenannten *spektroskopischen Modus* Informationen über die lokale elektronische Zustandsdichte in der Nähe des Fermi-Niveaus gewinnen. Hierzu wird die Spitze bei vorgegebenen Werten von Spannung und Tunnelstrom stabilisiert (typisch:  $U_0 \approx 1$  V,  $I_0 \approx 0.5$  nA) und der Regelkreis abgeschaltet. In konstantem Spitze-Probe Abstand wird dann eine Spannungsrampe durchfahren und  $I(U)$  detektiert. Durch numerisches Ableiten kann hieraus die differentielle Leitfähigkeit  $dI/dU(U)$  bestimmt werden<sup>1</sup>, die innerhalb des TH-Modells im Grenzfall kleiner Spannungen proportional zur Zustandsdichte der Oberfläche am Ort der Spitze  $\vec{r}_T$  ist:

$$dI/dU(U) \propto \rho_S(\vec{r}_T, E_F + eU). \quad (3.1)$$

Im sogenannten spinpolarisierten STM (SP-STM) benutzt man magnetische Spitzen, so daß bei der Abbildung magnetischer Oberflächen der Tunnelstrom vom Spin der tunnelnden Elektronen abhän-

---

<sup>1</sup>Zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses addiert man zu  $U_{\text{bias}}$  eine kleine Modulationsspannung  $U_{\text{mod}} = \Delta U \cdot \sin \omega t$  und detektiert  $dI/dU(U)$  direkt mittels LockIn-Technik.



**Abbildung 3.1:** Eindimensionaler Tunneleffekt. **a)** Ein Teilchen mit der Gesamtenergie  $E < V_0$  wird im Rahmen der klassischen Physik an der Potentialbarriere reflektiert. **b)** Quantenmechanisch wird es durch eine Wellenfunktion  $\psi$  beschrieben und besitzt immer eine endliche Wahrscheinlichkeit, die Barriere zu durchdringen.

gig wird. Dies kann sich sowohl auf die Topographie als auch auf die gemessenen Spektren auswirken. Die differentielle Leitfähigkeit läßt sich in diesem Fall in einen spinabhängigen und einen spinunabhängigen Term zerlegen, mit der aus planaren FM-Isolator-FM Tunnelübergängen bekannten Kosinus-Abhängigkeit [19, 20]:

$$dI/dU(U) \propto \rho_S(\vec{r}_T, E_F + eU)[1 + \cos(\theta(\vec{r}_T)) \cdot P_T P_S(\vec{r}_T, E_F + eU)]. \quad (3.2)$$

$P_S$  und  $P_T$  ist dabei die (spannungsabhängige) Spinpolarisation der Oberfläche bzw. der Spitze, und  $\theta$  der Winkel zwischen den Magnetisierungsrichtungen. Im SP-STM wird so die magnetische Domänenstruktur der Oberfläche über  $\theta(x, y)$  u.a. als eine Variation der differentiellen Leitfähigkeit abbildbar.

## 3.2 Eindimensionaler Tunneleffekt

Einen natürlichen Einstieg in die Theorie des STM liefert die Betrachtung einer Potentialbarriere der Höhe  $V_0$  und Breite  $d$  in einer Dimension entsprechend Abb. 3.1. Während ein klassisches (makroskopisches) Teilchen der Gesamtenergie  $E < V_0$  an der Potentialbarriere reflektiert wird, ist es quantenmechanisch durch seine Wellenfunktion  $\psi(z)$  zu beschreiben, die der (zeitunabhängigen) Schrödingergleichung

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \psi(z) = E\psi(z) \quad (3.3)$$

genügen muß. Der Ansatz  $\psi(z) = c_1 \cdot e^{ikz} + c_2 \cdot e^{-ikz}$  führt zu

$$k^2 = 2mE/\hbar^2 \quad z < 0 \quad \vee \quad z > d \quad (3.4)$$

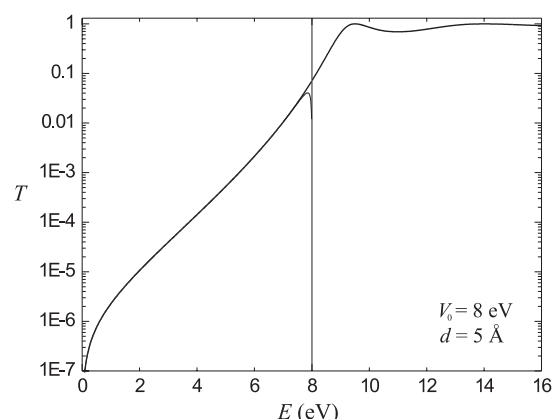
$$-\kappa^2 := k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 \quad 0 < z < d. \quad (3.5)$$

Lösungen der Schrödingergleichung sind also ebene Wellen in den Bereichen I und III und Exponentialfunktionen innerhalb der Barriere. Betrachten wir eine von links einlaufende Welle  $e^{ikz}$  ergibt sich folgende Lösung:

$$\psi_1(z) = e^{ikz} + Ae^{-ikz} \quad (3.6)$$

$$\psi_2(z) = Be^{\kappa z} + Ce^{-\kappa z} \quad (3.7)$$

$$\psi_3(z) = De^{ikz}, \quad (3.8)$$



**Abbildung 3.2:** Transmissionskoeffizient  $T(E)$  für  $V_0 = 8$  eV und  $d = 5$  Å. Während die exakte Lösung (3.9) auch für  $E > V_0$  gültig ist und dort Resonanzen zeigt, wird die Näherung (3.10) für  $E \rightarrow V_0$  zunehmend ungenau.

deren Koeffizienten sich aus den Nebenbedingungen der Stetigkeit und stetigen Differenzierbarkeit der Funktion an den Unstetigkeitsstellen des Potentials (*wave matching method*) ergeben. Das Verhältnis von transmittierter zu einfallender Stromdichte bezeichnet man als Transmissionskoeffizienten  $T$ :

$$|D|^2 = T = \frac{1}{1 + (k^2 + \kappa^2)^2 / (4k^2\kappa^2) \cdot \sinh^2(\kappa d)}. \quad (3.9)$$

Ist die inverse Abklinglänge  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$  groß gegenüber der inversen Barrierenbreite ( $\kappa d \gg 1$ ), also für breite und hohe Barrieren, läßt sich der Ausdruck weiter vereinfachen:

$$T \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} \cdot \exp(-2\kappa d) \quad (3.10)$$

In dieser Darstellung wird die experimentell beobachtete exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand  $d$  und der Wurzel der effektiven Barrierenhöhe  $\sqrt{V_0 - E}$  deutlich. Der Unterschied zwischen dieser Näherung und der exakten Lösung (3.9) ist in Abb. 3.2 dargestellt. Für typische Tunnelparameter ( $\phi = V_0 - E = 4$  eV,  $d = 5$  Å) bewirkt eine Verbreiterung der Barriere um 1 Å eine Verringerung des Tunnelstromes um etwa eine Größenordnung. Diese exponentielle Abhängigkeit macht das STM zu einer lokalen Meßmethode, mit einem vertikalen und lateralen Auflösungsvermögen bis hinab zur atomaren Skala.

In diesem Abschnitt wurden die Elektronen als untereinander nicht wechselwirkende, freie Teilchen beschrieben. Zwei wichtige experimentelle Befunde lassen sich im Rahmen dieses Modells nicht verstehen: Dies ist zum einen das Tunneln in Oberflächenzustände, die in  $z$ -Richtung lokalisiert sind, und daher keine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Oberfläche aufweisen ( $k_z = 0$ ). Zum anderen läßt sich keine Abhängigkeit des Tunnelstroms von der Zustandsdichte der Oberfläche  $\rho_S(E)$  herleiten. Letzteres liegt daran, daß der Einfluß der Zustandsdichte durch eine Gewichtung mit der Geschwindigkeit der Elektronen genau kompensiert wird [21]: In einer Dimension und mit der Dispersionsrelation für freie Elektronen,  $E(k) = (\hbar k)^2/(2m)$ , ist die Zustandsdichte  $\rho \propto dk/dE \propto 1/k$ , während für die Geschwindigkeit  $v = \hbar k/m$  gilt. Da im Modell für freie Elektronen der Transmissionskoeffizient  $T$  nur von  $E_z$  abhängt, kommt man auch bei einem Übergang zu drei Dimensionen zu dem gleichen Ergebnis [22].

### 3.3 Störungstheoretischer Ansatz: Die Topographie der Oberfläche

Ein komplementärer Ansatz, der die  $k$ -Abhängigkeit der elektronischen Zustände zunächst vernachlässigt und gleichzeitig eine realistische Beschreibung des Tunnelstroms in der dreidimensionalen Geometrie von Oberfläche (*sample*) und Spitze (*tip*) erlaubt, wurde von BARDEEN [23] vorgeschlagen. Darin werden die beiden beteiligten Elektroden als zwei schwach wechselwirkende Systeme beschrieben, und der Tunnelstrom aufgrund des Überlapps der Wellenfunktionen innerhalb der Barriere mit Hilfe zeitabhängiger Störungstheorie erster Ordnung berechnet. Entsprechend *Fermis Goldener Regel* ergibt sich dabei nach TERSOFF und HAMANN für den Tunnelstrom [18]:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \cdot \sum_{\mu, \nu} f(E_\mu) [1 - f(E_\nu + eU)] \cdot |M_{\mu\nu}|^2 \cdot \delta(E_\mu - E_\nu). \quad (3.11)$$

Dabei ist  $f(E)$  die Fermi-Funktion,  $U$  die angelegte Spannung,  $M_{\mu\nu}$  das Matrixelement des Übergangs zwischen Zuständen  $\psi_\nu$  der Oberfläche und  $\psi_\mu$  der Spitze und  $E_\mu$  die Energie des ungestörten Zustandes  $\psi_\mu$ . Die Deltafunktion entspricht der Energieerhaltung (elastisches Tunneln). Für hohe Temperaturen ist in (3.11) ein Term für den Fluß von Elektronen entgegen der angelegten Spannung zu ergänzen. In diesem Fall ist die Fermi-Kante thermisch so weit verbreitert, daß Elektronen von der positiven Elektrode elastisch in unbesetzte Zustände der negativen Elektrode tunneln können. Im Grenzfall niedriger Temperaturen ( $\ll$  Raumtemperatur) kann man die Fermi-Funktion durch eine Stufenfunktion nähern, und (3.11) vereinfacht sich unter der zusätzlichen Annahme geringer Spannungen ( $\sim 10$  meV bei Metallen) zu

$$I = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 U \cdot \sum_{\mu, \nu} |M_{\mu\nu}|^2 \cdot \delta(E_\nu - E_F) \cdot \delta(E_\mu - E_F). \quad (3.12)$$

Die Schwierigkeit besteht nun in der Berechnung des Matrixelementes, dessen Betragsquadrat ein Maß für die in (3.9) eingeführte Tunnelwahrscheinlichkeit ist. Nimmt man eine beliebige Lokalisierung der Spitzenzustände, d.h. eine punktförmige Spitze am Ort  $\vec{r}_T$  an, vereinfacht sich (3.12) zu

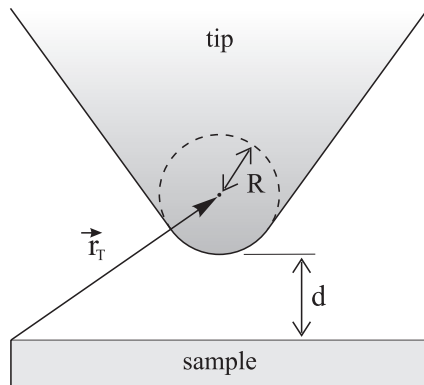
$$I \propto \sum_{\nu} |\psi_\nu(\vec{r}_T)|^2 \cdot \delta(E_\nu - E_F) = \rho_S(\vec{r}_T, E_F). \quad (3.13)$$

Der Tunnelstrom ist also proportional zur lokalen Zustandsdichte der Oberfläche (*sample*) am Fermi-Niveau am Ort der Spitze  $\vec{r}_T$ . Nun ist eine punktförmige Spitze kein sehr realistisches Modell. Es zeigt sich jedoch, daß man mit einer weiteren einschränkenden Bedingung auch für ausgedehnte Spitzen zu dem gleichen Ergebnis kommt. Nach BARDEEN [23] ist das Tunnel-Matrixelement

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \int d\vec{S} \cdot \left( \psi_\mu^* \vec{\nabla} \psi_\nu - \psi_\nu \vec{\nabla} \psi_\mu^* \right), \quad (3.14)$$

wobei sich die Integration über eine beliebige Fläche innerhalb der Vakuumbarriere erstreckt. Unter der Annahme einer asymptotisch kugelförmigen Spitze entsprechend Abb. 3.3 mit  $s$ -artigen elektronischen Zuständen ( $l = 0$ ) sowie gleicher Austrittsarbeit  $\phi$  von Spitze und Oberfläche haben TERSOFF und HAMANN [18] daraus folgenden Ausdruck für den Tunnelstrom entwickelt:

$$I = 32\pi^3 \hbar^{-1} e^2 U \phi^2 \rho_T(E_F) R^2 \kappa^{-4} e^{2\kappa R} \cdot \sum_{\nu} |\psi_\nu(\vec{r}_T)|^2 \cdot \delta(E_\nu - E_F). \quad (3.15)$$



**Abbildung 3.3:** Schematisches Bild der Tunnelgeometrie. Die Tunnelspitze hat eine beliebige Form, ist jedoch in der Nähe der Oberfläche lokal sphärisch mit dem Krümmungsradius  $R$ .

Dabei ist  $\phi$  die Austrittsarbeit,  $\rho_T$  die Zustandsdichte der Spitze pro Einheitsvolumen,  $R$  der effektive Spitzenradius,  $\kappa = \sqrt{2m\phi}/\hbar$  die minimale inverse Abklinglänge und  $\vec{r}_T$  der Mittelpunkt des Krümmungsradius. Die Summe ist dabei nichts weiter als die Zustandsdichte der Probe am Fermi-Niveau am Ort der Spitze  $\vec{r}_T$ ,

$$\sum_{\nu} |\psi_{\nu}(\vec{r}_T)|^2 \cdot \delta(E_{\nu} - E_F) = \rho_S(\vec{r}_T, E_F), \quad (3.16)$$

wobei die exponentielle Abhängigkeit des Stromes vom Abstand  $d$  zwischen Oberfläche und Spitze entsprechend (3.10) im Abklingen der Wellenfunktionen ins Vakuum verborgen ist:

$$|\psi_{\nu}(\vec{r}_T)|^2 \propto e^{-2\kappa(R+d)}. \quad (3.17)$$

Aus (3.15) folgt hiermit

$$I \propto U \cdot e^{-2\kappa d}. \quad (3.18)$$

Im Rahmen der gemachten Näherungen (geringe Wechselwirkung Spitze-Probe,  $s$ -artige Spitzenzustände, kleine Spannungen  $U \ll \phi$ ,  $T = 0$  K, elastisches Tunneln, Vernachlässigung des Elektronenspins  $\vec{s}$ , gleiche Austrittsarbeiten  $\phi_S$ ,  $\phi_T$ ) ergibt sich daraus folgende Interpretation *topographischer* STM-Daten: Flächen konstanten Tunnelstroms sind entsprechend (3.15) Flächen konstanter Zustandsdichte der Oberfläche am Fermi-Niveau am Ort der Spitze:

$$I = \text{const} \quad \rightarrow \quad \rho_S(\vec{r}_T, E_F) = \text{const}. \quad (3.19)$$

Ferner läßt sich aus dem Modell folgender Ausdruck für die zu erwartende Korrugation  $\Delta z^2$  auf Oberflächen mit fundamentaler Periodizität  $a$  herleiten [18, 24],

$$\Delta z \approx \frac{2}{\kappa} \cdot \exp(-2(\sqrt{\kappa^2 + \frac{\pi^2}{a^2}} - \kappa)z), \quad z = d + R, \quad (3.20)$$

mit dem sich gemessene Korrugationen auf rekonstruierten Metalloberflächen quantitativ deuten lassen [18]. Bei dichtgepackten Metalloberflächen mit interatomaren Abständen von  $2.5\text{--}3 \text{ \AA}$  sind die experimentell bestimmten Korrugationen mit einigen Zehntel Ångström dagegen deutlich größer, als aufgrund des TH-Modells zu erwarten ist. Hierfür gibt es prinzipiell zwei Erklärungsansätze. Zum einen hat CHEN [25] die gemessenen Korrugationserhöhungen im Rahmen der sogenannten *Ableitungsregeln* [24] unter der Annahme  $d_{z^2}$ -artiger Spitzenzustände beschrieben. Bei kleinen Perioden

<sup>2</sup>Als Korrugation  $\Delta z$  bezeichnet man die Differenz zwischen Minimum und Maximum einer Konturlinie.

ist also für eine bessere quantitative Übereinstimmung die elektronische Struktur der Spitze zu berücksichtigen. Zum anderen ist zweifelhaft, ob bei den für atomare Auflösung meist notwendigen extremen Tunnelparametern ( $R < 100 \text{ k}\Omega$ ) die Annahme einer vernachlässigbaren Wechselwirkung zwischen Spitze und Probe noch gerechtfertigt ist. Die möglichen Wechselwirkungen, die eine Erhöhung der Korrugation bewirken, sollen in Kapitel 7 im Zusammenhang mit atomarer magnetischer Auflösung diskutiert werden.

### 3.4 Spektroskopie der lokalen Zustandsdichte

Im letzten Abschnitt wurde von einer verschwindenden Potentialdifferenz  $U$  zwischen den beiden Elektroden ausgegangen. Größere Spannungen verschieben die relative Lage der beiden Fermi-Niveaus und damit der Spitzen- und Probenzustände gegeneinander, so daß sich als Verallgemeinerung von (3.15) der Gesamtstrom aus einer Faltung der beiden Zustandsdichten über das Energieintervall  $[0, eU]$  ergibt:

$$I \propto \int_0^{eU} \rho_S(\vec{r}_T, E_F + \varepsilon) \cdot \rho_T(E_F - eU + \varepsilon) d\varepsilon \quad (3.21)$$

Hierbei wurde  $T = 0 \text{ K}$  angenommen, sowie die übliche Konvention gewählt, daß  $U$  die Spannung der Oberfläche relativ zur Spitze bezeichnet. Zur Verdeutlichung sei das eindimensionale Schema in Abb. 3.4 betrachtet, mit unterschiedlichen Austrittsarbeiten von Spitze und Probe  $\phi_T$  und  $\phi_S$ . Im wechselwirkungsfreien Zustand (a) haben Spitze und Oberfläche die gleichen Vakuum-Niveaus (gestrichelte Linie). Angedeutet ist hier die Zustandsdichte der Probe sowie der (von der effektiven Barrierenhöhe abhängige) exponentielle Abfall zweier Wellenfunktionen der Spitze ins Vakuum. Im Tunnelkontakt bei  $U = 0$  (b) befinden sich Spitze und Probe im thermischen Gleichgewicht, die Fermi-Niveaus sind angeglichen, und wegen  $\phi_T > \phi_S$  ist die Barriere nicht rechteckig, sondern fällt zur Probe hin ab. Das Anlegen einer Bias-Spannung  $U$  verschiebt die beiden Fermi-Niveaus um  $|eU|$ . Bei  $U > 0$  (c) tunneln Elektronen elastisch von besetzten Zuständen der Spitze in unbesetzte Zustände der Probe, bei  $U < 0$  (d) tunneln Elektronen von besetzten Zuständen der Oberfläche in unbesetzte der Spitze. Setzt man  $\rho_T$  zunächst als konstant voraus, so ergibt sich durch Differentiation von (3.21) im Grenzfall kleiner Spannungen:

$$\frac{dI}{dU}(U) \propto \rho_S(\vec{r}_T, E_F + eU). \quad (3.22)$$

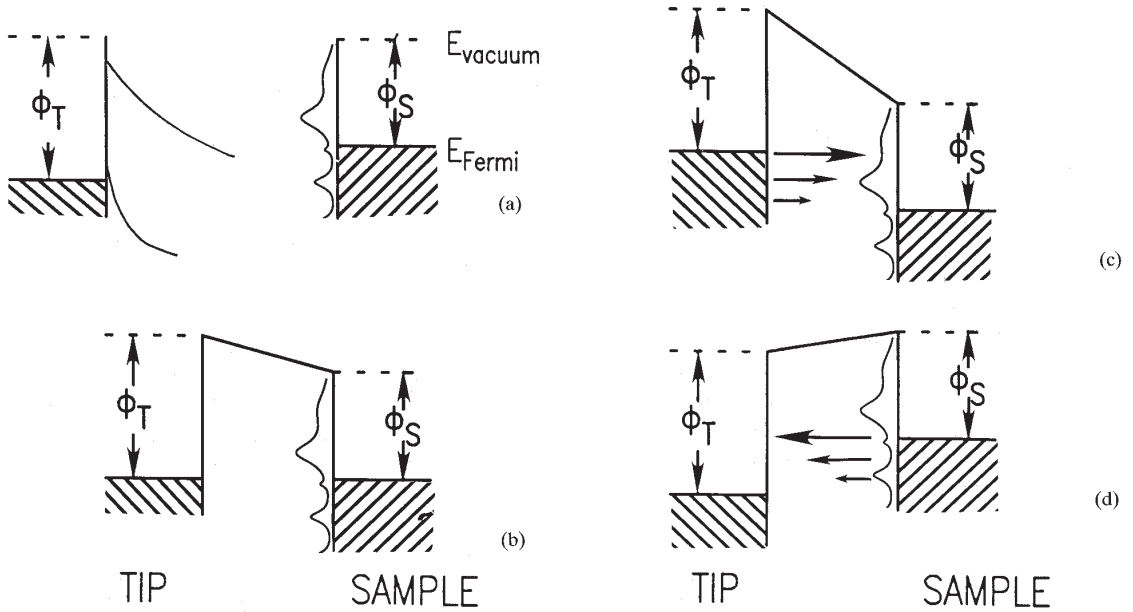
Die differentielle Leitfähigkeit  $dI/dU(U)$  ist in dieser Näherung ein direktes Abbild der Zustandsdichte der Oberfläche am Ort der Spitze  $\vec{r}_T$  bei der Energie  $E_F + eU$ . Da Form und Höhe der Tunnelbarriere von  $U$  abhängen, wird (3.22) für zunehmende Spannungen schnell unbrauchbar. Durch Einführung eines Transmissionskoeffizienten  $T(E, U, s)$ , ähnlich dem in (3.10), kann man von  $\rho_S(\vec{r}_T)$  auf die Zustandsdichte  $\rho_S(0)$  an der Oberfläche übergehen und gleichzeitig die Spannungsabhängigkeit der Barriere berücksichtigen:

$$I \propto \int_0^{eU} \rho_S(E_F + \varepsilon) \cdot \rho_T(E_F - eU + \varepsilon) \cdot T(\varepsilon, U, s) d\varepsilon \quad (3.23)$$

Die Schwierigkeit besteht nun in der Wahl eines geeigneten Transmissionskoeffizienten  $T(E, U, s)$ . Im Rahmen der semi-klassischen WKB-Näherung läßt er sich schreiben als [27, 28]:

$$T(E, U, s) \cong \exp(-2\kappa(E, U)s), \quad \kappa(E, U) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \bar{\phi} + \frac{eU}{2} - (E - E_{||}) \right)}, \quad (3.24)$$





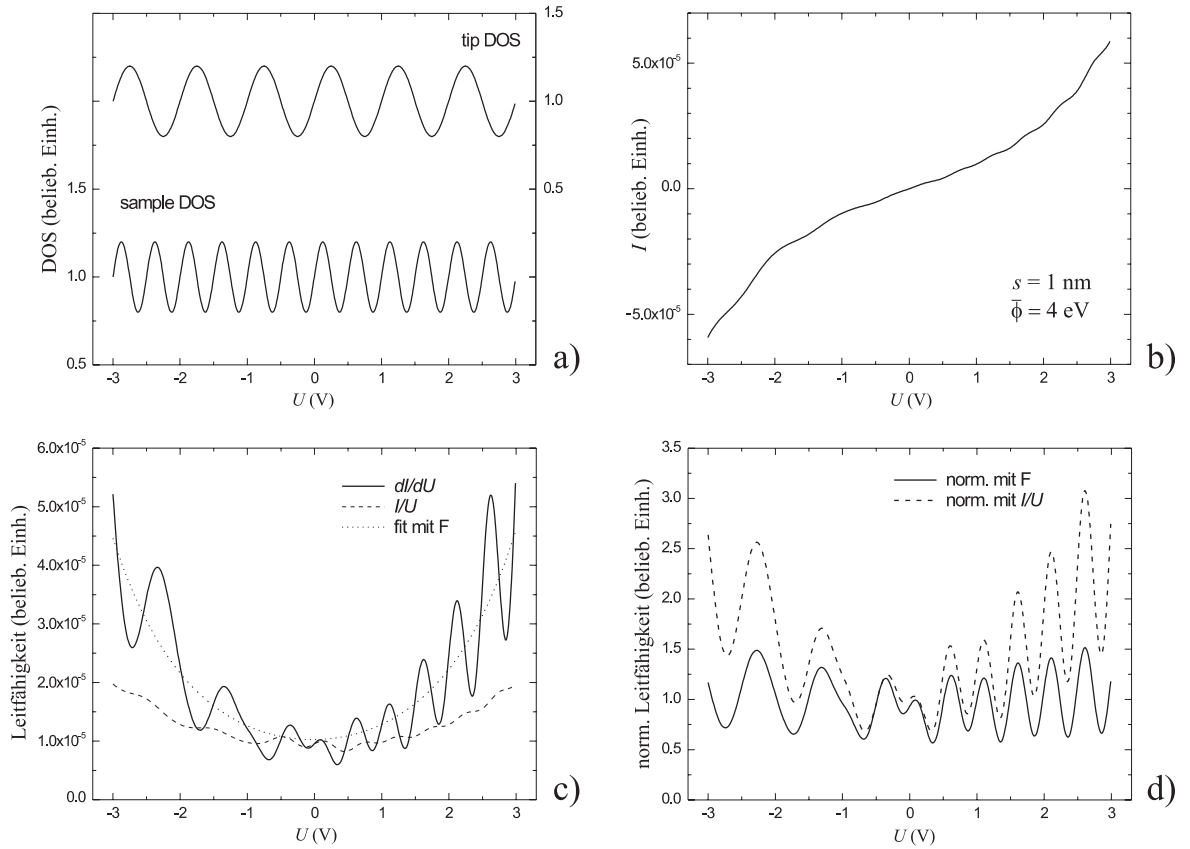
**Abbildung 3.4:** Energiediagramm des Tunnelübergangs. **a)** Probe und Spitze sind in großer Entfernung wechselwirkungsfrei. **b)** Bei der Annäherung fließt ein Tunnelstrom bis sich die Fermi-Niveaus angeglichen haben. **c)** Bei positiver Probenspannung tunneln Elektronen von der Spitze zur Probe. **d)** Bei negativer Probenspannung tunneln Elektronen von der Probe zur Spitze. (Abb. aus [26])

mit dem effektiven Tunnelabstand  $s = d + R$ , der mittleren Austrittsarbeit  $\bar{\phi} = (\phi_S + \phi_T)/2$ , und der Energiekomponente parallel zur Oberfläche  $E_{\parallel} = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m)$ . Letzteres führt zu einer exponentiellen Dämpfung mit zunehmendem  $k_{\parallel}$ , wodurch der Hauptbeitrag des Tunnelstroms von Zuständen nahe dem  $\bar{\Gamma}$ -Punkt der Oberflächen-Brillouinzone getragen wird. LANG [29] hat im Rahmen des *Jellium-Modells* gezeigt, daß dieser Ansatz mit einem einfachen Transmissionskoeffizienten  $T$  qualitativ zu dem gleichen Ergebnis führt wie die exakte Berechnung des Tunnelstroms mittels  $M_{\mu\nu}$  nach BARDEEN. Durch partielle Integration und anschließende Differentiation von (3.23) läßt sich nun ein Zusammenhang zwischen der mit dem STM meßbaren differentiellen Leitfähigkeit  $dI/dU$  und der Zustandsdichte der Oberfläche  $\rho_S$  herstellen [28]:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dU}(U, s) &\propto T(eU, U, s) \rho_S(E_F + eU) \rho_T(E_F) \\ &+ \int_0^{eU} T(\varepsilon, U, s) \rho_S(E_F + \varepsilon) \frac{\rho_T(E_F + \varepsilon - eU)}{dU} d\varepsilon \\ &+ \int_0^{eU} \frac{dT(\varepsilon, U, s)}{dU} \rho_S(E_F + \varepsilon) \rho_T(E_F + \varepsilon - eU) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Unter der Annahme einer konstanten oder zumindest nur schwach variierenden Spitzen-Zustandsdichte  $\rho_T$  läßt sich der zweite Term vernachlässigen, während der dritte hauptsächlich bei großen Spannungen durch den Anstieg von  $T$  einen Beitrag liefert.

Neben anderen Autoren hat UKRAINTSEV [28] darauf hingewiesen, daß (3.23) vollkommen symmetrisch ist bezüglich  $\rho_S$  und  $\rho_T$ , während die Schreibweise von (3.25) den Einfluß von  $\rho_S$  hervorhebt, was bei Vernachlässigung der Terme 2 und 3 zu qualitativ falschen Ergebnissen führen kann.



**Abbildung 3.5: Zustandsdichte,  $dI/dU$ -Spektren und Normierung.** a) Hypothetische Zustandsdichten  $\rho_S$  und  $\rho_T$  b) Nach (3.23) und (3.24) berechnete  $I(U)$ -Kurve c) Differentielle und totale Leitfähigkeit d)  $dI/dU(U)$  normiert mit  $I/U$  und  $F(U)$ .

Insbesondere folgt  $dI/dU$  nur für positive Spannungen annähernd der Zustandsdichte  $\rho_S$ , während  $dI/dU$  für  $U < 0$  eher ein Abbild der unbesetzten Zustände der Spitze liefert. Abbildung 3.5 soll dies verdeutlichen: (a) zeigt zwei hypothetische Zustandsdichten  $\rho_S$  und  $\rho_T$  mit unterschiedlichen Perioden zwecks Identifikation. Mit (3.23) und (3.24) kann man  $I(U)$  berechnen (b), und daraus die im Rahmen des Modells (qualitativ) zu erwartende differentielle Leitfähigkeit  $dI/dU$  (c): Auf einem zu beiden Seiten exponentiell ansteigenden Hintergrund sind die (unbesetzten) Zustandsdichten  $\rho_S$  für  $U > 0$  und  $\rho_T$  für  $U < 0$  zu identifizieren, mit einem Übergangsbereich bei  $E_F$ . Die Zustandsdichte der Spitze  $\rho_T$  erscheint dabei an  $U = 0$  gespiegelt.

Ausgehend von einer Symmetrisierung von (3.25) hat UKRAINTSEV folgende Funktion  $F(U)$  für die Normierung experimentell gemessener Spektren vorgeschlagen:

$$F(U) = A_T T'(s, U/2) + A_S T'(s, -U/2), \quad T'(s, \xi) = \exp\left(-2s \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\bar{\phi} - e\xi)}\right). \quad (3.26)$$

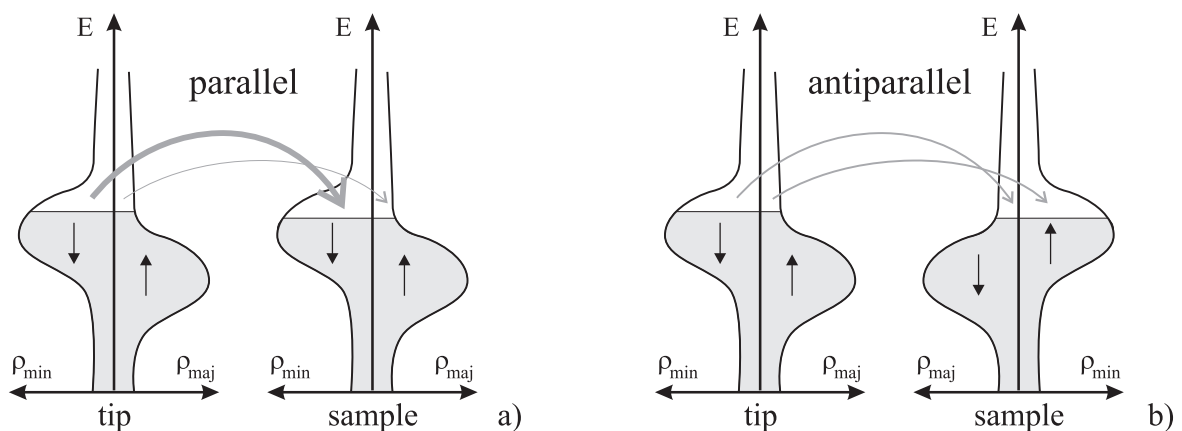
Die Parameter  $A_T$ ,  $A_S$  und  $s$  sind dabei durch einen Fit an  $dI/dU(U)$  zu bestimmen. Abb. 3.5(d) zeigt, daß man auf diese Weise den exponentiellen Hintergrund eliminieren und auch weitgehend korrekt relative Intensitäten extrahieren kann. Es sei angemerkt, daß dieses Verfahren die Messung von Spektren in einem möglichst großen Energiebereich erfordert, was sich in der Praxis negativ auf die erzielbare Energieauflösung auswirkt.

Eine weitere Methode aus  $dI/dU$ -Spektren intrinsische Eigenschaften der Probe (oder Spitze) zu extrahieren ist die Normierung mit der totalen Leitfähigkeit  $I/U$  [30,31]. Wie in Abb. 3.5(c) zu sehen ist, verläuft  $I/U(U)$  jedoch flacher als  $dI/dU(U)$  und kann daher den ansteigenden Hintergrund nur teilweise kompensieren. Auch die Intensitätsverhältnisse werden daher in Abb. 3.5(d) nicht korrekt wiedergegeben. Die Stärke der Methode liegt jedoch in ihrer Einfachheit – keine zusätzlichen Annahmen sind notwendig: die Spektren können “mit sich selbst” normiert werden – und der Tatsache, daß der Einfluß des Tunnelabstandes  $s$  weitgehend eliminiert wird [30]. Hingegen besteht ein weiterer Nachteil darin, daß durch die Normierung nahe  $U = 0$  V Information verloren geht, denn hier ist  $dI/dU \approx I/U$  (ohmsches Verhalten), und die normierten Spektren haben immer den Wert 1.

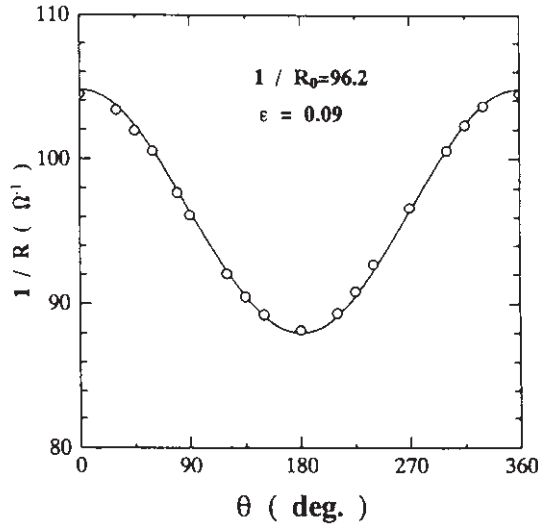
### 3.5 Spinpolarisiertes Tunneln

In Ferromagneten bewirkt die Austauschwechselwirkung eine Aufspaltung der Bandstruktur in energetisch abgesenkte Majoritäts- ( $\uparrow$ ) und angehobene Minoritätsbänder ( $\downarrow$ ). Dabei kommt es zur teilweisen Umbesetzung von Elektronen, woraus sich eine Nettomagnetisierung ergibt. Die Magnetisierungsrichtung stellt dabei eine Quantisierungsachse für den Spin der Elektronen dar. Aufgrund der Spinpolarisation  $P = (\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow})/(\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow})$  am Fermi-Niveau ist der Tunnelstrom abhängig von der relativen Magnetisierungsrichtung der beiden Elektroden. Abb. 3.6 soll dies für den Fall identischer Elektroden veranschaulichen: Unter Vernachlässigung von Spinflip-Prozessen bleibt der Spin während des Tunnelns erhalten. Bei paralleler Magnetisierung (a) tunneln dann ausschließlich Majoritätselektronen der Spitze in unbesetzte Majoritätszustände der Probe und Minoritätselektronen in unbesetzte Minoritätszustände. Bei antiparalleler Magnetisierung (b) ist es genau umgekehrt, und der Gesamtstrom ist in diesem Fall kleiner. Diesen Effekt nennt man Spin-Ventil- oder TMR(Tunnelmagnetowiderstands)-Effekt.

Der erste experimentelle Nachweis spinpolarisierten Tunnelns gelang TEDROW und MESERVEY 1971 an planaren Supraleiter-Isolator-Ferromagnet-Übergängen (Al-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Ni) [32] und JULLIERE 1975 an Fe-Ge-Co-Übergängen [33]. SLONCZEWSKI [19] hat die Methode aus Kap. 3.2 für die Anwendung auf FM-Elektroden erweitert und so innerhalb des Modells für freie Elektronen im Grenz-



**Abbildung 3.6:** Prinzip des spinpolarisierten Tunnelns zwischen identischen Elektroden: Der Tunnelstrom ist im parallelen Fall (a) größer als im antiparallelen (b).



**Abbildung 3.7:** Nachweis der  $\cos\theta$ -Abhängigkeit des Tunnelstroms an planaren FM-Oxid-FM-Übergängen. (Abbildung aus Ref. [35])

fall kleiner Spannungen folgenden Ausdruck für die Leitfähigkeit hergeleitet:

$$\sigma = \sigma_{fbf'} (1 + P_{fb}P_{f'b}) \cos\theta. \quad (3.27)$$

Dabei bezeichnet  $\theta$  den Winkel zwischen den beiden Magnetisierungsrichtungen,  $P_{fb}$  und  $P_{f'b}$  die effektive Polarisierung der Grenzflächen und  $\sigma_{fbf'}$  eine mittlere Leitfähigkeit.  $P_{fb}$  und  $P_{f'b}$  sind in diesem Fall nicht mit der Spinpolarisierung der Ferromagneten gleichzusetzen, sondern hängen im allgemeinen auch von Form und Höhe der Barriere ab [19, 34]. Experimentell wurde die Abhängigkeit des Tunnelstroms von  $\cos\theta$  von MIYAZAKI und TEZUKA [35] an planaren Fe-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Fe-Übergängen nachgewiesen (Abb. 3.7), mit  $\sigma_{fbf'} = 96.2 \Omega^{-1}$  und  $P_{fb}P_{f'b} = 9\%$  bei  $RT$ . Für parallele und antiparallele Einstellungen ergibt sich speziell:

$$\begin{aligned} \sigma_{\uparrow\uparrow} &= \sigma_{fbf'} (1 + P_{fb}P_{f'b}) \\ \sigma_{\uparrow\downarrow} &= \sigma_{fbf'} (1 - P_{fb}P_{f'b}), \end{aligned} \quad (3.28)$$

woraus sich eine (meßbare) effektive Polarisierung des Tunnelüberganges definieren läßt:

$$P_{fbf'} \equiv P_{fb}P_{f'b} = \frac{\sigma_{\uparrow\uparrow} - \sigma_{\uparrow\downarrow}}{\sigma_{\uparrow\uparrow} + \sigma_{\uparrow\downarrow}}. \quad (3.29)$$

Während das bisher Gesagte bereits ein erstes Verständnis spinpolarisierten Tunnelns erlaubt, wurde der wichtige Schritt einer Erweiterung des TH-Modells für den Fall magnetischer Elektroden erst kürzlich von HEINZE *et al.* durchgeführt [20, 36]. Unter der Annahme konstanter Zustandsdichte und Magnetisierung der Spitze,  $\rho_T = \rho_T^\uparrow + \rho_T^\downarrow$  und  $m_T = \rho_T^\uparrow - \rho_T^\downarrow$ , und identischer s-Wellen gleicher Abklinglänge  $\kappa = \kappa_\uparrow = \kappa_\downarrow$  ergibt sich für den Tunnelstrom  $I$  im Grenzfall kleiner Spannungen und  $T = 0$  K:

$$I(\vec{r}_T, U, \theta) \propto \rho_T \tilde{\rho}_S(\vec{r}_T, E_F + eU) + \mathbf{m}_T \tilde{\mathbf{m}}_S(\vec{r}_T, E_F + eU). \quad (3.30)$$

Dabei bezeichnen  $\tilde{\rho}_S$  und  $\tilde{\mathbf{m}}_S$  energieintegrierte Größen [36] in dem Sinne, daß sich durch Differentiation folgender Ausdruck ergibt:

$$dI/dU(\vec{r}_T, U, \theta) \propto \rho_T \rho_S(\vec{r}_T, E_F + eU) + \mathbf{m}_T \mathbf{m}_S(\vec{r}_T, E_F + eU). \quad (3.31)$$

Mit der üblichen Definition für die Polarisation,  $P = (\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow})/(\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow})$ , erhält man folgende zu (3.27) äquivalente Beziehung:

$$dI/dU(\vec{r}_T, U, \theta) \propto \rho_T \rho_S(\vec{r}_T, E_F + eU) [1 + \cos(\theta(\vec{r}_T)) P_T P_S(\vec{r}_T, E_F + eU)]. \quad (3.32)$$

Die Domänenstruktur einer Oberfläche bewirkt also zum einen entsprechend (3.30) im Konstantstrommodus ( $I = const$ ) über ein räumlich variierendes  $\theta(x, y)$  eine Variation der im SP-STM abgebildeten Höhe  $z$ . Dabei besteht bei kollinearen Magnetisierungsrichtungen von Spitze und Oberfläche (maximaler Kontrast) unter Vernachlässigung einer möglichen  $z$ -Abhängigkeit von  $\tilde{P}_S(\vec{r}_T, E_F + eU)$  folgender Zusammenhang:

$$e^{2\kappa\Delta z} = \frac{1 + P_T \tilde{P}_S(U)}{1 - P_T \tilde{P}_S(U)}, \quad \text{bzw.} \quad P_T \tilde{P}_S(U) = \frac{e^{2\kappa\Delta z} - 1}{e^{2\kappa\Delta z} + 1}, \quad \kappa = \sqrt{2m\tilde{\Phi}}/\hbar \quad (3.33)$$

Zum anderen ist entsprechend (3.32) im Betrieb bei konstanter Höhe (z.B. bei verschwindender energieintegrierter Polarisation  $\tilde{P}_S(\vec{r}_T, E_F + eU) = 0$ ) die Domänenstruktur in einer Karte der differentiellen Leitfähigkeit sichtbar. Im allgemeinen gibt es immer eine Mischung beider Effekte, wobei es auch zur Invertierung des  $dI/dU$ -Signals aufgrund der  $z$ -Änderung kommen kann. Die mit dem SP-STM möglichen Meßmodi sollen im folgenden diskutiert werden.

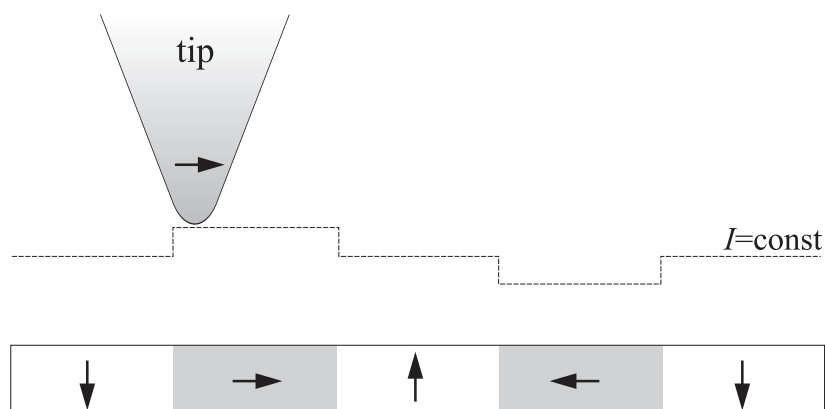
## Kapitel 4

# Abbildungsmodi der spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie

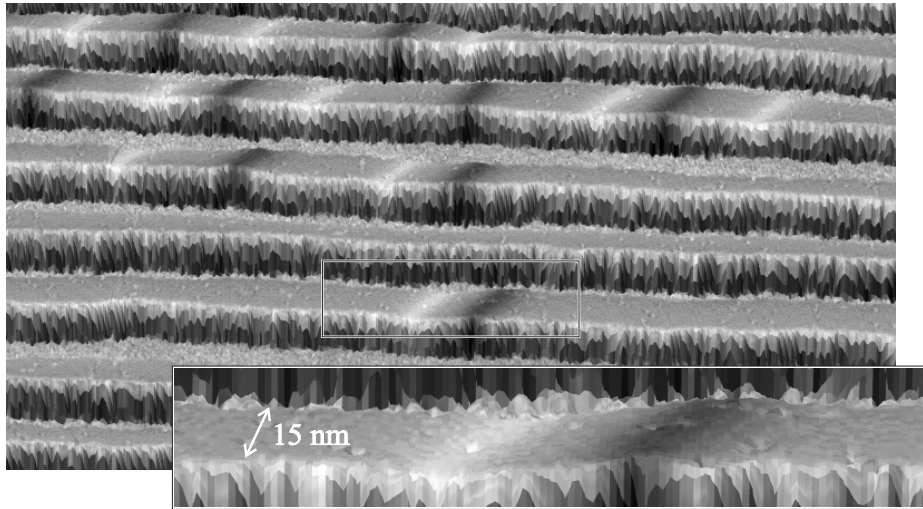
In diesem Kapitel soll ein Überblick gegeben werden, wie mit dem STM die magnetische Struktur von Oberflächen untersucht werden kann. Bei der spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie benutzt man dafür Sondenspitzen, die eine nichtverschwindende Spinpolarisation am Fermi-Niveau aufweisen, so daß der Tunnelstrom abhängig wird von der relativen Orientierung der Magnetisierungsvektoren in Spitze und Probe. Dies können Spitzen sein, die vollständig aus ferro- oder antiferromagnetischem Material bestehen, oder durch das Aufbringen dünner magnetischer Beschichtungen auf eine nichtmagnetische Spitze hergestellt werden.

### 4.1 Topographischer Modus

Die einfachste Herangehensweise ist der Betrieb des STMs im Konstantstrom- oder topographischen Modus. Dabei bewirkt die Domänenstruktur der Oberfläche im Fall von  $\tilde{P}_S(U) \neq 0$  und  $\tilde{\mathbf{m}}_S \mathbf{m}_T \neq 0$  eine Variation der gemessenen Topographie, was schematisch in Abb. 4.1 dargestellt ist. Der Kontrast



**Abbildung 4.1:** Schematische Darstellung des Konstantstrommodus: Bei positiver effektiver Spinpolarisation des Tunnelübergangs erhöht sich der Abstand bei parallelen Magnetisierungsrichtungen und verringert sich bei antiparallelen. Zwischen unterschiedlichen Magnetisierungsrichtungen, die senkrecht zur Magnetisierung der Spitze stehen, kann nicht unterschieden werden.



**Abbildung 4.2:** 3D-Ansicht des Konstantstrombildes von 1.6 ML Fe/W(110), eingefärbt mit  $dI/dU$ -Karte, aufgenommen mit einer Fe-Spitze bei  $U = -100$  mV,  $I = 0.3$  nA und  $T = 14$  K. Die Domänenwände erscheinen als Erhöhungen bzw. Vertiefungen in der Topographie. Aus  $\Delta z = \pm 0.2$  Å ergibt sich nach (3.33) mit  $\bar{\phi} = 4$  eV eine effektive Polarisation von 39%.

ist im kollinearen Fall am größten und verschwindet für  $\tilde{\mathbf{m}}_S \perp \mathbf{m}_T$ . Abb. 4.2 zeigt eine 3D-Ansicht von 1.6 ML Fe auf dem gestuften Wolframsubstrat, gemessen mit einer Fe-Spitze (in-plane-Kontrast) bei  $T = 14$  K. Zur besseren Identifikation wurde das Bild mit dem simultan aufgenommenen  $dI/dU$ -Signal eingefärbt. Wie in Kap. 6.2 gezeigt werden wird, steht die magnetisch leichte Achse in Gebieten mit DL-Bedeckung senkrecht zur Oberfläche. Die in Abb. 4.2 eingesetzte Spitze ist daher sensitiv auf die Domänenwände, da dort die Magnetisierung durch die Filmebene drehen muß. Entsprechend Abb. 4.1 erscheinen dann *Domänenwände* mit einander entgegengesetzten Magnetisierungsrichtungen als Erhöhungen bzw. Vertiefungen im Konstantstrombild, mit in diesem Fall  $\Delta z = \pm 0.2$  Å. Nach (3.33) läßt sich mit der Annahme  $\bar{\phi} = 4$  eV die effektive Polarisation  $P_T \tilde{P}_S(-100 \text{ mV})$  zu 39% bestimmen. Da der Azimutwinkel der Spitzenmagnetisierung nicht bekannt ist, steht die Magnetisierung innerhalb der Wände nicht unbedingt kollinear zur Magnetisierung der Spitze, und dieser Wert ist lediglich als eine untere Grenze zu verstehen.

Der topographische Meßmodus hat jedoch einige Nachteile: Zum einen ist die magnetische Information schwer von der (spingemittelten) Topographie zu trennen, insbesondere auf strukturierten Oberflächen wie in Abb. 4.2. Zum anderen wirkt sich eine Störung auf dem  $z$ -Signal, beispielsweise Drift oder ein kleiner Versatz zwischen einzelnen Scanlinien, direkt auf das Meßsignal aus, was in der langsamen  $y$ -Scanrichtung das Signal-Rausch-Verhältnis verringert. Neben ihrer Einfachheit liegt jedoch der Vorteil der Methode in der geringen Meßzeit, die für eine Aufnahme benötigt wird: etwa 3 bis 15 min für ein Bild von  $500 \times 500$  Punkten.<sup>1</sup> Es sei angemerkt, daß es auch dieser Meßmodus war, mit dem die magnetische Struktur einer antiferromagnetischen Oberfläche mit dem STM abgebildet werden konnte [37]. Es zeigte sich, daß auf der atomaren Skala die magnetische Struktur nicht nur eine kleine Modulation des spingemittelten Signals bewirkt, sondern das Konstantstrombild vollkommen dominiert. Eine ausführliche Diskussion findet sich in Kapitel 7.

<sup>1</sup>Bei  $dI/dU$ -Karten (vgl. Kap. 4.3) begrenzt die Zeitkonstante  $\tau$  des LockIns die Scangeschwindigkeit.

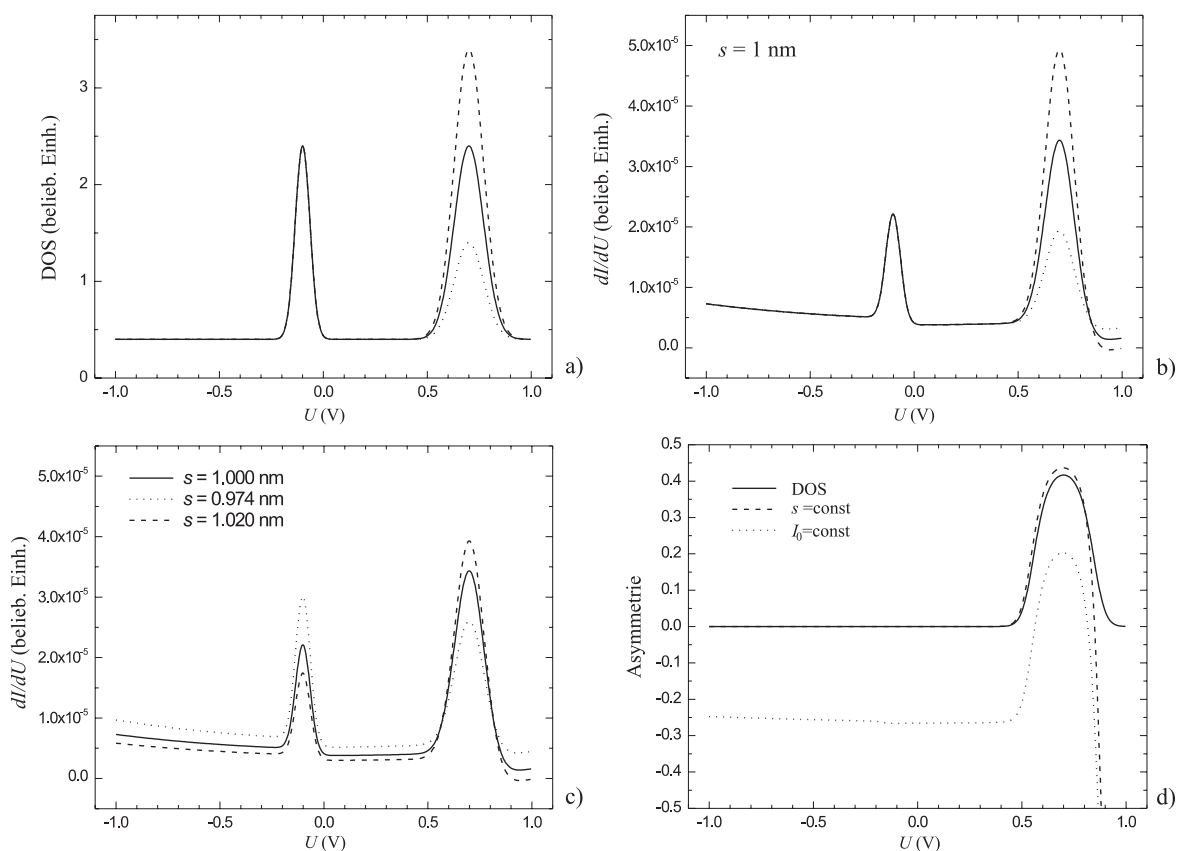
## 4.2 Spektroskopie

Bei der Spektroskopie mit magnetischen Spitzen hat man die Möglichkeit, die lokale Zustandsdichte (LDOS) spin- und energieaufgelöst auszumessen. Ein Vergleich der gemessenen Spektren über entgegengesetzt magnetisierten Domänen oder vor und nach dem Ummagnetisieren der Spitze oder Probe sollte dabei u.a. die (energieaufgelöste) Bestimmung der Spinpolarisation  $P_S(U)$  erlauben. Wichtige Fragestellungen sind hier z.B.: Wie hoch ist die Spinpolarisation eines Oberflächenzustandes? Handelt es sich um einen Minoritäts- oder Majoritätszustand? Ändert sich die gemessene Spinpolarisation mit dem Abstand?

Selbst wenn man die Spinpolarisation der Spitze als bekannt und konstant voraussetzt, so ergibt sich dabei die Schwierigkeit, daß wenn  $\tilde{P}_S(U_0) \neq 0$ , wobei  $U_0$  die Stabilisierungsspannung bezeichnet, Spektren über entgegengesetzt magnetisierten Domänen nicht bei gleichem Abstand gemessenen werden. Es besteht dann kein einfacher Zusammenhang mehr zwischen der gemessenen Asymmetrie  $A(U) := [dI/dU(U)_\uparrow - dI/dU(U)_\downarrow] / [dI/dU(U)_\uparrow + dI/dU(U)_\downarrow]$  und der Polarisation  $P(U) = (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow) / (\rho_\uparrow + \rho_\downarrow)$ . Abbildung 4.3 soll diesen wichtigen Unterschied zwischen Spektroskopie bei konstantem Abstand und bei Stabilisierung auf konstanten Strom verdeutlichen. Die Berechnung erfolgte wie in Abb. 3.5, aber mit  $\rho_T = \text{const.}$  Abb. 4.3(a) zeigt drei angenommene Zustandsdichten  $\rho_S$ , mit einer Variation des Peaks bei  $U = 700$  mV, die einer Spinpolarisation von 50 % entspricht, einem Referenz-Peak bei  $U = -100$  mV, sowie einem (nichtpolarisierten) Untergrund. Die bei konstantem Abstand  $s = 1$  nm berechneten Spektren in Abb. 4.3(b) spiegeln die Intensitätsverhältnisse der drei Zustandsdichten korrekt wider, insbesondere bei  $U = 700$  mV. Der Peak bei  $U = -100$  mV erscheint jedoch gegenüber denen bei  $U = 700$  mV wegen der größeren effektiven Barrierenhöhe erniedrigt. Man beachte die leicht negative differentielle Leitfähigkeit bei  $U = 1$  V: Weil die Zustandsdichte bei  $U = 700$  mV gegenüber dem Untergrund sehr groß ist (gestricheltes Spektrum) nimmt der Tunnelstrom mit zunehmender Spannung ab. Die mit der Spannung zunehmende Barrierenhöhe für den Peak bei 700 mV wird dabei durch das Tunneln in zusätzliche unbesetzte Zustände oberhalb des Peaks nicht vollständig kompensiert.

Da im STM der Tunnelabstand nur mittelbar über eine Regelung des Stromes (oder der Spannung) eingestellt werden kann, ist eine Messung unterschiedlicher (effektiver) Zustandsdichten bei gleichem Abstand im allgemeinen nicht möglich. Statt dessen werden Spektren bei vorgegebenen Stabilisierungsparametern  $I_0$  und  $U_0$  aufgenommen. Abb. 4.3(c) zeigt die sich so aus Abb. 4.3(a) ergebenden Spektren für  $U_0 = 1$  V: Die höhere Zustandsdichte bei  $U = 700$  mV (gestrichelte Linie) bewirkt ein Zurückziehen der Spitze und daher ein gegenüber Abb. 4.3(b) verringertes Signal. Ist die Zustandsdichte zwischen  $U = 0$  V und  $U_0 = 1$  V verringert (gepunktete Linie) verringert sich der Tunnelabstand und das  $dI/dU$ -Signal erscheint gegenüber dem entsprechenden in Abb. 4.3(b) im gesamten Spannungsbereich erhöht. Als Konsequenz verhält sich der Peak bei  $U = -100$  mV antagonistisch zu dem bei  $U = 700$  mV, obwohl der entsprechende Peak in der Zustandsdichte in den drei Fällen gleich ist. Eine Identifizierung der so gemessenen Asymmetrie mit der Spinpolarisation der Zustandsdichte wäre in diesem Fall offensichtlich falsch. Insbesondere ist ein antagonistisches Verhalten zweier Peaks kein hinreichendes Kriterium für den Nachweis eines Minoritäts-Majoritäts-Paares, wie es beispielsweise für einen spinaufgespaltenen Oberflächenzustand zu erwarten ist [4]. Abb. 4.3(d) zeigt im Vergleich die Spinpolarisation (Asymmetrie) der Zustandsdichte  $P(U)$  und die Asymmetrie  $A(U)$  für die Spektren aus (b) und (c). Die Spinpolarisation  $P(U)$  erreicht bei  $U = 700$  mV ihr Maximum von etwa 42%. Dieses erscheint gegenüber den angegebenen 50% wegen des nichtpolarisierten Hintergrundes reduziert. Die Messung bei konstantem Abstand

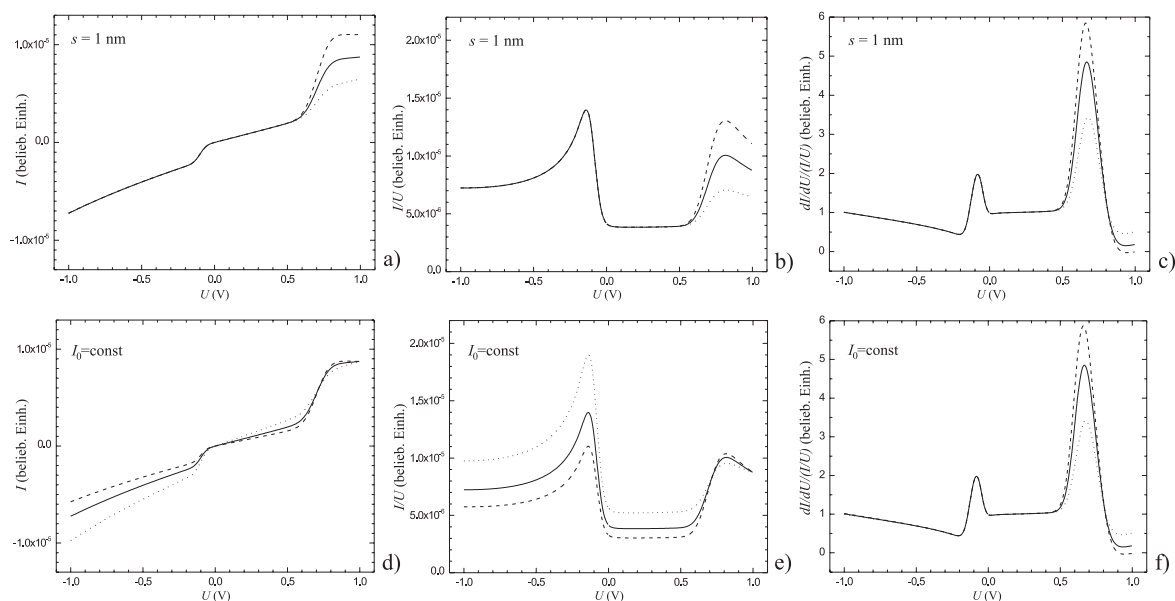




**Abbildung 4.3: SP-STIS bei konstantem Abstand und bei konstantem Stabilisierungsstrom.** a) Hypothetische Zustandsdichten  $\rho_S$ ,  $\rho_T$  wurde als konstant angenommen. b)  $dI/dU(U)$  bei konstantem Abstand  $s = 10$  Å. c)  $dI/dU(U)$  bei Stabilisierung bei konstantem  $I_0$ ,  $U_0 = 1$  V. d) Polarisation der DOS und Asymmetrie der Spektren aus (b) und (c).

(gestrichelt) zeigt für  $U < 850$  mV eine gute Übereinstimmung. Oberhalb dieses Wertes kommt es allerdings wegen eines Kreuzungspunktes der Spektren (vgl. 4.3(b)) zu großen Abweichungen. Im Fall der Stabilisierung bei konstantem Strom (gepunktet) ist  $A(U)$  für  $U < 500$  mV etwa  $-25\%$ , obwohl  $P(U)$  in diesem Bereich identisch Null ist. Allein das Vorzeichen von  $P(U)$  wird für die Peakposition bei  $U = 700$  mV richtig reproduziert.

Abb. 4.4 zeigt für die beiden behandelten Fälle – Spektroskopie bei konstantem Abstand und bei Stabilisierung auf konstanten Strom – den Tunnelstrom  $I$ , die totale Leitfähigkeit  $I/U$ , sowie die mit  $I/U$  normierten Spektren. Ein Vergleich von Abb. 4.4(c) und (f) zeigt, daß identische Zustandsdichten, die bei unterschiedlichen Abständen gemessen werden, durch die Normierung auf eine universelle Kurve zusammenfallen, eine Tatsache, die auch experimentell seit langem bekannt ist [30]. Das bedeutet jedoch *nicht*, daß diese universelle Kurve ein getreues Abbild der Zustandsdichte darstellt oder daß die Intensitätsverhältnisse *unterschiedlicher* Zustandsdichten korrekt reproduziert werden können. In der Tat entsteht durch die Normierung zwischen den Peaks ein Plateau, das keine Entsprechung in der Zustandsdichte hat, und die so bestimmte Asymmetrie bei  $U = 700$  mV ist zwar eine Verbesserung gegenüber dem direkten Spektrum in Abb. 4.3(c),  $P(700$  mV) wird aber immer noch unterschätzt. Betrachtet man den Tunnelstrom in Abb. 4.4(a), so wird deutlich, daß in diesem speziellen Fall eine Stabilisierung bei  $U_0 = -1$  V eine Messung bei konstantem Abstand ermöglichen

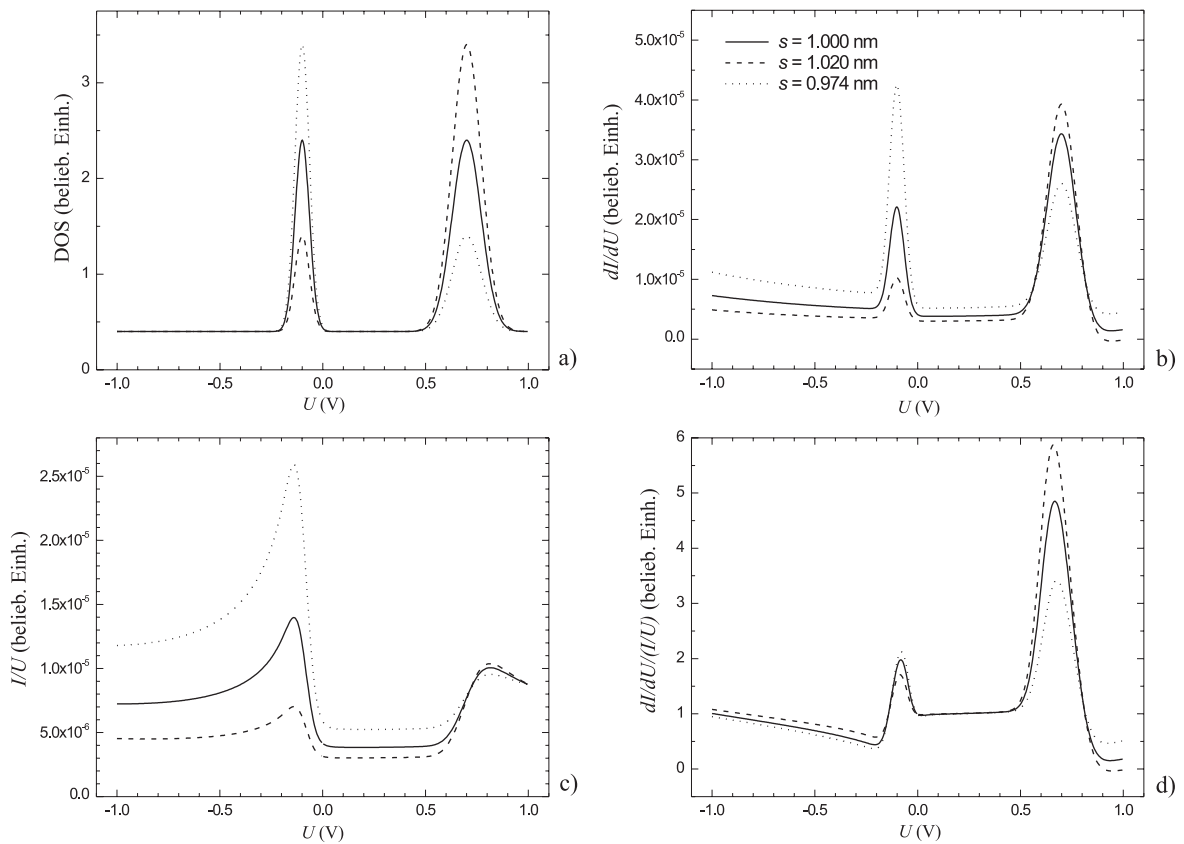


**Abbildung 4.4: Normierung mit der totalen Leitfähigkeit.** Messung bei konstantem Abstand: Tunnelstrom  $I$  (a), totale Leitfähigkeit  $I/U$  (b) und mit  $I/U$  normierte Spektren (c) aus Abb. 4.3(b). Messung bei Stabilisierung auf konstanten Strom  $I_0$  und  $U_0 = 1 \text{ V}$ : Tunnelstrom  $I$  (d), totale Leitfähigkeit  $I/U$  (e) und mit  $I/U$  normierte Spektren (f) aus Abb. 4.3(c).

würde, da sich die in Abb. 4.3(a) angenommenen Zustandsdichten zwischen  $U = 0 \text{ V}$  und  $U = -1 \text{ V}$  nicht unterscheiden. Eine Identifizierung von  $A(U)$  mit  $P(U)$  wäre dann zulässig.

Abschließend sei in Abb. 4.5 der wichtige Fall einer entgegengesetzten Spinpolarisation der beiden Peaks betrachtet, wie es für einen spinaufgespaltenen Oberflächenzustand zu erwarten ist. Die Variation des Abstandes bei konstanten  $I_0$ ,  $U_0 = 1 \text{ V}$  bewirkt in Abb. 4.5(b) eine Unterschätzung von  $P(700 \text{ mV})$  und eine Überschätzung von  $P(-100 \text{ mV})$ . Eine Abschätzung von  $P(U)$  durch  $A(U)$  im Fall von Gd(0001) in Ref. [38] läßt sich durch einen Vorzeichenwechsel von  $P(U)$  zwischen  $E_F$  und  $U_0 = 0.8 \text{ V}$  rechtfertigen, der mit inverser Photoemission (IPES) beobachtet wird. Es ist daher nur eine geringe Variation des Abstandes zu erwarten. Für eine direkte Identifizierung hätte allerdings der Nachweis erbracht werden müssen, daß der Tunnelabstand über entgegengesetzt magnetisierten Gd-Inseln konstant bleibt. Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß sich aus der Existenz von Kreuzungspunkten in den Spektren in Abb. 4.5(b) *nicht* folgern läßt, daß hier  $P(U)$  das Vorzeichen wechselt. Es deutet in diesem Fall lediglich darauf hin, daß  $P(700 \text{ mV})$  größer ist als die Spinpolarisation des Untergrundes. Mit Spektroskopie bei Stabilisierung auf konstanten Strom  $I_0$  ist man also allein empfindlich auf Differenzen der Spinpolarisation. Ist  $P(U)$  zwischen  $U = 0 \text{ V}$  und  $U_0$  konstant, wird der (bei  $s = \text{const}$  sichtbare) Unterschied der  $dI/dU$ -Spektren durch die Änderung des Abstandes vollkommen kompensiert.

Die Normierung mit  $I/U$  in Abb. 4.5(d) führt nur für  $U = 700 \text{ mV}$  zu einem besseren Ergebnis, während der Unterschied der Zustandsdichten bei  $U = -100 \text{ mV}$  fast vollständig unterdrückt wird. Zur Gewinnung quantitativer Aussagen über die Spinpolarisation  $P(U)$  scheint diese Normierungsmethode also wenig geeignet. Auch im Fall des Minoritäts- $d_{z_2}$ -Zustandes auf Co(0001) am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt bei  $U = -0.43$  [39] scheint mir die Anwendung der Normierung eher kontraproduktiv zu sein. Da

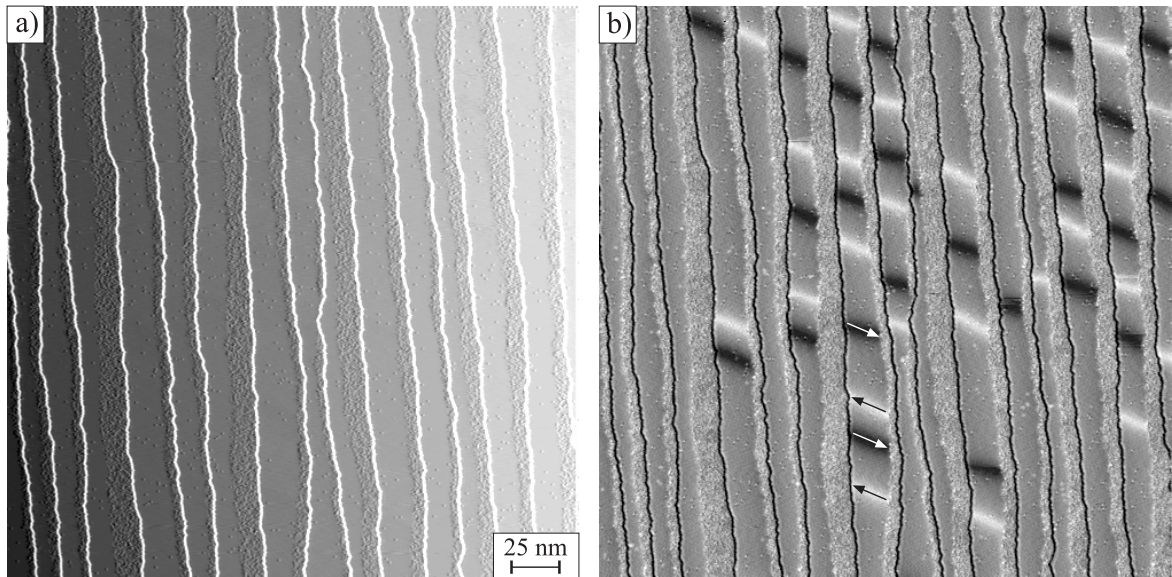


**Abbildung 4.5:** **a)** Hypothetische Zustandsdichten  $\rho_S$ , äquivalent einer entgegengesetzt gleich großen Spinpolarisation der Peaks von 50 %. **b)**  $dI/dU(U)$ , stabilisiert bei  $U_0 = 1.0$  V: Die Asymmetrie bei  $U = 700$  mV erscheint zu klein, die bei  $U = -100$  mV zu groß. **c)** totale Leitfähigkeit  $I/U$ . **d)** Die Normierung mit  $I/U$  führt lediglich für  $U = 700$  mV zu einem besseren Ergebnis.

die Spinpolarisation des Hintergrunds als “*negligibly small*” bestimmt wurde, wäre bei einer Stabilisierung bei  $U_0 > 0$  ein Vergleich der direkten  $dI/dU$ -Spektren m.E. sinnvoller gewesen. Praktisch lässt sich das Problem einer geeigneten Normierung umgehen, indem man bereits in der Messung den Tunnelabstand bei Spannungen stabilisiert, bei denen in der Topographie kein magnetisches Signal zu sehen ist. In diesem Fall ist  $\tilde{P}_S(U_0) \approx 0$ . Hierzu benötigt man mindestens eine Nullstelle von  $P(U)$  zwischen 0 V und  $U_0$ . Da das  $dI/dU$ -Signal exponentiell vom Abstand abhängt, ist eine vollständige Unterdrückung des Einflusses einer Abstandsvariation auf die  $dI/dU$ -Spektren allerdings schwierig. Zumindest lässt sich dann aber über die Größe des  $z$ -Rauschens der mögliche Fehler bei der Bestimmung von  $P(U)$  abschätzen.

### 4.3 Karten der differentiellen Leitfähigkeit

Eine weitere Methode, die sich in der Vergangenheit bei einer Vielzahl von SP-STM-Untersuchungen bewährt hat, ist das Messen von  $dI/dU$ -Karten bei ausgewählten Spannungen, die einen großen magnetischen Kontrast liefern. Hierzu wird im Konstantstrommodus zur angelegten Bias-Spannung  $U_{\text{bias}}$  eine kleine Modulationsspannung  $U_{\text{mod}} = \Delta U \cdot \sin \omega t$  von einigen Millivolt addiert und

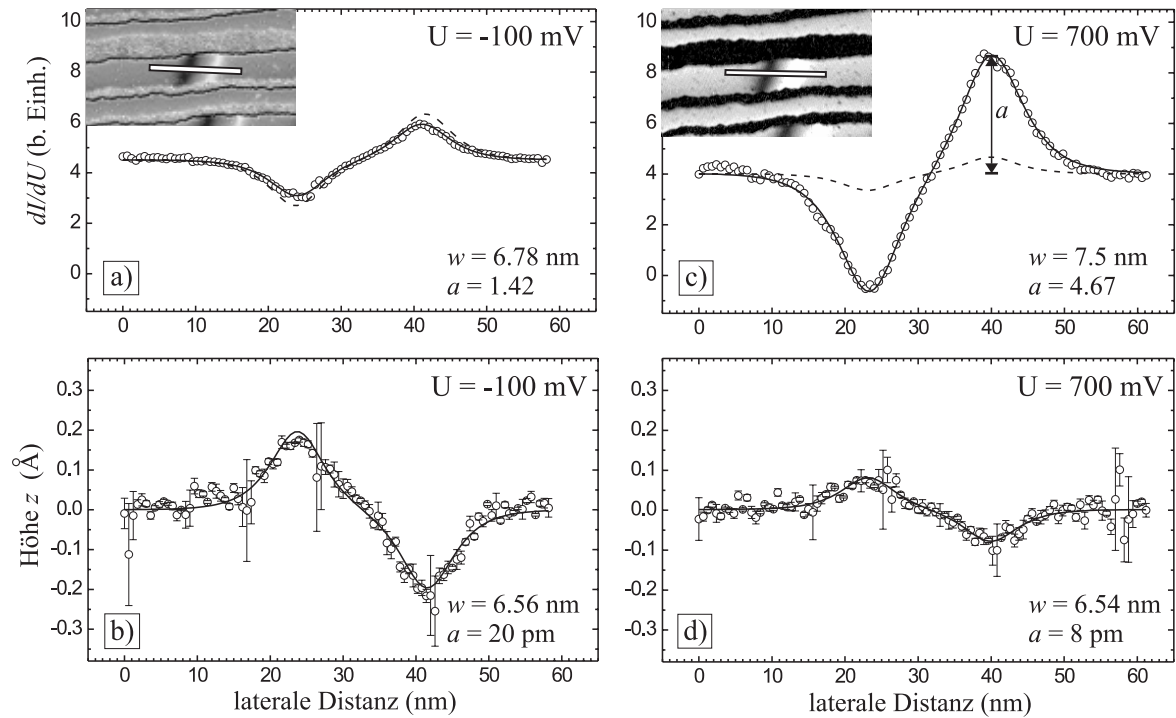


**Abbildung 4.6:**  $300 \times 300 \text{ nm}^2$  Konstantstrombild (a) und simultan aufgenommene  $dI/dU$ -Karte (b) von 1.6 ML Fe/W(110), aufgenommen mit einer Fe-beschichteten Spitze (in-plane-Kontrast) bei  $I = 0.3 \text{ nA}$ ,  $U = -100 \text{ mV}$  und  $T = 14 \text{ K}$  (gleiche Meßdaten wie in Abb. 4.2). Die Magnetisierungsrichtung innerhalb der Wände ist durch Pfeile angedeutet.

$dI/dU(U_{\text{bias}})$  bei eingeschaltetem Feedback direkt mittels LockIn-Technik gemessen. Topographie und  $dI/dU$ -Karte können so simultan aufgenommen werden, was eine direkte Korrelation beider Signale erlaubt. Gegenüber der Spektroskopie, also dem Messen ganzer  $dI/dU$ -Kurven an jedem Bildpunkt, erreicht man dabei sowohl eine höhere laterale Auflösung als auch eine deutlich reduzierte Meßzeit. Der Vorteil gegenüber dem reinen topographischen Modus besteht in einem besseren Signal-Rausch-Verhältnis und einer verbesserten Trennung von topographischer und magnetischer Information.

Abbildung 4.6 zeigt nebeneinander das (teilweise differenzierte) Konstantstrombild und die simultan aufgenommene  $dI/dU$ -Karte aus Abb. 4.2. Die magnetische Höhenvariation ist in Abb. 4.6(a) nicht zu erkennen, da sie klein gegenüber der atomaren Stufenhöhe ist. In der  $dI/dU$ -Karte wird dagegen die Topographie nivelliert, wodurch die Domänenwände im gesamten Bildbereich deutlich hervortreten. Der Schwarz-Weiß-Kontrast zwischen benachbarten Wänden wird dabei durch entgegengesetzte Magnetisierungsrichtungen innerhalb der Wände hervorgerufen.

Bei der Bestimmung der Spinpolarisation aus der gemessenen  $dI/dU$ -Asymmetrie besteht die gleiche Schwierigkeit wie bei der Spektroskopie. Eine Identifizierung von  $A(U_{\text{bias}})$  mit  $P(U_{\text{bias}})$  ist nur im Fall von  $\tilde{P}(U_{\text{bias}}) = 0$  zulässig, also beim Messen bei konstanter Höhe. Ist dies nicht gewährleistet, kann es zur Kompensation und sogar zur Invertierung des  $dI/dU$ -Signals aufgrund der Höhenvariation kommen. Abb. 4.7 soll diesen Effekt für das bereits in Abb. 4.2 gezeigte Domänenwandpaar verdeutlichen. Abb. 4.7(a) zeigt das (gemittelte)  $dI/dU$ -Signal bei  $U = -100 \text{ mV}$  entlang der im Bildausschnitt eingezeichneten Linie. Dieses verhält sich invers zur Variation des Tunnelabstandes  $z$  in Abb. 4.7(b): Vergrößert sich der Abstand, geht das  $dI/dU$ -Signal zurück, verringert sich der Abstand, wächst es an. Da die Variation des Abstandes in diesem Fall relativ groß ist, läßt sich vermuten, daß der Kontrast im  $dI/dU$ -Signal im wesentlichen durch die Änderung des Abstandes dominiert wird. Um dies quantitativ zu überprüfen, habe ich an die Daten die Summe zweier



**Abbildung 4.7:**  $dI/dU$ -Signal eines  $180^\circ$ -Domänenwandpaares bei  $U = -100$  mV (a) und die Variation der Höhe  $z$  (b) und entsprechende Schnittlinien für  $U = 700$  mV [(c) und (d)].

Standard-Domänenwandprofile,

$$y = y_0 + a \cdot \sin\left\{\sum_{i=1}^2 \arcsin\left[\tanh\left(\frac{x-x_i}{w/2}\right)\right]\right\}, \quad (4.1)$$

angefittet. Die sich daraus ergebenden Amplituden  $a$  und Wandbreiten  $w$  sind in Abb. 4.7 angegeben. Die effektive energieintegrierte Polarisation  $\tilde{P}_{\text{eff}}(-100 \text{ mV}) = 39\%$  wurde ja bereits in Kap. 4.1 aus  $a = 20 \text{ pm}$  abgeschätzt. Mit  $y_0 = 4.52$  ergibt sich für die Asymmetrie des  $dI/dU$ -Signal ein vergleichbarer Wert:  $A(-100 \text{ mV}) = a/y_0 = 31\%$ . Man kann nun mit  $dI/dU \propto \exp(-2\kappa z)$  die Änderung des  $dI/dU$ -Signals aufgrund der  $z$ -Variation abschätzen. Das Ergebnis ist in Abb. 4.7(a) für  $\bar{\phi} = 4 \text{ eV}$  eingezeichnet (gestrichelt).<sup>2</sup> Die gute Übereinstimmung mit dem gemessenen Signal bedeutet, daß das  $dI/dU$ -Signal in der Tat von der  $z$ -Variation dominiert wird, und die tatsächliche Spinpolarisation  $P(-100 \text{ mV})$  sehr klein ist. Vollkommen anders ist die Situation bei  $U = 700 \text{ mV}$  (rechte Seite in Abb. 4.7). Dies ist die energetische Position eines Oberflächenzustandes am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt (vgl. Abb. 6.16 und 6.17). Die  $z$ -Variation ist mit  $\pm 8 \text{ pm}$  weniger als halb so groß wie bei  $-100 \text{ mV}$ , woraus sich  $\tilde{P}_{\text{eff}}(700 \text{ mV}) = 16\%$  ergibt. Der Einfluß auf das  $dI/dU$ -Signal ist entsprechend geringer. Die Asymmetrie des  $dI/dU$ -Signal hat dagegen den (unphysikalischen) Wert von  $A(700 \text{ mV}) = a/y_0 = 116\%$ . Das läßt sich dadurch erklären, daß  $\tilde{P}_{\text{eff}}$  und  $P_{\text{eff}}$  bei  $700 \text{ mV}$  unterschiedliche Vorzeichen haben. Das  $dI/dU$ -Signal wird dann durch die  $z$ -Variation verstärkt, und kann in diesem Fall sogar negativ werden.

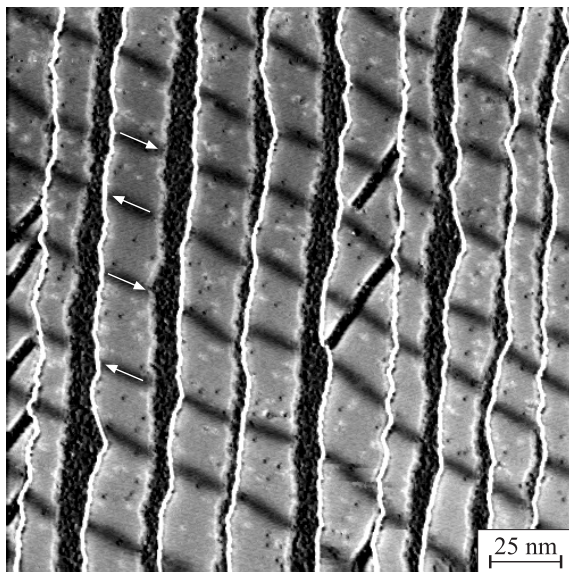
<sup>2</sup>Wegen  $I \propto \rho_S \exp(-2\kappa z)$  würde man eigentlich ein leicht asymmetrisches  $z$ -Signal erwarten, was jedoch im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht der Fall ist. Damit das berechnete  $dI/dU$ -Signal symmetrisch bleibt, habe ich daher statt  $\exp(-2\kappa z)$  die lineare Näherung  $1 - 2\kappa z$  benutzt.

Wie bei der Spektroskopie ist eine Identifizierung der gemessenen Asymmetrien des  $dI/dU$ -Signals mit der Spinpolarisation nur für den Fall  $\tilde{P}_{\text{eff}} = 0$  zulässig, also beim Messen bei konstanter Höhe. Ist dies nicht der Fall, ist im Prinzip eine nachträgliche Normierung des  $dI/dU$ -Signals mit dem  $z$ -Signal möglich, wie es in Ref. [40] im Fall von Streuzuständen auf InAs(110)-Oberflächen durchgeführt wurde. Hierzu sollte die effektive Barrierenhöhe der Oberfläche durch die Messung von  $I(z)$ -Kurven bestimmt werden, und zwar möglichst mit derselben Spitze, mit der auch die  $dI/dU$ -Karten gemessen werden. Ein solches Vorgehen ist allerdings nur sinnvoll, wenn die Spinpolarisation nicht vom Abstand abhängt.

In diesem Abschnitt und bei der Diskussion der Spektroskopie wurde davon ausgegangen, daß die Spinpolarisation der Spitze im relevanten Energiebereich konstant ist, und daß  $P_S(U)$  nicht vom Tunnelabstand abhängt. Dies sind Annahmen, die für ein reales System nicht unbedingt erfüllt sind, wodurch eine quantitative Analyse zusätzlich erschwert wird. Die reine *Abbildung* der Domänenstruktur einer Oberfläche ist von den genannten Problemen aber letztlich kaum berührt, wie ein Blick auf Abb. 4.7 zeigt. Obwohl sich die Größe der  $z$ -Variation in den beiden Fällen stark unterscheidet, sind die gemessenen Wandprofile nahezu identisch. Daß die gemessene Wandbreite bei  $U = 700$  mV rund 0.7 nm breiter erscheint als bei  $-100$  mV, könnte mit dem bei 700 mV größeren Tunnelabstand zusammenhängen, oder auf unterschiedliche Abklinglängen der jeweils beteiligten elektronischen Zustände hindeuten.

#### 4.4 Nichtmagnetische Spitzen

In den Fällen, in denen die magnetische Domänenstruktur eine Änderung der *elektronischen* Eigenschaften der Oberfläche bewirkt, ist deren Abbildung grundsätzlich auch mit *nicht* magnetischen Spitzen möglich. Ein Beispiel hierfür ist die Abhängigkeit der Bandstruktur von der Magnetisierungsrichtung in ferromagnetischen Übergangsmetallen aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung: In diesem Fall sollten Magnetisierungsrichtungen parallel und senkrecht zur leichten magnetischen Achse mit nichtmagnetischen Spitzen unterschieden werden können, nicht jedoch entgegengesetzte



**Abbildung 4.8:**  $200 \times 200 \text{ nm}^2$   $dI/dU$ -Karte von 1.8 ML Fe/W(110), aufgenommen mit einer Wolframspitze bei  $I = 0.5 \text{ nA}$  und  $U = 50 \text{ mV}$ . Die Domänenwände erscheinen dunkel. Im Gegensatz zu Abb. 4.6 kann zwischen Wänden mit entgegengesetzter Magnetisierung nicht unterschieden werden.

Orientierungen. Abb. 4.8 zeigt eine  $dI/dU$ -Karte von der aus den vorherigen Abschnitten bekannten Probe, aufgenommen mit einer unbeschichteten Wolframspitze. Die Domänenwände sind hier aufgrund einer gegenüber den Domänen reduzierten differentiellen Leitfähigkeit bei  $U = 50$  mV sichtbar. Da die Sondenspitze nicht magnetisch ist, werden alle Wände trotz unterschiedlicher Orientierung der Magnetisierung innerhalb der Wände gleich abgebildet. Eine ausführlichere Diskussion dieses Effekts findet sich in Kapitel 6.5.

## Kapitel 5

# Experimenteller Aufbau

Die experimentelle Realisierung spinpolarisierten Vakuumtunnels mit dem STM stellt eine Reihe technischer Anforderungen, die ich im folgenden beschreiben möchte.

### 5.1 UHV-Kammersystem

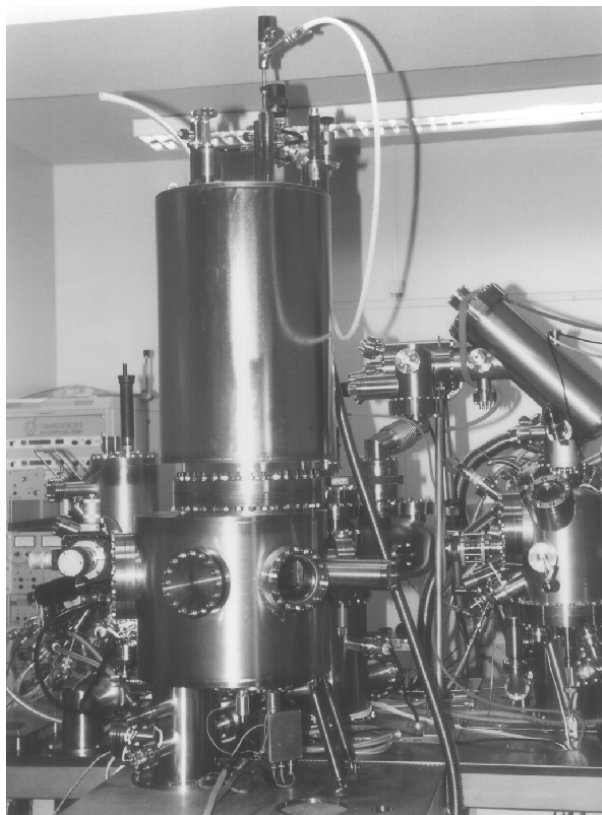
Unter gewöhnlichen Umgebungsbedingungen sind Oberflächen der Wechselwirkung mit den Molekülen der Luft ausgesetzt. Abgesehen von wenigen inerten Materialien, bilden die meisten Metalle eine Oxidschicht aus und sind zudem von einem dünnen Wasserfilm bedeckt. Um saubere und damit wohldefinierte Oberflächen präparieren und über mehrere Stunden untersuchen zu können, benötigt man daher Ultrahochvakuum (UHV).

Das gesamte UHV-System hat einen Basisdruck von  $< 1 \cdot 10^{-10}$  mbar und besteht aus fünf miteinander verbundenen Kammern: Präparationskammer, Analysechamber, MBE-Kammer, Kryokammer und einer zentralen Verteilerkammer, die den Transfer von Proben und Spitzen zwischen den einzelnen Kammern ermöglicht. Neben dem Kryo-Mikroskop, das speziell für spinpolarisierte Messungen konzipiert und gebaut wurde [41], stehen eine Reihe weiterer Präparations- und Analyseverfahren zur Verfügung. Dies sind u.a. eine Elektronenstoßheizung, Widerstandsheizungen auf den  $xyz$ -Manipulatoren der einzelnen Kammern, eine Ionen-Sputter-Kanone und eine Reihe von Elektronenstrahlverdampfern für die Präparation von Dünnschichtfilmen (Cr, Mn, Fe, Co, Gd, Tb). Die Vorcharakterisierung der hergestellten Proben erfolgt mittels Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) und Auger-Elektronenspektroskopie (AES).

### 5.2 Magnetkryostat

Eine Vielzahl physikalischer Phänomene wie Magnetismus, Supraleitung, Ladungs- und Spindichtewellen, der Kondo-Effekt, etc., ist allein bei Temperaturen weit unterhalb der Raumtemperatur ( $RT = 20^\circ\text{C} = 293\text{ K}$ ) beobachtbar. Zwar gibt es durchaus magnetische Materialien mit  $T_c > RT$  (Fe, Co, Ni, Cr), und in der Tat ist SP-STM und -STS auch bei Raumtemperatur erfolgreich durchgeführt worden [3, 42, 43]. Für die Untersuchung ultradünner Filme oder gar superparamagnetischer Teilchen sind dagegen tiefe Temperaturen wegen des generellen Trends einer Absenkung von  $T_c$  beim Übergang zu niedriger Dimensionalität zwingend erforderlich. Das gleiche Argument gilt für die Spitze: Das Arbeiten bei  $RT$  bedeutet eine erhebliche Einschränkung bezüglich der Materialauswahl





**Abbildung 5.1:** Ansicht des Kammer-systems mit der Tieftemperatur-Vakuumkammer im Vordergrund. Der obere Zylinder beherbergt die Reservoirs für Helium und Stickstoff. Unterhalb der UHV-Kammer sind die elektrischen Zuführungen zu sehen.

und der möglichen Dicke der magnetischen Beschichtung.

Tiefe Temperaturen bieten eine Reihe weiterer Vorteile: Zum einen ist die thermische Drift am Tunnelübergang, d.h. die relative Bewegung der Tunnelspitze gegenüber der Probenoberfläche herabgesetzt. Zum anderen wirken die umgebenden heliumgekühlten Flächen als Kryopumpen, was zu einer erheblichen Verbesserung des Vakuums am Probenort führt. Ferner verbessert sich die mögliche Energieauflösung von 25 meV bei  $RT$  auf 1.3 meV bei 15 K, und die herabgesetzte Diffusion ermöglicht die Abbildung einzelner Adsorbatatome selbst auf Substratoberflächen mit geringen Diffusionsbarrieren. Schärfere Schwingungsresonanzen sorgen schließlich für eine verbesserte mechanische Stabilität aufgrund einer reduzierten Empfindlichkeit für die Einkopplung äußerer Störungen.

Der Kryostat ist ein Helium-Badkryostat der Firma Oxford Instruments [44] (siehe Abb. 5.1). Der heliumkalte Bereich ist dabei gegenüber der Wärmestrahlung der Umgebung vollständig durch einen mit flüssigem Stickstoff ( $LN_2$ ) gekühlten Kupferschild abgeschirmt. Diese Wärmestrahlung ist letztlich der begrenzende Faktor beim Erreichen tiefer Temperaturen: Am Probenort stellt sich ein Gleichgewicht von dieser Wärmequelle (77 K) und der direkten Kühllankopplung an flüssiges Helium (4.2 K) bei 13–15 K ein.

Der Nutzen eines äußeren Magnetfeldes bei der Untersuchung der magnetischen Eigenschaften einer Probe liegt auf der Hand. Zum einen läßt sich die magnetische Domänenstruktur als Funktion des angelegten Feldes studieren, was im SP-STM die orts aufgelöste Untersuchung der mit der Hysterese verbundenen Prozesse erlaubt [45]. Zum anderen war zu Beginn dieser Arbeit SP-STM, trotz erster Publikationen auf diesem Gebiet [3, 4, 43], alles andere als eine etablierte Technik. Es war daher der zweifelsfreie Nachweis zu erbringen, daß ein beobachteter Kontrast tatsächlich magneti-

sehen Ursprungs ist. Die abgebildete sukzessive Änderung einer Domänenstruktur im zunehmenden äußeren Magnetfeld ist in ihrer Überzeugungskraft in dieser Hinsicht kaum zu überbieten.

Die zwei supraleitenden Spulen des Magneten (*split pair*) sind in den Kryostaten integriert und haben dort direkten Kontakt zu flüssigem Helium. Das Magnetfeld am Probenort ist beschränkt auf die  $z$ -Richtung (vertikal) und erreicht bei 60 A eine maximale Flußdichte von 2.5 Tesla. Die maximale *Sweep*geschwindigkeit beträgt 2.5 T/min. Ein Nachteil des Magnet-Kryostaten besteht in seiner großen Masse und der damit verbundenen Wärmekapazität. Ergibt sich im eingekühlten Zustand die Notwendigkeit, die UHV-Kammer zu öffnen, so muß zunächst der Kryostat auf Raumtemperatur gebracht werden, um die Kondensation von  $N_2$ ,  $O_2$  und  $H_2O$  im Innenraum der UHV-Kammer zu vermeiden. Zusammen mit dem einer Öffnung folgenden Evakuieren und dem Ausheizen, Abkühlen und Wiedereinkühlen des Kryostaten werden etwa 8–10 Tage benötigt.

### 5.3 Das Rastertunnelmikroskop

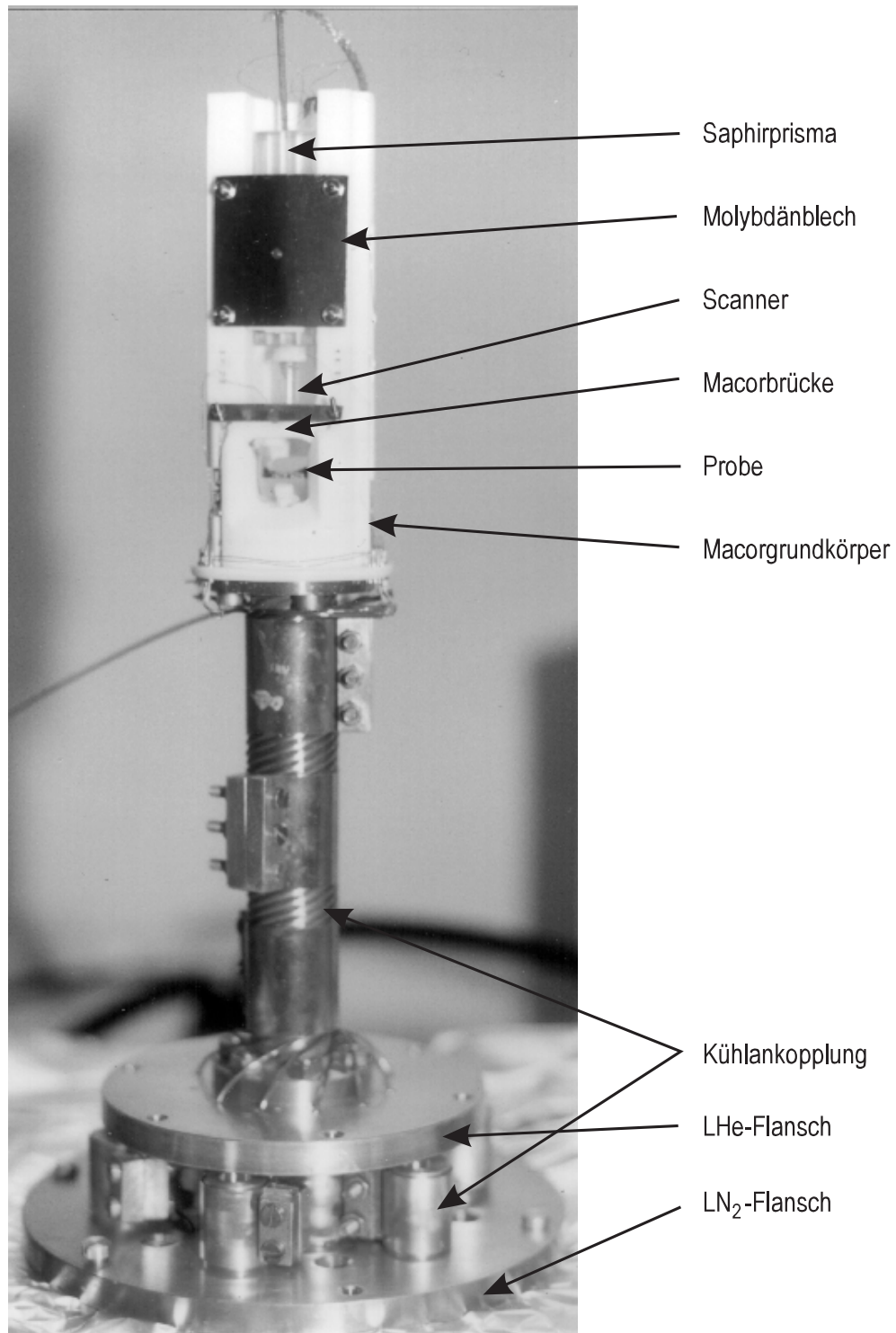
Das Mikroskop wurde im Rahmen zweier Diplomarbeiten aufgebaut [46] und für die Durchführung spinpolarisierter Messungen optimiert [47]. Der weiße Grundkörper (vgl. Abb. 5.2) ist aus Macorvollmaterial gefräst, was sowohl eine hohe mechanische Steifigkeit als auch eine gute Übereinstimmung mit den Wärmeausdehnungskoeffizienten des verwendeten Scannermaterials aufweist. Der Röhrenscanner, das Herzstück des Mikroskops, das die Bewegung der an seinem unteren Ende befestigten Spitze in alle drei Raumrichtungen erlaubt, ist in ein Saphirprisma versenkt, das von sechs Stapeln Scher-Piezos gehalten wird. Bei einer maximalen Steuerspannung von  $\pm 140$  V ergibt sich ein Scanbereich von  $5.5 \times 5.5 \mu m^2$  bei 13 K und etwa  $10.5 \times 10.5 \mu m^2$  bei  $RT$ . Die Annäherung der Spitze an die Probenoberfläche erfolgt von oben durch Ansteuern der Scher-Piezos mit einer sägezahnartigen Hochspannung (*slip stick modus*). Unterhalb der Spitze befindet sich eine Saphirwalze für die Aufnahme von  $11 \times 11 mm^2$ -Probenträgern. Diese ist bis zu  $270^\circ$  drehbar, wodurch die Probenoberfläche zugänglich wird sowohl für das Aufwachsen von Material bei tiefen Temperaturen als auch für einen Laserstrahl und damit für Magneto-Optische Kerreffektmessungen (MOKE).

Die thermische Ankopplung des Mikroskops erfolgt über einen Sockel und einen Flansch aus OFHC-Kupfer, der mit der LHe-kalten Bodenplatte des Kryostaten verschraubt wird (vgl. Abb. 5.2). Ein weiterer Flansch wird an der Bodenplatte des Kühlschildes befestigt und ist dann über die Seitenwände des Schildes mit dem  $LN_2$ -Reservoir verbunden.

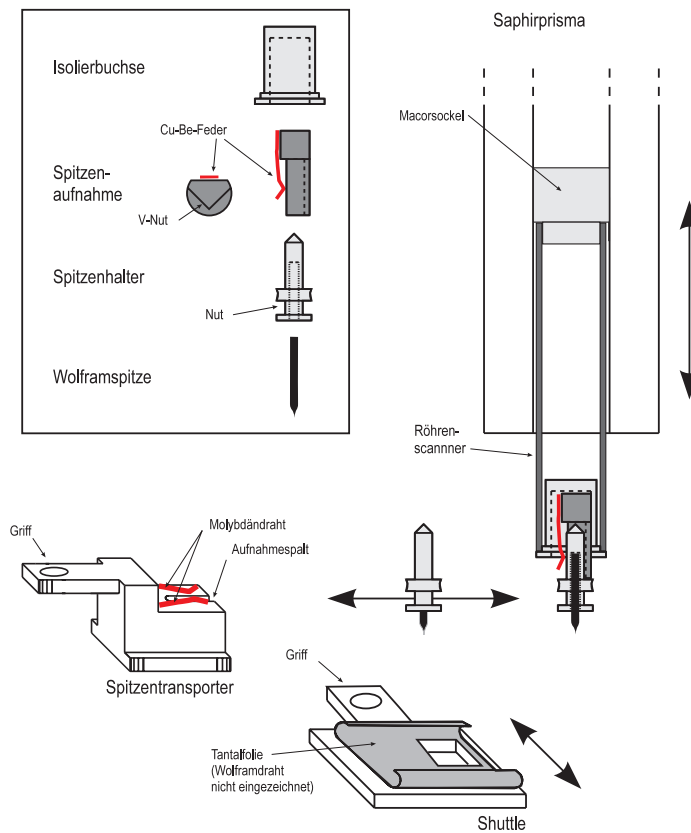
Die Empfindlichkeit magnetischer Oberflächen auf Kontamination verlangt, daß die Präparation, der Transfer und das Einsetzen magnetisch beschichteter Spitzen in das Mikroskop vollständig *in vacuo* stattfindet. Der dazu erforderliche Transfermechanismus ist schematisch in Abb. 5.3 dargestellt.

### 5.4 Substrat- und Spitzenpräparation

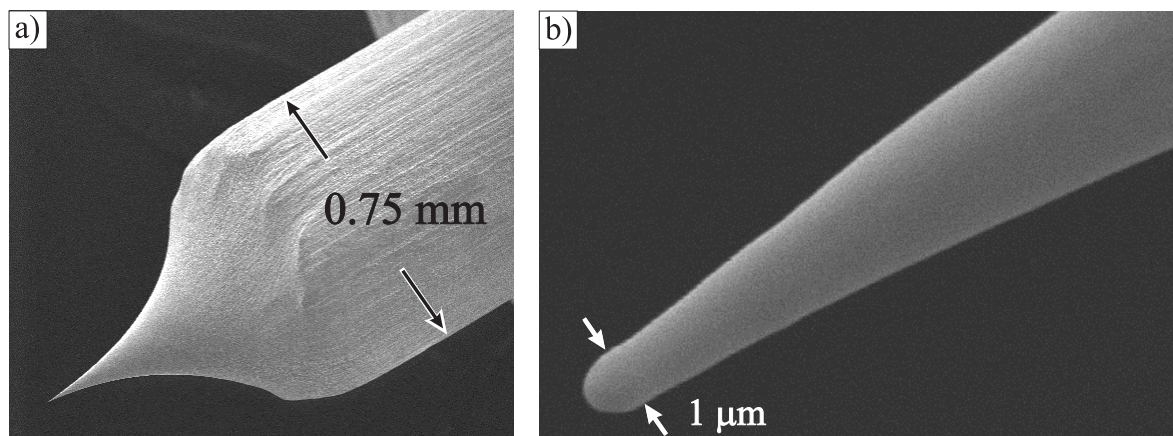
Als Substrat zum Aufwachsen magnetischer Schichten wurden hauptsächlich zwei Wolfram-Einkristalle der kristallographischen Orientierung (110) verwendet. Aufgrund ihres Fehlschnittes weisen diese atomar flache Terrassen mit einer Breite von etwa 25 nm bzw. 9 nm auf. Zur Präparation wurden die Kristalle wiederholt etwa eine Stunde in einer Sauerstoffatmosphäre von  $\approx 5 \cdot 10^{-7}$  mbar bei 1500 K geheizt und anschließend für wenige Sekunden auf 2300 K gebracht (*geflasht*). Durch diese Prozedur segregiert der im Volumen enthaltene Kohlenstoff an die Oberfläche und verläßt den Kristall dort in Form von CO und  $CO_2$ . Nach dem thermischen Entfernen der Oxidschicht bleibt eine saubere Wolframoberfläche mit nur wenigen Fremdatomen zurück.



**Abbildung 5.2:** Das Mikroskop auf seinem Kupfersockel. Die Kühlankopplung der elektrischen Zuleitungen erfolgt in zwei Stufen. Die beiden Flansche sind nur im ausgebauten Zustand miteinander verschraubt und liegen nach dem Einbau des Mikroskops auf LHe- bzw. LN<sub>2</sub>-Temperatur.



**Abbildung 5.3:** Schematische Darstellung des Spitzenwechselmechanismus. Die Wolframspitze klemmt in einem Spitzenhalter aus Molybdän und kann dem Mikroskop mit einem Spitzentransporter entnommen werden. Der Transporter wird wiederum von einem Shuttle aufgenommen, der für den Transport durch das Kammer-system angepaßt ist. Zum Heizen der Spitze wird die gesamte Einheit, bestehend aus Shuttle, Transporter und Spitze, auf der Elektronenstoßheizung auf 2300 K gebracht.



**Abbildung 5.4:** SEM-Aufnahmen einer Wolframspitze nach dem Heizen bei 2300 K. a) Makroskopisch erscheint die Spitze scharf. b) In der Vergrößerung ist jedoch zu sehen, daß das Spitzeneende aufgeschmolzen ist, und einen Krümmungsradius von etwa 500 nm hat.

Die Sondenspitzen werden *ex situ* durch Ätzen von 0.75 mm starkem polykristallinem Wolframdraht in gesättigter NaOH-Lösung (8 g/100 ml) hergestellt, bei Wechselspannungen von 4–8 V. Nach der Reinigung in destilliertem Wasser werden diese in das Kammer-System eingeschleust und dort auf 2300 K geheizt. Durch den Heizprozeß desorbiert die Oxidschicht und die Spitzen schmelzen am unteren Ende auf, was zu Krümmungsradien von etwa 500 nm führt (vgl. Abb. 5.4). Für die Abbildung von Oberflächen mit großen Korngrenzen sind solche Spitzen wenig geeignet. Für die Verwendung im SP-STM ist dieser Präparationsschritt jedoch unumgänglich: Bei der Rekristallisation nach dem Aufschmelzen entsteht eine wohlgeordnete, saubere (110)-Oberfläche [24], mit guten Haftungseigenschaften für magnetische Beschichtungen. Im letzten Schritt wird mit einem Elektronenstrahlverdampfer magnetisches Material aufgebracht, und der dabei entstehende Film für 4 min bei  $T \approx 550$  K getempert. Es kamen verschiedene Spitzenbeschichtungen zum Einsatz,

- (i)  $10 \pm 1$  ML Fe (*in-plane*),
  - (ii)  $7 \pm 1$  ML Gd (*out-of-plane*, z.T. *in-plane*),
  - (iii)  $7 \pm 1$  ML Gd und 0.5 ML Fe (*out-of-plane*),
  - (iv)  $35 \pm 10$  ML Cr (*out-of-plane*),
- (5.1)

wobei Mischfilme durch Koevaporation erzeugt werden können. Die Bezeichnungen “in-plane” und “out-of-plane” beziehen sich auf die experimentell beobachteten Magnetisierungsrichtungen der Spitze relativ zur Probenoberfläche. Wegen der Äquivalenz von Substrat- und Spitzenoberfläche ist bei der Entwicklung neuer magnetischer Beschichtungen die Kenntnis der magnetischen Eigenschaften der entsprechenden Filme auf W(110)-Substraten ein guter Ausgangspunkt. Da der Tunnelstrom in der Regel von einer kleinen *Nano* spitze an der Unterseite der makroskopischen Spitze getragen wird, kann es allerdings zu Abweichungen von (5.1) kommen, was in der Tat auch beobachtet wurde. Spitzen mit einer *schrägen* Magnetisierungsrichtung erschweren zwar die Analyse der Daten, bieten dafür aber die Möglichkeit gleichzeitig Informationen über die senkrechte und in der Filmebene liegende Komponente der Oberflächenmagnetisierung zu gewinnen.

## Kapitel 6

# Magnetische Nanostrukturen: Fe/W(110)

Die Wahl des Substratkristalls und die Kontrolle der Wachstumsbedingungen magnetischer Filme ermöglichen heute die gezielte Erzeugung von Nanostrukturen, deren magnetische Eigenschaften sich in der Regel stark von Volumenkristallen unterscheiden. Technologische Anwendungen sind dabei genauso von Interesse wie ein besseres Verständnis grundlegender magnetischer Phänomene und Prozesse in reduzierten Dimensionen. SP-STM ist zur Charakterisierung magnetischer Nanostrukturen in besonderer Weise geeignet, da strukturelle, elektronische und magnetische Eigenschaften simultan untersucht und direkt korreliert werden können.

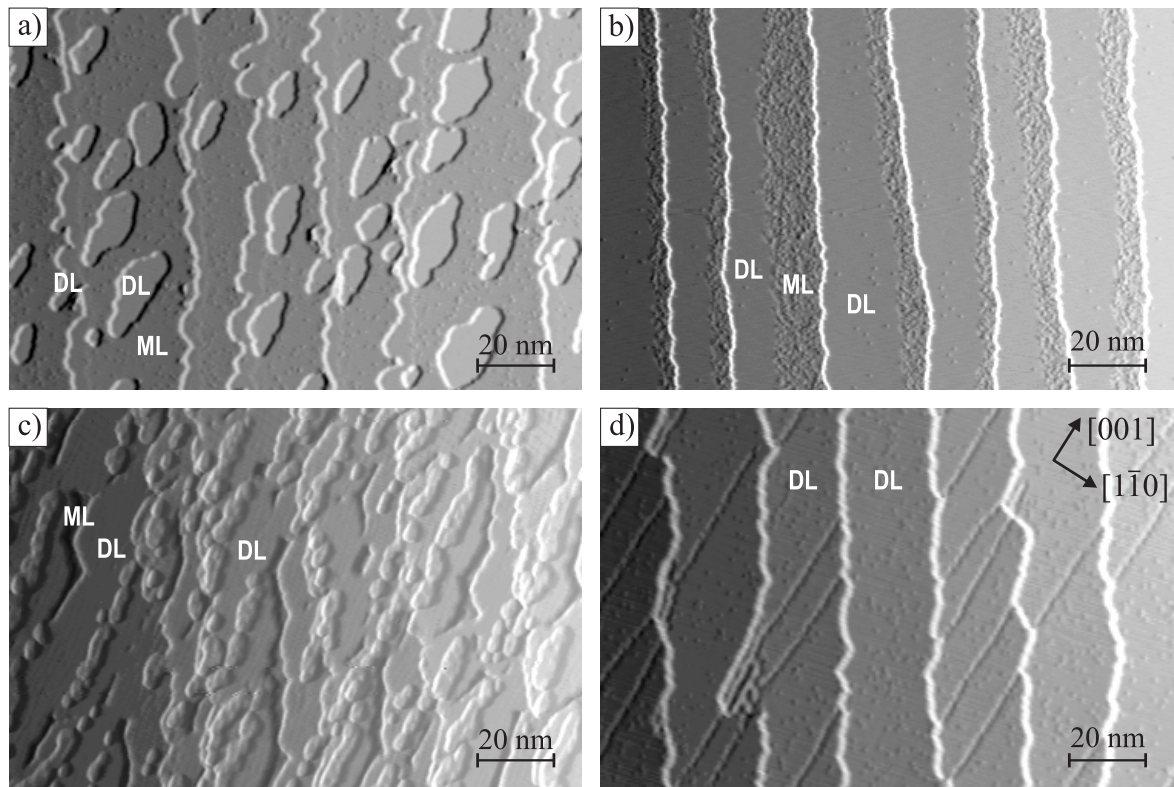
Gegenstand dieses Kapitels ist der Magnetismus von Fe/W(110) bei tiefen Temperaturen, mit dem Schwerpunkt auf Domänenwand-Eigenschaften und  $B$ -Feld abhängige Messungen an knapp 2 Monolagen (ML) in Streifenmorphologie, sowie die bedeckungsabhängige Entwicklung der magnetischen Domänen in Inselmorphologie. Gleichzeitig wird es notwendig und auch möglich sein, auf Aspekte der Meßtechnik einzugehen, insbesondere auf die Eigenschaften und Unterschiede ferromagnetischer, antiferromagnetischer und nichtmagnetischer Tunnelspitzen.

### 6.1 Bisherige Ergebnisse

Das System Fe/W(110) ist experimentell mit einer Vielzahl von Techniken untersucht und gerade in den letzten Jahren auch kontrovers diskutiert worden. Fe und W besitzen als Volumenkristalle bcc-Struktur mit den Gitterkonstanten  $a_W = 3.165 \text{ \AA}$  und  $a_{Fe} = 2.866 \text{ \AA}$ , woraus sich eine große Fehlanpassung von  $(a_W - a_{Fe})/a_W = 9.4\%$  ergibt, die das Wachstum der ersten Fe-Lagen wesentlich bestimmt: Der durch das Substrat induzierte Dehnungsstress wird mit zunehmender Bedeckung schrittweise durch die Bildung von Versetzungslinien und -netzwerken abgebaut, bis bei einer lokalen Bedeckung von 4 ML lateral die Volumen-Gitterkonstante von Fe erreicht ist [48]. Die erste atomare Lage wächst pseudomorph und bildet aufgrund der großen freien Oberflächenenergie des Substrats bei einer Bedeckung von  $\theta = 1.0 \text{ ML}^1$  einen nahezu perfekt geschlossenen Film. Das weitere Wachstum und die Nanostruktur des Films hängen von der Substrat-Temperatur beim Aufbringen des Films ab. Abbildung 6.1 zeigt den Unterschied zwischen Wachstum bei  $RT$  und bei erhöhten Temperaturen von etwa anderthalb und zwei Lagen: Bei  $RT$  nukleiert die zweite Lage in Form von freistehenden Inseln (Abb. 6.1(a)), gleichzeitig lagert sich ein Teil der zweiten Lage an die Substratstufenkanten an. Mit zunehmender Bedeckung werden die Inseln größer und wachsen schließlich zusammen

---

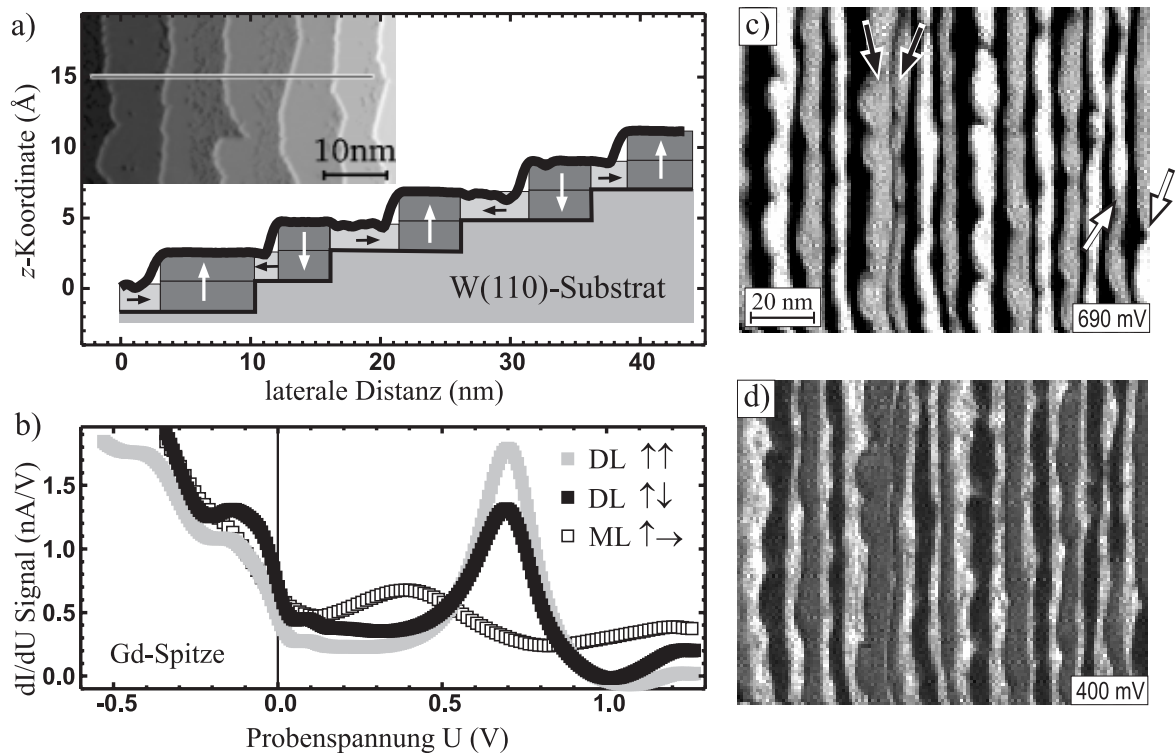
<sup>1</sup>Alle Angaben beziehen sich auf die auf dem W-Substrat mit dem STM sichtbare Bedeckung.



**Abbildung 6.1:** Wachstum von Fe/W(110). **a)** 1.3 ML, gewachsen bei *RT*: Das W-Substrat ist nahezu vollständig von der ersten Fe-Lage bedeckt, die zweite Lage bildet freistehende Inseln und dekoriert teilweise die Stufenkanten. **b)** 1.6 ML, gewachsen bei  $T \approx 550$  K: Aufgrund der höheren Mobilität wächst die zweite Lage vollständig entlang der Substratstufenkanten. **c)** 2.1 ML, gewachsen bei *RT*: Die zweite Lage ist vernetzt, aber nicht geschlossen. Wachstum der dritten Lage hat auf den Versetzungslinien begonnen. **d)** 2.0 ML, gewachsen bei  $T \approx 550$  K: Geschlossener DL-Film mit Versetzungslinien entlang [001]. Kleine Bereiche dritter Lage sind zu sehen. Alle Bilder  $150 \times 100 \text{ nm}^2$ .

(Abb. 6.1(c)). Gleichzeitig bilden sich Versetzungslinien, auf denen die dritte Lage nukleiert, bevor sich die zweite vollständig geschlossen hat. Bei erhöhten Substrat-Temperaturen dominiert das Stufenkantenwachstum, und es entstehen unterhalb  $\theta = 2$  ML Doppellagen(DL)-Streifen, die von ML-Streifen begrenzt sind, und sich entlang der Substratterassen erstrecken (Abb. 6.1(b)). Bei  $\theta = 2.0$  ML (Abb. 6.1(d)) entsteht so ein perfekt geschlossener DL-Film mit Versetzungslinien, die entlang [001] orientiert sind. Diese bewirken durch den Einbau zusätzlicher Fe-Atome eine teilweise Relaxation des gedehnten Films in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung.

Die Magnetisierung der geschlossenen ML liegt in der Ebene entlang  $[1\bar{1}0]$ , bei einer Curie-Temperatur von  $T_c(\text{ML}) = 225$  K [49]. Für 2 ML, präpariert bei *RT*, bestimmten ELMERS *et al.* mittels SPLEED und MOKE für  $T \geq 115$  K die gleiche ( $[1\bar{1}0]$ ) Magnetisierungsrichtung [50] und schlossen auf  $T_c(\text{DL}) \approx 450$  K. Übereinstimmend haben SANDER *et al.* [51] am gleichen System bei  $T = 140$  K mit MOKE *easy-axis*-Magnetisierungskurven entlang  $[1\bar{1}0]$  gemessen und stellten für den Zwischenbereich von anderthalb Lagen lediglich eine durch die Inseln verursachte Erhöhung der (in-plane) Koerzitivität fest. Es war daher überraschend als WEBER *et al.* [52] für diesen Bedeckungsbereich (1.5 ML) mit TOM und MOKE eine *senkrechte* Magnetisierung der DL-Inseln feststellten. HAUSCHILD *et al.* [53] bestätigten dies wenig später durch weitere MOKE-Messungen



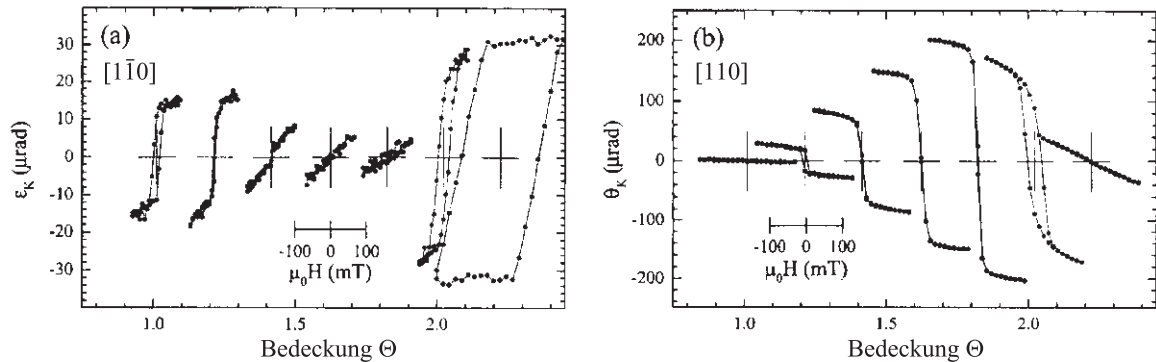
**Abbildung 6.2: 1.5 ML Fe/W(110): Dipolar antiparallel gekoppelte DL-Streifen** a) Schnittlinie durch die Topographie (kleines Bild) und Struktur des Films auf dem gestuften W-Substrat. Die Pfeile deuten die Magnetisierungsrichtung an. b) Die  $dI/dU$ -Spektren, aufgenommen mit einer Gd-Spitze (senkrechter Kontrast) bei  $T=16$  K ( $I_0=0.5$  nA,  $U_0=1.2$  V), zeigen auf der DL zwei unterschiedliche Signaturen, die zwei unterschiedlichen Magnetisierungsrichtungen entsprechen. c) Laterale Verteilung des  $dI/dU$ -Signals bei  $U=690$  mV ( $130 \times 100$  nm<sup>2</sup>,  $1$  nm<sup>2</sup>/Bildpunkt): Die ML erscheint dunkel und die DL-Streifen sind alternierend antiparallel magnetisiert. d) Bei  $U=400$  mV erscheint die ML hell, und die Kontraste auf den DL-Streifen sind invertiert (vgl. (b)).

bei  $T = 165$  K für die DL-Streifen und folgerten ferner eine über das Streufeld vermittelte antiparallele Kopplung benachbarter Streifen. Die senkrechte Magnetisierung der DL-Inseln und -Streifen wurde dabei auf die Substrat-induzierte Dehnung zurückgeführt [52, 53] und die Diskrepanz zur in-plane-Magnetisierung der ausgedehnten DL mit der bei höheren Bedeckungen einsetzenden teilweisen Relaxation erklärt.

Die antiparallele Kopplung des DL-Streifensystems konnte mit SP-STM bei  $T = 16$  K verifiziert werden [54]<sup>2</sup>, eine Messung, die ich hier als Einstiegspunkt für die Diskussion der neuen Ergebnisse nutzen möchte. Abbildung 6.2(a) zeigt anhand einer Topographie-Schnittlinie noch einmal die Struktur des Films. Die Terrassenbreite ist hier mit 8–9 nm kleiner als in Abb. 6.1 und entspricht der aus Ref. [53]. Die  $dI/dU$ -Spektren in Abb. 6.1(b), aufgenommen mit einer senkrecht magnetisierten Gd-Spitze, zeigen die für ML und DL charakteristischen Peaks bei  $U = 0.4$  V bzw.  $U = 0.69$  V, wie sie auch mit nichtmagnetischen Spitzen gemessen werden [54]. Auf der DL finden sich jedoch zwei unterschiedliche Spektren, bezeichnet mit  $\uparrow\uparrow$  und  $\uparrow\downarrow$ , die zwei unterschiedlichen  $z$ -Komponenten der Magnetisierung entsprechen. Die Domänenstruktur des Film wird deutlich, wenn man für Spann-

<sup>2</sup>Magnetfeld-abhängige Messungen finden sich in Ref. [45].





**Abbildung 6.3:** Magnetisierungskurven für verschiedene Fe-Bedeckungen  $\theta$  in Streifenmorphologie bei  $T = 165 \pm 10$  K: **a)** longitudinale Kerr-Elliptizität, **b)** polare Kerr-Rotation. (Abb. aus Ref. [53])

gen, die in den Spektren einen guten Kontrast zeigen, das  $dI/dU$ -Signal ortsaufgelöst darstellt, was in Abb. 6.2(c) und (d) für die beiden Peak-Positionen gemacht wurde. Bei 690 mV erscheint die ML dunkel und die DL-Streifen zeigen einen zweistufigen Kontrast, der von einem zum nächsten DL-Streifen alterniert. Eine Ausnahme ist mit zwei schwarzen Pfeilen markiert: Die beiden DL-Streifen liegen hier so dicht beieinander, daß sie über die Stufenkante hinweg austauschgekoppelt sind. Zwei Domänenwände befinden sich am rechten Bildrand (weiße Pfeile). Bei 400 mV in Abb. 6.2(d) erscheint die ML hell und der Kontrast auf der DL ist sowohl schwächer als auch invertiert, was auch direkt in den Spektren abzulesen ist.

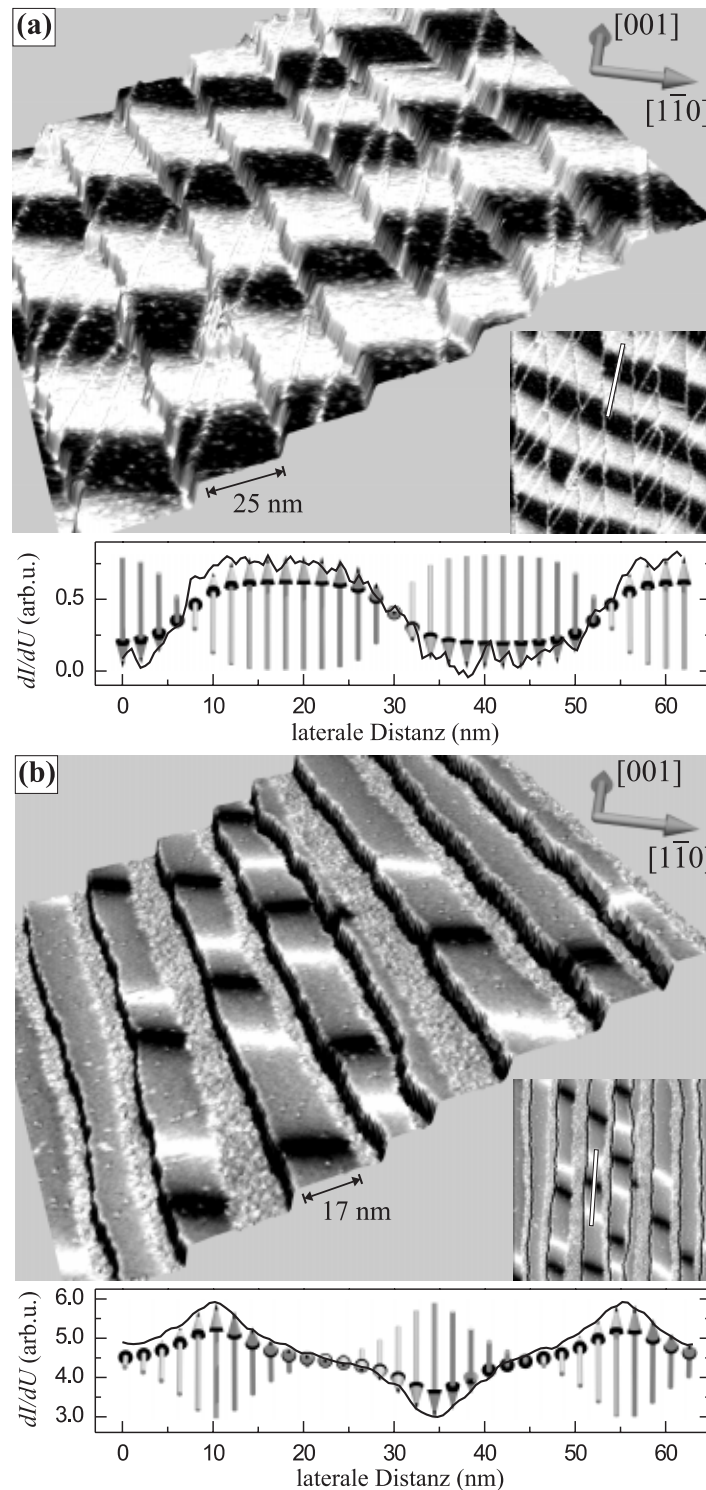
Im Gegensatz zu Messungen bei  $T = 165$  K, bei denen das System in senkrechten Feldern weder Hysterese noch Remanenz zeigt (siehe Abb. 6.3(b)) und aufgrund der Kopplung der DL-Streifen über das Streufeld im Nullfeld demagnetisiert ist [53], finden sich bei  $T = 14.5$  K hohe Werte von Remanenz,  $M_R \approx 0.98 \cdot M_S$ , und Koerzitivfeld,  $\mu_0 H_c = 200 \pm 50$  mT [45], vermutlich eine Folge reduzierter Domänenwandbeweglichkeit bei tiefen Temperaturen.

Theoretisch sind die magnetischen Eigenschaften des Fe/W(110)-Systems in den letzten Jahren von verschiedenen Autoren mit *ab initio*-Rechnungen untersucht worden [55–57]. Dabei konnten die experimentell gefundenen Anisotropierichtungen erst kürzlich von X. NIE *et al.* reproduziert werden [57]. Die Autoren führen die in-plane-Magnetisierung der ML auf die magnetische Polarisation des W-Substrats durch den Fe-Film und die damit verbundene Anisotropie (Spin-Bahn-Kopplung) zurück und erklären die senkrechte Anisotropie der DL durch ein zunehmendes Unterdrücken des Bahnmoments der W-Atome durch das Kristallfeld der zusätzlichen atomaren Fe-Lage.

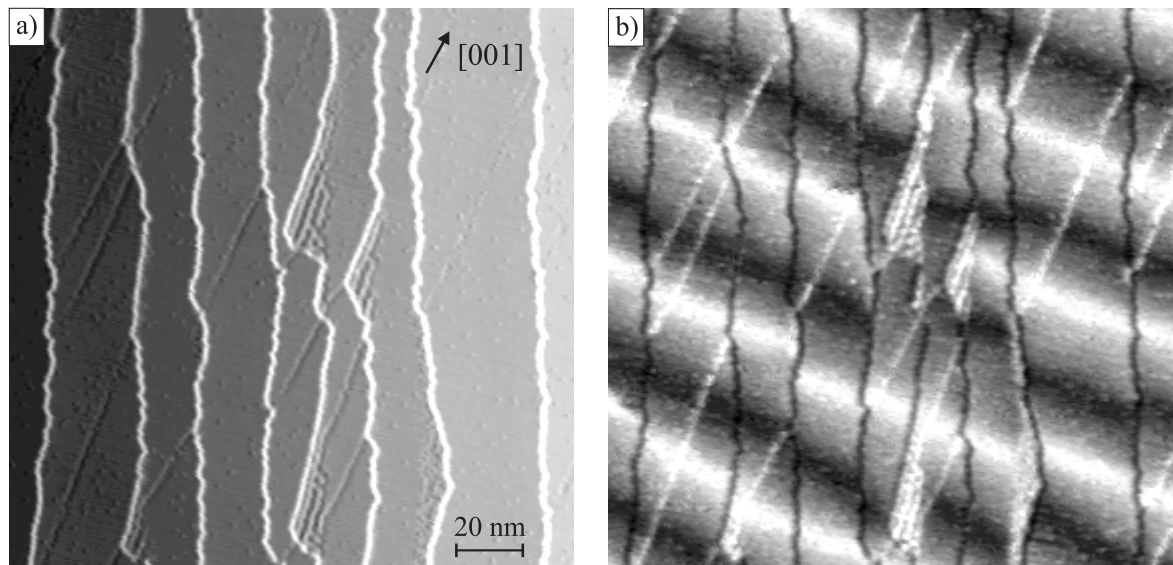
## 6.2 DL-Streifen am Übergang zum geschlossenen Film

Interessanterweise zeigt der geschlossene Film von  $\theta = 2.0$  ML in Abb. 6.3 sowohl senkrecht als auch in der Ebene Remanenz, und erst bei 2.2 ML scheint die Magnetisierung vollständig in der Ebene zu liegen. Dabei sollte man allerdings berücksichtigen, daß eine exakte Schichtdickenbestimmung nicht trivial ist, wenn man den Film nicht wie mit dem STM “sehen” kann. In jedem Fall schien eine Untersuchung der magnetischen Struktur am Übergang zum geschlossenen Film vielversprechend, wozu Fe-Filme von  $\theta = 1.6 - 2.7$  ML auf einem W-Substrat mit breiteren Terrassen (ca. 25 nm) präpariert wurden.

Abbildung 6.4(a) zeigt das Konstantstrombild in 3D-Ansicht, eingefärbt mit dem simultan auf-

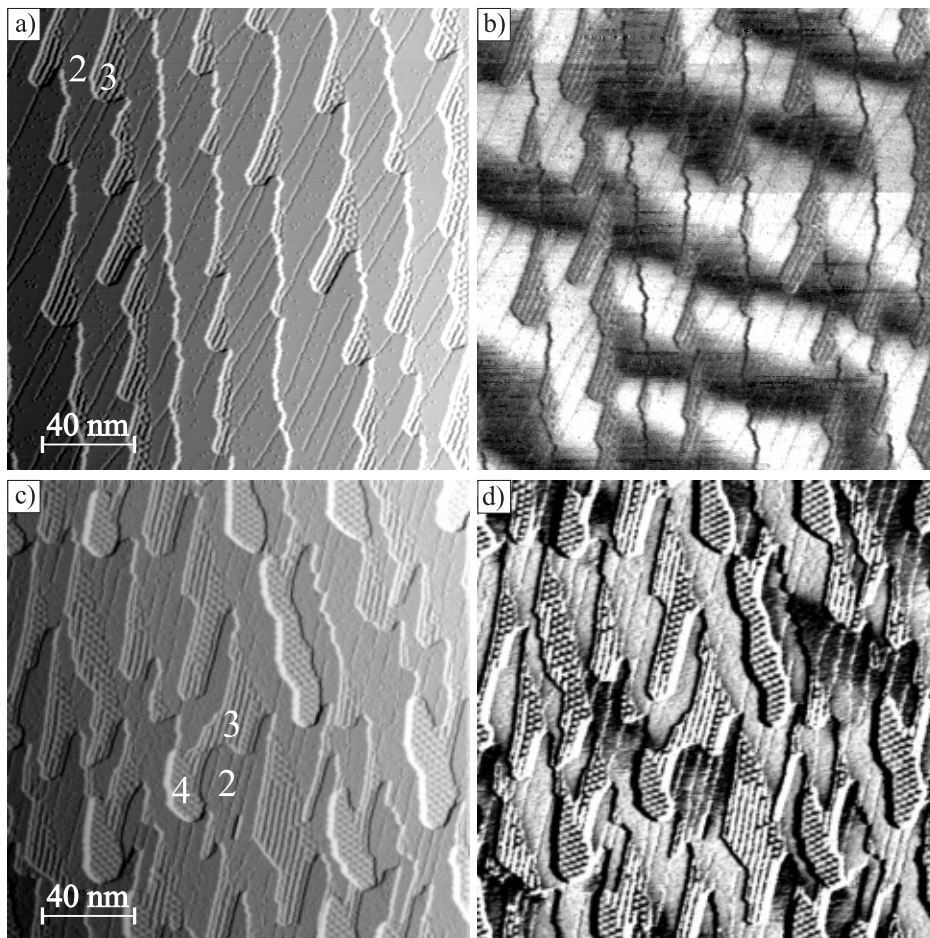


**Abbildung 6.4:** Mit zunehmender Bedeckung (breiteren DL-Streifen) bilden sich magnetische Streifendomänen aus. **a)** 2.0 ML Fe, abgebildet mit senkrecht magnetisierter GdFe-Spitze bei  $I=0.3$  nA,  $U=-0.45$  V und  $T=14$  K. Die magnetische Periode beträgt  $50\pm 5$  nm. **b)** 1.6 ML Fe, abgebildet mit in-plane magnetisierter Fe-Spitze bei  $I=0.3$  nA und  $U=-0.1$  V. Die Domänenstruktur befindet sich in einem Mischzustand von antiparallel gekoppelten DL-Streifen (Abb. 6.2) und Streifendomänen (Abb. 6.4(a)). (alle Aufnahmen  $170\times 170$  nm<sup>2</sup>)



**Abbildung 6.5:** Topographie (a) und  $dI/dU$ -Karte (b) von 2.0 ML Fe, aufgenommen mit in-plane-sensitiver Gd-Spitze. ( $170 \times 170 \text{ nm}^2$ )

genommenen  $dI/dU$ -Signal, von  $\theta = 2.0 \text{ ML Fe/W}(110)$ , aufgenommen mit einer GdFe-Spitze bei  $T = 14 \text{ K}$ . Da die Magnetisierung der Spitze senkrecht zur Oberfläche steht, ist die  $dI/dU$ -Karte ein Abbild der  $z$ -Komponente der Oberflächenmagnetisierung. Man erkennt Streifendomänen mit einer magnetischen Periode von  $50 \pm 5 \text{ nm}$  und einer Orientierung der Domänen, die nur wenig von der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung abweicht. Benachbarte Terrassen sind über die Stufenkanten hinweg austauschgekoppelt. Versetzungslinien mit  $[001]$ -Orientierung erscheinen hell bei der gewählten Bias-Spannung, haben jedoch entgegen den Annahmen aus Refs. [52, 53] keinen merklichen Einfluß auf die Domänenstruktur. Unterhalb des Bildes ist eine Schnittlinie durch die  $dI/dU$ -Karte gezeigt, die drei Domänenwände kreuzt. Der Vergleich mit drei Standard-Domänenwandprofilen (Pfeilstruktur) der Wandbreite  $w = 7 \text{ nm}$  und einem Abstand zwischen den Wandzentren von  $23 \text{ nm}$  ergibt eine gute Übereinstimmung. Dabei wurde angenommen, daß die Wände den gleichen Drehsinn besitzen, eine Tatsache, die man aus der Abbildung nur einer Magnetisierungskomponente natürlich nicht folgern kann, die sich aber aus Messungen der in-plane-Komponente ergibt: Abb. 6.4(b) zeigt 1.6 ML Fe, aufgenommen mit einer in-plane magnetisierten Fe-Spitze. In den DL-Streifen erscheinen nun die Domänenwände alternierend hell und dunkel, eine Folge entgegengesetzter Magnetisierungsrichtungen in den Zentren benachbarter Wände, in Übereinstimmung mit der Annahme gleichen Drehsinns. Zum Vergleich ist wiederum eine Schnittlinie gezeigt, die drei Domänenwände kreuzt. Diese folgt dem gleichen Profil wie in Abb. 6.4(a), wenn man eine  $90^\circ$ -Rotation aufgrund der unterschiedlichen Spitzen-Magnetisierung berücksichtigt. Die beiden Schnittlinien repräsentieren also – im Rahmen der Meßgenauigkeit – ein und dieselbe magnetische Konfiguration. In Abb. 6.4(b) sind die Streifendomänen noch nicht voll entwickelt. Mit abnehmender struktureller Breite der DL-Streifen nimmt die Dichte der Domänenwände ab, und ihre Abstände werden unregelmäßig. Da die Terrassenbreite des Substratkristalls und damit die DL-Streifenbreite innerhalb des Bildes stark variiert, ist auch die Domänenwanddichte in den einzelnen DL-Streifen sehr unterschiedlich. Diese Probe befindet sich offensichtlich in einem Übergangszustand zwischen antiparallel gekoppelten DL-Streifen, wie sie in Abb. 6.2 zu sehen sind, und den bei  $\theta = 2 \text{ ML}$  beobachteten Streifendomänen in Abb. 6.4(a).



**Abbildung 6.6:** Bedeckungen oberhalb 2 ML, abgebildet mit senkrecht magnetisierter GdFe-Spitze ( $200 \times 200 \text{ nm}^2$ ): Topographie (a) und  $dI/dU$ -Karte (b) von 2.2 ML Fe, sowie von  $\approx 2.7$  ML [(c) und (d)]. Die Streifendomänen werden zunehmend durch Bereiche dritter und vierter Lage gestört. Die DL zeigt jedoch auch bei 2.7 ML noch Domänen mit senkrechten Magnetisierungskomponenten, wobei auch die Richtung der Domänen lokal erhalten bleibt.

Qualitativ läßt sich dieser Übergang folgendermaßen verstehen: Sind die Substratterrassen schmal, liegen die DL-Streifen eng beieinander und können ihre Streufeldenergie durch eine antiparallele Kopplung verringern. Domänenwände, die zusätzliche Energie kosten, sind in diesem Fall energetisch nicht sinnvoll. Sind die Substratterrassen breiter, und damit auch die DL-Streifen, ist dieser Mechanismus weniger effektiv, und der Einbau von Domänenwänden führt zu einer Reduktion der Streufeldenergie.

Abb. 6.5 zeigt zum Vergleich die Topographie (a) und die  $dI/dU$ -Karte (b) von 2 ML, abgebildet mit einer in-plane magnetisierten Gd-Spitze.<sup>3</sup> Die Wände folgen hier genauer der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung als die Domänen in Abb. 6.4(a). Kleine Bereiche dritter Lage stören bereits lokal die Periodizität der magnetischen Struktur. Letzteres wird mit zunehmender Bedeckung stärker. Abb. 6.6 zeigt Aufnah-

<sup>3</sup>Mit Gd beschichtete Spitzen zeigten nach der Befüllung des Verdampfers mit einer neuen Charge Gd eine in-plane-Magnetisierung, im Gegensatz zu Abb. 6.2, was vermutlich auf eine Materialverunreinigung zurückzuführen ist. Für senkrechte Kontraste wurden daher im folgenden GdFe-Spitzen verwendet.

men von  $\theta \approx 2.2$  und 2.7 ML Fe. Es haben sich Zungen mit einer lokalen Höhe von 3 und schließlich 4 ML gebildet, die die Ausbildung der Streifendomänen in den angrenzenden DL-Bereichen stören. Eine senkrechte Magnetisierung in den DL-Bereichen und eine bevorzugte Ausrichtung der Domänen entlang  $[1\bar{1}0]$  ist aber selbst bei 2.7 ML in Abb. 6.6(d) noch zu erkennen. Der bei höheren Temperaturen beobachtete Reorientierungsübergang von einer senkrechten leichten Achse in die Ebene für  $\theta > 2$  ML (vgl. Abb. 6.3) wird also bei  $T = 14$  K nicht gefunden, was vermutlich auf eine erhöhte Anisotropie bei tiefen Temperaturen zurückzuführen ist.

### 6.3 Streifendomänen

Wir haben gesehen, daß sich mit zunehmender Bedeckung bei 2 ML Fe eine streifenartige magnetische Struktur ausbildet, die nicht mehr, wie bei geringeren Bedeckungen, von der Nanostruktur des Films abhängt. Die sogenannten “Domänen” sind dabei nicht Bereiche mit einer homogenen Magnetisierungsrichtung, wie dieser Begriff beispielsweise in der Domänentheorie verwendet wird. Statt dessen handelt es sich um eine kontinuierliche Rotation von  $\vec{M}$  in  $[001]$ -Richtung, wobei “Domänen”- und “Domänenwand”breite von gleicher Größenordnung sind. Ein Vergleich der Schnittlinien in Abb. 6.4 zeigt jedoch, daß die senkrechte und in-plane-Komponente der Magnetisierung nicht äquivalent sind:  $\vec{M}$  verbleibt länger in der Senkrechten als in der Ebene. Die Terminologie ist daher sinnvoll, insbesondere in Hinblick auf die Filme mit niedrigerer Bedeckung, und die senkrechte Remanenz, die nach dem Aufmagnetisieren beobachtet wird.

In der Literatur [8, 13] unterscheidet man im wesentlichen zwei Typen von Streifendomänen, wobei in der Regel dickere Filme als nur wenige atomare Lagen untersucht werden: A) Ist  $K_1 > K_d$ , bilden sich Domänen aus, die gegenüber der Wandbreite sehr groß sind. Deren Magnetisierung ist homogen und parallel zur leichten (senkrechten) Achse, sowie antiparallel in benachbarten Domänen. B) Ist  $K_1 < K_d$  und  $K_1$  oberhalb eines kritischen Wertes  $K_c$ , der von der Filmdicke und den magnetischen Parametern abhängt [8], verbleibt  $\vec{M}$  im wesentlichen in der Filmebene, und es findet nur eine schwache, streifenartige Modulation von  $M_z$  statt, die mit zunehmendem  $K_1$  größer wird.<sup>4</sup>

Theoretisch haben YAFET und GYORGY [58] die Bildung dieses zweiten Typs von Streifendomänen in einer atomaren Monolage untersucht. Demnach gibt es für das Verhältnis von Anisotropie und Streufeldenergie  $f = K_1/K_d$  einen Grenzwert  $f_{\min}$  (der etwas unterhalb 1 liegt), so daß für  $f > f_{\min}$  eine Domänenstruktur energetisch günstiger ist als eine einheitliche Magnetisierung in der Ebene. Mit zunehmendem  $f$  wird dabei die maximale  $z$ -Komponente der Magnetisierung, angefangen von  $M_z = 0$  bei  $f_{\min}$ , kontinuierlich größer, und die Domänenengröße nimmt so rasch zu, daß sie bereits bei  $f = 1.4$  eine Größenordnung von 1 cm erreicht hat.

Offensichtlich beschreibt keines der genannten Modelle die experimentelle Situation, denn die Domänen sind weder groß gegenüber den Domänenwänden, noch findet nur eine schwache Modulation von  $M_z$  statt. Eine große Modulation ist dagegen nach [58] nicht kompatibel mit kleinen Domänenbreiten, und experimentell wird ja sogar eine vollständige Rotation von  $\vec{M}$  beobachtet.

#### 6.3.1 Modellierung

Um das Auftreten der Streifendomänen zu verstehen schien daher eine mikromagnetische Modellierung notwendig. Die Idee dabei war, die magnetischen Konstanten  $K_1$  und  $A$  zu bestimmen, für

<sup>4</sup>A. HUBERT bezeichnet Typ A als *strong stripe domains* und Typ B als *weak* oder *dense stripe domains*. Hinzu kommen die sogenannten *band domains*, die Typ A ähnlich sind, jedoch nicht geradlinig verlaufen.

die die beobachtete Konfiguration die Gesamtenergie minimiert. Hierzu wurde als Beschreibung von  $\vec{M}(x)$  die Funktion

$$m_z(x, p, w) = \tanh[\sin(2\pi x/p) \cdot \frac{p}{\pi w}] / \tanh[\frac{p}{\pi w}], \quad m_z = M_z/M_s \quad (6.1)$$

gewählt, mit der Periode  $p$  und der Wandbreite  $w$ . Unter der Annahme von  $m_x = 0$  (Blochwand) ergibt sich  $m_y(x, p, w)$  über die Bedingung  $m_y^2 + m_z^2 = 1$ . Für einen endlichen, isolierten DL-Bereich wurde dann für eine Reihe von Werten  $p$  um 50 nm und  $w$  um 7 nm die Gesamtenergiedichte  $e$  bestimmt. Die Austausch- und Anisotropieenergiedichte ergibt sich durch Integration über eine Periode:

$$e = \frac{1}{p} \int_0^p [A((\frac{\partial m_z}{\partial x})^2 + (\frac{\partial m_y}{\partial x})^2) + K_1 m_y^2] dx + e_d. \quad (6.2)$$

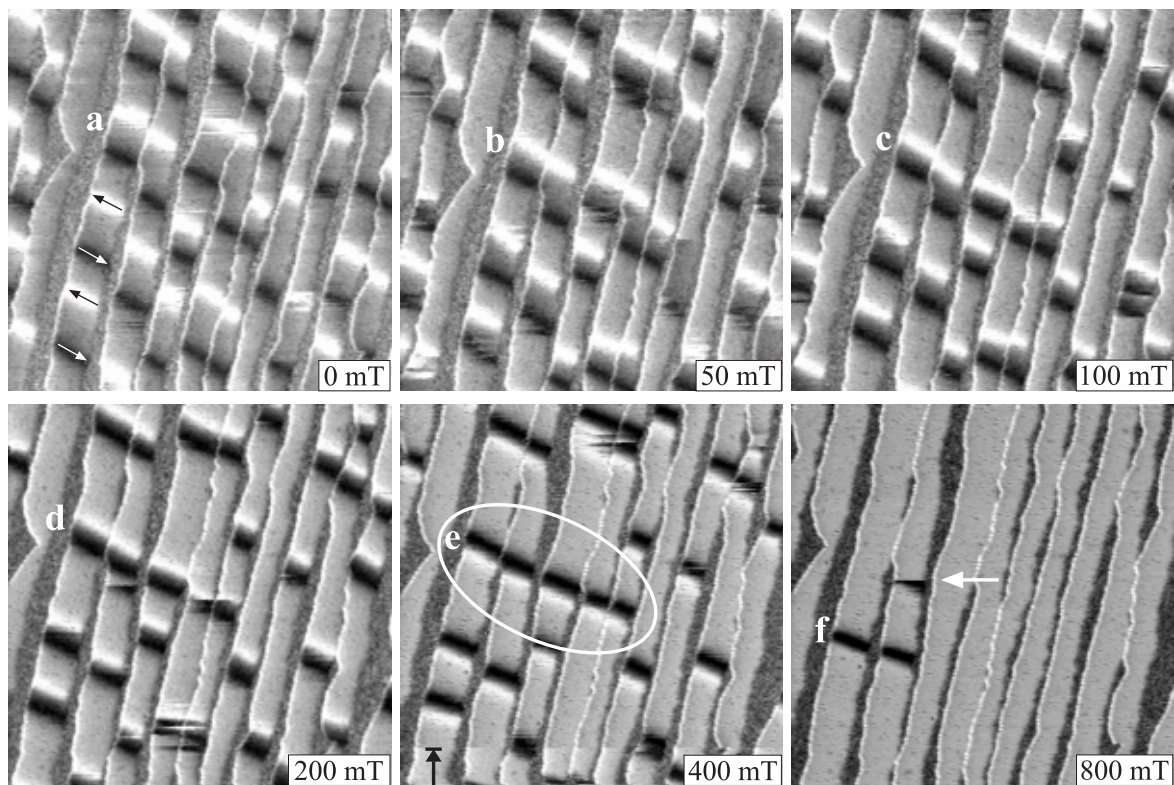
Die magnetostatische Energiedichte  $e_d$  wurde durch eine Diskretisierung in  $x$  mit Hilfe der Formeln aus Ref. [59] (*finite Elemente*) bestimmt. Für einen Bereich von  $1000 \times 1000 \times 0.4$  nm<sup>3</sup> und einer plausiblen Annahme über die Sättigungsmagnetisierung,  $M_s = 2.0 \cdot 10^6$  A/m, liegen die experimentellen Werte von  $p$  und  $w$  bei der Wahl von  $K_1 = 2.5 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup> und  $A = 1.2 \cdot 10^{-12}$  J/m in einem energetischen Minimum.  $K_1$  wäre dann praktisch identisch mit der Streufeld-Anisotropiekonstanten  $K_d = \mu_0 M_s^2 / 2$ , was insofern in Übereinstimmung mit dem Modell von YAFET und GYORGY ist, als daß  $f \approx 1$  für kleine Perioden zu erwarten ist. Die so bestimmten Werte führen allerdings in zweierlei Hinsicht zu Widersprüchen. Zum einen wird wegen  $K_d \approx K_1$  die Domänenwandbreite extrem empfindlich auf die Breite der DL-Streifen. Mit abnehmender Streifenbreite würde auch die Domänenwandbreite schnell abnehmen, da so die Streufeldenergie verringert werden kann. Bei einer DL-Streifenbreite von z.B. 10 nm hätte eine Wand bei den oben bestimmten Werten von  $A$  und  $K_1$  nur noch eine Breite von etwa  $w = 3.5$  nm. Experimentell wurde dagegen zwar eine Variation von  $w = 6 - 9$  nm, jedoch kein eindeutiger Trend bezüglich der strukturellen Breite festgestellt. Wichtiger noch, der Wert von  $A$  liegt etwa eine Größenordnung unter dem, der aufgrund der Curie-Temperatur der geschlossenen DL zu erwarten ist,<sup>5</sup> und ist überdies unvereinbar mit Messungen im Magnetfeld, die ich im folgenden Abschnitt vorstellen werde.

Ich ziehe daher den Schluß, daß die beobachtete Domänenstruktur *nicht* den magnetischen Grundzustand bei tiefen Temperaturen darstellt und/oder daß die berücksichtigten Energieterme zu einer vollständigen Beschreibung nicht ausreichen. Denkbar wäre, daß die Streifendomänen bei höheren Temperaturen – bei  $K_d \approx K_1$  – entstehen, und beim weiteren Einkühlen der Probe stabil bleiben, obwohl  $K_1$  mit abnehmender Temperatur zunimmt, und daher größere Domänen eigentlich energetisch günstiger wären. Zusätzlich wäre es möglich, daß das verwendete Modell und die berücksichtigten Wechselwirkungen das System nicht adäquat beschreiben. Bevor ich auf diese zwei Punkte zurückkomme, ist es notwendig, zunächst feldabhängige Messungen vorzustellen.

### 6.3.2 360°-Domänenwände im B-Feld

Im folgenden soll die Änderung der Domänenstruktur in senkrechten Magnetfeldern untersucht werden. Abb. 6.7 zeigt  $dI/dU$ -Karten von 1.8 ML, aufgenommen mit einer in-plane magnetisierten Gd-Spitze bei  $B = 0$  bis 800 mT. Im Nullfeld sind die Abstände der Domänenwände auf den breiteren DL-Streifen äquidistant, auf den schmaleren zunehmend größer und unregelmäßig. Bewegungen der Wände während der Bildaufnahme äußern sich als scharfe Kontraste in  $y$ -Richtung und sind in erster

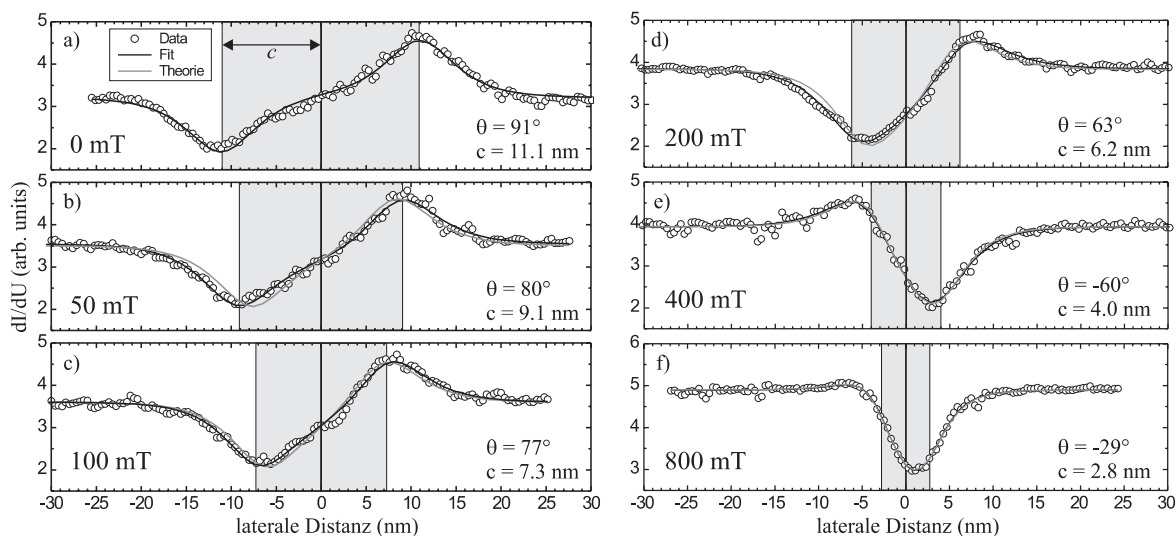
<sup>5</sup>Unter der Annahme von  $T_c \propto A$ , kann man über die Austauschkonstante von Volumen Fe,  $A_{\text{bulk}} \approx 2 \cdot 10^{-11}$  J/m [13], den Wert der DL abschätzen:  $A_{DL} \approx 0.9 \cdot 10^{-11}$  J/m. ( $T_{c,\text{bulk}} = 1043$  K,  $T_{c,DL} \approx 450$  K)



**Abbildung 6.7:** 1.8 ML Fe im senkrechten Magnetfeld: Paare von  $180^\circ$ -Wänden laufen zusammen und werden im zunehmenden Feld zusammengedrückt. Die anfangs in-plane magnetisierte Gd-Spitze wird mit jedem Feldschritt weiter in die Senkrechte gedreht. Die Bezeichnungen a–f korrespondieren mit den Schnittlinien in Abb. 6.8. ( $I = 0.3$  nA,  $U = -0.3$  V, Bildbereich:  $200 \times 200$  nm<sup>2</sup>)

Linie auf das Streufeld der Spitze zurückzuführen (vgl. Kap. 6.4). Im senkrechten  $B$ -Feld wachsen die Bereiche mit einer Magnetisierung in Feldrichtung, und Paare von  $180^\circ$ -Wänden laufen zusammen. Dies ist gleichbedeutend mit der Bildung von  $360^\circ$ -Wänden, die mit zunehmender Feldstärke immer weiter komprimiert werden. Betrachtet man beispielsweise die Abbildung bei  $B = 100$  mT, so fällt auf, daß in *allen* DL-Streifen innerhalb des Bildbereiches die  $360^\circ$ -Wände von einer dunklen Wand an der Unterseite und einer hellen Wand an der Oberseite gebildet werden. Das bedeutet, daß die Magnetisierung nicht nur innerhalb jedes DL-Streifens eine definierte Drehrichtung (*Chiralität*) aufweist, der Drehsinn ist auch in allen DL-Streifen der gleiche. Das ist insofern überraschend, als daß die in Kap. 2.3.2 betrachtete  $180^\circ$ -Wand bezüglich der zwei möglichen Drehrichtungen energetisch entartet ist. Ich werde auf diesen Punkt in Kap. 6.3.4 zurückkommen.

Auch die Magnetisierungsrichtung der Spitze ändert sich und wird von Bild zu Bild weiter in die Senkrechte gedreht. Bei 400 mT ändert sich auch deren in-plane-Komponente, woraufhin der Kontrast der Wände invertiert erscheint. Die Position, bei der dies passiert, ist mit einem schwarzen Pfeil markiert. Bei dieser Feldstärke hat sich eine Gruppe von fünf  $360^\circ$ -Wänden gebildet, vermutlich eine Folge des in-plane-Streufeldes der Wände, möglicherweise aber auch aufgrund einer durch die ML vermittelten Austauschkopplung. Bei 800 mT hat sich der Großteil der Wände aufgelöst. Ein Pfeil markiert eine Wand, die gerade während des Abbildens verschwindet. Auch die beiden letzten Wände haben sich während der nachfolgenden Abbildung bei 800 mT (nicht gezeigt) aufgelöst. Die



**Abbildung 6.8:** Schnittlinien durch die in Abb. 6.7 markierten  $180^\circ$ -Domänenwandpaare, sowie gefittete (schwarze Linie) und nach 1D-Theorie berechnete (graue Linie) Domänenwandprofile. Der graue Bereich kennzeichnet den Abstand der Wandmittelpunkte,  $2c$ , also eine Rotation von  $180^\circ$ .

Stabilität der  $360^\circ$ -Wände und der Einfluß des Streufeldes der Spitze auf deren Ummagnetisierung wird in Zusammenhang mit antiferromagnetischen Tunnelspitzen in Abschnitt 6.4 diskutiert.

Die Kompression der  $360^\circ$ -Wände im Magnetfeld läßt sich bereits sehr gut mit einem einfachen eindimensionalen Ansatz unter Berücksichtigung von Austausch-, Anisotropie- und Zeemanenergie mikromagnetisch modellieren. Der Gleichgewichtszustand stellt sich dabei im wesentlichen durch eine Balance von Austauschenergie, die für eine Abstoßung der Wände sorgt, und dem Drehmoment ein, das vom  $B$ -Feld auf die Magnetisierung in den Wänden ausgeübt wird. Die Magnetisierungsrichtung relativ zur Richtung des senkrechten äußeren Feldes sei durch die Funktion

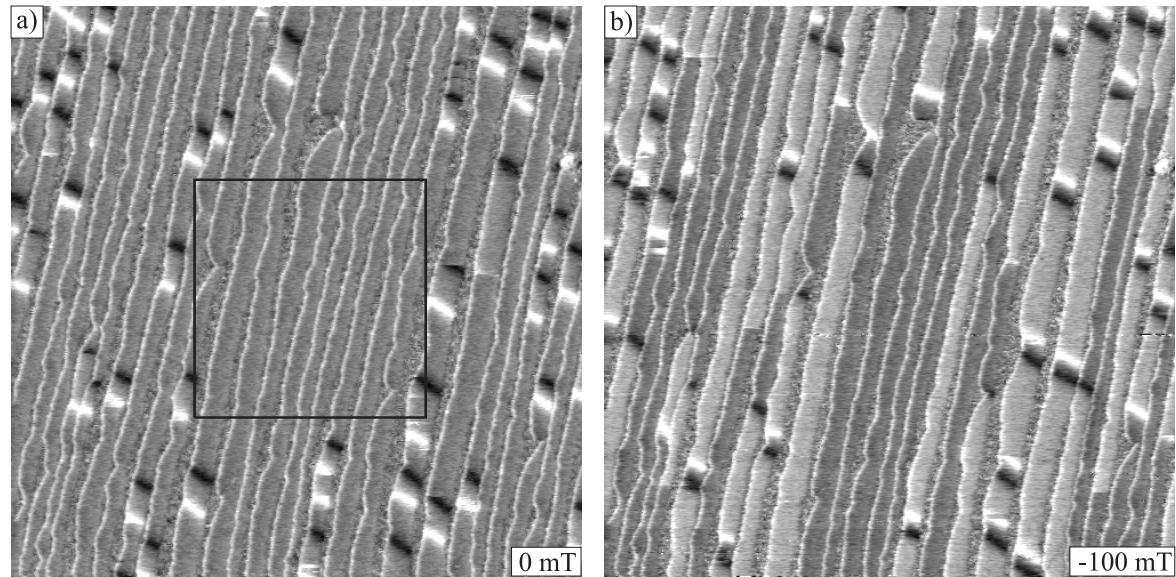
$$\varphi(x, c, w) = \arcsin\left(\tanh\left(\frac{x+c}{w/2}\right)\right) + \arcsin\left(\tanh\left(\frac{x-c}{w/2}\right)\right) \quad (6.3)$$

beschrieben, also durch zwei  $180^\circ$ -Standard-Domänenwandprofile mit der Wandbreite  $w$  und dem Abstand der beiden Wandzentren  $2c$ . Der Gleichgewichtszustand ergibt sich dann durch eine Minimierung der Energiedichte

$$e(c, w) = \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{+l/2} A \underbrace{\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}(x, c, w)\right)^2}_{\text{Austausch}} + \underbrace{K_{\text{eff}} \sin^2(\varphi(x, c, w))}_{\text{eff. Anisotropie}} + \underbrace{M_s B [1 + \cos(\varphi(x, c, w))]}_{\text{Zeeman}} dx \quad (6.4)$$

bezüglich der zwei freien Parameter  $c$  und  $w$ . In dieser Darstellung wird die Streufeldenergie der Einfachheit halber als uniaxiale Anisotropie beschrieben.  $K_{\text{eff}}$  ist daher ein effektiver Anisotropieparameter, im Gegensatz zu  $K_1$  in (6.2). Die 1 im Zeeman-Term ist nicht physikalisch, sondern hat allein numerische Gründe. Es wurde wiederum von  $M_s = 2.0 \cdot 10^6$  A/m ausgegangen, während  $A = 1.5 \cdot 10^{-11}$  J/m und  $K_{\text{eff}} = 1.2 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup> so gewählt wurden, daß sich eine möglichst gute Übereinstimmung von experimentellen und berechneten Wandprofilen ergab. Abb. 6.8 zeigt Schnittlinien durch die in Abb. 6.7 gekennzeichneten  $180^\circ$ -Domänenwandpaare (Kreise), einen Fit (schwarze Li-





**Abbildung 6.9:**  $500 \times 500 \text{ nm}^2$   $dI/dU$ -Karten, aufgenommen im Anschluß an Abb. 6.7. **a)** Die Verteilung der Domänenwände macht den Einfluß der Spitze auf die Ummagnetisierung deutlich. **b)** Der Fe-Film zeigt auch auf größerer Skala eine strenge Chiralität.

nie) mit der Funktion

$$y = y_0 + a \cdot \cos\left[\arcsin\left(\tanh\left(\frac{x - x_0 + c}{w/2}\right)\right) + \arcsin\left(\tanh\left(\frac{x - x_0 - c}{w/2}\right)\right) + \theta\right], \quad (6.5)$$

sowie die berechneten Wandprofile (graue Linie).<sup>6</sup> Die Fit-Funktion entspricht (6.3), wobei neben den trivialen Fit-Parametern  $x_0$ ,  $y_0$  und  $a$  ein zusätzlicher Parameter  $\theta$  zur Berücksichtigung der sich im  $B$ -Feld ändernden Spitzenmagnetisierung notwendig war. Über  $\theta$  läßt sich deren Richtung relativ zur Richtung des Magnetfeldes ( $z$ -Achse) quantifizieren. Überraschend ist die trotz des einfachen Ansatzes recht gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment im gesamten Feldbereich von 50–800 mT. Im Nullfeld ist die gewählte theoretische Beschreibung nicht sinnvoll, da dann  $c$  von den benachbarten Wänden bzw. den Randbedingungen abhängt. Auch der Kollaps der Struktur bei 800 mT kann so nicht beschrieben werden, da durch (6.3) die Magnetisierung  $\vec{M}$  auf eine Ebene senkrecht zur Filmebene beschränkt ist. Davon abgesehen zeigt die gute Übereinstimmung, daß die Kontinuumstheorie in diesem Fall anwendbar ist, wobei die Streufeldenergie nicht einmal explizit berechnet werden mußte. Letzteres bedeutet, daß der Gleichgewichtszustand im wesentlichen durch Austausch- und Zeemanenergie bestimmt wird, und daß sich die  $360^\circ$ -Wände in nicht zu großen Feldern ( $B < 800 \text{ mT}$ ) elastisch komprimieren lassen, ähnlich wie eine Schraubenfeder, auf die eine äußere Kraft ausgeübt wird.

Die Stabilität der  $360^\circ$ -Wände ist Folge einer Anisotropie innerhalb der Ebene und wird in Kap. 6.4 diskutiert. Abbildung 6.9 macht deutlich, daß dabei auch die Tunnelspitze eine Rolle spielt. Abb. 6.9(a) zeigt ein Übersichtsbild, das anschließend im Nullfeld aufgenommen wurde. Der zuvor in Abb. 6.7 gescannte Bereich (schwarzer Rahmen) ist frei von Domänenwänden, im Gegensatz zur

<sup>6</sup>Die grauen Linien in (b) bis (f) sind ein Fit an die Daten mit den jeweils berechneten (festen) Werten  $c$  und  $w$  und den freien Parametern  $x_0$ ,  $y_0$ ,  $a$  und  $\theta$ . Die Angaben von  $\theta$  und  $c$  in Abb. 6.8 beziehen sich dagegen auf den reinen Fit an die Daten.

Umgebung. Aber auch dort hat die Dichte der Domänenwände deutlich abgenommen. Die Magnetisierung der Spitze liegt bei  $B = 0$  mT wieder in der Ebene, zeigt also keine merkliche Remanenz. Im entgegengesetzten Feld bei  $B = -100$  mT (Abb. 6.9(b)) wird sie wieder leicht in die Senkrechte gedreht, wodurch neben den Wänden die Domänen sichtbar werden. Diese Aufnahme zeigt noch einmal die strenge Chiralität des Systems auf einem größeren Bereich: Oberhalb schwarzer Wände sind immer dunkle Domänen zu sehen und oberhalb weißer Wände helle Domänen. Die helleren Domänen sind in diesem Fall die in Feldrichtung magnetisierten.

### 6.3.3 Richtung der $180^\circ$ -Domänenwände

In den bisher gezeigten Messungen fiel auf, daß die Domänenwände in den DL-Streifen alle mehr oder weniger entlang der gleichen kristallographischen Richtung, der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung, orientiert sind. Abweichungen von dieser Richtung zielen stets auf eine Verkürzung der Wandlänge durch eine Drehung hin zu einer Orientierung senkrecht zur langen Achse der DL-Streifen. Es stellt sich die Frage, warum die Wände ihre Länge nicht vollständig minimieren und welcher Mechanismus dabei für eine Ausrichtung entlang  $[1\bar{1}0]$  sorgt.

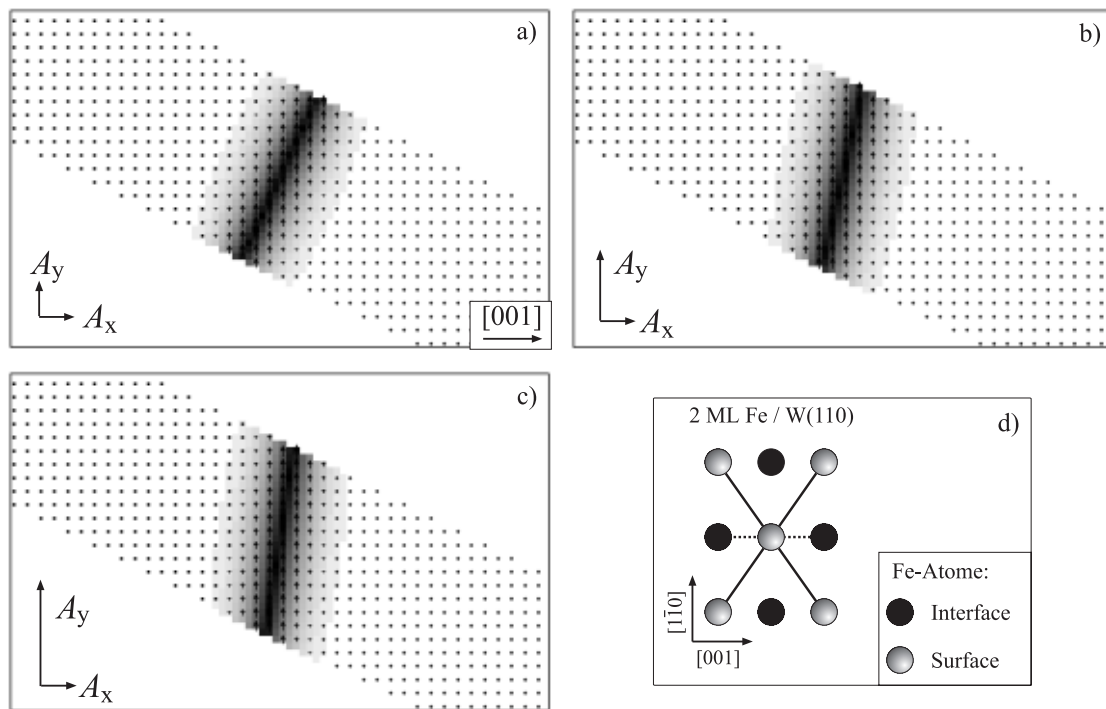
Es sei zunächst ein unendlich ausgedehnter uniaxialer Ferromagnet betrachtet. In diesem Fall sind Blochwände streufeldfrei und daher energetisch günstiger als Néelwände. Letztere besitzen wegen  $\nabla\vec{M} \neq 0$  magnetische Ladungen, die innerhalb der Wand ein Streufeld erzeugen, das zusätzliche Energie kostet. Deshalb verlaufen Domänenwände ohne weitere Randbedingungen parallel zur Anisotropierichtung. Dasselbe gilt im Prinzip auch für einen unendlich ausgedehnten dünnen Film mit einer senkrechten leichten Achse und einer zusätzlichen Anisotropie innerhalb der Ebene, wie im Fall der Fe-DL.<sup>7</sup> Auch hier erzeugen Néelwände zusätzliche magnetische Ladungen innerhalb des Films, und der energetische Unterschied zwischen Néel- und Blochwänden sorgt für eine Ausrichtung der Blochwände senkrecht zur harten magnetischen in-plane-Richtung. Dieser Effekt ist aber deutlich schwächer als im Volumen, da Néelwände im wesentlichen nur noch Linienladungen erzeugen, gegenüber Flächenladungen im Volumen. Hinzu kommt die endliche Breite des DL-Streifens. Man kann sich leicht überlegen, daß es ohne in-plane-Anisotropie und für Wände, die senkrecht zum Streifen verlaufen, mit abnehmender Streifenbreite einen Übergang von Bloch- zu Néelwänden geben muß, sobald die Streifenbreite die Größenordnung der Domänenwandbreite erreicht, da dann die Blochwände ein vergleichbares Streufeld an den Rändern erzeugen wie die Néelwände im Volumen. In der Tat zeigt eine mikromagnetische Simulation [17], daß mit realistischen Parametern für die DL<sup>8</sup> dieser Übergang bei einer Breite von etwa 30 nm stattfindet. Es ist also nicht zu erwarten, daß die in-plane-Anisotropie über diesen Mechanismus die Wände ausrichten kann. Abb. 6.10(a) zeigt dies exemplarisch für einen endlichen Streifen der Breite 26 nm und einen Winkel zwischen DL-Streifen und harter in-plane Richtung von  $30^\circ$ : Die in-plane-Anisotropie richtet allein die Magnetisierung innerhalb der Wand aus, während die Wand selbst sich senkrecht zum Streifen dreht, um ihre Länge zu minimieren.

Anisotropie und Streufeld allein können das beobachtete Phänomen also nicht erklären. Die Idee war daher die Annahme eines *anisotropen* Austausches, d.h. einer unterschiedlich starken Austauschkopplung entlang  $[001]$  und  $[1\bar{1}0]$ .<sup>9</sup> Da diese beiden Richtungen nicht äquivalent sind (vgl. Abb. 6.10(d)) ist diese Annahme zunächst auch plausibel. Abb. 6.10(b) und (c) zeigen die relaxierten

<sup>7</sup>Daß die DL auch innerhalb der Ebene eine Anisotropie aufweist, läßt sich an der Stabilität der  $360^\circ$ -Wände im externen Magnetfeld ablesen, und wird ausführlich in Kap. 6.4 diskutiert.

<sup>8</sup> $M_s = 2.0 \cdot 10^6$  A/m,  $A = 1.5 \cdot 10^{-11}$  J/m,  $K_1 = 3.5 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup>

<sup>9</sup>Gemeint ist hier also *nicht* eine Abhängigkeit der Austauschwechselwirkung von der Spinrichtung.



**Abbildung 6.10:**  $180^\circ$ -Wände in einem DL-Streifen (Simulation). Die magnetisch harte Achse verläuft in  $x$ - bzw.  $[001]$ -Richtung. **a)** isotroper Austausch. **b)**  $A_y = 2A_x$ . **c)**  $A_y = 3A_x$ . **d)** Einheitszelle der DL Fe/W(110). Die Linien bezeichnen die nächsten Nachbarn des zentralen Fe-Oberflächenatoms. Der Abstand zur unteren Lage (gestrichelt) ist jedoch durch Relaxation verkürzt.

Konfigurationen für eine relative Stärke von 2:1 und 3:1. Die Domänenwand dreht sich zunehmend in Richtung des stärkeren Austausches, wobei sich ein Gleichgewicht zwischen dieser Richtung und einer möglichst kurzen Wand einstellt. Das ist qualitativ die experimentell beobachtete Situation.

Im Rahmen des Kontinuummodells muß man also von einem anisotropen Austausch ausgehen, um die Richtung der Domänenwände zu beschreiben. Die Vermutung liegt nahe, daß das Heisenbergmodell in diesem Fall eine bessere Beschreibung liefert, da es die atomare Struktur des Films berücksichtigt. Um diese Annahme zu überprüfen wurde die Austauschenergie  $E_{\text{ex}} = -J \sum_{i,j} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$  für eine Domänenwand entlang der beiden Richtungen  $[1\bar{1}0]$  und  $[001]$  berechnet. Da es hier nur auf das Verhältnis der Energien ankommt, wurden die  $\vec{s}_i, \vec{s}_j$  der Einfachheit halber als Einheitsvektoren aufgefaßt. Ferner wurde die Relaxation des Interlagenabstandes vernachlässigt; jedes Fe-Atom hat also sechs nächste Nachbarn, über die summiert werden muß. Exemplarisch wurde dies für eine Domänenwand der Breite  $w = 6$  nm in einem quadratischen Bereich von  $22.15 \times 22.15$  nm<sup>2</sup> ( $141 \times 100$  Atome) durchgeführt. Es ergibt sich dann für die Wand entlang  $[1\bar{1}0]$   $E_{\text{ex}} = 15.7J$  und entlang  $[001]$   $E_{\text{ex}} = 20.9J$ , bezogen auf die Austauschenergie einer homogenen Magnetisierung. Eine Domänenwand entlang  $[1\bar{1}0]$  ist also in diesem Modell die energetisch günstigere, in qualitativer Übereinstimmung mit dem Experiment. Das Verhältnis der Energien scheint aber verglichen mit Abb. 6.10 zu klein zu sein, d.h. die Relaxation und die damit verbundene Änderung des nächste-Nachbar-Abstandes in  $[001]$ -Richtung spielt eine weitere Rolle. Davon abgesehen ist natürlich auch dieses Modell nur eine grobe Näherung für ein  $3d$ -Übergangsmetall und eine quantitative Übereinstimmung gar nicht zu erwarten.

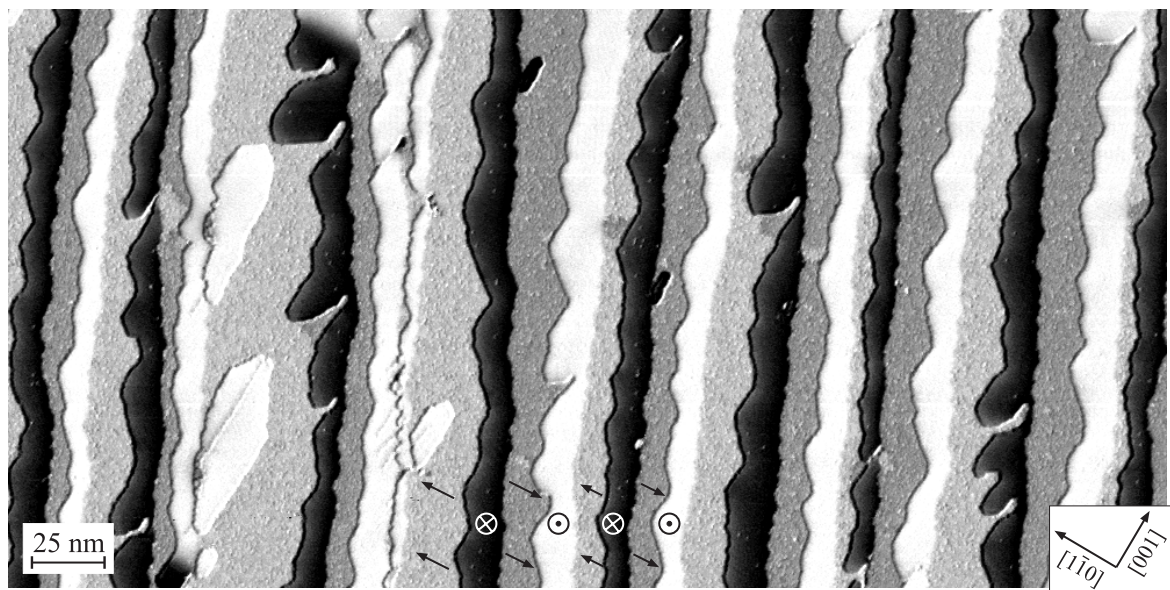
### 6.3.4 Chiralität

Eine überraschende Eigenschaft der Fe-Doppellage ist die Chiralität (Händigkeit) ihrer magnetischen Struktur. Der definierte Drehsinn der Magnetisierung in [001]-Richtung war bereits beim Vergleich der senkrechten und in-plane-Komponente zweier unterschiedlicher Proben in Abb. 6.4 aufgefallen, und konnte in Abschnitt 6.3.2 durch die Brechung der Symmetrie im externen B-Feld an einer einzelnen Probe bestätigt werden. Betrachtet man zunächst einen einzelnen DL-Streifen, so ist ein einheitlicher Drehsinn der Magnetisierung nicht überraschend. Eine solche Struktur ist stabiler gegenüber thermischen Fluktuationen als eine, bei der benachbarte Wände einen unterschiedlichen Drehsinn besitzen. Letztere können sich leicht gegenseitig auslöschen, während  $180^\circ$ -Wände gleichen Drehsinns selbst gegenüber starken Magnetfeldern stabil sind. Innerhalb eines einzelnen DL-Streifens ist eine einheitliche Chiralität also bereits aus Stabilitätsgründen zu erwarten.

Schwieriger ist die Frage, warum alle DL-Streifen innerhalb eines Bildbereiches den gleichen Drehsinn aufweisen. Hierzu ist zunächst anzumerken, daß der absolute Drehsinn nicht bestimmt werden kann, da der Azimutwinkel der Spitzenmagnetisierung nicht bekannt ist. Aufnahmen unterschiedlicher Proben mit unterschiedlichen Spitzen lassen sich daher nicht direkt vergleichen. Diese Frage ließe sich mit dem Anlegen von in-plane-Feldern entscheiden, was im derzeitigen Versuchsaufbau jedoch nicht möglich ist. Prinzipiell gibt es daher zwei Erklärungsansätze: i) Entweder sind die zwei möglichen Drehrichtungen energetisch entartet, und es gibt lediglich eine Kopplung benachbarter DL-Streifen, die eine definierte Chiralität im jeweiligen Bildbereich bewirkt. Auf größerer Skala oder auf neu präparierten Proben könnte dann auch der entgegengesetzte Drehsinn beobachtet werden. ii) Die zweite Möglichkeit besteht darin, daß die zwei Drehrichtungen energetisch nicht gleich sind, d.h. die Struktur des magnetischen Films favorisiert eine der zwei Drehrichtungen.

Für (i) kommen zwei Kopplungsmechanismen in Betracht, das Streufeld und eine Austauschkopplung über die ML. Das Streufeld könnte jedoch nur eine relativ schwache Kopplung vermitteln, und man sollte daher zumindest vereinzelte Ausnahmen beobachten, was nicht der Fall ist. Zum anderen sollten benachbarte Domänen über das Streufeld antiparallel koppeln – was ja auch tatsächlich beobachtet wird – benachbarte Wände dagegen parallel. Das bedeutet aber gerade, daß eine alternierende Chiralität benachbarter DL-Streifen begünstigt wird. Das Streufeld scheidet daher als Ursache aus. Auch eine Austauschkopplung, vermittelt durch die zwischen den DL-Streifen liegende ML, ist wenig wahrscheinlich. Die ML ist in der Ebene entlang  $[1\bar{1}0]$  magnetisiert und hat eine sehr kleine Austauschlänge von nur etwa  $3 \text{ \AA}$  [60]. Sie kann daher allenfalls eine in-plane-Komponente vermitteln, und daher keine Drehrichtung.

Es ist also eher davon auszugehen, daß (ii) die zwei möglichen Drehrichtungen energetisch nicht äquivalent sind, obwohl die atomare Struktur der DL, wie in Abb. 6.10(d) zu sehen ist, nicht chiral ist. Auch hierbei kommen wieder das Streufeld und die Austauschwechselwirkung als mögliche Ursachen in Betracht. Setzt man entgegen den bisherigen Annahmen voraus, daß es sich bei den  $180^\circ$ -Wänden nicht um Bloch- sondern um Néelwände handelt, könnte die in-plane-Komponente des Streufeldes der angrenzenden Domänen die energetische Entartung der beiden Drehrichtungen aufheben. Dadurch, daß die magnetischen Momente der Oberflächenatome größer sind als die dem W-Substrat benachbarten in der ersten Lage – nach Ref. [57]  $2.73 \mu_B$  gegenüber  $2.17 \mu_B$  (Spinmomente) – ergibt sich nämlich ein Nettoeffekt. Die Frage ist allerdings, ob dieser Effekt stark genug ist, um sich signifikant auszuwirken. Das zweite Problem mit dieser Erklärung ist, daß die leichte Richtung der geschlossenen DL bei höheren Temperaturen die  $[1\bar{1}0]$ -Richtung ist (vgl. Abb. 6.3). Es ist daher zu erwarten, daß diese auch bei  $T = 14 \text{ K}$  die leichtere der beiden in-plane-Richtungen bleibt. Da auch die Wände entlang  $[1\bar{1}0]$  orientiert sind, handelt es sich also vermutlich um Blochwände,



**Abbildung 6.11:**  $dI/dU$ -Karte von 1.4 ML Fe, aufgenommen mit Gd-Spitze. Da die Magnetisierung der Spitze sowohl eine senkrechte als auch eine in-plane-Komponente aufweist, ist gleichzeitig ein Kontrast auf DL und ML zu sehen. ( $I = 0.3$  nA,  $U = -0.3$  V, Bildbereich:  $400 \times 200$  nm<sup>2</sup>)

bei denen kein solcher Effekt zu erwarten ist.

Der zweite Erklärungsansatz ist die Annahme einer chiralen Austauschkopplung, basierend auf der Dzyaloshinsky-Moriya (DM) Wechselwirkung [61], die üblicherweise in der Form  $\vec{D}(\vec{s}_i \times \vec{s}_j)$  dargestellt wird, wobei  $\vec{D}$  eine Anisotropierichtung bezeichnet. Explizit hat BOGDANOV darauf hingewiesen, daß eine starke chirale Kopplung aufgrund großer Dehnung und durch die gebrochene Symmetrie an Oberflächen zu erwarten ist, und daß *“induced magnetic chirality may stabilize new magnetic structures and patterns in thin magnetic layers”* [62]. Es stellt sich die Frage, ob hierzu eine weitere Symmetriebrechung notwendig ist – beispielsweise durch die beiden Ränder der DL-Streifen (die wegen der Substratterassen nicht äquivalent sind) – oder ob eine solche Wechselwirkung bereits auf einer idealen DL ohne Stufenkanten zu beobachten wäre. SHEKHTMAN *et al.* [63] haben darauf hingewiesen, daß neben der Brechung der Inversionssymmetrie bezüglich des Zentrums benachbarter Spins auch die Stärke des isotropen Austausches der verschiedenen Bindungen variieren muß, damit sich entgegengesetzte Beiträge nicht kompensieren. M.E. sind beide Bedingungen auch für die ideale DL erfüllt, insbesondere wegen der Nichtäquivalenz der beiden Fe-Lagen und der Abstandsänderung in [001]-Richtung (vgl. Abb. 6.10(d)). Eine DM-Wechselwirkung sollte daher prinzipiell möglich sein. Neben der Chiralität der Streifendomänen in [001]-Richtung könnte diese auch die Ursache für deren kurze Periode sein. Eine chirale Wechselwirkung wäre demnach der in (6.2) fehlende Term.

Die Frage, ob das Streufeld oder eine mögliche DM-Wechselwirkung die experimentell beobachtete Chiralität verursacht, läßt sich an dieser Stelle nicht entscheiden. Hierzu sind eine tiefere theoretische Analyse und weitere experimentelle Untersuchungen notwendig. Insbesondere sollte durch das Anlegen von in-plane-Feldern der absolute Drehsinn und die Magnetisierungsrichtung innerhalb der Wände bestimmt werden.

Neben den Streifendomänen bei  $\theta \approx 2$  ML, gibt es auch bei niedrigeren Bedeckungen eine chi-

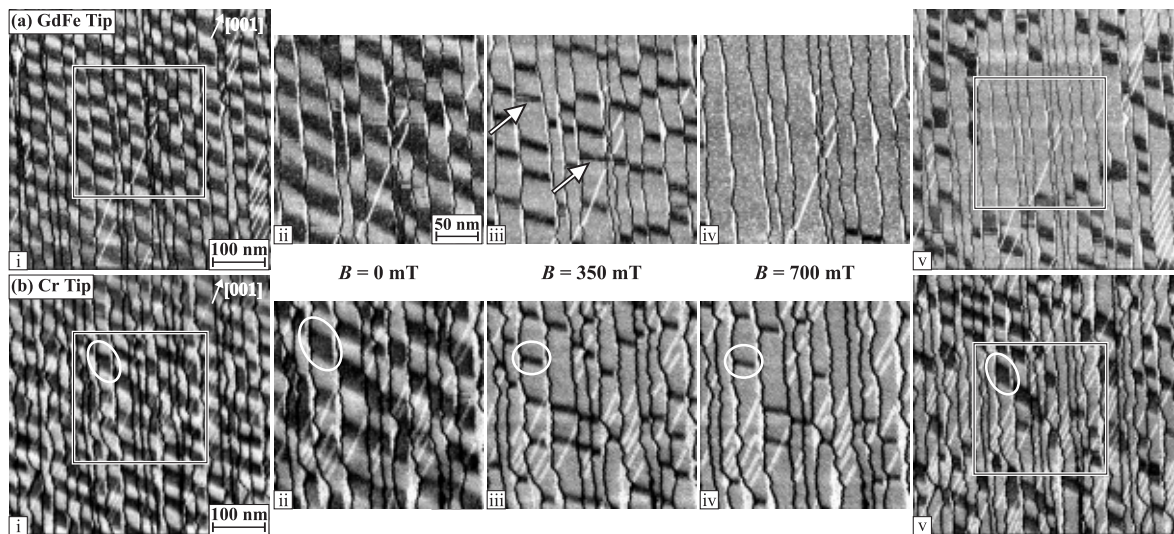
rale Ordnung, und zwar *senkrecht* zu den Stufenkanten. Abb. 6.11 zeigt eine  $dI/dU$ -Karte von 1.4 ML Fe/W(110), aufgenommen mit einer *schräg* magnetisierten Spitze. Neben einem alternierenden Schwarz-Weiß-Kontrast auf den DL-Streifen ist daher auch ein Kontrast auf den ML-Bereichen zu sehen, was horizontal einer Abfolge von  $\uparrow \rightarrow \downarrow \leftarrow \uparrow \rightarrow \downarrow \leftarrow \dots$ , entspricht. Auch diese Struktur läßt sich mit der oben vorgeschlagenen DM-Wechselwirkung auf der DL erklären: Aus der Drehung der Magnetisierung in [001]-Richtung resultieren entgegengesetzte in-plane-Komponenten der Magnetisierung an den beiden gegenüberliegenden Seiten der DL-Streifen. An diese kann die in-plane-magnetisierte Monolage ankoppeln, so daß die Drehrichtung in  $x$ -Richtung insgesamt festgelegt ist.

## 6.4 Antiferromagnetische und ferromagnetische Spitzen

In diesem Abschnitt werden drei Ziele verfolgt. Zum einen soll gezeigt werden, daß SP-STM auch mit antiferromagnetischen (AF) Spitzen möglich ist. Zweitens läßt sich über den direkten Vergleich mit einer ferromagnetischen (FM) Spitze deren Streufeld abschätzen. Schließlich kann durch feldabhängige Messungen mit einer AF-Spitze das für die Ummagnetisierung der in Kap. 6.3.2 behandelten  $360^\circ$ -Wände notwendige kritische Feld  $B_c$  bestimmt werden. Dies ist mit einer FM-Spitze wegen deren Wechselwirkung mit der Probe nicht möglich.

SP-STM ist bisher allein mit FM-Spitzen durchgeführt worden. Diese besitzen ein äußeres Streufeld, das von der Menge des magnetischen Materials und der Form der Spitze abhängt. Anders als bei der Magnetkraftmikroskopie (MFM) ist die magnetostatische Wechselwirkung jedoch für den Abbildungsmechanismus nicht notwendig, sondern hat allein die negative Auswirkung einer Beeinflussung der zu untersuchenden Probe. In dieser Beziehung stellen dünne FM-Filme auf nichtmagnetischen Spitzen bereits eine deutliche Verbesserung gegenüber dickeren Beschichtungen [4] oder Spitzen aus FM-Vollmaterial dar. Der natürliche nächste Schritt ist die Verwendung von AF-Spitzen. Diese sollten kein signifikantes Streufeld besitzen, da sich entgegengesetzte Beiträge bereits auf atomarer Skala kompensieren. Trotzdem sind sie für SP-STM Messungen geeignet, solange die Zustandsdichte in der Nähe des Fermi-Niveaus spinpolarisiert ist. Die Tatsache, daß die inverse Situation – FM-Spitze und AF-Oberfläche – bereits erfolgreich realisiert wurde [3, 42], spricht dafür, daß dieser Schritt auch tatsächlich praktikabel ist. AF-Spitzen würden insbesondere die Untersuchung weichmagnetischer Proben und superparamagnetischer Teilchen ermöglichen. Ferner wären sie insensitiv gegenüber äußeren Feldern, was die Analyse feldabhängiger Daten deutlich vereinfachen würde.

Abbildung 6.12(a) zeigt eine Serie von  $dI/dU$ -Karten mit 1.95 ML Fe im zunehmenden senkrechten Magnetfeld. Im Gegensatz zu Abb. 6.7 wurde eine GdFe-beschichtete Spitze benutzt, die über den gesamten Feldbereich einen senkrechten Kontrast zeigt. (i) und (ii) zeigen den Ausgangszustand der Probe nach der Präparation und dem Einkühlen bei  $T = 14$  K und  $B = 0$  mT. Versetzungslinien entlang [001] sowie schmale Bereiche der ML, die in  $y$ -Richtung verlaufen, erscheinen bei der gewählten Bias-Spannung hell. Im Vergleich zu Abb. 6.4(a) und 6.5(b) fällt auf, daß die Austauschkopplung zwischen benachbarten Terrassen deutlich reduziert ist. Es hat im Gegenteil den Anschein, daß sobald die DL-Streifen durch einen schmalen ML-Streifen getrennt sind, eher eine schachbrettartige Struktur bevorzugt wird. Bei 350 mT (iii) sind die hellen Domänen gewachsen und die dunklen wurden komprimiert, entsprechen also  $360^\circ$ -Wänden. Zwei Pfeile in (iii) markieren Stellen, an denen sich die Domänenstruktur während des Abbildens von einer Scanlinie zur nächsten verändert hat, was auf eine Domänenwandverschiebung durch das Streufeld der Spitze hindeutet. Bei 700 mT (iv) ist die Probe innerhalb des Bildbereiches in der Sättigung, bis auf zwei Domänenwände am rechten unteren Bildrand. Im Übersichtsbild (v), aufgenommen im Nullfeld, wird jedoch

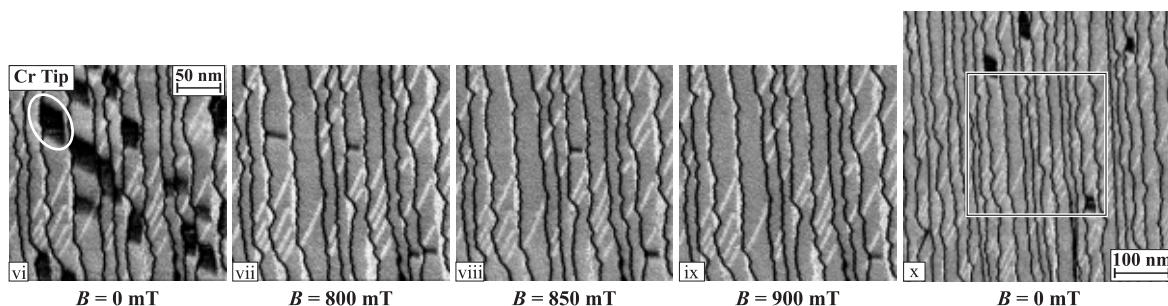


**Abbildung 6.12:** **a)**  $dI/dU$ -Karten von 1.95 ML Fe, aufgenommen mit einer GdFe-Spitze (senkrechter Kontrast) bei  $I = 0.3$  nA,  $U = -0.22$  V: i)  $500 \times 500$  nm<sup>2</sup> Übersichtsbild im Nullfeld. ii)  $250 \times 250$  nm<sup>2</sup> Vergrößerung. iii) Asymmetrie bei  $B = 350$  mT: Helle Domänen wachsen auf Kosten der dunklen. iv) Sättigung innerhalb des Bildbereiches. v) Der Einfluß der Spitze wird im Übersichtsbild deutlich ( $B = 0$  mT). **b)** Analoge Serie einer identisch präparierten Probe, abgebildet mit einer Cr-beschichteten Spitze bei  $I = 0.3$  nA,  $U = -0.22$  V. i),ii) Ausgangszustand bei  $B = 0$  mT iv) Im Gegensatz zu (a) hat eine große Zahl von Domänenwänden überlebt. v) Der in (iv) abgebildete Bereich zeigt keinen signifikanten Unterschied im Vergleich zur Umgebung.

deutlich, daß dieser Feldwert keinesfalls reine Probeneigenschaften widerspiegelt. Das Gesamtfeld aus externem Feld und dem Streufeld der Spitze ist sehr viel effektiver bei der Ummagnetisierung als das externe Feld allein. Die Wirkung der Spitze ist dabei lateral relativ scharf begrenzt.

Abbildung 6.12(b) zeigt eine analoge Serie einer identisch präparierten Probe, aufgenommen mit einer AF Cr-beschichteten Spitze. Auch diese besitzt eine senkrechte Sensitivität wie die GdFe-Spitze. Als ein Beispiel ist eine dunkle Domäne durchgehend markiert worden. Die Domänenstrukturen in Abb. 6.12(b)(i) bis (iii) zeigen keinen signifikanten Unterschied zu den entsprechenden in 6.12(a). Da innerhalb der ganzen Serie während des Abbildens keine Verschiebung von Domänenwänden beobachtet wird, können diese Ereignisse in 6.12(a) nun eindeutig dem Streufeld der Spitze zugeordnet werden. Alternative Ursachen wie thermische Wandbewegungen, oder durch den Tunnelstrom induzierte, scheiden durch einen Vergleich mit 6.12(b) aus. Wie in Abb. 6.12(a)(iii) werden die dunklen Domänen bei 350 mT komprimiert und aus der  $[1\bar{1}0]$  Richtung herausgedreht, wodurch sie ihre Länge verkürzen. Bei 700 mT (6.12(b)(iv)) haben im Vergleich zu (a) deutlich mehr Wände überlebt, und im Übersichtsbild, anschließend im Nullfeld aufgenommen, ist kein signifikanter Unterschied in der Domänenverteilung zwischen dem zuvor abgebildeten Bereich und der Umgebung zu sehen. Dieses Ergebnis demonstriert den Vorteil einer streufeldfreien Spitze. Bei einer genaueren Betrachtung von Abb. 6.12(b)(v) fällt auf, daß die dunklen Domänen bevorzugt in Gebieten mit Versetzungslinien verschwunden sind, diese also offensichtlich deren Stabilität herabsetzten, während ja im Nullfeld kein Einfluß der Versetzungslinien auf die Domänenstruktur festzustellen war.

Um die Wirkung des Spitzen-Streufeldes quantifizieren und das für die Sättigung der Probe tatsächlich notwendige  $B$ -Feld bestimmen zu können, wurde im Anschluß an 6.12(b)(v) das Feld weiter in Schritten von 50 mT erhöht. Bei 900 mT in Abb. 6.13(ix) ist schließlich der zu Abb. 6.12(a)(iv)



**Abbildung 6.13:** Fortsetzung der Serie aus Abb. 6.12(b): Bei 900 mT ist der zu 6.12(a)(iv) äquivalente Zustand erreicht. In (x) ist kein Einfluß der Spitze festzustellen.

äquivalente Zustand erreicht, und ein Übersichtsbild im Nullfeld (x) zeigt wiederum keinerlei Anzeichen einer Wechselwirkung mit der Spitze. Ich schließe daraus, daß die GdFe-Spitze bei einem externen Feld von 700 mT die gleiche Wirkung hat wie ein zusätzliches homogenes Feld von 200–300 mT.<sup>10</sup> Obwohl dieser Wert deutlich kleiner ist als der an einer Gd-Oberfläche maximal mögliche,  $B_{\max} = \mu_0 M_s / 2 \approx 1.3$  T, scheint er doch unvereinbar mit der relativ schwachen Wechselwirkung, die im Nullfeld beobachtet wird. Ein Vergleich mit Abb. 6.7 macht deutlich, daß die GdFe-Spitze *kein* homogenes Feld von 200–300 mT erzeugt, es hat lediglich bei 700 mT den gleichen Effekt.

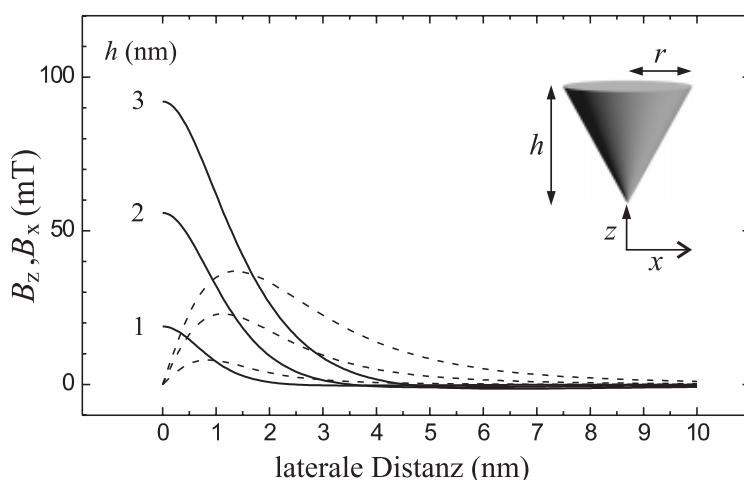
Um diesen scheinbaren Widerspruch aufzulösen habe ich das Streufeld der Spitze u.a. mit Formeln aus Ref. [64] abgeschätzt. Das Modell für die Spitze besteht aus zwei Teilen: einem dünnen Film auf einer Halbkugel, der senkrecht zu seiner Oberfläche magnetisiert ist, und einem Kegel an der Unterseite als die für den Tunnelprozeß zuständige Nanospitze, magnetisiert entlang seiner Achse. Mit  $M_s = 2.13 \cdot 10^6$  A/m für Gd und einem Radius von  $r = 500$  nm (vgl. Abb. 5.4) ergibt sich für den dünnen Film ein Feld von  $\approx 1$  mT pro nm Schichtdicke  $s$  (für  $s \ll r$ ) im Abstand von 1 nm von der Kugeloberfläche. Dieser Beitrag ist offensichtlich zu klein und zu homogen, um die Stärke und die lokale Begrenzung der Wechselwirkung in Abb. 6.12(a)(v) zu erklären. Für die Nanospitze setze ich voraus, daß sie eine Dreieckspyramide ist, mit einem Verhältnis von Höhe  $h$  zu Seitenlänge  $a$  wie in Volumen hcp Gd ( $h/a = 2.89/3.64$ ) und benutze als Näherung einen Kegel mit der gleichen Höhe und dem gleichen Volumen ( $h/r \approx 2.14$ ). Abb. 6.14 zeigt die senkrechte und in-plane-Komponente des Streufeldes eines solchen Kegels im Abstand von  $\Delta z = 1$  nm von seiner Spitze, aufgetragen über den Abstand von seiner Achse  $x$ , für  $h = 1-3$  nm bei einem konstanten Verhältnis  $h/r$ .<sup>11</sup> Diese Felder sind lokal sehr begrenzt und ihre Stärke nimmt monoton mit der Größe des Kegels zu. Ich vermute, daß inhomogene Felder dieser Art, die aus der Rauigkeit der Spitzenoberfläche resultieren, ausreichend sind, um bei 700 mT die Ummagnetisierung der  $360^\circ$ -Wände auszulösen, und gleichzeitig die Domänenstruktur im Nullfeld nicht schwerwiegend stören, aufgrund des kleinen Wechselwirkungsgebietes mit der Oberfläche. Letzteres ist vermutlich nicht mehr der Fall bei magnetisch weicheren Proben und superparamagnetischen Teilchen. In diesen Fällen ist der Einsatz von AF-Spitzen vermutlich auch im Nullfeld erforderlich.

Um den Ummagnetisierungsprozeß und den Einfluß des Streufeldes der Spitze darauf zu verstehen, ist wiederum eine mikromagnetische Modellierung sinnvoll. Hierzu habe ich die zeitliche Entwicklung einer einzelnen  $360^\circ$ -Wand in einem isolierten DL-Bereich von  $40 \times 16 \times 0.4$  nm<sup>3</sup> im

<sup>10</sup>200 mT ist hier wegen der großen Schrittweite in Abb. 6.12(a) und der im Vergleich größeren Versetzungsliniendichte in Abb. 6.13 eine untere Grenze.

<sup>11</sup>Bei einer Schichtdicke von in diesem Fall  $\approx 4$  nm sind sehr viel größere Nanospitzen unrealistisch.





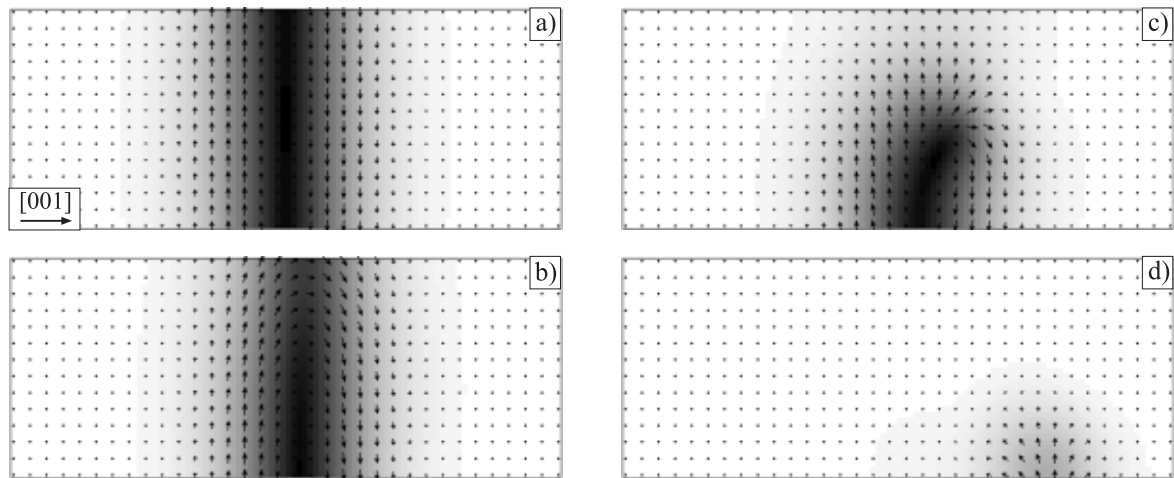
**Abbildung 6.14:** Senkrechte Streufeldkomponente  $B_z$  und in-plane-Komponente  $B_x$  (gestrichelt) eines Kegels im Abstand  $\Delta z = 1$  nm von seiner Spitze, aufgetragen gegenüber dem Abstand von seiner Achse  $x$ .

zunehmenden  $B$ -Feld untersucht, bei einer Zellengröße von  $4 \times 4 \times 4 \text{ \AA}^3$ . Das Entscheidende ist neben der magnetisch leichten senkrechten  $[110]$ -Achse eine zusätzliche Anisotropie innerhalb der Ebene, die die Wand gegenüber senkrechten Feldern stabilisiert [65, 66].  $360^\circ$ -Wände sind *nicht* topologisch, d.h. aufgrund ihrer Struktur, stabil. Ohne diese zusätzliche Anisotropie lösen sie sich in beliebig kleinen Feldern auf [65]. Bei  $360^\circ$ -Néelwänden in dünnen Filmen mit in-plane-Anisotropie übernimmt diese Rolle die Streufeldanisotropie [13]. Ich implementiere daher eine uniaxiale Anisotropie  $K_h$ , mit der harten Richtung entlang  $[001]$ , d.h. senkrecht zur Wand. Je größer  $K_h$ , desto größer ist das kritische Feld  $B_c$ , bei dem sich die Wand auflöst. Die Ummagnetisierung erfolgt durch eine Rotation über die harte  $[001]$ -Achse und konnte daher in Kap. 6.3.2 bei einer Beschränkung auf nur zwei Freiheitsgrade nicht beschrieben werden. Mit den üblichen Parametern  $M_s = 2.0 \cdot 10^6 \text{ A/m}$ ,  $A = 1.5 \cdot 10^{-11} \text{ J/m}$ , und der senkrechten Anisotropie  $K_1 = 3.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$  (leichte Achse) kann man in der Simulation bei der Wahl von  $K_h \approx -2.1 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$  das experimentell bestimmte kritische Feld von  $B_c = 900 \text{ mT}$  reproduzieren. Hierzu wurde das externe Feld in Schritten von  $50 \text{ mT}$  erhöht und bei jedem Schritt die Konfiguration relaxiert, bis die maximale Änderung in allen Zellen den Wert von  $0.1^\circ/\text{ns}$  unterschritten hatte. Mit den gewählten Parametern ist die Wand in der Simulation also bei  $850 \text{ mT}$  noch stabil und löst sich bei  $900 \text{ mT}$  auf.

Ferner zeigt sich, daß bei Feldern  $B$  nahe  $B_c$  ein externes in-plane-Feld in Richtung der harten  $[001]$ -Achse sehr viel effektiver ist als eine Erhöhung des homogenen senkrechten Feldes, eine Folge des größeren Drehmoments, das so auf die Struktur ausgeübt werden kann. Dabei ist ein lokales Feld am Rand des DL-Streifens für die Nukleation ausreichend. Abb. 6.15 zeigt die zeitliche Entwicklung einer so ausgelösten Ummagnetisierung. Abb. 6.15(a) zeigt den relaxierten Ausgangszustand im homogenen senkrechten Feld von  $B = 700 \text{ mT}$ . Das zusätzliche in-plane-Feld hat die Form

$$\vec{B} = B_{\max} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{l^2}\right) \cdot \vec{e}_x, \quad B_{\max} = 40 \text{ mT}, \quad l = 8 \text{ nm}, \quad (6.6)$$

mit dem Maximum in der Mitte des oberen Randes. Nach rund  $0.5 \text{ ns}$  Simulationszeit (b) hat dieses Feld die Magnetisierung merklich in die  $[001]$ -Richtung gedreht und die Wand kann sich vom Rand ablösen. Da jetzt auch die senkrechten  $700 \text{ mT}$  wirksam sind, verläuft die in (c) und (d) gezeigte Bewegung zur anderen Seite deutlich schneller und ist nach insgesamt  $0.57 \text{ ns}$  vollständig beendet. Dieser Prozeß ist mit dem STM natürlich zeitlich nicht aufzulösen, sondern äußert sich allein dadurch, daß die  $360^\circ$ -Wand von einer Scanlinie zur nächsten verschwunden ist (vgl. Abb. 6.7).



**Abbildung 6.15:** Kollaps einer  $360^\circ$ -Wand bei 700 mT, ausgelöst durch ein lokales in-plane-Feld in  $+x$ -Richtung mit  $B_{\max} = 40$  mT (Simulation). **a)**  $t = 0$ : Relaxierte Ausgangskonfiguration. **b)**  $t = 509$  ps nach dem Einschalten des zusätzlichen Feldes. **c)**  $t = 521$  ps. **d)**  $t = 533$  ps.

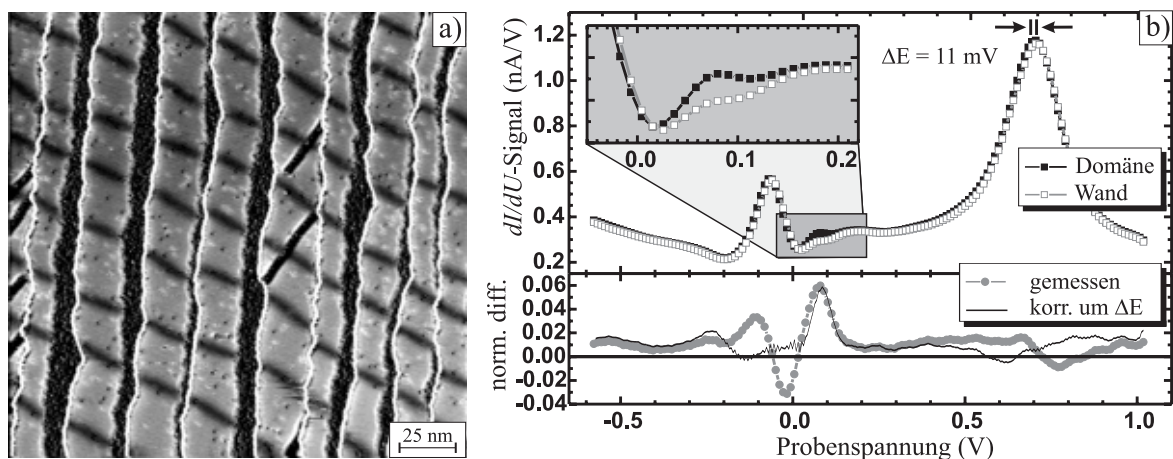
Die Wirksamkeit des Streufeldes der Spitze in externen Feldern nahe  $B_c$  läßt sich so qualitativ verstehen. Das Entscheidende ist in diesem Fall die Inhomogenität des Feldes und die daraus resultierende in-plane-Komponente. Die erforderliche Feldstärke ist dabei in Übereinstimmung mit den in Abb. 6.14 berechneten Feldern. Diese sind allerdings verglichen mit  $l = 8$  nm in (6.6) stärker lokalisiert, und reichen innerhalb des Modells nicht zur Nukleation der Ummagnetisierung aus. Dies mag verschiedene Ursachen haben. Zum einen könnte der magnetische Film der Spitze doch rauher sein als aufgrund seiner Schichtdicke zu erwarten ist, oder die Nanospitze hat eine andere Form, die ein größeres Streufeld erzeugt. Zum anderen mag das Modell zu einfach sein, und neben dem Streufeld der Spitze spielen andere Prozesse und Randbedingungen bei der Nukleation eine Rolle, beispielsweise Temperatureffekte, der Tunnelstrom, die Rauigkeit des DL-Randes, oder die Kopplung zur ML. Möglicherweise ist aber auch in diesem Fall der mikromagnetische Ansatz wegen der bei den hohen Feldstärken auftretenden großen Winkel zwischen benachbarten Zellen nicht mehr akkurat, oder die Orientierung der Domänenwände entlang  $[1\bar{1}0]$  (schräg zum DL-Streifen) und das Herausdrehen aus dieser Richtung im zunehmenden Feld spielt eine wesentliche Rolle bei der Nukleation.

Ich möchte abschließend auf die Versetzungslinien der DL zurückkommen. Diese zeigten im Nullfeld keinerlei Einfluß auf die Domänenstruktur. In Abb. 6.12 ist dagegen zu sehen, daß die dunklen Domänen bevorzugt in Gebieten mit einer großen Dichte an Versetzungslinien verschwinden. Die Stabilität der  $360^\circ$ -Wände ist hier also herabgesetzt, was auf eine reduzierte in-plane-Anisotropie  $K_h$  hindeutet. Das macht insofern Sinn, als daß die Versetzungslinien lokal die Periodizität des Gitters stören, und dadurch vermutlich auch die Kristallanisotropie herabsetzen. Die zweite Möglichkeit besteht darin, daß die Nukleation der Ummagnetisierung in diesen Gebieten einfacher ist.

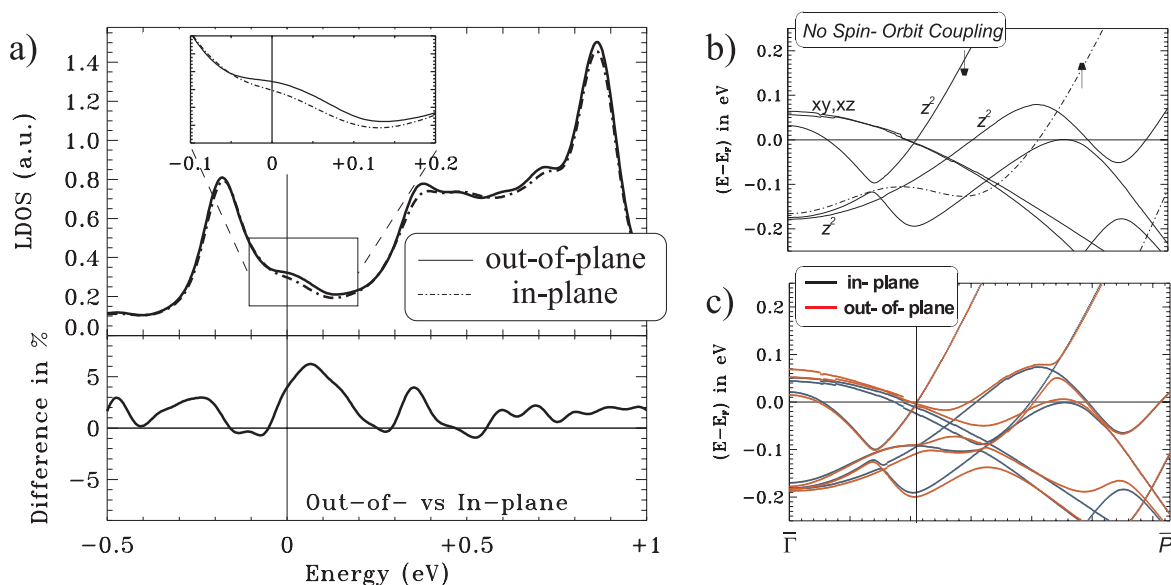
## 6.5 Nichtmagnetische Spitzen

Es wurde bereits in Kapitel 4.4 darauf hingewiesen, daß die magnetische Domänenstruktur einer Oberfläche prinzipiell auch mit nichtmagnetischen Spitzen abgebildet werden kann, wenn diese lokal eine Änderung der *elektronischen* Eigenschaften der Oberfläche bewirkt. Mit “nichtmagnetisch” ist hier para- oder diamagnetisch gemeint, Materialien also, die keine Spinpolarisation der Zustandsdichte aufweisen. Theoretisch wurde von LESSARD *et al.* [67] gezeigt, daß die Bandstruktur in 3d-Übergangsmetallen aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung (*spin-orbit-coupling*, SOC) von der Magnetisierungsrichtung dadurch abhängt, daß die Entartung von Bändern durch SOC für eine Richtung aufgehoben wird, nicht aber für die senkrecht dazu liegende. Anders als mit spinpolarisiertem STM, bei dem man aufgrund der Spinpolarisation der Oberfläche direkt sensitiv ist auf die *Orientierung* der Magnetisierung (relativ zur Magnetisierung der Spitze), sollte man also mit nichtmagnetischen Spitzen unterschiedliche *Richtungen* der Magnetisierung indirekt durch ihren Einfluß auf die Bandstruktur unterscheiden können.

Abbildung 6.16(a) zeigt eine  $dI/dU$ -Karte von etwa 1.8 ML Fe/W(110), aufgenommen mit einer (nichtmagnetischen) W-Spitze bei  $U = 50$  mV. Die Domänenwände in den DL-Streifen erscheinen hier alle als dunkle Linien, trotz entgegengesetzter Magnetisierungsrichtungen benachbarter Wände (vgl. Abb. 6.7). Ursache ist eine reduzierte differentielle Leitfähigkeit der Wände im Vergleich zu den Domänen. Lokale Spektroskopie (Abb. 6.16(b)) zeigt, daß dieser Kontrast durch einen kleinen Peak bei  $U = 70$  mV hervorgerufen wird, der in den  $dI/dU$ -Spektren zu sehen ist, die oberhalb von Domänen gemessen wurden, und im Fall der Domänenwände unterdrückt ist. Zusätzlich ist das Domänenwand-Spektrum gegenüber dem Domänen-Spektrum um  $\Delta E = +11$  mV verschoben, vermutlich eine Folge unterschiedlicher Austrittsarbeiten. Die normalisierte Differenz der Spektren zeigt daher neben dem Maximum bei  $U = 70$  mV eine ausgeprägte Oszillation bei negativen Spannungen, die sich durch eine Verschiebung des Domänenwand-Spektrums um  $-\Delta E$  unterdrücken läßt. Die Erhöhung der Zustandsdichte bei  $U = 70$  mV für Magnetisierungen senkrecht zur Oberfläche ist unabhängig vom Material der Spitze und auch in  $dI/dU$ -Spektren zu sehen, die mit magnetischen Spitzen aufgenommen wurden.



**Abbildung 6.16:** a)  $dI/dU$ -Karte von  $\approx 1.8$  ML Fe/W(110), aufgenommen mit einer nichtmagnetischen W-Spitze bei  $U = +50$  mV und  $I = 0.5$  nA. Die Domänenwände erscheinen alle als dunkle Linien. b) Gemittelte  $dI/dU$ -Spektren oberhalb einer Domäne und einer Domänenwand.

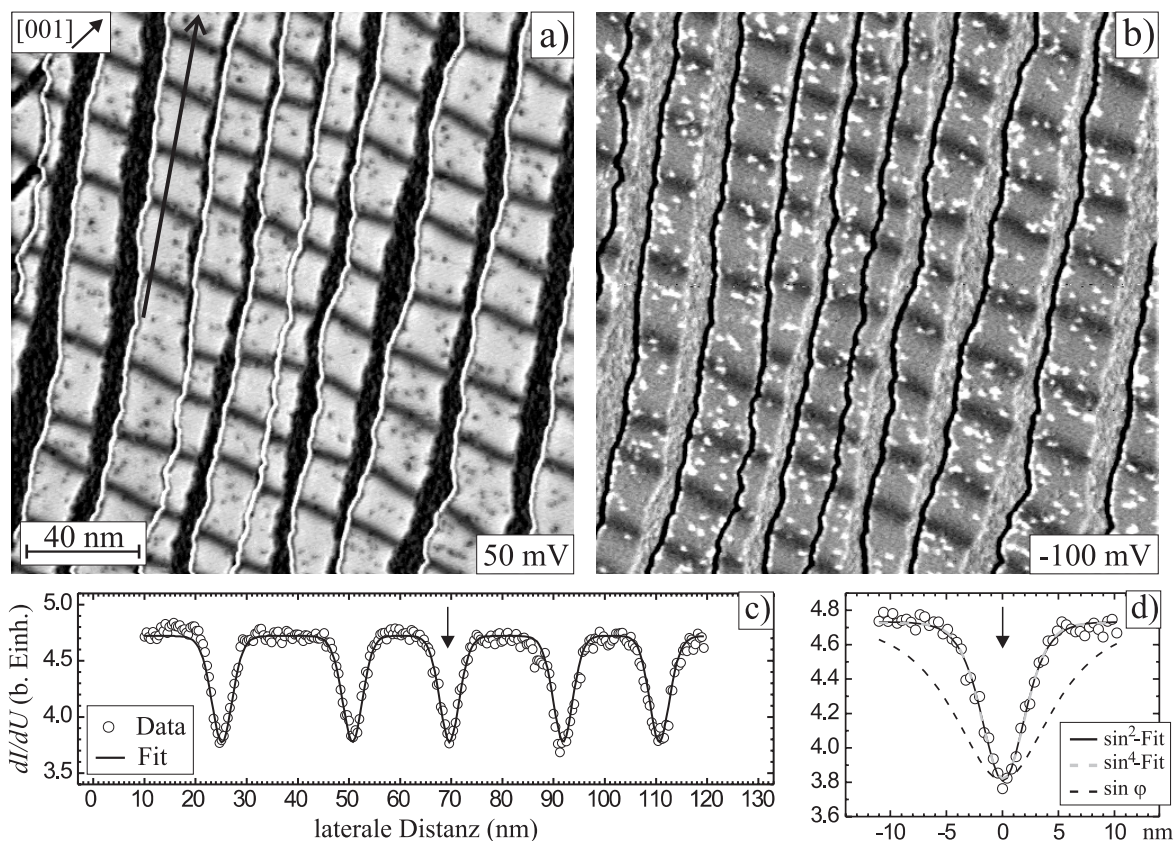


**Abbildung 6.17:** **a)** Berechnete Zustandsdichte 14 Å oberhalb der Oberfläche von 2 ML Fe/W(110) für den Fall senkrechter Magnetisierung (durchgezogene Linie) und in der Ebene entlang  $[1\bar{1}0]$  (gestrichelt), sowie die normalisierte Differenz der Spektren. **b)** Bandstruktur in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung ohne Spin-Bahn-Kopplung. **c)** Bandstruktur mit Spin-Bahn-Kopplung.

Um diese experimentellen Ergebnisse auf Eigenschaften der Bandstruktur zurückführen zu können hat S. HEINZE [68] *ab initio* Dichtefunktionaltheorie-Berechnungen für 2 ML Fe/W(110) in Abhängigkeit der Magnetisierungsrichtung durchgeführt. Hierzu ist die Implementierung der Spin-Bahn-Wechselwirkung notwendig, da ansonsten die Bandstruktur unabhängig von der Magnetisierungsrichtung ist. Abb. 6.17(a) zeigt die berechnete lokale Zustandsdichte 14 Å über der Oberfläche für die beiden Fälle einer senkrechten Magnetisierung (durchgezogene Linie) und in der Ebene entlang  $[1\bar{1}0]$  (gestrichelt). Für die Berechnung wurden 1800  $\mathbf{k}_{\parallel}$ -Punkte berücksichtigt, innerhalb eines Quadrates am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt, das 25% der Brillouinzone bedeckt. Beide Spektren zeigen Maxima bei  $-0.18$  eV und  $+0.85$  eV, die von Minoritäts- $d_{z^2}$ -Zuständen am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt hervorgerufen werden. Diese können mit den experimentell bestimmten Peaks bei  $-0.08$  V und  $+0.7$  V identifiziert werden (vgl. Abb. 6.16(b)). In einem Bereich von 100 meV oberhalb  $E_F$  (siehe Vergrößerung in Abb. 6.17(a)) ist die Zustandsdichte im senkrechten Fall signifikant erhöht, was zu einem ausgeprägten Maximum in der normalisierten Differenz der Spektren führt, in schöner Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen in Abb. 6.16. Für die  $[001]$ -Richtung wurde kein solcher Effekt gefunden, was ein weiteres Indiz für den Bloch-Charakter der Domänenwände darstellt.

Eine genauere Analyse wird durch den Vergleich der mit und ohne Spin-Bahn-Kopplung berechneten Bandstruktur ermöglicht. In Abb. 6.17(b) kreuzen nahe  $E_F$  zwei nahezu entartete  $d_{xy}$ - und  $d_{xz}$ -Bänder ein Band mit  $d_{z^2}$ -Charakter;<sup>12</sup> alle drei sind Minoritätsbänder. Zustände mit  $d_{xy}$ - und  $d_{xz}$ -Charakter tragen aufgrund ihrer kleinen Abklinglänge in  $z$ -Richtung nur wenig zur Zustandsdichte im Vakuum bei, während der Tunnelstrom häufig von  $d_{z^2}$ -Zuständen dominiert wird. Da die Steigung des  $d_{z^2}$ -Bandes in Abb. 6.17(b) groß ist, trägt es in diesem Fall (ohne SOC) nur wenig zur LDOS im Vakuum bei. Für den senkrechten Fall führt SOC dagegen zu einer Beimischung von  $d_{z^2}$ -Charakter

<sup>12</sup>Eine Darstellung der entsprechenden Orbitale findet sich z.B. in Ref. [8].



**Abbildung 6.18:** a)  $200 \times 200 \text{ nm}^2$   $dI/dU$ -Karte, aufgenommen mit W-Spitze bei  $I = 0.5 \text{ nA}$  und  $U = 50 \text{ mV}$ . b)  $U = -100 \text{ mV}$  c) Schnitt entlang der in (a) eingezeichneten Linie, sowie ein Fit mit (6.7) und  $n = 4$ . d) Detail aus (c), Fit mit  $\sin^n \varphi$ ,  $n = 2, 4$ . Mit  $n = 4$  ergibt sich  $w = 7.6 \text{ nm}$ .

zu den beiden  $d_{xy}$ - und  $d_{xz}$ -Bändern, was zu einer deutlichen Erhöhung der LDOS über der Oberfläche führt. In Abb. 6.17(a) ist zu sehen, daß der größte Effekt nahe dem Kreuzungspunkt der Bänder zu beobachten ist.

Abbildung 6.18 zeigt weitere  $dI/dU$ -Karten, aufgenommen bei  $U = 50 \text{ mV}$  (a) und  $U = -100 \text{ mV}$  (b). Im Vergleich zu den Messungen mit in-plane magnetisierten Spitzen zeigen die Domänenwände nicht nur alle den gleichen Kontrast, und das trotz entgegengesetzter Magnetisierungsrichtungen benachbarter Wände, sie erscheinen auch deutlich schmäler. Das Wandprofil entspricht also nicht wie im magnetischen Fall einer Projektion von  $\vec{M}$  auf die Ebene,  $\sin \varphi$ , sondern folgt vermutlich einem  $\sin^2 \varphi$ - oder  $\sin^4 \varphi$ -Gesetz, wobei  $\varphi$  den Winkel relativ zur Filmmormalen bezeichnet. Im Fall von  $\Delta dI/dU \propto \sin^2 \varphi$  würde die Änderung des  $dI/dU$ -Signals mit der Anisotropieenergiedichte,  $K \sin^2 \varphi$ , skalieren. Das wäre insofern plausibel, als daß die Kristallanisotropie und der oben beschriebene Effekt einer erhöhten Zustandsdichte bei einer Magnetisierung entlang der leichten magnetischen Achse die Spin-Bahn-Kopplung als gemeinsame Ursache haben. Es zeigt sich jedoch, daß sich mit  $\sin^4 \varphi$  eine bessere Übereinstimmung mit den magnetischen Messungen erzielen läßt. Abb. 6.18(c) zeigt das  $dI/dU$ -Signal über fünf  $180^\circ$ -Wände entlang der in Abb. 6.18(a) eingezeichneten Linie. Um das Profil der Wände durch eine Mittelung nicht zu verbreitern, wurde lediglich eine einzelne Schnittlinie genommen. Eine verbesserte Statistik läßt sich dann durch einen

simultanen Fit aller Wände erzielen. Als Fit-Funktion diene

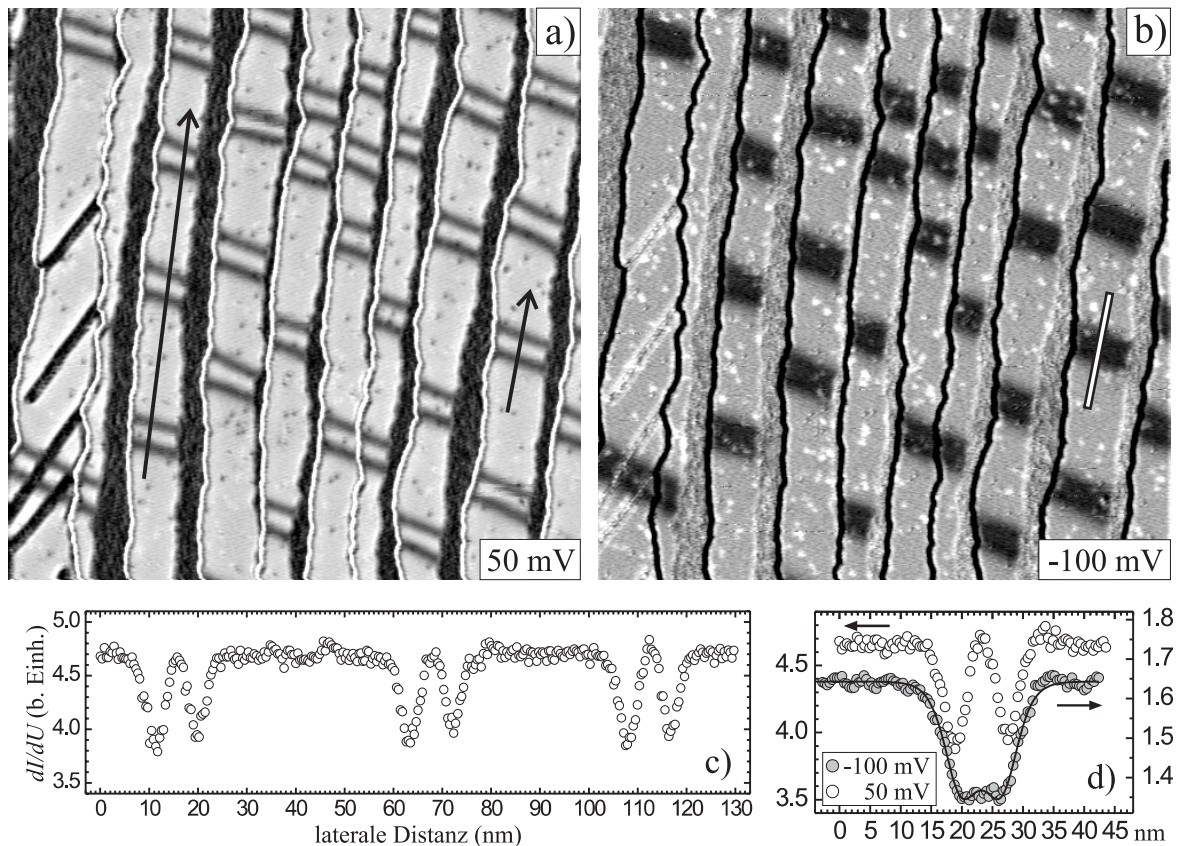
$$y = y_0 + a \cdot \left| \sin \left\{ \sum_{i=1}^5 \arcsin \left( \tanh \left( \frac{x - x_i}{w/2} \right) \right) + \pi/2 \right\} \right|^n, \quad n = 4. \quad (6.7)$$

Benutzt man zunächst  $n = 1$  – in diesem Fall beschreibt (6.7) nichts weiter als eine Summe von Standard-Domänenwandprofilen – ergibt sich eine Wandbreite von  $w = 3.4$  nm. Die Wände erscheinen also etwa halb so breit wie im magnetischen Fall (vgl. Abb. 4.7). Für  $n = 2$  und 4 ergibt sich  $w = 5.2$  nm bzw. 7.9 nm. Letzterer Wert paßt am besten zu der mit magnetischen Spitzen bestimmten Wandbreite von  $w = 7 \pm 1$  nm.<sup>13</sup> *Effektiv* folgt das Domänenwandprofil also einem  $\sin^4 \varphi$ -Gesetz. Da sich die elektronischen Eigenschaften dabei auf sehr kleiner Skala ändern, hängt die gemessene Wandbreite aber auch von der Abklinglänge der beteiligten Zustände ab und erscheint daher möglicherweise größer oder kleiner als es aufgrund der funktionellen Abhängigkeit zu erwarten ist. Eine *tatsächliche*  $\sin^2 \varphi$ -Beziehung kann daher nicht ausgeschlossen werden. Abb. 6.18(d) zeigt, daß sich der Exponent  $n$  über die Form des gemessenen Profils nicht bestimmen läßt. Die beiden Fits mit  $\sin^2 \varphi$  und  $\sin^4 \varphi$  sind praktisch identisch; allein die sich daraus ergebende Wandbreite  $w$  unterscheidet sich mit in diesem Fall  $w = 5.1$  nm und 7.6 nm für  $n = 2$  bzw. 4. Zum Vergleich ist für  $w = 7.6$  nm eine Domänenwand eingezeichnet, wie sie mit in-plane magnetisierten Spitzen abgebildet wird ( $n=1$ ). Bei  $U = -100$  mV in Abb. 6.18(b) erscheinen die Domänenwände etwas breiter als bei 50 mV. Wegen des sehr viel schwächeren Kontrastes und des größeren Einflusses der Adsorbate auf das  $dI/dU$ -Signal bei dieser Spannung, ist eine aussagekräftige Quantifizierung der Wandbreite hier leider nicht möglich.

Abbildung 6.19 zeigt denselben (leicht verschobenen) Bildbereich im senkrechten Feld von  $B = 600$  mT. Wie zu erwarten war haben sich Paare von  $180^\circ$ -Domänenwänden gebildet, und lediglich am linken Bildrand, in einem DL-Bereich mit Versetzungslinien, haben irreversible Umagnetisierungsprozesse stattgefunden. Überraschend ist eine leichte Asymmetrie in der Stärke des  $dI/dU$ -Signals benachbarter Wände: Entgegengesetzte Magnetisierungsrichtungen zeigen jetzt einen schwachen aber systematischen Unterschied. Dies wird besonders deutlich in der Schnittlinie in Abb. 6.19(c). Offensichtlich hat sich die elektronische Struktur der Spitze im Vergleich zur vorherigen Aufnahme verändert: In Abb. 6.19(b) erscheint die DL nicht mehr wie vorher dunkler als die ML, und der Einfluß der Adsorbate auf das  $dI/dU$ -Signal ist sehr viel schwächer. Außerdem ist der Kontrast zwischen Domänen und Wänden bei  $U = -100$  mV jetzt deutlich größer als in Abb. 6.18(b). Die Asymmetrie der Wände in Abb. 6.19(c) kann dadurch allerdings nicht erklärt werden. Auch eine Polarisierung der paramagnetischen W-Spitze im Magnetfeld scheidet als Ursache aus: In diesem Fall sollte man entgegengesetzt magnetisierte Domänen unterscheiden können, nicht Domänenwände.

Abb. 6.19(b) ist einer  $dI/dU$ -Karte ähnlich, die mit einer senkrecht magnetisierten Spitze aufgenommen wurde (vgl. Abb. 6.12), da auch der Bereich zwischen den Wänden, der antiparallel zum B-Feld magnetisiert ist, bei  $U = -100$  mV eine reduzierte differentielle Leitfähigkeit zeigt. Ein Vergleich der Schnittlinien in Abb. 6.19(d) macht deutlich, daß dies nicht auf eine Verbreiterung der Wände zurückzuführen ist. Die seitliche Begrenzung der Struktur ist bei  $U = -100$  mV genauso scharf wie bei 50 mV. Das  $dI/dU$ -Signal bleibt lediglich zwischen den Wänden auf einem konstanten Niveau, ganz so als wäre man bei dieser Spannung (und mit dieser Spitze) sensitiv auf die laterale *Änderung* der Magnetisierung. Möglicherweise ist die Ursache eine Streuung von Elektronen an der

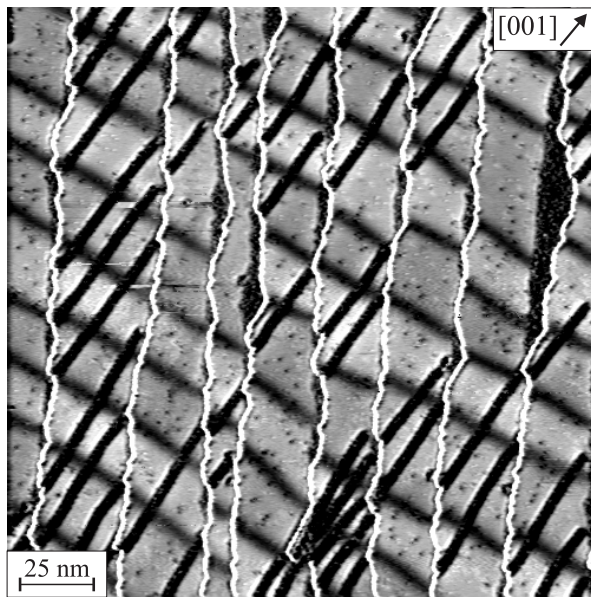
<sup>13</sup>Auch  $n = 3$  wäre mit  $w = 6.7$  nm in guter Übereinstimmung mit den magnetischen Messungen. Ein Fit an die Daten ist allerdings nur mit der geraden Funktion  $|\sin \varphi|^3$  möglich, nicht mit  $\sin^3 \varphi$ .



**Abbildung 6.19:**  $dI/dU$ -Karten im senkrechten Feld von  $B = 600$  mT, aufgenommen mit W-Spitze bei  $U = 50$  mV (a) und  $U = -100$  mV (b). Die Schnittlinie (c) zeigt eine schwache Asymmetrie der Domänenwände. Bei  $U = -100$  mV werden die einzelnen  $180^\circ$ -Wände nicht aufgelöst (vgl. (d)).

Domänenwand. In jedem Fall läßt sich durch einen Fit mit  $(d\phi/dx)^2$  (woraus sich  $w = 6.8$  nm ergibt) eine gute Übereinstimmung erzielen (vgl. Abb. 6.19(d)). Das  $dI/dU$ -Signal ist in diesem Fall also proportional zur Austauschenergiedichte.

In wenigen weiteren Fällen konnten ähnlich wie in Abb. 6.19(a) entgegengesetzte *Orientierungen* der Magnetisierung mit W-Spitzen unterschieden werden, nicht jedoch in den Wänden, sondern innerhalb der Domänen. Abb. 6.20 zeigt eine  $dI/dU$ -Karte von etwa 2 ML Fe/W(110), aufgenommen bei  $U = 50$  mV. Eine Reihe von Versetzungslinien in [001]-Orientierung erscheint wie die Domänenwände dunkel. Benachbarte, antiparallel magnetisierte Domänen zeigen einen zweistufigen Kontrast, im Gegensatz zu Abb. 6.18. Eine schwache Spinpolarisierung der Spitze kann in diesem Fall allerdings nicht vollständig ausgeschlossen werden. Möglicherweise wurde die zuvor präparierte magnetische Beschichtung beim Flashen der Spitze nicht vollständig entfernt, oder magnetisches Material wurde durch eine Kollision mit der Oberfläche an die Spitze transferiert. Letzteres ist aber eher unwahrscheinlich, da der Kontrast über viele Bilder und einen langen Zeitraum stabil blieb. Ein magnetischer Cluster an der Spitze müßte dann zum einen so groß sein, daß seine Magnetisierung bei  $T = 14$  K thermisch nicht fluktuiert, und zum anderen so klein, daß man das fehlende Material auf der Oberfläche übersieht. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, daß unter bestimmten Bedingungen die den Tunnelstrom tragende Nanospitze aufgrund der Symmetriebrechung und der starken Spin-



**Abbildung 6.20:**  $200 \times 200 \text{ nm}^2$   $dI/dU$ -Karte von  $\approx 2 \text{ ML}$  Fe/W(110), aufgenommen mit einer W-Spitze bei  $I = 0.3 \text{ nA}$  und  $U = 50 \text{ mV}$ . Im Gegensatz zu den vorherigen Aufnahmen zeigen die Domänen einen schwachen, zweistufigen Kontrast, trotz nichtmagnetischer Spitze.

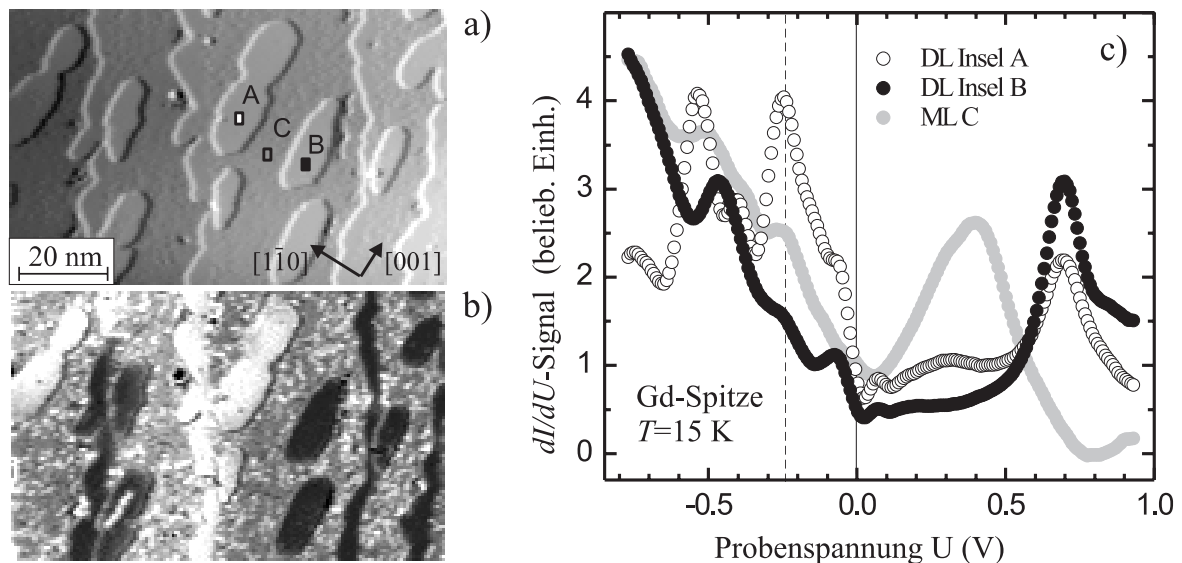
Bahn-Kopplung von Wolfram eine schwache Spinpolarisierung besitzt. Der allgemeine Trend an Oberflächen ist eine reduzierte Bandbreite und damit eine erhöhte Zustandsdichte bei  $E_F$ , wodurch Ferromagnetismus begünstigt wird (Stonerkriterium). Für W(110) ist nach Ref. [55] die partielle  $d$ -Zustandsdichte bei  $E_F$  in der Oberflächenlage etwa doppelt so hoch wie im Volumen. Dieser Effekt wird für eine Spitzenkonfiguration vermutlich noch größer sein. Es bleibt also zu klären, ob die mit W-Spitzen beobachteten Kontraste von entgegengesetzt magnetisierten Bereichen durch eine Spinpolarisierung der Spitze hervorgerufen werden, oder ob die Bandstruktur des Fe-Films nicht nur von der Richtung, sondern auch von der Orientierung der Magnetisierung abhängt. Beides wären überraschende Ergebnisse.

## 6.6 Fe DL-Inseln auf W(110)

Im Vergleich mit den zuvor untersuchten DL-Streifen ist die Nanostruktur der Fe-Filme in Inselmorphologie noch komplexer (vgl. Abb. 6.1), woraus sich aufgrund der unterschiedlichen Anisotropierichtungen – senkrecht in der DL und in-plane in der ML – ein interessantes Wechselspiel von Struktur und Magnetismus auf der nm-Skala ergibt. Von besonderem Interesse ist dabei die Abhängigkeit der Magnetisierungsrichtung von der DL-Inselgröße sowie die Frage, welche Auswirkungen ein Zusammenwachsen der Inseln nahe  $\theta = 2 \text{ ML}$  auf die Domänenstruktur des Films hat.

Abb. 6.21 zeigt die Topographie (a) und das  $dI/dU$ -Signal (b) von 1.4 ML Fe/W(110), aufgenommen mit einer senkrecht magnetisierten Gd-Spitze. Die ML erscheint bei der gewählten Spannung in (b) grau, und die DL-Bereiche – freistehende Inseln sowie schmale DL-Streifen an der Substratstufenkante – zeigen einen zweistufigen Kontrast. Wie die DL-Streifen zeigen also auch die Inseln eine große senkrechte Magnetisierungskomponente. Die Spektren (c) haben wie in Abb. 6.2 im positiven Spannungsbereich die für ML und DL charakteristischen Peaks bei  $U = +0.4 \text{ V}$  bzw.  $U = +0.69 \text{ V}$ . Der negative Bereich ist in dieser Messung von Spitzenzuständen dominiert, die eine hohe Spinpolarisation aufweisen. Diese wirken sich sogar noch schwach bei  $U = +0.3 \text{ V}$  aus, durch einen breiten Peak in Spektrum A und eine Schulter in Spektrum C (vgl. Abb. 6.2).

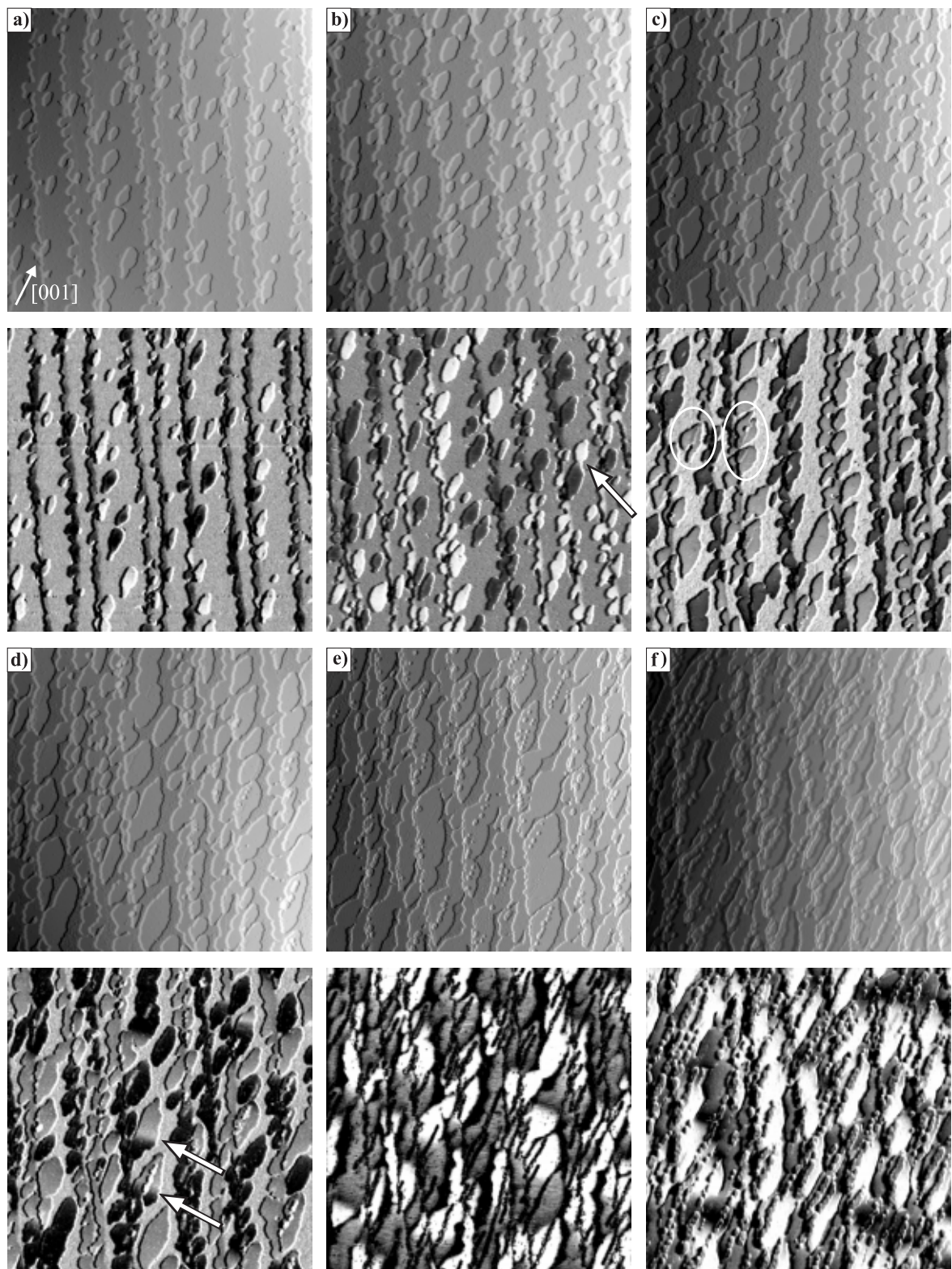




**Abbildung 6.21:** Spektroskopie von 1.4 ML Fe mit Gd-Spitze (senkrechter Kontrast), bei  $U_0 = 0.9$  V,  $I_0 = 1$  nA und  $T = 15$  K. **a)** Topographie, teilweise differenziert. **b)**  $dI/dU$ -Signal bei  $U = -0.25$  V: Die ML erscheint grau und die DL zeigt einen zweistufigen Kontrast. **c)** Gemittelte Spektren an den in (a) bezeichneten Stellen.

### 6.6.1 Bedeckungsabhängigkeit der Domänenstruktur

Abbildung 6.22 zeigt eine Serie von Konstantstrombildern und simultan aufgenommenen  $dI/dU$ -Karten im Bedeckungsbereich von 1.2 bis 2.1 ML Fe, aufgenommen mit unterschiedlichen Gd-Spitzen. Die Bias-Spannung wurde jeweils angepaßt, um einen optimalen Kontrast der DL-Inseln zu erzielen. Aufgrund des unterschiedlichen Meßmodus im Vergleich zu vollen Spektroskopiekurven (vgl. Kap. 4.3) und der Variation der elektronischen Eigenschaften der Spitze, sind dies nicht unbedingt Spannungen, bei denen auch in Abb. 6.21(c) ein großer Kontrast zu sehen ist. Bei 1.2 ML (a) zeigen die größeren Inseln einen zweistufigen Kontrast, was einer senkrechten antiparallelen Verteilung entspricht. Kleinere Inseln zeigen dagegen ein mittleres Signal. Dies ist eine Folge ihrer in-plane-Magnetisierung und wird in Kap. 6.6.2 diskutiert. Auch bei 1.3 ML (b) sind alle Inseln in einem eindomänigen Zustand, bis auf eine Ausnahme (siehe Pfeil): Hier sind zwei Inseln zusammengewachsen und haben so eine Einschnürung gebildet, in der sich eine Domänenwand befindet. Die Wandenergie ist hier wegen der Kürze der Wand minimal. Im Vergleich zu (a) ist die Magnetisierungsverteilung der Inseln nicht mehr zufällig. Es haben sich Ketten von parallel magnetisierten Inseln gebildet, die entlang der Stufenkanten angeordnet sind. Dies ist die Folge einer Austauschkopplung zu den DL-Streifen an den Substratstufenkanten und wurde bereits zwischen DL-Streifen in Abb. 6.2 beobachtet. Diese Art der Kopplung ist bei 1.4 ML (c) noch ausgeprägter. Benachbarte Inselketten sind hier außerdem wie die DL-Streifen antiparallel ausgerichtet, wodurch die Streufeldenergie minimiert wird. Ferner sind in (c) bereits einige Inseln mit Versetzungslinien zu sehen (siehe Kreise), ohne daß dabei eine Änderung ihrer Magnetisierungsrichtung beobachtbar ist. Bei 1.6 ML (d) hat bereits das Zusammenwachsen der Inseln begonnen und es finden sich auch ohne Einschnürungen Domänenwände in Inseln, die länger sind als etwa 30 nm. Zwei Domänenwände sind mit Pfeilen markiert. Die untere kreuzt eine Versetzungslinie, auf der sich bereits kleine Bereiche dritter Lage gebildet haben. Bei 1.8 ML (e) ist die Vernetzung der Inseln weiter fortgeschritten



**Abbildung 6.22:** Topographie und  $dI/dU$ -Karten von 1.2–2.1 ML Fe in Inselmorphologie, abgebildet mit Gd-Spitzen (senkrechter Kontrast). **a)** 1.2 ML,  $U = -0.4$  V. **b)** 1.3 ML,  $U = -0.8$  V. **c)** 1.4 ML,  $U = -0.3$  V. **d)** 1.6 ML,  $U = +0.7$  V. **e)** 1.8 ML,  $U = +0.7$  V. **f)** 2.1 ML,  $U = -1.0$  V. (alle Bilder  $200 \times 200 \text{ nm}^2$ )

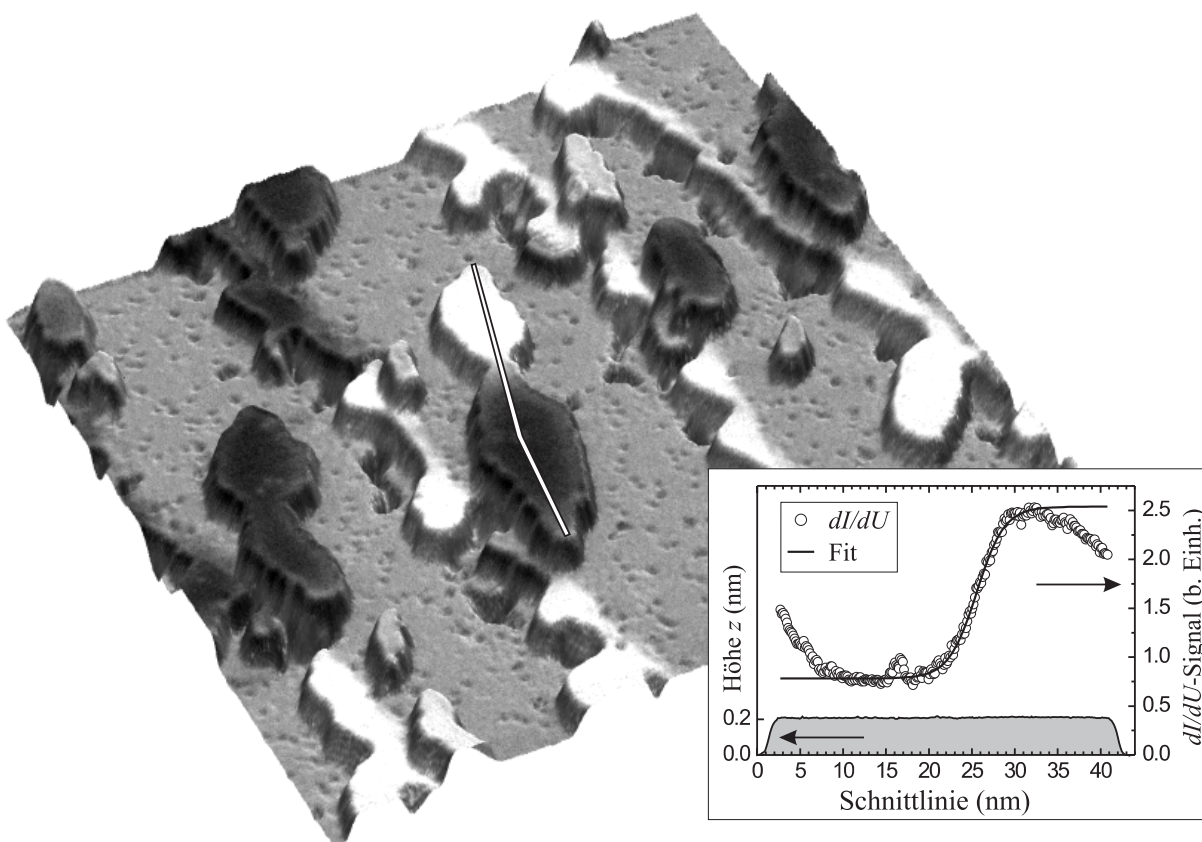
und die Dichte der Versetzungslinien deutlich angewachsen. Diese, sowie die ML und kleine Bereiche dritter Lage erscheinen in der  $dI/dU$ -Karte schwarz. Trotzdem gibt es ausschließlich senkrechte Domänen, die entweder durch Domänenwände oder aufgrund der Struktur begrenzt sind. Diese Ordnung wird auch bei 2.1 ML (f) aufrecht erhalten. Die zweite Lage ist hier nahezu geschlossen, bis auf schmale Gräben, die ungefähr entlang der Stufenkanten orientiert sind. Auch die Bereiche dritter Lage sind merklich angewachsen. Die Domänenbreite ist in  $x$ -Richtung von der Terrassenbreite dominiert, beträgt also etwa 25 nm.

Die senkrechte Magnetisierung der DL-Inseln [52] konnte also bestätigt werden. Entgegen den Ergebnissen der Refs. [50, 51] wird diese sogar für Bedeckungen um  $\theta = 2$  ML aufrechterhalten. Dies ist vermutlich eine Folge einer erhöhten senkrechten Anisotropie bei tiefen Temperaturen ( $T = 15$  K) im Vergleich zu den Messungen bei  $T = 115$  K bzw. 140 K. Die Vermutung, daß die bei höheren Bedeckungen einsetzende teilweise Relaxation des Films eine Reorientierung nach in-plane bewirkt [50, 52] kann – zumindest für tiefe Temperaturen – nicht bestätigt werden. Es wurde weder ein Verschwinden des senkrechten Signals noch eine lokale Wechselwirkung von Domänenwänden mit Versetzungslinien festgestellt, in Übereinstimmung mit den Ergebnissen für die DL-Streifen in Kap. 6.2.

### 6.6.2 Kopplung zur umgebenden Monolage

Abbildung 6.23 zeigt eine vergrößerte Aufnahme der Insel aus Abb. 6.22(b), sowie das  $dI/dU$ - und  $z$ -Signal entlang der eingezeichneten Linie. Der Fit einer Tanh-Funktion an das  $dI/dU$ -Signal ergibt eine Wandbreite von 6.5 nm, d.h. die Einschnürung, die eine Breite von nur etwa 2 nm besitzt, hat auf die Wandbreite keinen signifikanten Einfluß. Da die Domänenwand in der Topographie nicht zu sehen ist, läßt sich in diesem Fall aus der Asymmetrie der Signalstärken die effektive Spinpolarisation des Tunnelübergangs berechnen:  $P_{\text{eff}}(-0.8 \text{ V}) = 52\%$ . Der Rückgang des Signals in Richtung eines mittleren Wertes an beiden Enden der Insel entspricht einer Rotation der Magnetisierung in die Ebene. Dieser Effekt ist wegen der schmal auslaufenden Enden bei dieser Insel besonders ausgeprägt. Eine ähnliche Beobachtung macht man bei den kleinen Inseln. Auch diese zeigen mittlere Signalstärken, im Gegensatz zu dem zweistufigen Schwarz-Weiß-Kontrast der größeren Inseln. Zusätzlich gibt es einen rein elektronischen Effekt, der die Leitfähigkeit der Inselränder etwas erhöht. Die dunklen Inseln haben daher einen helleren Rand, der nicht allein magnetische Ursachen hat, und der Verlauf des im Inset gezeigten  $dI/dU$ -Signals ist zu den beiden Seiten hin nicht exakt symmetrisch.

Bereits WEBER *et al.* [52] haben vermutet, daß es eine kritische Inselgröße geben muß, unterhalb der die Magnetisierung der Insel aufgrund der Austauschkopplung zur umgebenden in-plane magnetisierten ML trotz senkrechter Anisotropie vollständig in der Ebene bleibt. Um diese Aussage quantitativ zu überprüfen wurde für etwa 140 frei stehende Inseln der in Abb. 6.22(b) gezeigten Probe mit  $\theta = 1.3$  ML deren mittleres  $dI/dU$ -Signal bestimmt. Dieses ist in Abb. 6.24(a) gezeigt, aufgetragen über die Inselbreite entlang  $[1\bar{1}0]$  (schmale Seite). Dabei entspricht jedes graue Kästchen einer Insel, und der Fehlerbalken kennzeichnet die Standardabweichung über der Inseloberfläche. Bei Breiten größer als 4 nm ist ein reiner zweistufiger, senkrechter Kontrast zu sehen, der zu kleinen Inseln hin zwischen 2 und 3 nm verschwindet und dann im Rahmen des Meßfehlers auf einem mittleren Niveau bleibt. Dieses weist wegen der erhöhten Leitfähigkeit des Inselrandes einen kleinen Offset auf. Die kritische Inselbreite, unterhalb der die DL-Inseln vollständig in der Ebene magnetisiert sind, ist also 2–3 nm. Eine alternative Interpretation, daß der Kontrast durch schnelle thermische Fluktuation der Magnetisierungsrichtung verschwindet, kann ausgeschlossen werden. In diesem Fall sollte die Schaltrate mit zunehmender Inselgröße abnehmen, und es wären Inseln beobachtbar, die innerhalb



**Abbildung 6.23:**  $75 \times 75 \text{ nm}^2$  Vergrößerung der Insel aus Abb. 6.22(b) ( $I = 0.3 \text{ nA}$ ,  $U = -0.8 \text{ V}$ ), sowie das  $dI/dU$ - und  $z$ -Signal entlang der eingezeichneten Linie. Der Fit ergibt eine Wandbreite von  $6.5 \text{ nm}$ .

eines Bildes oder von einem Bild zum nächsten ihre Magnetisierung ändern, was nicht der Fall ist.

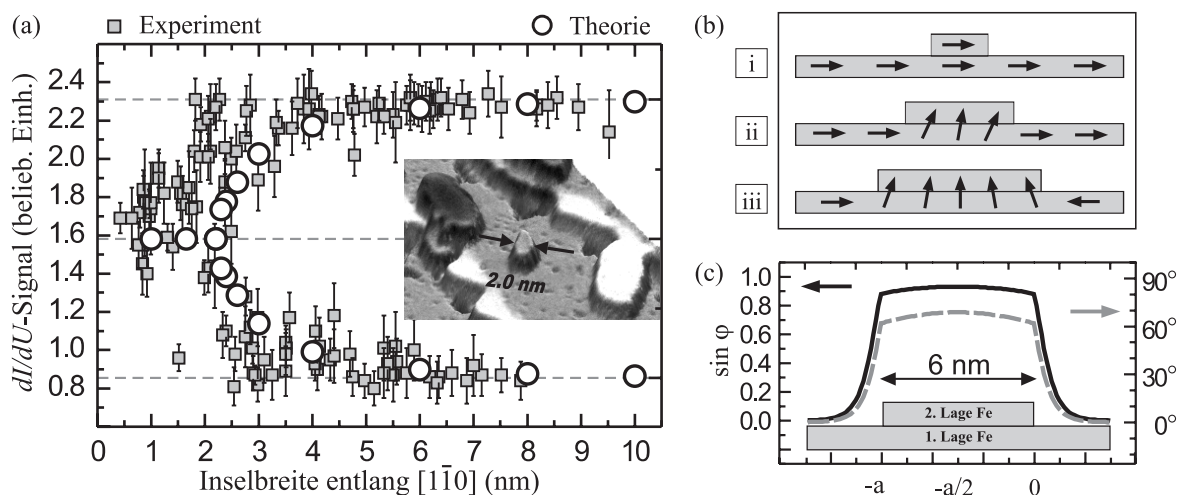
Um den größenabhängigen Reorientierungsübergang genauer zu untersuchen, habe ich in Anlehnung an Rechnungen von ELMERS [69] eine einfache 1D mikromagnetische Berechnung durchgeführt, ähnlich der in Kap. 6.3.2 für die  $360^\circ$ -Wände. Unter Vernachlässigung der endlichen Inselgröße entlang  $[001]$  soll die eindimensionale Funktion der Magnetisierungsrichtung  $\varphi(x)$  bestimmt werden, die das Energieintegral über ein von ML begrenztes einzelnes DL-Gebiet der Breite  $a$  minimiert. Definiert man  $\varphi = 0$  als in-plane-Richtung und betrachtet ein DL-Gebiet zwischen  $x = -a$  und  $0$  (vgl. Abb. 6.24(c)), läßt sich die Energie pro Längeneinheit in  $y$ -Richtung in der folgenden Form schreiben:

$$\Gamma = 4t \int_{-a/2}^0 A_{\text{DL}} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + K_{\text{DL}} \cos^2 \varphi dx + 2t \int_0^\infty A_{\text{ML}} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + K_{\text{ML}} \sin^2 \varphi dx. \quad (6.8)$$

Dabei ist  $t = 2 \text{ \AA}$  die Schichtdicke,  $A$  die Austausch- und  $K$  die effektive Anisotropiekonstante. Als Ansatz für  $\varphi(x)$  wurden für DL bzw. ML die Funktionen

$$\varphi_{\text{DL}}(x) = \cos\left(\frac{x+a/2}{l_1}\right) + c_1, \quad \varphi_{\text{ML}}(x) = c_2 \cdot \arccos\left(\tanh\left(\frac{x}{l_2}\right)\right) \quad (6.9)$$

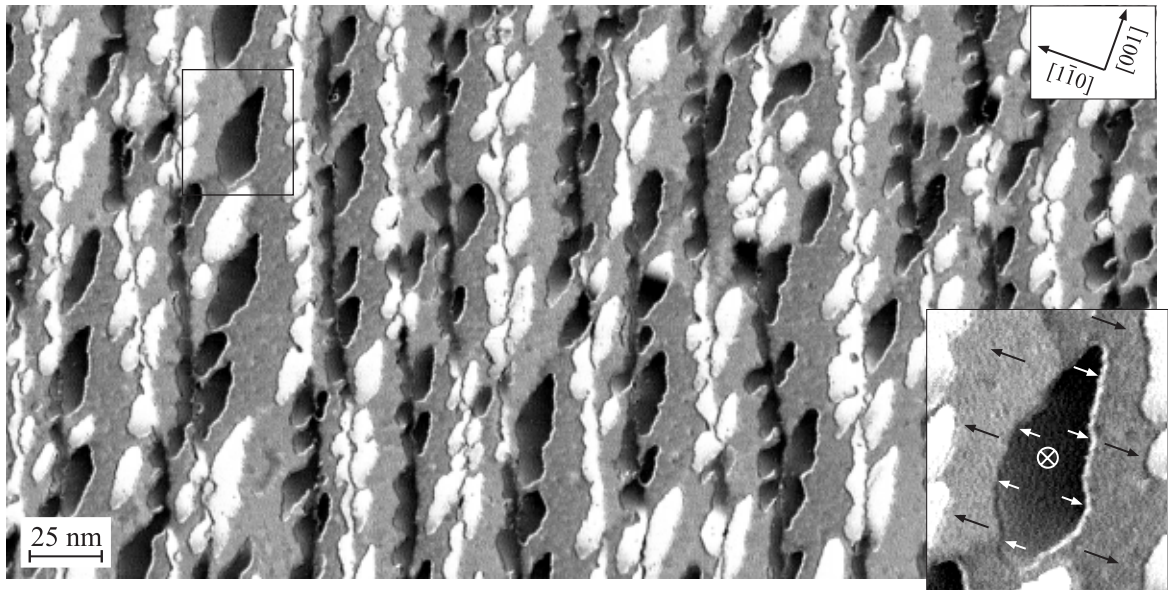
gewählt. Dabei lassen sich 2 der 4 freien Parameter durch Nebenbedingungen eliminieren. Diese sind  $\varphi_{\text{ML}}(0) = \varphi_{\text{DL}}(0)$  und  $\varphi'_{\text{ML}}(0) = 2A_{\text{DL}}/A_{\text{ML}} \cdot \varphi'_{\text{DL}}(0)$  und implizit bereits  $\varphi'_{\text{DL}}(-a/2) = 0$  und



**Abbildung 6.24:** a) Mittleres  $dI/dU$ -Signal der Inseln, aufgetragen über deren Breite entlang  $[1\bar{1}0]$  (graue Kästchen), und ein Vergleich mit 1D-Theorie. b) Schematische Darstellung der Kopplung zur angrenzenden ML. c) Berechneter Verlauf von  $\varphi(x)$  und  $\sin \varphi(x)$  für  $a = 6$  nm.

$\varphi'_{\text{ML}}(\infty) = 0$ . Die zweite Bedingung sorgt für ein stetiges Drehmoment an der Grenzfläche zwischen ML und DL, wobei sich der Faktor 2 aus dem Verhältnis der Schichtdicken ergibt [69]. Durch die Wahl der letzten beiden Nebenbedingungen ist hier nur der Fall einer *parallelen* Magnetisierungsrichtung in den beiden begrenzenden ML-Bereichen betrachtet, also die Fälle (i) und (ii) in Abb. 6.24(b). Als Anisotropiekonstanten wurden die in Ref. [70] experimentell bestimmten Werte  $K_{\text{ML}} = 5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$  und  $K_{\text{DL}} = 1 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$  verwendet.  $A_{\text{DL}} = 1.25 \cdot 10^{-11} \text{ J/m}$  folgt dann aus der Domänenwandbreite  $w_{\text{DL}} = 2\sqrt{A_{\text{DL}}/K_{\text{DL}}} = 7 \text{ nm}$ , und  $A_{\text{ML}} = 1.25 \cdot 10^{-12} \text{ J/m}$  wurde als Fitparameter an die Daten benutzt. Abb. 6.24(a) zeigt den Sinus der Magnetisierungsrichtung in der Mitte des DL-Gebietes,  $\sin(\varphi(-a/2))$ , aufgetragen über die Breite  $a$  als weiße Kreise, wobei die gestrichelten Linien 0 und  $\pm 1$  bezeichnen. Mit den benutzten magnetischen Parametern ist die kritische Breite für vollständige in-plane-Magnetisierung der DL  $a_c = 2.4 \text{ nm}$ , in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Interessant sind die Abweichungen um  $a = 2 \text{ nm}$ : Die nahezu senkrechten Signale einiger kleiner Inseln sind hier wahrscheinlich Folge einer Domänenwand in der ML, was dem Fall (iii) in Abb. 6.24(b) entspricht. Abbildung 6.24(c) zeigt exemplarisch den berechneten Verlauf von  $\varphi(x)$  für  $a = 6 \text{ nm}$ . Die schwarze Kurve,  $\sin(\varphi(x))$ , entspricht dem, was mit einer senkrecht magnetisierten Spitze im Experiment zu erwarten ist. Es besteht insofern Übereinstimmung, als daß das  $dI/dU$ -Signal auf den Inseln relativ flach erscheint, und in der ML kein senkrechtes Signal zu beobachten ist. Die Rotation der Magnetisierung von in-plane in der ML zu nahezu senkrecht in der DL findet also in einem sehr kleinen Übergangsbereich statt.

Da die Fälle (ii) und (iii) mit senkrecht magnetisierten Spitzen praktisch nicht zu unterscheiden sind, ist in Abb. 6.25 eine Aufnahme gezeigt, bei der die Magnetisierung der Spitze offensichtlich auch eine in-plane-Komponente besitzt. Diese  $dI/dU$ -Karte ist das Äquivalent zu Abb. 6.11 in Inselmorphologie. Es ist sowohl ein senkrechter Schwarz-Weiß-Kontrast in den DL-Bereichen als auch ein etwas schwächerer Grau-Kontrast in der ML zu sehen, der Domänen entgegengesetzter in-plane-Magnetisierung entspringt. Dabei ist in der Regel die helle DL rechts von einer hellen und links von einer dunklen ML begrenzt, die dunkle DL rechts von einer dunklen und links von einer hellen ML. Dies entspricht einer definierten Rotation in  $x$ -Richtung von  $\uparrow \rightarrow \downarrow \leftarrow \uparrow \rightarrow \downarrow \leftarrow \dots$ , wie es



**Abbildung 6.25:**  $dI/dU$ -Karte von 1.4 ML Fe/W(110), aufgenommen mit schräg magnetisierter Gd-Spitze. Kleines Bild: Kennzeichnung der in-plane Komponenten der Magnetisierung. ( $I = 0.3$  nA,  $U = -0.5$  V, Bildbereich:  $400 \times 200$  nm<sup>2</sup>)

bereits bei den DL-Streifen in Abb. 6.11 zu beobachten war. Zusätzlich ist auf den DL-Inseln ein Signalgradient zu erkennen, d.h. die Magnetisierung der Inseln entspricht Fall (iii) in Abb. 6.24(b); im Fall (ii) wäre das  $dI/dU$ -Signal zu den Rändern hin symmetrisch. Die Vergrößerung in Abb. 6.25 zeigt exemplarisch die magnetische Konfiguration, wobei die Pfeile auf der Insel schematisch die in-plane-Komponente der Magnetisierung kennzeichnen.

## Kapitel 7

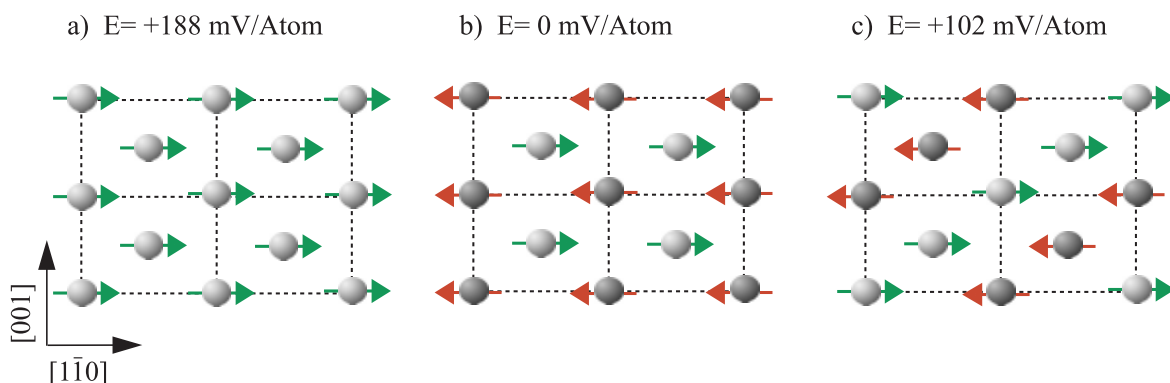
# 2D Antiferromagnetismus: 1 ML Mn/W(110)

Theoretisch wurde die Frage, ob spontane magnetische Ordnung auch in reduzierten Dimensionen existieren kann, bereits 1930 von BLOCH [71] und 1966 von MERMIN und WAGNER [72] untersucht. Innerhalb des isotropen Heisenbergmodells ergab sich dabei, daß weder für eine eindimensionale (1D) Kette noch für eine zweidimensionale (2D) Ebene langreichweitige ferro- oder antiferromagnetische Ordnung bei  $T > 0$  existiert. Während 2D-ferromagnetische Ordnung mittlerweile experimentell nachgewiesen wurde – eine Folge der in jedem realen magnetischen System vorhandenen Anisotropie – blieb der experimentelle Nachweis für den 2D-antiferromagnetischen Fall bisher aus.

Die Konzeption des hier vorzustellenden Experiments geht auf eine mehr als 10 Jahre alte Vorhersage von BLÜGEL *et al.* für 2D antiferromagnetische Monolagen (ML) V, Cr und Mn auf Pd(100) [73] und Edelmetalloberflächen [74] zurück. Mit *ab initio* Berechnungen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie konnte gezeigt werden, daß in diesen Monolagen auf Ag(001) nächste Nachbar-Atome antiferromagnetisch koppeln, woraus sich eine schachbrettartige Anordnung der atomaren magnetischen Momente ergibt. Dabei ist die Hybridisierung mit dem Edelmetallsubstrat gering, d.h. die magnetische Monolage verhält sich im wesentlichen wie eine frei schwebende Schicht.

Die experimentelle Bestätigung dieser Ergebnisse stieß dagegen auf eine Reihe erheblicher Schwierigkeiten: (i) Zum einen ist die geringe Materialmenge von nur einer magnetischen atomaren Lage für Beugungsexperimente wie Neutronenstreuung ein schwer lösbares Problem. (ii) Zum anderen kommt es wegen der geringeren freien Oberflächenenergie von Edelmetallen im Vergleich zu 3d-Übergangsmetallen bereits bei  $RT$  zur Interdiffusion, d.h. eine pseudomorphe magnetische Lage kann gar nicht erst präpariert werden. (iii) Ferner ist die Néel-Temperatur unbekannt und liegt vermutlich weit unterhalb  $RT$ , was die Arbeit bei tiefen Temperaturen erfordert. (iv) Die größte Schwierigkeit ist jedoch die erforderliche laterale Auflösung. Antiferromagnetische Materialien besitzen keine Nettomagnetisierung: Abbildungs- und Meßverfahren, die über einen Bereich größer als ein Atom integrieren, sind daher im allgemeinen unbrauchbar.

Der naheliegende Schritt war daher die Untersuchung eines solchen Systems mit SP-STM bei tiefen Temperaturen. Neben der Überprüfung der theoretischen Vorhersagen stellt eine antiferromagnetische Oberfläche zugleich einen idealen Standard zur Bestimmung der lateralen magnetischen Auflösung dieses Verfahrens dar. Das Problem der Interdiffusion konnte durch die Wahl eines stabileren Substrats, W(110), gelöst werden. Experimentell wurde für Mangan (Mn) auf W(110) pseudomorphes Wachstum bei  $RT$  für lokale Bedeckungen von bis zu drei atomaren Lagen nachgewie-



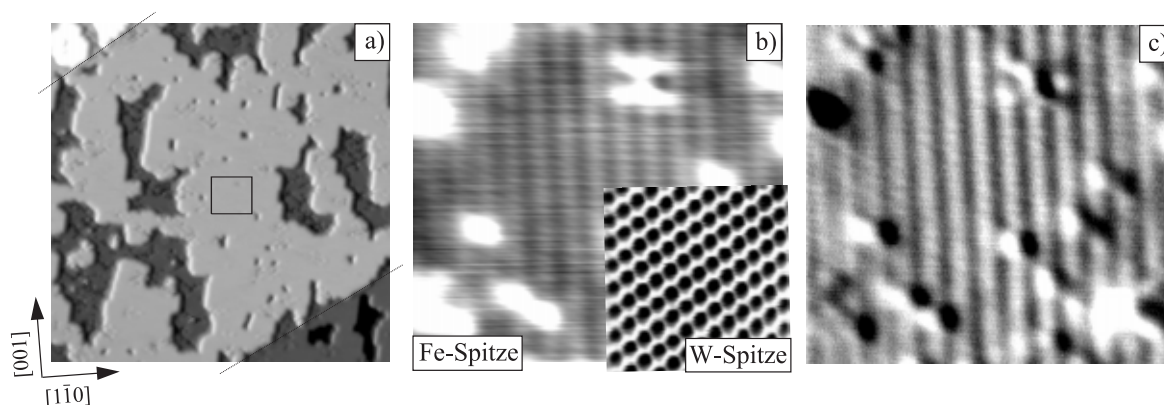
**Abbildung 7.1:** Drei mögliche magnetische Konfigurationen der Mn-Monolage auf W(110): ferromagnetisch (a),  $c(2 \times 2)$ -antiferromagnetisch (b) und  $p(2 \times 1)$ -antiferromagnetisch (c), sowie ihre Gesamtenergien relativ zur  $c(2 \times 2)$ -AF-Konfiguration.

sen [75]. Die *ab initio* Berechnungen für das System von 1 ML Mn/W(110) wurden von S. HEINZE durchgeführt [37, 76], wobei drei unterschiedliche magnetische Konfigurationen verglichen wurden: eine ferromagnetische (FM) und zwei reihenweise antiferromagnetische,  $c(2 \times 2)$ -AF und  $p(2 \times 1)$ -AF (vgl. Abb. 7.1). Die  $c(2 \times 2)$ -AF-Konfiguration (b) erwies sich dabei als die mit der geringsten Gesamtenergie, und ist daher die bei tiefen Temperaturen zu erwartende magnetische Konfiguration. Ferner ergab sich, daß (i) die Mn-Atome ein großes magnetisches Moment von  $3.32 \mu_B$  besitzen und (ii) die magnetisch leichte Achse in der Ebene entlang  $[1\bar{1}0]$  verläuft. (iii) Im Rahmen des TH-Modells sollte bei der Messung mit magnetischer Spitze die Nichtäquivalenz der in  $[001]$ -Richtung verlaufenden benachbarten atomaren Reihen (vgl. Abb. 7.1(b)) das Konstantstrombild dominieren, mit einer Korrugation von etwa  $8 \text{ pm}^1$  entlang  $[1\bar{1}0]$  [76] und der doppelten strukturellen Periode. Die Ursache dafür, daß auf der atomaren Skala die größte Periode das Topographiebild dominiert, ist das mit zunehmendem reziproken Gittervektor exponentielle Abklingen der Wellenfunktionen ins Vakuum [20, 37].

Abb. 7.2(a) zeigt ein Übersichtsbild von 0.8 ML Mn/W(110), aufgenommen mit einer Fe-Spitze bei  $T = 16 \text{ K}$ . Die hellgrauen Bereiche entsprechen dabei einer lokalen Bedeckung von 1 ML. Die Vergrößerung (b) zeigt das erwartete Streifenmuster und eine Anzahl hell erscheinender atomarer Defekte. Der direkte Vergleich mit einer identisch präparierten Probe, gemessen mit einer nicht-magnetischen Wolframspitze (kleines Bild) zeigt, daß die beobachtete Struktur tatsächlich magnetischen Ursprungs ist und auch die erwartete doppelte Periode der atomaren Reihen aufweist. Durch Differenzieren des Bildes (Abb. 7.2(c)) kann der Kontrast verbessert werden. Abb. 7.3 zeigt weitere Aufnahmen der Mn-ML, gemessen mit drei unterschiedlichen Spitzen, sowie einzelne Schnittlinien entlang  $[1\bar{1}0]$ . Die Korrugation liegt im Fall der W-Spitze mit  $\approx 25 \text{ pm}$  (Abb. 7.3(a)) etwa eine Größenordnung über der mit magnetischen Spitzen gemessenen, und kann innerhalb des TH-Modells (s-artige Spitze) nur qualitativ erklärt werden. Die mit der in-plane-sensitiven Fe-Spitze gemessene Korrugation von  $3\text{--}4 \text{ pm}$  (Abb. 7.3(b)) ist dagegen in guter Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage von  $\Delta z = 8 \text{ pm}$ , insbesondere wenn man beachtet, daß der Azimuthwinkel der Spitzenmagnetisierung im Experiment unbekannt ist, während theoretisch der kollineare Fall (maximaler Kontrast) angenommen wurde. Der deutlich kleinere Wert von  $1\text{--}2 \text{ pm}$  bei der Messung mit einer (nahezu) senkrecht magnetisierten Gd-Spitze (Abb. 7.3(c)) stützt dabei das theoretische Ergebnis ei-

<sup>1</sup>Angenommen wurde eine Spinpolarisation der Spitze von 40%.





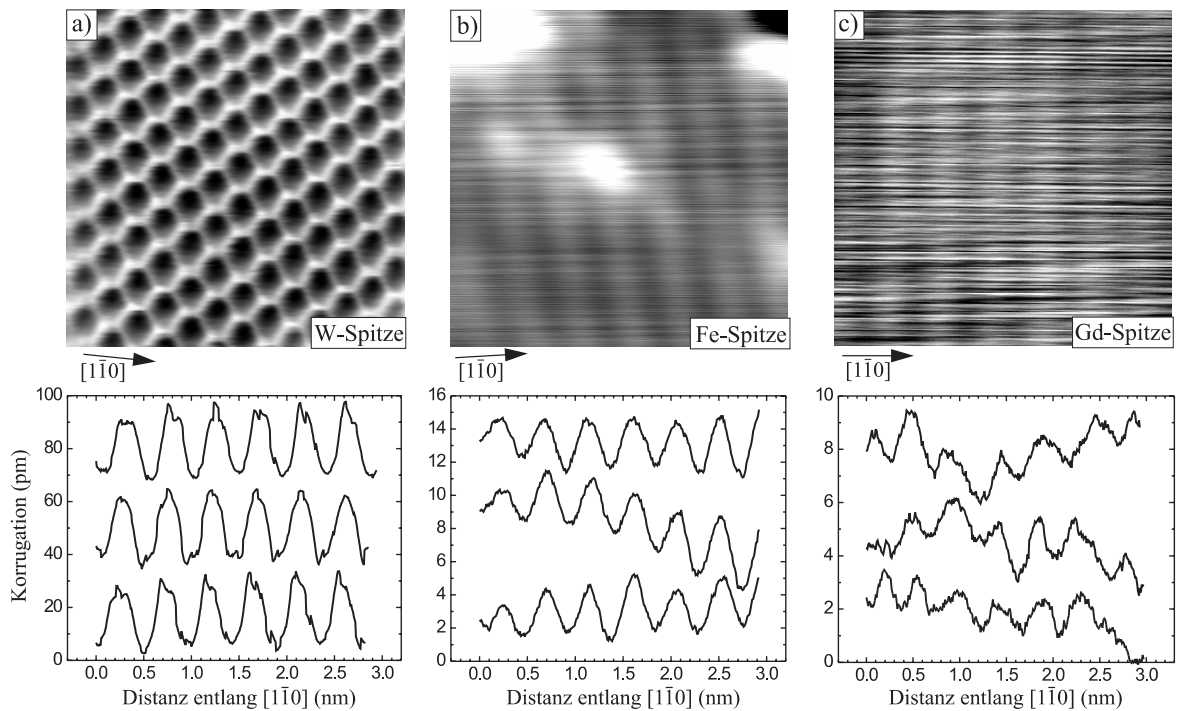
**Abbildung 7.2:** a)  $50 \times 50 \text{ nm}^2$  Konstantstrombild (teilweise differenziert) von 0.8 ML Mn/W(110), aufgenommen mit einer Fe-Spitze bei  $U = -0.5 \text{ V}$ ,  $I = 0.5 \text{ nA}$  und  $T = 16 \text{ K}$ . Zwei Substratstufenkanten wurden markiert. b)  $6 \times 5.5 \text{ nm}^2$  Vergrößerung des in (a) markierten Bereiches ( $U = -3 \text{ mV}$ ,  $I = 40 \text{ nA}$ ). Ausschnitt ( $3 \times 3 \text{ nm}^2$ ): Mn ML, aufgenommen mit W-Spitze bei  $U = -2 \text{ mV}$ ,  $I = 40 \text{ nA}$ . c) Aufnahme aus (b), total differenziert.

ner in-plane-Anisotropie der Mn-ML. In diesem Fall ist von einer kleinen in-plane-Komponente der Spitzenmagnetisierung auszugehen, also von einer leichten Verkippung der Magnetisierung aus der Senkrechten. Daß es hier zu Abweichungen von den idealen Richtungen kommen kann, wurde ja bereits auf ferromagnetischen Proben beobachtet.

Das niederfrequente  $z$ -Rauschen des Mikroskops beträgt in dieser Messung etwa  $2 \text{ pm}$ , was sich insbesondere in der langsamen  $y$ -Scanrichtung bemerkbar macht. Da die Schnittlinien in (a) im Gegensatz zu (b) und (c) über viele (in  $x$ -Richtung verlaufende) Scanlinien gehen, sind diese scheinbar mit mehr Rauschen behaftet als die in (b), obwohl das Meßsignal in (b) viel schwächer ist. Insbesondere die Messung mit Gd-Spitze ist an der Auflösungsgrenze des Mikroskops im derzeitigen Versuchsaufbau durchgeführt worden: Das Meßsignal hebt sich nur schwach vom Hintergrundrauschen ab. Das Mikroskop ist jedoch auch nicht für extrem hohe Auflösung optimiert worden, sondern stellt einen Kompromiß zwischen einer möglichst hohen Auflösung und einem möglichst großen maximalen Scanbereich dar. Das physikalische Limit ist hier also keinesfalls erreicht, woraus sich ein gewisser Spielraum für zukünftige Messungen ergibt.

Ich möchte noch einmal auf den Unterschied zwischen magnetischer und nichtmagnetischer Messung zurückkommen, und auf deren Übereinstimmung mit der Theorie. Entgegen den Ergebnissen von HOFER *et al.* in Ref. [77]<sup>2</sup> erreicht man für die Korrugation der magnetischen Überstruktur im Rahmen des TH-Modells, d.h. unter Vernachlässigung von Spitze-Probe-Wechselwirkungen und unter der Annahme  $s$ -artiger elektronischer Zustände der Spitze, eine exzellente Übereinstimmung mit dem Experiment. Im nichtmagnetischen Fall wurden dagegen  $\approx 25 \text{ pm}$  gemessen, während die Theorie nur etwa  $1.5 \text{ pm}$  vorhersagt [78]. Dieses Defizit des TH-Modells ist wohlbekannt. Für die systematische Unterschätzung der Korrugation auf dichtgepackten Metalloberflächen gibt es verschiedene Erklärungsansätze: Eine bessere quantitative Übereinstimmung erreicht man unter der Annahme von höher lokalisierten Spitzen-Orbitalen wie z.B.  $d_{z^2}$ -artigen Orbitalen [25]. Ande-

<sup>2</sup>Trotz des wichtigen Versuchs über das TH-Modell hinauszugehen und die elektronische Struktur der magnetischen Spitze in die *ab initio* Berechnungen zu implementieren, bleibt Ref. [77] weit hinter den Ergebnissen von Ref. [37] zurück: Es kann weder der magnetische Grundzustand noch die magnetische Anisotropierichtung bestimmt werden, und die berechnete Korrugation von  $\Delta z = 18 \text{ pm}$  ist in weniger guter Übereinstimmung mit dem Experiment, als die von HEINZE *et al.* berechneten  $8 \text{ pm}$ .



**Abbildung 7.3:**  $3 \times 3 \text{ nm}^2$  Konstantstrombilder der ML Mn/W(110), aufgenommen mit unterschiedlichen Spitzen bei  $T=16 \text{ K}$ , sowie typische Schnittlinien entlang  $[1\bar{1}0]$ . **a)** W-Spitze ( $U=-2 \text{ mV}$ ,  $I=40 \text{ nA}$ ), Korrugation:  $\approx 25 \text{ pm}$ . **b)** Fe-Spitze ( $U=-6 \text{ mV}$ ,  $I=40 \text{ nA}$ ), Korrugation:  $3\text{--}4 \text{ pm}$ . **c)** Gd-Spitze ( $U=-10 \text{ mV}$ ,  $I=10 \text{ nA}$ ), Korrugation:  $1\text{--}2 \text{ pm}$ .

re Modelle gehen davon aus, daß bei den kleinen Tunnelabständen, bei denen atomare Auflösung in der Regel erzielt wird, die Annahme einer vernachlässigbaren Wechselwirkung zwischen Spitze und Oberfläche nicht mehr richtig ist. CIRACI *et al.* [79] führen für das System Al-Spitze–Al(111)-Oberfläche Korrugungsverstärkungen auf eine elektronische Modifikation der Oberfläche durch die Spitze zurück und schließen elastische Deformationen als Ursache aus, während HOFER *et al.* [80] für eine W-Spitze auf Au(111) zu dem entgegengesetzten Schluß kommen, und atomare Deformationen der Oberfläche und Spitze als Hauptursache identifizieren. Experimentell wurde ferner gezeigt, daß durch das Aufnehmen einzelner Adsorbate an das Spitzenende, z.B. CO oder Xe [81], eine deutliche Kontrastverbesserung erzielt werden kann. In den Abbildungen 7.2(b) und 7.3(b) und (c) wurde nun “lediglich” die magnetische Überstruktur abgebildet, ohne daß die einzelnen Atome der Oberfläche zu sehen sind. Da es im nichtmagnetischen Fall (W-Spitze) möglich ist, mehr zu sehen als das TH-Modell eigentlich erlaubt, sollte dies prinzipiell auch mit einer geeigneten magnetischen Spitze möglich sein. In diesem Fall hätte man dann echte atomare magnetische Auflösung.

# Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befaßte sich mit spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie an magnetischen Nanostrukturen und ultradünnen Filmen bei tiefen Temperaturen und im Ultrahochvakuum. Dabei wurden unterschiedliche Spitzenmaterialien eingesetzt und deren Eigenschaften untersucht.

Einer Einführung in die Grundlagen des Magnetismus und der mikromagnetischen Theorie in Kapitel 2, sowie in die Theorie der Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie in Kapitel 3, folgte in Kapitel 4 eine Übersicht über vier unterschiedliche Meßmodi, die die Abbildung magnetischer Strukturen einer Oberfläche mit dem STM erlauben. Es zeigte sich, daß quantitative Aussagen über die Spinpolarisation der Oberfläche nur unter speziellen Voraussetzungen möglich sind. Dabei ist das Hauptproblem, daß der Tunnelabstand – anders als bei planaren Tunnelübergängen – indirekt durch den (spinpolarisierten) Tunnelstrom geregelt wird, und daher über entgegengesetzt magnetisierten Bereichen in der Regel nicht gleich ist.

Nach einer kurzen Darstellung des experimentellen Aufbaus und der für SP-STM notwendigen technischen Voraussetzungen in Kapitel 5, folgte in Kapitel 6 die Darstellung der Untersuchungen an 1–3 ML Fe/W(110). In Streifenmorphologie zeigten diese Filme mit zunehmender Bedeckung einen Übergang von einer antiparallelen Kopplung benachbarter DL-Streifen zu Streifendomänen, die bei exakt 2 ML voll entwickelt sind und mit weiter zunehmender Bedeckung lokal durch Bereiche dritter Lage gestört werden. Die Domänenwände zeigten dabei überraschenderweise eine einheitliche Chiralität, deren mögliche Ursachen diskutiert wurden. Diese Fragestellung erfordert eine tiefgehende theoretische Analyse, sowie weitere experimentelle Untersuchungen. Insbesondere sollte der absolute Drehsinn durch das Anlegen von in-plane-Feldern bestimmt werden.

Aufgrund der Chiralität bilden sich in senkrechten Magnetfeldern eine Vielzahl von  $360^\circ$ -Wänden, die bis zu  $B_c = 900$  mT stabil bleiben. Über dieses kritische Feld konnte die in-plane-Anisotropie der DL abgeschätzt werden. Ferner wurde an diesem System durch einen direkten Vergleich von Messungen mit einer ferromagnetischen (FM) und einer antiferromagnetischen (AF) Tunnelspitze der Einfluß des Streufeldes der FM-Spitze auf die Probe untersucht. Während dieses im Nullfeld lediglich vereinzelt eine Verschiebung von Domänenwänden verursacht, wirkt es sich nahe  $B_c$  drastisch auf die Ummagnetisierung der  $360^\circ$ -Wände aus. Technologisch ist der erfolgreiche Einsatz von AF-Spitzen ein wichtiger Schritt, der die Untersuchung magnetischer Materialien und Prozesse ermöglicht, für die wohldefinierte, magnetfeldfreie Bedingungen zwingend erforderlich sind.

Am gleichen System wurde gezeigt, daß die Abbildung von Domänenwänden sogar mit nicht-magnetischen Tunnelspitzen möglich ist, da die Domänenwände aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung lokal die elektronischen Eigenschaften der Oberfläche ändern. Lokale Spektroskopie in Verbindung mit Dichtefunktionaltheorie-Berechnungen ermöglichte dabei Einblicke in den Zusammenhang von

elektronischer Bandstruktur und Magnetisierungsrichtung.

Schließlich wurde die Bedeckungsabhängigkeit der Domänenstruktur von Fe-Filmen in Inselmorphologie studiert. Dabei wurde für kleine DL-Inseln bei einer kritischen Breite von  $a_c = 2-3$  nm ein Reorientierungsübergang zu vollständiger in-plane-Magnetisierung gefunden, verursacht durch die Austauschkopplung zur in-plane-magnetisierten ML. Größere DL-Inseln zeigten dagegen eine senkrechte Magnetisierungsrichtung, die auch nach deren Zusammenwachsen bei 2.1 ML aufrecht erhalten wird, in Übereinstimmung mit den Ergebnissen für die DL-Streifen.

Den Abschluß der Arbeit bildete die Untersuchung einer antiferromagnetischen Monolage, Mn/W(110), in Kapitel 7. Dabei konnte die theoretische Vorhersage einer  $c(2 \times 2)$ -AF-Konfiguration experimentell bestätigt und zugleich demonstriert werden, daß SP-STM ein laterales magnetisches Auflösungsvermögen auf der atomaren Skala besitzt.

# Literaturverzeichnis

- [1] F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J. Mankey, and R.F. Willis, *Adv. Phys.* **47**, 511-597 (1998).
- [2] G. Binnig und H. Rohrer, *Helv. Phys. Acta* **55**, 726 (1982).
- [3] R. Wiesendanger, H.-J. Güntheroth, G. Güntheroth, R.J. Gambino, R. Ruf, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 247 (1990).
- [4] M. Bode, M. Getzlaff, R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4256 (1998).
- [5] P.A.M. Dirac, *Proc. Royal Soc. London* **A133**, 60 (1931).
- [6] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physic*, Saunders College Publishing, Orlando (1976).
- [7] A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*, Oxford University Press, New York (1996).
- [8] S. Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Oxford University Press, Oxford (1997).
- [9] R. Zeller, *Bandmagnetismus*, Vorlesungsmanuskript des 30. IFF-Ferienkurses (1999).
- [10] G. Güntherodt, U. Rüdiger, *Magnetische Festkörper: ein Überblick*, Vorlesungsmanuskript des 30. IFF-Ferienkurses (1999).
- [11] E.Y. Vedmedenko, H.P. Oepen, A. Ghazali, J.-C.S. Lévy, and J. Kirschner, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 5884 (2000).
- [12] W. Heisenberg, *Zeitschr. f. Physik* **49**, 619 (1928).
- [13] A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer, Berlin, Heidelberg (1998).
- [14] W.F. Brown, Jr., *Micromagnetics*, R.E. Krieger Publishing, New York (1963).
- [15] D. Jiles, *Introduction to Magnetism and Magnetic Materials*, Chapman & Hall, London (1991).
- [16] L. Landau, E. Lifshitz, *Phys. Z. Sowjetunion* **8**, 153 (1935).
- [17] *Object Oriented Micromagnetic Framework*, OOMMF, Version 1.2 alpha 2, (<http://math.nist.gov/oommf/>).
- [18] J. Tersoff und D.R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1998 (1983); *Phys. Rev. B* **31**, 805 (1985).

- [19] J.C. Slonczewski, Phys. Rev. B **39**, 6995 (1989).
- [20] S. Heinze, *First-Principles Theory of Scanning Tunneling Microscopy Applied to Transition-Metal Surfaces*, Dissertation, Hamburg (2000).
- [21] C.B. Duke, *Tunneling in Solids*, Solid State Physics, Supplement 10, Academic Press, New York, London (1969).
- [22] J.G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 (1963).
- [23] J. Bardeen, Phys. Rev. Lett. **6**, 57 (1961).
- [24] C.J. Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*, Oxford University Press, New York, Oxford (1993).
- [25] C.J. Chen, Phys. Rev. Lett. **65**, 448 (1990).
- [26] R.J. Hamers, Annu. Rev. Phys. Chem. **40**, 531 (1989).
- [27] R. Wiesendanger, *Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy, Methods and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge, New York (1994).
- [28] V.A. Ukraintsev, Phys. Rev. B **53**, 11176 (1996).
- [29] N.D. Lang, Phys. Rev. B **34** 5947 (1986).
- [30] R.M. Feenstra, J.A. Stroscio, and A.P. Fein, Surf. Sci. **181** 295-306 (1987).
- [31] J.A. Stroscio and W.J. Kaiser, *Scanning Tunneling Microscopy*, Methods of Experimental Physics, Volume 27, Academic Press, Inc., San Diego (1993).
- [32] P.M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. **26**, 192 (1971).
- [33] M. Julliere, Phys. Lett. A **54**, 225 (1975).
- [34] H.J. Reittu, J. Phys. Condens. Matter **6**, 1847 (1994).
- [35] T. Miyazaki and N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mat. **139** L231-L234 (1995).
- [36] D. Wortmann, S. Heinze, Ph. Kurz, G. Bihlmayer, and S. Blügel, Phys. Rev. Lett. **86**, 4132 (2001).
- [37] S. Heinze, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, S. Blügel, and R. Wiesendanger, Science **288**, 1805 (2000).
- [38] R. Wiesendanger, M. Bode, and M. Getzlaff, Appl. Phys. Lett. **75**, 124 (1999).
- [39] S.N. Okuno, T. Kishi, and K. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **88**, 066803 (2002).
- [40] Chr. Wittneven, R. Dombrowski, M. Morgenstern, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **81**, 5616 (1998).
- [41] O. Pietzsch, A. Kubetzka, D. Haude, M. Bode, and R. Wiesendanger, Rev. Sci. Instrum. **71**, 424 (2000).

- [42] M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlic, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **85**, 4606 (2000).
- [43] R. Wiesendanger, I.V. Shvets, D. Bürgler, G. Tarrach, H.J. Güntheroth, J.M.D. Coey, S. Gräser, Science **255**, 583 (1992).
- [44] Oxford Instruments, D-65205 Wiesbaden.
- [45] O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode, and R. Wiesendanger, Science **292**, 2053 (2001).
- [46] O. Pietzsch, *Aufbau eines Rastertunnelmikroskops für den Einsatz im Ultrahochvakuum, bei tiefen Temperaturen und in hohen Magnetfeldern*, Diplomarbeit, Hamburg (1997).
- [47] A. Kubetzka, *Optimierung eines Rastertunnelmikroskops für die Durchführung spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie*, Diplomarbeit, Hamburg (1999).
- [48] H. Bethge, D. Heuer, Ch. Jensen, K. Reshöft, and U. Köhler, Surf. Sci. **331-333**, 878-884 (1995).
- [49] H.J. Elmers, J. Hauschild, H. Höche, and U. Gradmann, Phys. Rev. Lett. **73**, 898 (1994).
- [50] H.J. Elmers, J. Hauschild, H. Fritzsche, G. Liu, U. Gradmann, and U. Köhler, Phys. Rev. Lett. **75**, 2031 (1995).
- [51] D. Sander, R. Skomski, C. Schmidhals, A. Enders, and J. Kirschner, Phys. Rev. Lett. **77**, 2566 (1996).
- [52] N. Weber, K. Wagner, H.J. Elmers, J. Hauschild, and U. Gradmann, Phys. Rev. B **55**, 14121 (1997).
- [53] J. Hauschild, U. Gradmann, and H.J. Elmers, Appl. Phys. Lett. **72**, 3211 (1998).
- [54] O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **84**, 5212 (2000).
- [55] X. Qian and W. Hübner, Phys. Rev. B **60**, 16192 (1999).
- [56] I. Galanakis, M. Alouani, and H. Dreyssé, Phys. Rev. B **62**, 3923 (2000).
- [57] X. Nie, G. Bihlmayer, and S. Blügel, submitted to Phys. Rev. Lett.
- [58] Y. Yafet and E.M. Gyorgy, Phys. Rev. B **38**, 9145 (1988).
- [59] Ref. [13], S. 122f.
- [60] M. Pratzner, H.J. Elmers, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **87**, 127201 (2001).
- [61] I.E. Dzyaloshinsky, Sov. Phys. JETP **5**, 1259 (1957); T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
- [62] A.N. Bogdanov and U.K. Rößler, Phys. Rev. Lett. **87**, 037203 (2001).
- [63] L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and Amnon Aharony, Phys. Rev. Lett. **69**, 836 (1992).
- [64] A. Wadas and H.J. Hug, J. Appl. Phys. **72**, 203 (1992).

- [65] E. Magyari and H. Thomas, Phys. Scr. T **44**, 45 (1992).
- [66] H.B. Braun, Phys. Rev. B **50**, 16485 (1994).
- [67] A. Lessard, T.H. Moos, and W. Hübner, Phys. Rev. B **56**, 2594 (1997).
- [68] M. Bode, S. Heinze, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, G. Bihlmayer, S. Blügel, and R. Wiesendanger, submitted to Phys. Rev. Lett.
- [69] H.J. Elmers, J. Magn. Magn. Mat. **185** 274-282 (1998).
- [70] H.J. Elmers, J. Hauschild, and U. Gradmann, Phys. Rev. B **59**, 3688 (1999).
- [71] F. Bloch, Zeitschr. f. Physik **61**, 206 (1930).
- [72] N.D. Mermin and W. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [73] S. Blügel, M. Weinert, P.H. Dederichs, Phys. Rev. Lett. **60**, 1077 (1988).
- [74] S. Blügel, P.H. Dederichs, Europhys. Lett. **9**, 597-602 (1989).
- [75] M. Bode, M. Hennefarth, D. Haude, M. Getzlaff, and R. Wiesendanger, Surf. Sci. **432**, 8 (1999).
- [76] M. Bode, S. Heinze, A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Hennefarth, M. Getzlaff, R. Wiesendanger, X. Nie, G. Bihlmayer, and S. Blügel, submitted to Phys. Rev. B.
- [77] W.A. Hofer and A.J. Fischer, Surf. Sci. Lett. (in press).
- [78] S. Heinze, private Kommunikation.
- [79] S. Ciraci, A. Baratoff, and I.P. Batra, Phys. Rev. B **42**, 7618 (1990).
- [80] W.A. Hofer, A.J. Fischer, R.A. Wolkow, and P. Grütter, Phys. Rev. Lett. **87**, 236104 (2001).
- [81] G. Meyer, Rev. Sci. Instrum. **67**, 2960 (1996).



# Publikationen

1. M. Bode, M. Getzlaff, A. Kubetzka, R. Pascal, O. Pietzsch, and R. Wiesendanger: *Temperature-Dependent Exchange Splitting of a Surface State on a Local-Moment Magnet: Tb(0001)*, Phys. Rev. Lett. **83**, 3017 (1999).
2. O. Pietzsch, A. Kubetzka, D. Haude, M. Bode, and R. Wiesendanger: *A Low-Temperature UHV Scanning Tunneling Microscope with a Split-Coil Magnet and a Rotary Motion Stepper Motor for High Spatial Resolution Studies of Surface Magnetism*, Rev. Sci. Instr. **71**, 424 (2000).
3. O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode, and R. Wiesendanger: *Real-Space Observation of Dipolar Antiferromagnetism in Magnetic Nanowires by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5212 (2000).
4. S. Heinze, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, S. Blügel, and R. Wiesendanger: *Real-Space Imaging of Two-Dimensional Antiferromagnetism on the Atomic Scale*, Science **288**, 1805 (2000).
5. M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, S. Heinze, and R. Wiesendanger: *Experimental Evidence for Intra-Atomic Noncollinear Magnetism at Thin Film Probe Tips*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2142 (2001).
6. M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger: *Imaging Magnetic Nanostructures by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy*, J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. **114-116**, 1055 (2001).
7. A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Bode, and R. Wiesendanger: *Magnetism of nanoscale Fe islands studied by spin-polarized scanning tunneling spectroscopy*, Phys. Rev. B **63**, 140407 (2001).
8. M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, and R. Wiesendanger: *Spin-polarized scanning tunneling spectroscopy on Fe nanowires*, Appl. Phys. A **72**, S149 (2001).
9. M. Getzlaff, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, and R. Wiesendanger: *Spin-dependent tunneling effects on magnetic nanostructures*, Chin. Phys. **10**, S186 (2001).
10. O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode, and R. Wiesendanger: *Observation of Magnetic Hysteresis at the Nanometer Scale by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy*, Science **292**, 2053 (2001).

11. M. Pratzner, H.J. Elmers, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger: *Atomic-Scale Magnetic Domain Walls in Quasi-One-Dimensional Fe Nanostripes*, Phys. Rev. Lett. **87**, 127201 (2001).
12. A. Kubetzka, M. Bode, O. Pietzsch, and R. Wiesendanger: *Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy with Antiferromagnetic Probe Tips*, Phys. Rev. Lett. **88**, 057201 (2002).
13. M. Bode, S. Heinze, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, M. Hennefarth, M. Getzlaff, S. Blügel, and R. Wiesendanger: *Structural, electronic, and magnetic properties of the Mn monolayer on W(110)*, submitted to Phys. Rev. B.
14. M. Bode, S. Heinze, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, G. Bihlmayer, S. Blügel, and R. Wiesendanger: *Magnetization-Direction Dependent Local Electronic Structure probed by Scanning Tunneling Spectroscopy*, submitted to Phys. Rev. Lett.

# Konferenzen

1. 29.03.2000: A. Kubetzka, M. Bode, O. Pietzsch, and R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg: *Korrelation struktureller und magnetischer Eigenschaften dünner Fe-Filme auf W(110) mittels spinpolarisierter Rastertunnelspektroskopie* (Vortrag).
2. 21.07.2000: A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Bode, and R. Wiesendanger, 2nd International Conference on Scanning Probe Spectroscopy, Hamburg: *Correlation of Structural and Magnetic Properties of Ultra-Thin Fe-Films on W(110) by Spin-Polarized STM/STS* (Poster).
3. 05.10.2000: A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Bode, and R. Wiesendanger, 47th International Symposium, American Vacuum Society, and NANO 6, Boston, USA: *Correlation of Structural and Magnetic Properties of Ultra-Thin Fe-Films on W(110) by Spin-Polarized STM/STS* (Vortrag).
4. 27.03.2001: A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Bode, and R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Hamburg: *Korrelation struktureller und magnetischer Eigenschaften ultradünner Fe-Filme auf W(110) mittels SP-STM/STS* (Poster).
5. 29.03.2001: A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Bode, and R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Hamburg: *Untersuchung der magnetischen Domänenstruktur von 2 ML Fe/W(110) mittels SP-STM/STS* (Vortrag).
6. 16.07.2001: A. Kubetzka, M. Bode, O. Pietzsch, and R. Wiesendanger, 11th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques, Vancouver, Kanada: *Magnetism of Nanoscale Fe-Islands Investigated by SP-STM/STS* (Poster).

# Danksagung

Mein Dank gilt vor allem meinen beiden Kollegen und Mitstreitern der vergangenen drei Jahre: Matthias Bode und Oswald Pietzsch. Ich bin stolz, daß ich diesem außergewöhnlichen Team angehören durfte.

Herr Prof. R. Wiesendanger hat durch seine weitsichtige Planung und die Bereitstellung einer ausgezeichneten UHV-Anlage maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Ich möchte ihm an dieser Stelle für seine umfassende Unterstützung danken.

Die gesamte Gruppe R hat für eine fabelhafte Arbeitsatmosphäre gesorgt. Insbesondere danke ich Stefan Heinze, Mathias Getzlaff, Markus Morgenstern, Daniel Haude und Olena Vedmedenko für Tipps & Tricks und Diskussionen.

Marion Kubetzka und Kirsten von Bergmann sei gedankt für das sorgfältige Korrekturlesen dieser Arbeit.

Ein spezieller Dank geht an Prof. L. C. Silva dos Santos, die mir in den vergangenen Jahren zur Seite stand und bei kniffligen Problemen entscheidende Hinweise gegeben hat.

Zu guter letzt und nach altem Brauch danke ich meinen Eltern Rainer und Regine Kubetzka, für ihr unerschöpfliches Vertrauen und ihre langjährige Unterstützung, die keinesfalls nur finanzieller Natur war.