



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
VIENNA
UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY

Diplomarbeit

Magnetische Phasenumwandlung ultradünner Eisenschichten auf Cu(100) durch Ionenbeschuss

ausgeführt am
Institut für Allgemeine Physik
der
Technischen Universität Wien

unter Anleitung von
ao. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Peter Varga

durch
Boris Kamenik
1130 Wien, Anton Langer-Gasse 53

29. Mai 2008

Ultradünne Schichten von Eisen (Fe) auf Kupfer (Cu) können, abhängig von Temperatur, Schichtdicke, kristallographischer Orientierung des Substrats und Art der Herstellung, unterschiedliche strukturelle und magnetische Eigenschaften aufweisen. Bei Raumtemperatur (RT) epitaktisch aufgetragene Schichten von 5–10 Monolagen (ML) Fe auf Cu(100) wachsen pseudomorph kubisch-flächenzentriert (fcc) und sind paramagnetisch. Durch Beschuss mit niederenergetischen Edelgas-Ionen kann lokal der Übergang zu einer ferromagnetischen kubisch-raumzentrierten Struktur (bcc) ausgelöst werden. Die Auswirkungen des Beschusses mit Edelgas-Ionen unterschiedlicher Energie und Masse auf die strukturellen und magnetischen Eigenschaften von ca. 8 ML dicken Fe-Schichten wurden durch Messungen des magnetooptischen Oberflächen-Kerr-Effekts (SMOKE), niederenergetische Elektronenbeugung (LEED), Augerelektronenspektroskopie (AES) und Ionenstreu-spektroskopie (LEIS) untersucht und mit den Ergebnissen von Monte-Carlo-Simulationen (SRIM) verglichen. Ebenfalls untersucht wurden die Stabilität der fcc-Struktur von 6 ML und 9 ML dicken Fe-Schichten auf Cu(100) beim Abkühlen und die ferromagnetische Umwandlung von 8 ML Fe auf Cu(100) bei Ionenbeschuss durch eine zusätzlich aufgedampfte Goldschicht.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	1
1.1. Motivation	1
1.2. Eisen auf Cu(100)	2
2. Grundlagen	10
2.1. Magnetooptischer Kerr-Effekt an Oberflächen	10
2.2. Ionenbeschuss von Festkörperoberflächen	14
2.3. Analytische Methoden	19
2.3.1. Auger electron spectroscopy (AES)	19
2.3.2. Low energy electron diffraction (LEED)	20
2.3.3. Low energy ion scattering (LEIS)	24
2.3.4. Surface magneto-optical Kerr-effect (SMOKE)	26
2.4. Experimenteller Aufbau	30
2.5. Schichtpräparation	33
2.5.1. Der Cu(100)-Kristall	33
2.5.2. Substratreinigung	33
2.5.3. Aufdampfen	34
2.5.4. Schichtdickenkontrolle	35
3. Experimente	39
3.1. Ionenbeschuss von 8 ML Fe auf Cu(100)	39
3.1.1. Helium	41
3.1.2. Neon	42
3.1.3. Argon	43
3.1.4. Krypton	47
3.1.5. Xenon	50
3.1.6. LEED-Messungen	53
3.1.7. LEIS-Messungen	55
3.2. Ionenbeschuss von 5,4 Å + 10–12 Å Fe auf Cu(100)	56
3.3. Abkühlversuche	59
3.3.1. 6 ML Fe auf Cu(100)	59
3.3.2. 9 ML Fe auf Cu(100)	61
3.4. Goldschichten auf 8 ML Fe auf Cu(100)	63
3.4.1. SMOKE-Messungen durch Goldschichten variabler Dicke	63
3.4.2. Dichttheit einer 2-nm-Goldschicht	64
3.4.3. Ionenbeschuss durch 2,3 nm Gold	65

4. Simulationen	68
4.1. SRIM	68
4.2. Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu	71
4.2.1. Energieübertrag durch Stöße	71
4.2.2. Ionenimplantation	75
5. Diskussion	80
6. Zusammenfassung	91
Danksagung	93
A. Liste aller Präparationen	94
B. Zerstäubungsfaktoren (<i>sputter yields</i>)	98
Abbildungsverzeichnis	99
Tabellenverzeichnis	101
Literaturverzeichnis	102

1. Einführung

1.1. Motivation

Ein faszinierender Aspekt der Oberflächenphysik ist die Vielfalt an unterschiedlichen Strukturen und Eigenschaften, die ultradünne Schichten ein und desselben Materials aufweisen können.

Bei einigen Materialien sind mit den verschiedenen Kristallstrukturen auch unterschiedliche magnetische Ordnungszustände verbunden. Da die Struktur ultradünner Schichten entscheidend von der Struktur des Substrats bestimmt wird, lassen sich durch die Wahl einer geeigneten Oberfläche oft Kristallstrukturen stabilisieren, die als *bulk*-Material bei Raumtemperatur und Umgebungsdruck nicht vorkommen. Eisen auf Cu(100) ist ein solcher Fall. Während reines Eisen bei Normalbedingungen kubisch-raumzentriert (bcc) und ferromagnetisch ist, können ultradünne Eisenschichten auf Cu(100) in einem gewissen Dickenbereich pseudomorph aufwachsen, d. h. sie übernehmen die kubisch-flächenzentrierte (fcc) Kristallstruktur des Substrats. Eisen auf Cu(100) ist dadurch ein interessantes Modellsystem für den Zusammenhang zwischen Struktur und magnetischer Ordnung.

Hinsichtlich möglicher Anwendungen sind Schichtsysteme, deren magnetische Eigenschaften sich gezielt lokal verändern lassen, besonders interessant. Die Speicherdichte magnetischer Informationsspeichermedien wird von der Größe der zuverlässig magnetisierbaren Bereiche bestimmt. Magnetisch vorstrukturierte Oberflächen (*patterned media*) bieten hier die Möglichkeit unerwünschte Kopplungseffekte (Superparamagnetismus) zu vermeiden, indem die einzelnen Bits durch nicht ferromagnetische Bereiche räumlich voneinander getrennt werden. Dadurch werden kleinere Partikelgrößen und höhere Speicherdichten möglich.

Die Erzeugung solcher magnetischen Strukturen durch Ionenbeschuss hat gegenüber herkömmlichen lithographischen Verfahren den Vorteil, dass dafür im Prinzip nur ein einziger Arbeitsschritt nötig ist. Zudem spielen Beugungseffekte bei Ionen keine Rolle. Die minimale Größe der durch Ionenstrahlen erzeugbaren Strukturen ist im Prinzip nur durch die laterale Ausdehnung der Prozesse beim Einschlag der Teilchen im Festkörper begrenzt.

Auf STM-Bildern (Rastertunnelmikroskopie) von pseudomorphen fcc-Eisenschichten auf Cu(100) bei Raumtemperatur findet man vereinzelt längliche Nanokristalle, deren lokale Bindungswinkel und -längen eher einem bcc-Gitter ähneln als dem fcc-Kristallgitter ihrer Umgebung. Durch Abkühlen und Wiedererwärmen auf Raumtemperatur lässt sich der Anteil dieser „bcc-Nadeln“ steigern. Offensichtlich besteht eine Tendenz der Schicht, sich an geeigneten Stellen lokal in Richtung einer bcc-Konfiguration umzuformen.

Diese Beobachtungen führten auf die Idee, zu versuchen, ob die Entstehung und das Wachstum der bcc-Strukturen auch durch Ionenbeschuss gefördert werden kann. Erste Versuche, bei denen acht Monolagen Eisen auf Cu(100) mit 1-keV-Argon-Ionen bestrahlt wurden, zeigten eine deutliche Zunahme von Zahl und Größe der bcc-Nadeln im STM-Bild. Um die magnetischen Eigenschaften von solcherart modifizierten Eisenschichten direkt messen zu können, wurde eigens ein Messsystem auf der Basis des magnetooptischen Oberflächen-Kerr-Effekts (SMOKE) gebaut. Mit Hilfe dieses Geräts sollte in weiteren Experimenten der Zusammenhang zwischen Energie, Masse und Dosis der verwendeten Ionen und den Eigenschaften der beschossenen Eisenschicht untersucht werden.

1.2. Eisen auf Cu(100)

Epitaktisch aufgewachsene ultradünne Eisenschichten auf Cu(100) werden seit einigen Jahrzehnten intensiv erforscht. Sie zeigen, je nach Schichtdicke und der Substrattemperatur während des Aufdampfens, eine erstaunliche Vielfalt an Strukturen und Eigenschaften.

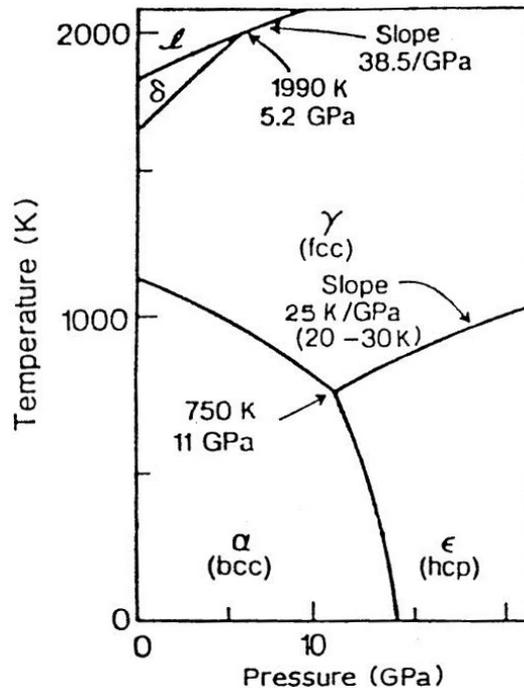


Abbildung 1.1.: Phasendiagramm von Eisen [1]

Eisen als Volumenmaterial (*bulk*) kristallisiert je nach Temperatur und Druck in unterschiedlichen Strukturen (Abb. 1.1). Die unterhalb von 1185 K bei niedrigem Druck stabile Phase (α -Fe) ist kubisch-raumzentriert (bcc) und ferromagnetisch. Bei höheren Temperaturen (1185–1667 K) ist das kubisch-flächenzentrierte (fcc),

paramagnetische γ -Fe stabiler. Die Gitterkonstante dieser fcc-Eisen-Struktur ($a_{\gamma\text{-Fe}} = 3.58 \text{ \AA}$) ist sehr nahe der des kubisch-flächenzentrierten Kristallgitters von Kupfer ($a_{\text{Cu}} = 3.62 \text{ \AA}$), weshalb es nahe lag, Kupfer als stabilisierenden Untergrund für die Herstellung pseudomorpher fcc-Eisenschichten zu benutzen.

Überraschend erwiesen sich diese ultradünnen Eisenschichten auf Cu(100) als ferromagnetisch [2], was mit dem im Vergleich zum paramagnetischen fcc-Eisen um 5–6 % größerem Gittervolumen in Verbindung gebracht wurde. Die ursprüngliche Annahme einer ferromagnetischen fcc-Eisenstruktur gilt mittlerweile jedoch als überholt. Wo immer ferromagnetisches Eisen auftritt, findet man bei genauerer Betrachtung bcc-artige Strukturen, deren lokale Ordnung die magnetischen Eigenschaften zu bestimmen scheint. Details zu den Kristallstrukturen und eine Zusammenfassung der Forschungsgeschichte ultradünner Eisenschichten auf Cu(100) bis zum Jahr 2003 finden sich in der Dissertation von Rupert Tscheließnig [3]. Einen guten Überblick über die verschiedenen Strukturen bietet der Artikel von Biedermann *et al.* [4], aus dem auch die in diesem Abschnitt gezeigten STM-Bilder stammen.

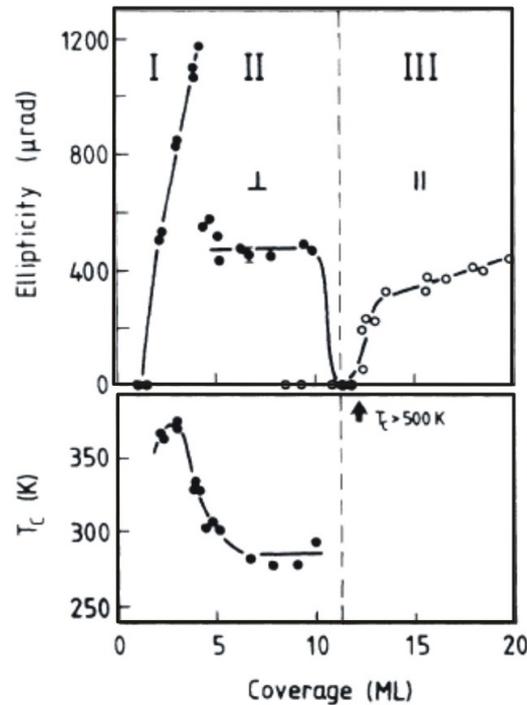


Abbildung 1.2.: Kerr-Elliptizität (SMOKE) und Curie-Temperatur der ferromagnetischen Phasen I–III von Fe auf Cu(100), Magnetisierung normal (\perp) und parallel (\parallel) zur Oberfläche [5]

Der Zusammenhang zwischen Schichtdicke und Oberflächenmagnetismus ultradünner Eisenfilme auf Cu(100) ist mehrmals untersucht worden [5, 6, 7, 8, 9]. Nach

Thomassen *et al.* [5] werden diese Schichten in drei Phasen (Abb. 1.2) mit jeweils unterschiedlichen magnetischen Eigenschaften eingeteilt:

- 2–4 Monolagen (Phase I)
- 5–10 Monolagen (Phase II)
- > 10 Monolagen (Phase III)

Unterhalb von etwa 1,5 bis 2 Monolagen Bedeckung findet man noch keine spontane Magnetisierung der Oberfläche. Die Eisenatome ordnen sich zu kleinen implantierten Clustern und monoatomaren Inseln, deren Ränder weitgehend von Kupferatomen umgeben sind. Ihre atomare Ordnung entspricht dem fcc-Gitter der Kupfer-Matrix.

Eisenfilme von etwa zwei bis vier Monolagen Dicke (Phase I) wachsen in einer komplexen Struktur aus kleinen bcc-artigen Bereichen („Nanomartensit“) auf dem fcc-Gitter des Kupfersubstrats [4, 10]. Die einzelnen Bereiche ordnen sich lokal zu Überstrukturen mit (1×6) oder ähnlicher Symmetrie. Im Vergleich zum bcc-Gitter von α -Eisen ist die Elementarzelle leicht vergrößert und verzerrt. Bei Raumtemperatur sind diese Eisenschichten ferromagnetisch, ihr magnetisches Moment ist normal zur Oberfläche orientiert (*out-of-plane*) und annähernd proportional zur Schichtdicke. Offenbar ist der gesamte Film ferromagnetisch geordnet, nicht nur eine Oberflächenschicht.

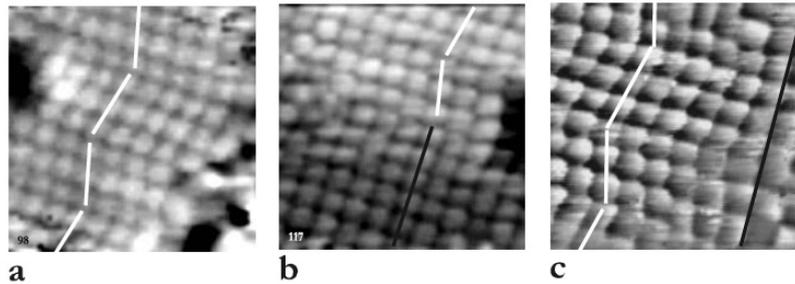


Abbildung 1.3.: (1×6) -Nanomartensit-Struktur von Fe auf Cu(100), STM-Bilder (einige mV), 4,3 ML bei RT (a, b) und 3,6 ML bei 80 K (c), Domänengrenzen zwischen Nanomartensit und fcc-Gitter (b) und verschiedenen Rotationsdomänen (c) [4]

Zwischen etwa fünf und zehn Monolagen Dicke (Phase II) wächst Eisen auf Cu(100) pseudomorph kubisch-flächenzentriert. Anders als γ -Eisen (fcc) wird die Schicht unterhalb einer Curie-Temperatur von ca. 250 K ferromagnetisch. Wie in Phase I ist das magnetische Moment *out-of-plane* orientiert, es hängt jedoch nicht von der Dicke ab.

Bei LEED-Untersuchungen dieser Eisenschichten wurden wellenartige Verzerrungen der fcc-Oberfläche mit einer Amplitude von einigen Prozent der Gitterkonstante entdeckt und als Hinweis auf eine ferromagnetische Oberflächenstruktur gedeutet. Tieftemperatur-STM-Messungen bei 5 K [11, 10] brachten schließlich die für das

magnetische Moment verantwortliche Struktur zum Vorschein, eine Oberflächenrekonstruktion mit $(2 \times 2)p4g$ -Symmetrie (Abb. 1.4). Diese „*magnetic live layer*“ hat lokal sehr ähnliche Bindungswinkel und -längen wie ferromagnetisches α -Eisen. I/V-LEED-Messungen [11] zeigen, dass die Oberfläche auch bei Temperaturen oberhalb der Curie-Temperatur rekonstruiert bleibt. Allerdings sind die Domänengrenzen sehr beweglich, sodass die Oberflächenrekonstruktion im STM nur bei tiefen Temperaturen sichtbar ist.

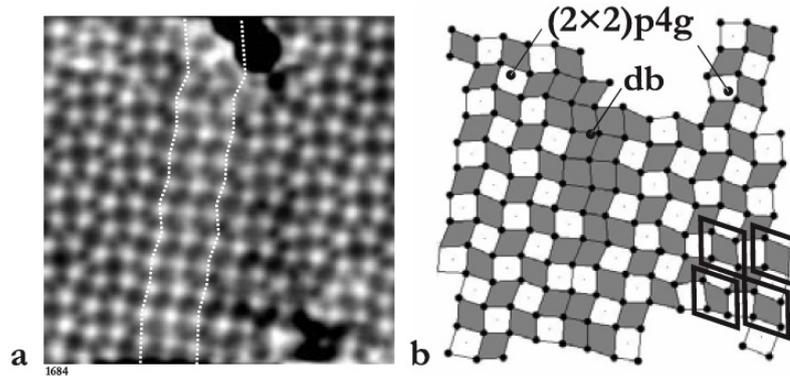


Abbildung 1.4.: $(2 \times 2)p4g$ -Oberflächenrekonstruktion von 7 ML Fe auf Cu(100) bei 5 K, STM-Bild (a, $3 \text{ nm} \times 3 \text{ nm}$, -2 mV , invertiert) und Atompositionen (b), zwei Domänen mit Domänengrenze (db) [4]

Eingebettet in die fcc-Eisenschicht findet man im STM-Bild kleine bcc-artige Bereiche [12] (Abb. 1.5). Die Struktur dieser Nanokristalle entspricht der Nanomartensitstruktur von unter vier Monolagen dicken Eisenschichten, nur dass die bcc-Bereiche hier deutlich breiter sind (8–10 Atomreihen) und längliche Nadeln bilden (Abb. 1.7). Sie bedecken nur einen geringen Teil der Oberfläche ($< 1\%$ von 8 ML Fe auf Cu(100) bei RT). Durch Abkühlen erhöht sich der Anteil der Nanokristalle [9], und sie werden breiter. Die bcc-Struktur ist trotz der Verzerrung (bezogen auf α -Eisen) energetisch günstiger als das pseudomorphe fcc-Gitter (Abb. 1.8) und bleibt beim Wiedererwärmen auf Raumtemperatur erhalten. Durch wiederholte Temperaturwechsel zwischen 300 K und 80 K lässt sich sogar die gesamte Oberfläche einer 7–8-Monolagen-Schicht martensitisch umformen [4].

Die Oberfläche der bcc-Nadeln entspricht einer bcc(110)-Ebene. Da der Lagenabstand von bcc-Eisen in dieser Orientierung ($2,03 \text{ \AA}$) größer ist als der der fcc(100)-Oberfläche ($1,80 \text{ \AA}$), ragen die bcc-Kristalle ein wenig aus der Oberfläche heraus und sind dadurch im STM-Bild gut zu erkennen (Abb. 1.5). Eine genaue Analyse von bcc-Nadeln, die sich über mehrere Stufenkanten erstrecken, zeigt, dass diese Höhendifferenz auf höheren Atomlagen größer ist als auf tieferen (Abb. 1.6). Das bcc-Eisen liegt also nicht nur an der Oberfläche sondern reicht zumindest einige Atomlagen in die Eisenschicht hinein.

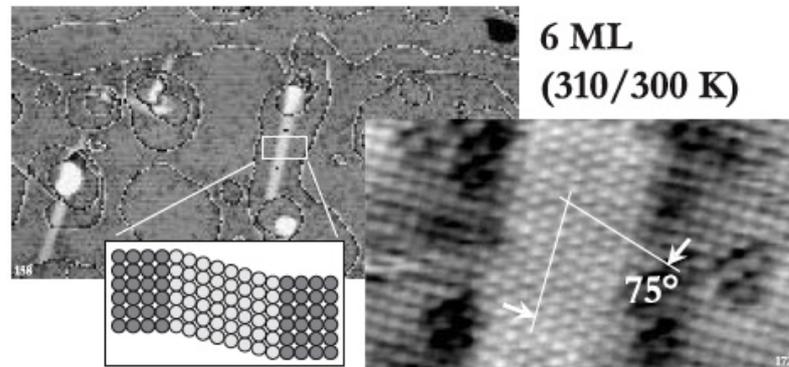


Abbildung 1.5.: bcc-Nanokristalle in 6 ML fcc-Fe auf Cu(100), STM-Bilder bei RT (Lagen angeglichen) und Strukturmodell [4]

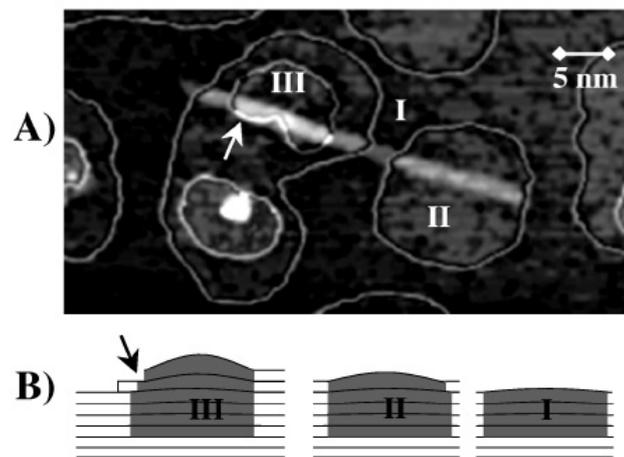


Abbildung 1.6.: bcc-Nanokristalle in 6 ML fcc-Fe auf Cu(100), STM-Bild (A, Lagen angeglichen) und Modell zur Abschätzung der vertikalen Ausdehnung (B, Höhendifferenz übertrieben dargestellt) [12]

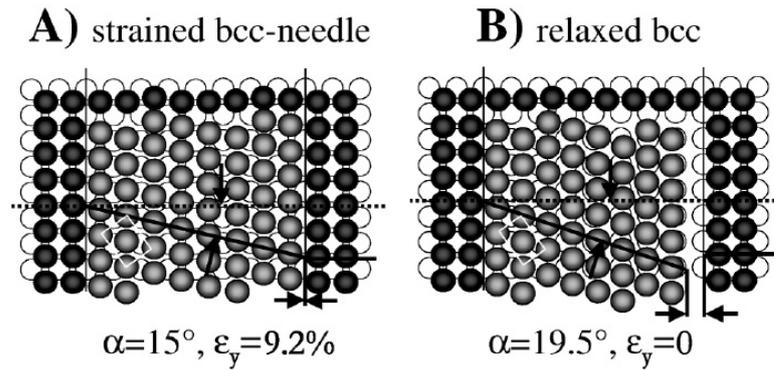


Abbildung 1.7.: Modell der Atompositionen eines typischen bcc-Nanokristalls in Bezug zum fcc(100)-Substrat, real beobachtet (A) und relaxiert (B). Um die Lücke zum umgebenden fcc-Gitter zu schließen, ist die bcc-Struktur um $\sim 9\%$ in y-Richtung (waagrecht) verzerrt. Das weiße Rechteck markiert eine bcc(110)-Einheitszelle. [12]

Tiefemperatur-STM-Untersuchungen im Grenzbereich zwischen Phase I und II (4–5 ML Fe auf Cu(100)) lassen vermuten, dass sich die Nanokristalle direkt aus der Nanomartensit-Struktur bilden können. Ein drei Atomreihen breiter Bereich der (1×6) -Elementarzelle könnte z. B. in die Orientierung seiner Nachbarbereiche umklappen, wodurch sich ein neun Reihen breiter bcc-Kristall gebildet hätte.

SMOKE- und LEED-Messungen an Phase-II-Eisenschichten auf Cu(100) in unserer Arbeitsgruppe [13] haben gezeigt, dass sich die Struktur und magnetischen Eigenschaften umso stärker durch Abkühlen in Richtung bcc-Struktur bzw. Ferromagnetismus verändern lassen, je dicker die Schicht ist.

Ab etwa zehn Monolagen Bedeckung (Phase III) geht die Struktur der Eisenschichten zum kubisch-raumzentrierten Gitter von α -Eisen über, wobei eine bcc-[110]-Oberfläche gebildet wird. Wie das *bulk*-Material ist der Eisenfilm bei Raumtemperatur ferromagnetisch, die Magnetisierung liegt dabei „*in-plane*“, d. h. parallel zur Oberfläche.

Ultradünne Eisenschichten auf Cu(100) sind im Lauf der Zeit mit einer Vielzahl von analytischen Methoden untersucht worden: STM, LEED bzw. I/V-LEED, RHEED, SMOKE (Abschnitt 2.1), Ionenstreu-spektroskopie, spin-polarisierte Photo- und Sekundärelektronenemission, Mößbauer-Spektroskopie etc. Die hier zitierten Artikel machen nur einen Teil der umfangreichen Literatur zu diesem Thema aus [14, 15, 16, 17].

Theoretische Modelle und Berechnungen konnten zwar einige der experimentellen Befunde nachvollziehen, haben jedoch bisher nur wenig eigenständige Erkenntnisse erbracht. *Ab-initio*-Simulationen der lokalen Spindichte [18] und magnetische Modellrechnungen (*selfconsistent local mean-field theory*) [19] für verschiedene Schichtdicken stimmen darin überein, dass die Spins der obersten zwei Atomlagen von Phase-

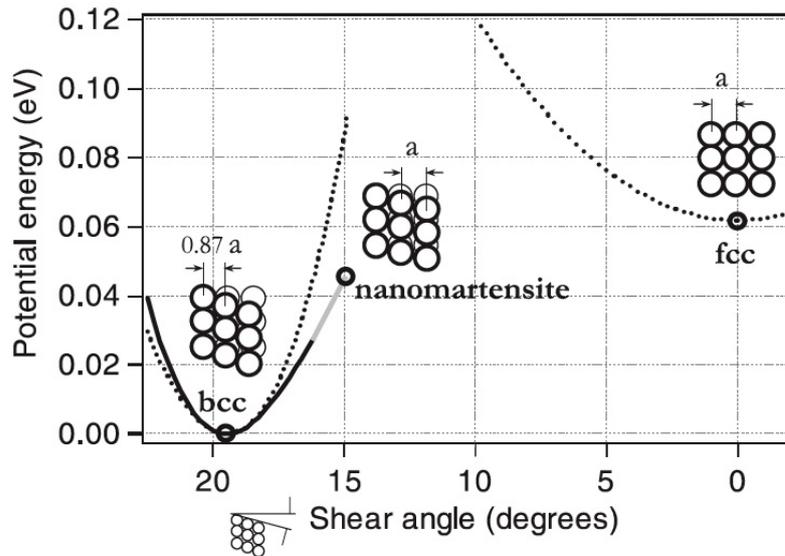


Abbildung 1.8.: Potentielle Energien der bcc-, Nanomartensit- und fcc-Eisenstruktur, berechnet in linearer Elastizitätstheorie (punktiert) und E. dritter Ordnung (durchgezogen) mit den elastischen Koeffizienten von bcc-Eisen [4]

II-Schichten ferromagnetisch gekoppelt sind, die der darunter liegenden Schichten antiferromagnetisch. Das passt gut zu den experimentellen Befunden über die „*magnetic live layer*“, deren magnetisches Moment praktisch unabhängig von der Schichtdicke ist.

Die Beobachtung, dass sich Anteil und Größe der bcc-artigen Nanokristalle im fcc-Gitter von zwischen fünf und zehn Monolagen dicken Eisenschichten auf Cu(100) (Phase II) durch Abkühlen und Wiedererwärmen erhöhen lassen, führte zur Frage, ob sich dieser Übergang von fcc in Richtung der energetisch günstigeren bcc-Struktur (Abb. 1.8) auch durch Ionenbeschuss auslösen lässt. Erste Versuche mit 1-keV-Argon-Ionen auf 8-ML-Schichten in unserer Arbeitsgruppe bestätigten diese Vermutung. STM-Bilder nach Ionenbeschuss zeigten deutlich mehr Nanokristalle als die Bilder der unbehandelten Schicht.

Die lokale Ordnung der bcc-Nadeln entspricht im Wesentlichen der bei Raumtemperatur ferromagnetischen Nanomartensit-Struktur, weshalb zu erwarten war, dass die Umwandlung der Schichtstruktur auch mit einer Änderung der magnetischen Eigenschaften bei Raumtemperatur verbunden ist. Um diesen Effekt zu messen, wurde von Werner Rupp im Rahmen seiner Dissertation [13] eine auf dem magnetooptischen Kerr-Effekt basierende Messapparatur geplant und gebaut (Abschnitt 2.3.4). Da die Nanokristalle parallel zur Oberfläche liegen, ändert sich durch Ionenbeschuss vor allem die Suszeptibilität *in-plane*.

Die Untersuchung der Auswirkungen von Ionenbeschuss unterschiedlicher Dosis,

Energie und Ionenmasse auf den Oberflächenmagnetismus von Phase-II-Eisenschichten auf Cu(100) war die Hauptaufgabe der vorliegenden Diplomarbeit.

2. Grundlagen

2.1. Magnetooptischer Kerr-Effekt an Oberflächen

Analog zum magnetooptischen Faraday-Effekt bei der Transmission von Licht durch ein magnetisiertes Medium beschreibt der magnetooptische Kerr-Effekt die Änderung der Polarisation durch Reflexion an magnetisierten Oberflächen. Der Effekt wurde 1876 von John Kerr (1824–1907) als Drehung der Polarisationsrichtung von linear polarisiertem Licht bei der Reflexion am Pol eines Ferromagneten entdeckt und erstmals beschrieben [20]. SMOKE (*surface magneto-optical Kerr effect*), bzw. die auf diesem Effekt beruhende Messmethode, ist aufgrund der hohen Empfindlichkeit hervorragend zur Charakterisierung der magnetischen Eigenschaften dünner reflektierender Schichten geeignet [21, 22].

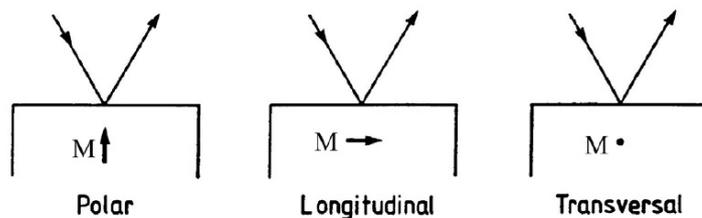


Abbildung 2.1.: Orientierung der Magnetisierung zur Oberfläche und Einfallsebene beim polaren, longitudinalen und transversalen Kerr-Effekt [17]

Abhängig von der Orientierung der Magnetisierung zur reflektierenden Oberfläche und der Einfallsebene des Strahl unterscheidet man drei Arten von Kerr-Effekt (Abb. 2.1). Beim polaren Kerr-Effekt steht die Magnetisierung normal zur Oberfläche. Liegt die Magnetisierung parallel zur Oberfläche, unterscheidet man longitudinalen und transversalen Kerr-Effekt, je nachdem ob sie parallel oder normal zur Einfallsebene steht. Der allgemeinste Fall ist eine Überlagerung aller drei Effekte.

Die Fresnelschen Gleichungen für Reflexion und Transmission elektromagnetischer Wellen an der Grenzfläche zweier Medien sind sowohl für durchsichtige als auch für absorbierende Medien gültig [23]. Für absorbierende Medien, d. h. komplexwertige Brechungsindizes, sind die entsprechenden Reflexions- und Transmissionskoeffizienten ebenfalls komplex. Sie sind für parallel und normal zur Einfallsebene polarisierte Wellenanteile im Allgemeinen unterschiedlich groß, wodurch sich die Polarisation von Licht bei Reflexion ändert.

An magnetisierten Oberflächen ergibt sich durch den Kerr-Effekt eine zusätzliche Polarisationsdrehung und Phasenverschiebung. Linear polarisiertes Licht ist nach der

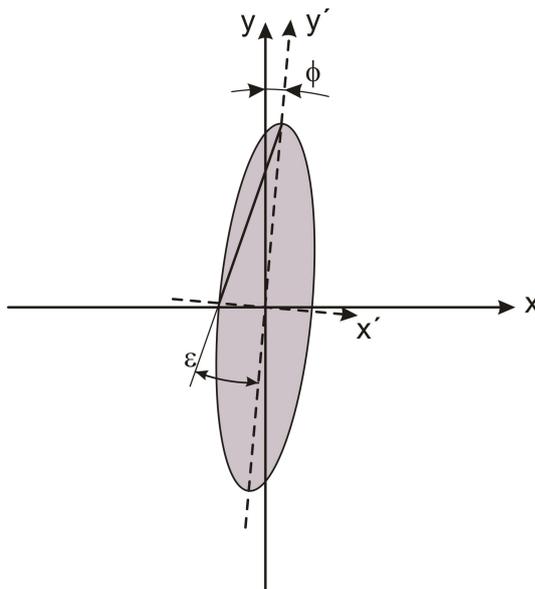


Abbildung 2.2.: Definition der Kerr-Rotation ϕ und -Elliptizität ε (der einfallende Strahl ist linear polarisiert entlang der y -Richtung)

Reflexion im Allgemeinen elliptisch polarisiert. Diese Polarisationsänderung kann durch zwei Parameter ϕ und ε charakterisiert werden (Abb. 2.2).

Die Kerr-Rotation ϕ gibt den Winkel zwischen der ursprünglichen Polarisationsrichtung und der Hauptpolarisationsrichtung des reflektierten Strahls an. Linear polarisiertes Licht kann in einen rechts- und einen links-zirkular polarisierten Anteil aufgespalten werden, für die durch das Magnetfeld an der Oberfläche leicht unterschiedliche Brechungsindizes gelten. Die bei der Reflexion entstandene Phasendifferenz führt so zu einer effektiven Drehung um den Winkel ϕ .

Die Kerr-Elliptizität ε entspricht dem Arcustangens des Verhältnisses zwischen kleiner und großer Hauptachse (b und a) der Polarisationsellipse und wird durch unterschiedliche Reflexions- bzw. Absorptionskoeffizienten für den rechts- und links-zirkularen Wellenteil verursacht. ϕ und ε können zu einem komplexen Kerr-Winkel Φ zusammengefasst werden.

$$\Phi = \phi + i\varepsilon, \quad \varepsilon = \arctan \frac{b}{a} \quad (2.1)$$

Jede ebene elektromagnetische Welle ist durch einen zweidimensionalen Vektor vollständig beschreibbar, z. B. durch das elektrische Feld normal zur Ausbreitungsrichtung. Deshalb liegt es nahe, die Transformation der Welle durch ein optisches System als ein Produkt von 2×2 -Matrizen für jede optische Komponente anzuschreiben (Jones-Formalismus). So wie der Durchgang durch einen Polarisator oder optisch anisotropen Kristall entspricht auch die Reflexion an einer magnetisierten Oberfläche der Multiplikation mit einer bestimmten Transformationsmatrix. Die Bestimmung

des Kerr-Winkels Φ mit Hilfe des Jones-Formalismus wird in der Projektarbeit von Martin Hetzel [24] ausführlich behandelt.

Der eigentliche Ursache für den magnetooptischen Kerr-Effekt (und Faraday-Effekt) ist die Kopplung zwischen Spin und Impuls der quasifreien Elektronen in einem ferromagnetischen Metall. Bei der Bewegung durch ein elektrisches Feld \mathbf{E} erfährt das Elektron ein Magnetfeld $\sim \mathbf{E} \times \mathbf{p}$, das wiederum mit seinem Spin wechselwirkt. Da $(\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s} = \mathbf{p} \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{E})$, entspricht dies der Wirkung eines effektiven Magnetfeldes mit dem Vektorpotential $\mathbf{A} \sim \mathbf{s} \times \mathbf{E}$ auf die Bahn des Elektrons. Diese Spin-Bahn-Kopplung wirkt prinzipiell in allen Materialien, aber da Elektronen mit entgegengesetzt orientiertem Spin auch ein entgegengesetzt orientiertes Magnetfeld spüren, ergibt sich nur dann ein Effekt, wenn der Gesamtspin nicht verschwindet. Die Energieaufspaltung $H_{\text{int}} \sim (-e/mc)\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ führt in diesem Fall zu verschiedenen Phasengeschwindigkeiten und Absorptionen für rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht, sodass optische und magnetische Eigenschaften miteinander gekoppelt sind. Für eine vollständige Behandlung muss neben der Energieaufspaltung auch die Änderung der Elektronen-Wellenfunktionen durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung störungstheoretisch berücksichtigt werden [25].

Makroskopisch kann der Effekt durch unterschiedliche Brechungsindizes für rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht beschrieben werden, bzw. indem man den komplexen Brechungsindex durch eine tensorielle Größe ersetzt. Die dielektrischen Eigenschaften eines Mediums werden im allgemeinsten Fall durch einen 3×3 -Tensor ϵ_{ij} beschrieben. Dieser dielektrische Tensor kann in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil aufgespalten werden: $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji}) + \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} - \epsilon_{ji})$. Diagonalisiert man den symmetrischen Teil durch eine geeignete Koordinatentransformation, so sind die Eigenwerte entweder gleich (isotropes Medium) oder verschieden (anisotropes Medium). Auf jeden Fall aber entsprechen die Normalmoden (Schwingungsmoden, deren Polarisationsrichtung sich während der Ausbreitung nicht ändert) linear polarisiertem Licht. Der symmetrische Anteil des dielektrischen Tensors kann daher nicht zu unterschiedlichen optischen Eigenschaften für rechts- und linkszirkular polarisierte Schwingungen führen. Da der symmetrische Teil von ϵ_{ij} nichts zum Kerr- bzw. Faraday-Effekt beiträgt, können wir ihn als isotrop mit der Dielektrizitätskonstante ϵ annehmen. Den Effekt des antisymmetrischen Teils sieht man am besten, wenn man den dielektrischen Tensor wie folgt ansetzt:

$$\bar{\epsilon} = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & iQ_z & -iQ_y \\ -iQ_z & 1 & iQ_x \\ iQ_y & -iQ_x & 1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Die zwei Normalmoden entsprechen rechts- und linkszirkular polarisiertem Licht mit den Brechungsindizes $n_R = n(1 + \frac{1}{2}\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{k}})$ und $n_L = n(1 - \frac{1}{2}\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{k}})$, wobei $n = \sqrt{\epsilon}$ der mittlere Brechungsindex ist, $\hat{\mathbf{k}}$ der Einheitsvektor entlang der Ausbreitungsrichtung und $\mathbf{Q} = (Q_x, Q_y, Q_z)$ der sog. Voigt-Vektor [22], der die antisymmetrischen Eigenschaften von ϵ_{ij} charakterisiert. Die unterschiedlichen Phasengeschwindigkeiten bewirken beim Durchqueren der Strecke L eine Polarisationsänderung um den komplexen Winkel Φ (Faraday-Effekt).

$$\Phi = \frac{\pi L}{\lambda} (n_L - n_R) = -\frac{\pi L n}{\lambda} \mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{k}} \quad (2.3)$$

Real- und Imaginärteil von Φ entsprechen der Rotation und Elliptizität in Abb. 2.2 und Gl. 2.1. Da ferromagnetische Materialien Licht stark absorbieren, ist der magnetooptische Effekt üblicherweise leichter an reflektiertem als an transmittiertem Licht zu messen. Sonst besteht kein wesentlicher Unterschied zwischen Faraday- und Kerr-Effekt.

Um den Kerr-Effekt bei der Reflexion an einer oder mehreren magnetischen Schichten zu beschreiben, sind die Maxwell-Gleichungen in allen beteiligten Medien inkl. der Randbedingungen an den Grenzflächen zu erfüllen, wobei die optischen Eigenschaften jedes Mediums durch sein ϵ_{ij} gegeben sind. Bei nicht verschwindendem Einfallswinkel ist es zweckmäßig, das elektrische Feld des ein- und ausgehenden Strahls (\mathbf{E}^e und \mathbf{E}^r) in seine Komponenten senkrecht und parallel zur Einfallsebene (s - und p -Komponenten) aufzuspalten. Die Reflexion kann dann durch eine Matrix aus vier Reflexionskoeffizienten beschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} E_s^r \\ E_p^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{ss} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_s^e \\ E_p^e \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Wenn der eingehende Strahl nur eine der zwei Komponenten enthält, ergeben sich einfache Ausdrücke für die Kerr-Rotation und -Elliptizität:

$$\phi_s + i\varepsilon_s = \frac{r_{ps}}{r_{ss}} \quad (2.5)$$

für s -polarisiertes Licht und

$$-\phi_p + i\varepsilon_p = \frac{r_{sp}}{r_{pp}} \quad (2.6)$$

für p -polarisiertes Licht.

Wenn die Dicke des Schichtsystems sehr klein ist im Vergleich zur Wellenlänge ($\sum_i n_i d_i \ll \lambda$), ist die gesamte Polarisationsänderung Φ des reflektierten Strahls einfach die Summe der Polarisationsänderungen an den einzelnen Schichten. Für die Reflexionskoeffizienten der s - und p -Komponenten des elektrischen Feldes ergeben sich in diesem Fall die Formeln 2.7 (Qiu u. Bader [22]). n_e und n_l bezeichnet die Brechungsindizes des ersten und letzten Mediums (vom einfallenden Strahl aus gezählt), θ_e und θ_l die Einfallswinkel auf die erste und letzte Grenzfläche, d_i , n_i und $\mathbf{Q}^{(i)}$ die Dicken, Brechungsindizes und magnetooptischen Konstanten (Voigt-Vektoren) der einzelnen Schichten. Die z -Richtung steht normal zur Oberfläche, y liegt parallel zur Oberfläche und zur Einfallsebene.

$$\begin{aligned}
r_{ss} &= \frac{n_e \cos \theta_e - n_l \cos \theta_l}{n_e \cos \theta_e + n_l \cos \theta_l} \\
r_{pp} &= \frac{n_l \cos \theta_e - n_e \cos \theta_l}{n_l \cos \theta_e + n_e \cos \theta_l} \\
r_{ps} &= -\frac{4\pi}{\lambda} \frac{n_e \cos \theta_e}{(n_e \cos \theta_e + n_l \cos \theta_l)(n_l \cos \theta_e + n_e \cos \theta_l)} \\
&\quad \cdot \left(\cos \theta_l \sum_i d_i n_i^2 Q_z^{(i)} - n_e n_l \sin \theta_e \sum_i d_i Q_y^{(i)} \right) \\
r_{sp} &= -\frac{4\pi}{\lambda} \frac{n_e \cos \theta_e}{(n_e \cos \theta_e + n_l \cos \theta_l)(n_l \cos \theta_e + n_e \cos \theta_l)} \\
&\quad \cdot \left(\cos \theta_l \sum_i d_i n_i^2 Q_z^{(i)} + n_e n_l \sin \theta_e \sum_i d_i Q_y^{(i)} \right)
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Im Fall einer einzelnen Schicht ist das erste Medium Vakuum bzw. Luft, das letzte Medium ist das Substrat, und die Summenzeichen fallen weg. Da die Dicke der Schicht eine reelle Größe ist, hängen sowohl die Kerr-Rotation als auch die Kerr-Elliptizität linear von der Schichtdicke ab. An den Vorfaktoren von $Q_z^{(i)}$ und $Q_y^{(i)}$ in Gl. 2.7 ist auch erkennbar, warum der polare Kerr-Effekt (Abb. 2.1) üblicherweise stärker ist als der longitudinale: wenn $n_e \simeq 1$ (Luft, Vakuum), ist n_i^2 meist größer als $n_e n_l$.

Für dicke Schichtsysteme können die Beiträge der einzelnen Schichten nicht einfach addiert werden, weil der Lichtstrahl tiefere Schichten nur mehr abgeschwächt erreicht. Die Matrix der Reflexionskoeffizienten muss in diesem Fall iterativ bestimmt werden ([26] S. 156 ff.). Durch die Rauheit der Grenzflächen und geänderte optische Eigenschaften ultradünner Schichten im Vergleich zum *bulk*-Material (aufgrund von Gitterverzerrungen bzw. unterschiedlicher elastischer Konstanten) können die tatsächlichen Reflexionseigenschaften von den theoretisch erwarteten abweichen.

2.2. Ionenbeschuss von Festkörperoberflächen

Der Beschuss von Oberflächen mit Ionen ist Bestandteil vieler technischer Anwendungen, z. B. zur Modifikation von Materialeigenschaften (Halbleiter-Dotierung, Beschichtungsverfahren etc.) und zur Erzeugung von Mikrostrukturen (Ionenätzen).

Die Vorgänge beim Einschlag eines hochenergetischen Teilchens in den Festkörper sind sehr komplex und können durch einfache analytische Modelle nur unzureichend beschrieben werden. Eine realistische Beschreibung der dabei ablaufenden Prozesse ist zur Zeit nur durch Molekulardynamik-Simulationen möglich.

Da der Verlauf jedes einzelnen Ioneneinschlags stark vom Zufall und von nicht kontrollierbaren Anfangsbedingungen abhängt, müssen diese Simulationen, um aussagekräftige statistische Aussagen zu erlauben, oft wiederholt werden. Um den Rechenaufwand zu reduzieren, werden deswegen meist Näherungsverfahren eingesetzt, bei denen der Festkörper nicht als ausgedehntes Mehrteilchensystem, sondern

anhand gemittelter Eigenschaften simuliert wird. Ein solcher Simulationscode (TRIM) wird in Kapitel 4 näher beschrieben.

Durch Ionenbeschuss von Oberflächen können folgende Effekte ausgelöst werden:

- Erzeugung von Defekten
- Änderung der Kristallstruktur
- Änderung der Oberflächenstruktur
- Zerstäubung (*sputtering*)
- Ionenimplantation
- Durch- oder Entmischung
- An- oder Abreicherung

Ionen verlieren ihre kinetische Energie beim Durchqueren eines Festkörpers im Wesentlichen durch zwei Arten von Prozessen: durch inelastische Wechselwirkungen mit den Elektronen der Umgebung (*electron stopping*) und durch elastische Stöße mit Atomen entlang ihrer Bahn (*nuclear stopping*). Der Energieverlust pro zurückgelegter Strecke (*stopping power*) bzw. der auf die Dichte n bezogene Bremsquerschnitt S (*stopping cross section*, Gl. 2.8) ist daher die Summe dieser zwei Beiträge.

$$S = -\frac{1}{n} \frac{dE}{ds} = S_n + S_e \quad (2.8)$$

Die Bremsquerschnitte können als Integral des Energieübertrags ΔE über den differentiellen Streuquerschnitt des jeweiligen Streuprozess geschrieben werden (Gl. 2.9). Für sie gibt es analytische und empirische Näherungsformeln.

$$S = \int \Delta E(\sigma) d\sigma \quad (2.9)$$

Die mittlere Eindringtiefe \bar{d} ergibt sich aus dem Integral über alle Energieverluste.

$$\bar{d} = \int_0^{E_0} \frac{dE}{n(S_n + S_e)} \quad (2.10)$$

Der Anteil der in Form von Anregungen, Ionisation, Elektronentransfer und Elektronenaustausch an den Festkörper abgegebenen Energie ist umso größer, je leichter und schneller das Ion und je höher seine Ladung ist. Der Rest der kinetischen Energie wird durch Stöße an das Kristallgitter abgegeben.

Die elektronischen Energieverluste sind etwa proportional zur Ionengeschwindigkeit ($S_e \propto \sqrt{E}$) und können daher beliebig groß werden. Der Energieverlust durch Stöße steigt für kleine Ionenenergien zunächst an, erreicht ein Maximum und fällt danach langsam ab. Bei Energien im Bereich von einigen keV ist dies der dominierende Anteil und kann durch elektrostatische Wechselwirkungen zwischen Thomas-Fermi-Potentialen gut beschrieben werden [27]. Die Energie, ab der die elektronischen Verluste überwiegen, hängt stark von der Projektil-Target-Kombination ab. Sie kann um mehrere Größenordnungen variieren.

Ist die an ein Gitteratom abgegebene Energie groß genug, um die Bindungen zum Kristallgitter zu lösen, so entsteht ein *Frenkel-Defekt*, bestehend aus einer Leerstelle und einem Zwischengitteratom. Die dazu minimal nötige Energie sinkt mit steigender Temperatur und ist abhängig von der Richtung, entlang der der Stoß erfolgt. Bei kubisch-raumzentrierten Metallen ist diese Schwellenenergie minimal für Stöße entlang von $\{100\}$ - und $\{111\}$ -Richtungen im Kristallgitter und groß entlang von $\{110\}$ -Richtungen, bei kubisch-flächenzentrierten Metallen minimal entlang von $\{100\}$ - und $\{110\}$ -Richtungen und groß entlang von $\{111\}$ -Richtungen [28].

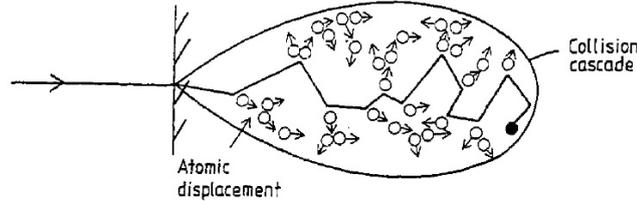


Abbildung 2.3.: Stoßkaskade (*collision cascade*) beim Einschlag eines Ions [29]

Die verdrängten Atome geben ihre kinetische Energie wiederum an andere Gitteratome weiter, wodurch sich eine Stoß- bzw. Versetzungskaskade ausbildet (Abb. 2.3). Wenn die Energie des einfallenden Ions ($\sim \text{keV}$) viel höher ist als die zum Aufbrechen einzelner Kristallbindungen nötige Energie (einige 10 eV), sind entsprechend viele Atome an der Stoßkaskade beteiligt. Nach etwa 10^{-13} Sekunden kommt die Stoßkaskade zum Stillstand und die eingebrachte Energie beginnt sich zu verteilen, bis lokal ein thermisches Gleichgewicht erreicht ist. In dieser Phase (*thermal spike*) bildet sich ein tropfenförmiger Bereich aus geschmolzenem Material, der sich ausbreitet, abkühlt und innerhalb einiger 10^{-12} Sekunden wieder rekristallisiert. Das Volumen des aufgeschmolzenen Bereichs lässt sich anhand der Schmelztemperatur T_s und der durch Stöße abgegebenen Energie E_{nuc} abschätzen [28].

$$V_{\text{melt}} \approx V_{\text{atom}} \cdot \frac{E_{\text{nuc}}}{14k_{\text{B}}T_s} \quad (2.11)$$

Da die Dichte der flüssigen Phase geringer ist als die Dichte des Kristalls, steht das flüssige Volumen unter Druck. Wenn der geschmolzene Bereich bis zur Oberfläche reicht, entweicht flüssiges Material zur Oberfläche, bis die Druckdifferenz ausgeglichen ist (Abb. 2.4 a). Die Rekristallisation erfolgt von außen nach innen, sodass in diesem Fall eine Adatomsinsel an der Oberfläche und ein Leerstellencluster im Zentrum des Bereichs zurückbleibt (Abb. 2.4 b).

Ein Großteil der beim Einschlag des Ions entstandenen Punktdefekte wird durch das anschließende Aufschmelzen und Abkühlen wieder ausgeheilt. Je weiter sich die Defekte vom Zentrum des Einschlags wegbewegen, umso geringer ist die Wahrscheinlichkeit einer Rekombination zwischen Fehlstellen und Zwischengitteratomen. Die Effizienz der Bildung von Defekten hängt deshalb in komplizierter Weise von der Form und Größe der Stoßkaskade bzw. des *Thermal Spikes* ab [31]. Die implantierten

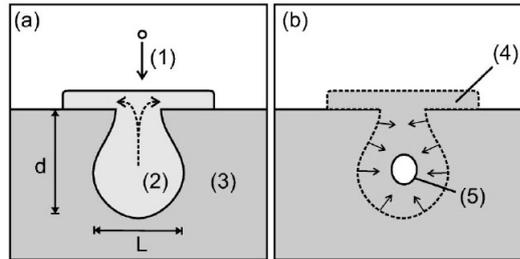


Abbildung 2.4.: Modell der Entstehung von Adatominseln bei Ionenbeschuss durch lokales Aufschmelzen knapp unterhalb der Oberfläche [30]

Ionen bilden als Substitutions- oder Zwischengitteratome zusätzliche Punktdefekte. Bei hohen Ionendosen und großen Eindringtiefen kann es unter Umständen zur Bildung von Gasblasen unter der Oberfläche kommen.

Da der flüssige Bereich von außen nach innen rekristallisiert, erstarrt das Material üblicherweise in der Kristallstruktur des umgebenden Festkörpers. Unter günstigen Voraussetzungen (lokale Gitterverzerrungen, mehrere energetisch ähnliche Kristallstrukturen) kann ein Teil der Schmelze jedoch auch anders kristallisieren.

Beim Ionenbeschuss ultradünner Schichten kommt es durch die Stoßkaskade und das anschließende Aufschmelzen zur Durchmischung zwischen Schicht und Substrat. Dieser Effekt ist umso stärker, je mehr des geschmolzenen Bereichs an der Grenzfläche zwischen verschiedenen Materialien liegt. Die Durchmischung durch direkten Impulsübertrag im Verlauf der Stoßkaskade (Abb. 2.5) spielt im Vergleich zur Diffusion während des *Thermal Spikes* meist eine untergeordnete Rolle [28].

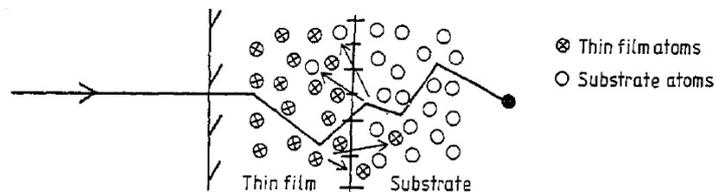


Abbildung 2.5.: Durchmischung zwischen Schicht und Substrat [29]

Bei Legierungen kann es aufgrund unterschiedlicher Oberflächenenergien der beteiligten Elemente zu An- bzw. Abreicherungen an der Oberfläche kommen. Auch durch präferentielles Zerstäuben (s. u.) kann sich die Zusammensetzung der Oberfläche ändern.

Vergleicht man die ungefähre Dauer des *Thermal Spikes* (10^{-12} Sekunden) mit einer typischen Flächenstoßrate (10^{-4} Ionen pro Oberflächenatom und Sekunde), wird deutlich, dass die einzelnen Ioneneinschläge als voneinander unabhängige Ereignisse betrachtet werden können.

Zerstäubung (*Sputtering*)

Ein weiterer wichtiger Effekt ist die Zerstäubung der Oberfläche durch Ionenbeschuss. Wenn der Energieübertrag auf ein oberflächennahes Gitteratom während der Stoßkaskade groß genug ist, kann sich das Atom vom Festkörper lösen und in die Gasphase übergehen. Dieser Prozess wird u. a. zur Reinigung von Oberflächen und zum „Verdampfen“ von Material bei physikalischen Beschichtungsverfahren (*sputter deposition*) eingesetzt.

Die Effizienz des Oberflächenabtrags wird durch den Zerstäubungsfaktor Y charakterisiert (*sputter yield*). Er gibt die mittlere Zahl der gesputterten Atome pro einfallendem Ion an und hängt im Wesentlichen von folgenden Faktoren ab:

- Ionenenergie
- Ionenmasse
- Massen der Oberflächenelemente
- Oberflächenbindungsenergie
- Einfallswinkel des Ionenstrahls

Die Rauheit der Oberfläche, sowie bei kristallinen Oberflächen die Kristallstruktur und -orientierung können, in geringerem Ausmaß, ebenfalls den Zerstäubungsfaktor beeinflussen [32].

Erstaunlicherweise gibt es kein theoretisches Modell, anhand dessen man Sputter Yields aus diesen Parametern ableiten kann. Simulationen sind entweder zu aufwändig (Molekulardynamik) oder nicht realistisch genug, um zuverlässige Werte für beliebige Parameterkombinationen zu liefern. Da gemessene Sputter Yields oft erheblich von einander abweichen, werden zur Abschätzung meist empirische Formeln auf der Basis vieler unabhängiger Experimente verwendet. Die umfassendste Sammlung solcher Fitkurven (Matsunami *et al.*, 1983 [33]) basiert auf allen bis zu diesem Zeitpunkt veröffentlichten Daten für Ionenbeschuss monoatomarer, polykristalliner Materialien bei senkrechtem Einfallswinkel. Eine weitere empirische Formel zur Berechnung von Sputter Yields ist die von Bohdansky *et al.* [34]. Für Edelgas-Ionen und bestimmte Ionenenergien stehen auch Tabellen zur Verfügung [35].

Zerstäubungsfaktoren schräg einfallender Ionen lassen sich durch Näherungsformeln aus den entsprechenden Werten bei senkrechtem Einfall abschätzen [36, 37, 32]. Diese Werte gelten allerdings nicht für monokristalline Materialien, wo der Faktor bei Ioneneinfall entlang niedrigindizierter Kristallrichtungen um ein Vielfaches niedriger sein kann (*channeling*).

Der Zerstäubungsfaktor Y ist praktisch unabhängig von der Temperatur und steigt bei kleinen Ionenenergien mit der Energie. Im Bereich von 500 eV bis 2 keV steigt Y für eine bestimmte Kombination von Sputter- und Targetelement näherungsweise mit der Wurzel der Ionenenergie [38].

$$Y(E) \propto Y(1 \text{ keV}) \cdot \sqrt{\frac{E}{1 \text{ keV}}} \quad (2.12)$$

Der bestimmende Parameter in diesem Energiebereich ist die Sublimations- bzw. Oberflächenbindungsenergie des Targetmaterials ($Y \propto E_{\text{sub}}^{1,3}$ bei 1 keV [38]). Bei sehr hohen Ionenenergien (> 100 keV) geht der Zerstäubungsfaktor aufgrund der höheren Eindringtiefe wieder zurück.

Bei Legierungen und Mischsystemen werden die Komponenten im Allgemeinen unterschiedlich stark gesputtert, wodurch sich mit der Zeit die Zusammensetzung der Oberfläche ändert. Durch ungleichmäßigen Materialabtrag und den oben beschriebenen Ausfluss-Prozess (Abb. 2.4) wird die Oberfläche zudem immer rauher (Facettierung).

2.3. Analytische Methoden

2.3.1. Auger electron spectroscopy (AES)

Augerelektronenspektroskopie ist eine Standardmethode zur Bestimmung der chemischen Zusammensetzung von Oberflächen. Der zu Grunde liegende Auger-Effekt wurde 1925 von Pierre Auger entdeckt und beruht auf der strahlungslosen Abregung ionisierter Atome durch Emission von Elektronen. Die Energie des emittierten Auger-Elektrons ist abhängig von den Energieniveaus des Atoms bzw. Ions und damit charakteristisch für das chemische Element. AES ist oberflächensensitiv, leicht durchzuführen und praktisch zerstörungsfrei. Bis auf Wasserstoff und Helium sind im Prinzip alle Elemente nachweisbar.

Durch Elektronenbeschuss oder Strahlung wird ein Teil der Atome der obersten Lagen in einer inneren Schale ionisiert. Das freigewordene Energieniveau wird sofort von einer energetisch höher liegenden Elektronenschale nachbesetzt. Die dadurch frei werdende Energie wird entweder durch Emission von Strahlung abgegeben (Röntgen-Fluoreszenz), oder durch Coulomb-Wechselwirkung als kinetische Energie auf ein anderes Elektron übertragen, das damit die Atomhülle verlässt und detektiert werden kann. Die Energie des Auger-Elektrons ist völlig unabhängig von der Energie des anregenden Teilchens und nur durch die Potentialdifferenzen der am Auger-Prozess beteiligten Energieniveaus bestimmt.

Angenommen, das Atom wurde in der innersten Schale ionisiert, und die beteiligten Elektronen kommen aus der nächst höher gelegenen Schale (Abb. 2.3.1). Dann ist die Energie des emittierten Elektrons gleich dem Energieniveau des Lochs in der K-Schale minus der Bindungsenergien des auffüllenden und des emittierten Elektrons aus der L-Schale und der Austrittsarbeit Φ des Festkörpers (Gl. 2.13, alle Energien vom Fermi-Niveau positiv gezählt).

$$E_{\text{KLL}} = E_{\text{K}} - (E_{\text{L}_1} + E_{\text{L}_2}) - \Phi \quad (2.13)$$

Für genaue Rechnungen ist zu beachten, dass die Energieniveaus des ionisierten Atoms geringfügig verschieden sind von denen des neutralen Atoms. Der Energieübertrag durch Coulomb-Wechselwirkung ist am effektivsten zwischen Elektronen

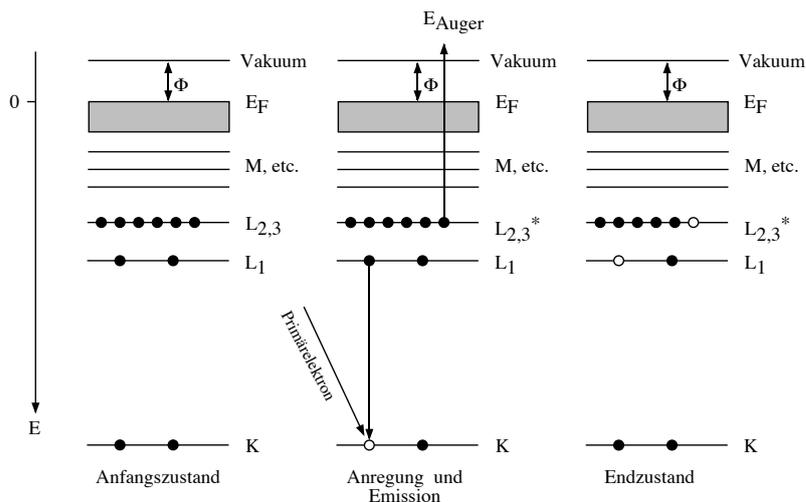


Abbildung 2.6.: Augerprozess, Energieniveaus bei einem KLL-Übergang

derselben Drehimpuls-Quantenzahl. Daher stammen die jeweils intensivsten Auger-Linien von KLL-, LMM- oder MNN-Übergängen (Abb. 2.7).

Die Oberflächensensitivität der Augerelektronenspektroskopie beruht auf der geringen Reichweite der emittierten Auger-Elektronen. Die mittleren freien Weglängen von Elektronen mit einigen hundert Elektronenvolt Energie liegen im Bereich von wenigen Ångström (Abschnitt 2.5.4), weshalb das Auger-Signal praktisch nur die Zusammensetzung der obersten Atomlagen wiedergibt.

Um die Auger-Elektronen vom Signalhintergrund der inelastisch rückgestreuten Elektronen besser trennen zu können, wird das Energiespektrum üblicherweise differenziert dargestellt. Die Differenz zwischen Minimum und Maximum des differenzierten Signal-peaks (*Auger peak-to-peak height*, APPH) ist annähernd proportional zur Anzahl der detektierten Auger-Elektronen. Aufgrund unterschiedlicher Emissions- und Absorptionswahrscheinlichkeiten sind die APPH-Werte verschiedener Spektrallinien nicht direkt als Oberflächenkonzentrationen der jeweiligen Elemente interpretierbar. Zur genauen Quantifizierung sollte das Auger-Spektrum mit am gleichen Gerät aufgenommenen Spektren der reinen Elemente verglichen werden. Für ungefähre Abschätzungen der Atomkonzentrationen sind auch die in der Literatur [40] angegebenen Empfindlichkeitsfaktoren anwendbar.

Beim von uns verwendeten Auger-System erfolgt die Ionisierung der Oberflächenatome durch einen 3-keV-Elektronenstrahl. Die Elektronen werden über einen Halbkugelanalysator und eine *Channel Plate* energieaufgelöst detektiert. Die Nachweisgrenze für Verunreinigungen liegt im Bereich von einigen Prozent einer Monolage.

2.3.2. Low energy electron diffraction (LEED)

LEED (*low energy electron diffraction*) ist das älteste und immer noch am häufigsten angewandte Verfahren zur Bestimmung von Oberflächenstrukturen. Es beruht auf der

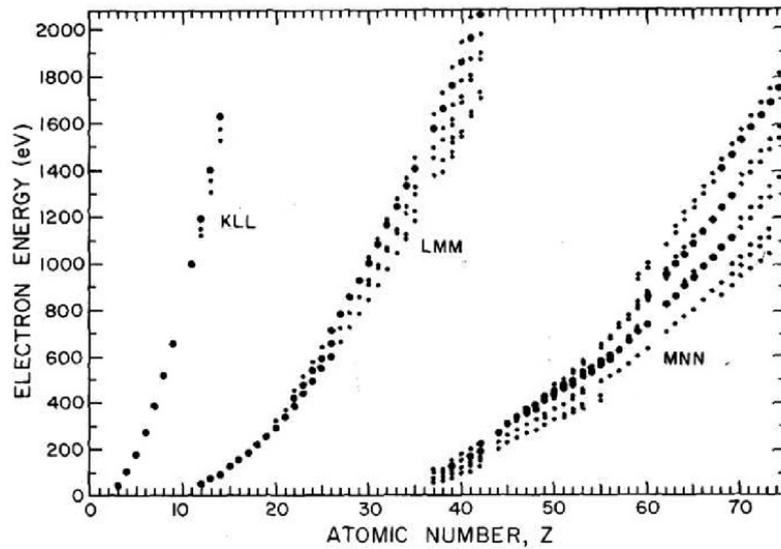


Abbildung 2.7.: Energie der wichtigsten Auger-Linien in Abhängigkeit von der Ordnungszahl [39]

Beugung monoenergetischer langsamer Elektronen an den periodischen Strukturen der Kristalloberfläche.

Elektronen mit Energien zwischen 10 und 500 eV werden als langsame Elektronen bezeichnet. Die entsprechenden de Broglie-Wellenlängen ($\lambda = h/\sqrt{2m_e E}$) liegen zwischen etwa 4 und 0,5 Å, im selben Längenbereich wie die Atomabstände im Kristallgitter und die Elementarzellen typischer Überstrukturen. Da der einfallende Elektronenstrahl in guter Näherung als ebene Welle beschrieben werden kann, ergeben sich durch Wechselwirkung mit dem periodischen Potential der Oberfläche ausgeprägte Maxima in der Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen. Betrachtet man nur die elastisch gestreuten Elektronen ($E = E_0$, $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$), entspricht die Wechselwirkung mit der Oberfläche der Beugung an einem zweidimensionalen Gitter. Aus den Symmetrien und Winkelabständen der Beugungsmaxima bei gegebener Elektronenenergie lassen sich somit die Symmetrien und Periodizitäten des Oberflächengitters bestimmen. Da die freie Weglänge von Elektronen in Festkörpern im Bereich der bei LEED verwendeten Energien ihr Minimum hat ($< 10 \text{ \AA}$), ist die Methode äußerst oberflächensensitiv.

Ein LEED-System besteht im Wesentlichen aus einer Elektronenquelle, in der Elektronen erzeugt, auf die gewünschte Energie beschleunigt und fokussiert werden, und einem Leuchtschirm auf positiver Spannung (Abb. 2.8, links). Vor dem Schirm befinden sich (zumindest) zwei Gitter: eines davon liegt auf negativem Potential, das andere auf Massepotential. Während das äußere Gitter dazu dient inelastisch gestreute Elektronen abzuhalten, schirmt das innere Gitter das Feld des äußeren ab, sodass die Bahnen der Elektronen im Raum zwischen Probe und Leuchtschirm nicht

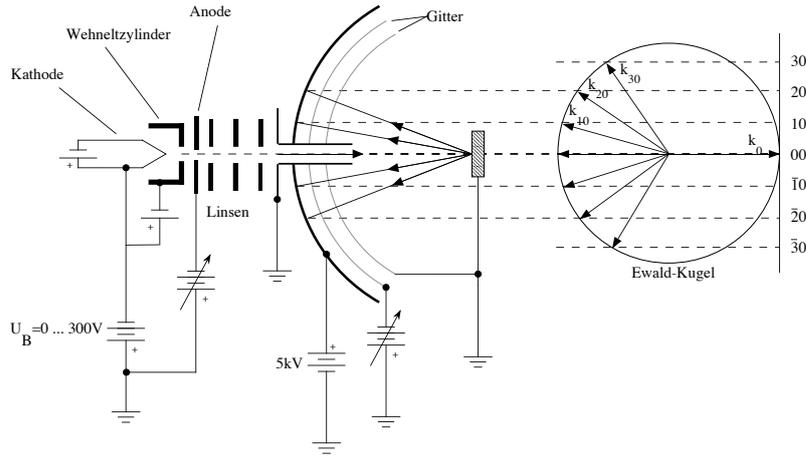


Abbildung 2.8.: Aufbau und Funktion eines LEED-Systems. Die Positionen der Beugungsreflexe am Leuchtschirm entsprechen den reziproken Gittervektoren der Probenoberfläche (Illustration: W. Rupp)

verzerrt werden. Durch das positive Potential des Schirms werden die Elektronen, die die Gitter passiert haben, beschleunigt und erzeugen beim Auftreffen auf der fluoreszierenden Beschichtung kleine Leuchtpunkte. Das Bild des Leuchtschirms wird üblicherweise auf der probenabgewandten Seite durch ein Fenster von einer Kamera aufgenommen (*reverse view* LEED) und am Computer ausgewertet.

Die Laue-Bedingung für die elastische Streuung ($|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$) einer ebenen Welle an einem dreidimensionalen Gitter gilt gleichermaßen für die Streuung an einem Oberflächengitter. In beiden Fällen tritt genau dann konstruktive Interferenz auf, wenn die Differenz zwischen einfallendem und gestreuten Wellenvektor einem reziproken Gittervektor \mathbf{g}_{hkl} entspricht.

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{g}_{hkl}, \quad \mathbf{g}_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^* \quad (h, k, l \in \mathbb{Z}) \quad (2.14)$$

Das reziproke Gitter eines zweidimensionalen Gitters entspricht im dreidimensionalen reziproken Raum einer Schar paralleler Geraden, die durch zwei ganzzahlige Indizes h und k parametrisiert werden können. Für die Laue-Bedingung sind dann nur die Komponenten von \mathbf{k} und \mathbf{k}_0 innerhalb der durch \mathbf{g}_{hk} aufgespannten Ebene (d. h. parallel zur Oberfläche) relevant.

$$\mathbf{k}^{\parallel} - \mathbf{k}_0^{\parallel} = \mathbf{g}_{hk}, \quad \mathbf{g}_{hk} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* \quad (h, k \in \mathbb{Z}) \quad (2.15)$$

Im Unterschied zur Beugung am dreidimensionalen Gitter (z. B. Röntgen-Diffraktometrie) gibt es bei der Elektronenbeugung an Kristalloberflächen oberhalb einer bestimmten Mindestenergie immer Streurichtungen, für die die Laue-Bedingung erfüllt ist. Dies wird deutlich, wenn man die Ewald-Konstruktion zur Veranschaulichung der Streubedingung im reziproken Gitter betrachtet. Da das reziproke Gitter einer

Oberfläche keinem Punktgitter sondern einer Schar von Geraden entspricht, gibt es immer Schnittpunkte mit der durch den Radius $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}|$ definierten Ewald-Kugel, sofern $|\mathbf{k}_0|$ größer ist als der kleinste reziproke Gittervektor.

Bei senkrechtem Einfallswinkel ($\mathbf{k}_0^\parallel = 0$ in Gl. 2.15) entsprechen die Positionen der Beugungsreflexe genau dem reziproken Gitter der untersuchten Oberfläche (Abb. 2.8, rechts). Erhöht man die Elektronenenergie, gibt es mehr Schnittpunkte zwischen der Ewald-Kugel und den Geraden des reziproken Gitters, d. h. mehr Beugungsreflexe. Die Streuwinkel der einzelnen Reflexe werden mit steigender Energie kleiner (Gl. 2.16), sodass die Leuchtpunkte zusammenrücken und auf den 00-Reflex zuwandern, der von der Elektronenquelle abgeschattet wird. Aus dem Streuwinkel φ eines LEED-Spots n -ter Ordnung und der Energie lässt sich leicht der entsprechende Gitterlinienabstand d_{hk} berechnen.

$$\sin \varphi = \frac{n\lambda}{d_{hk}} \approx \frac{n}{d_{hk}} \sqrt{\frac{150 \text{ eV}}{E}} \quad (d_{hk} \text{ in } \text{Å}) \quad (2.16)$$

Üblicherweise bedeckt der Elektronenstrahl einen im Vergleich zu den untersuchten Strukturen makroskopischen Bereich der Oberfläche. Gibt es in diesem Bereich unterschiedliche Oberflächenstrukturen oder verschieden orientierte Domänen derselben Struktur, so ist das LEED-Bild eine Überlagerung mehrerer Beugungsbilder.

Die Schärfe der Beugungsreflexe wird von der Ausdehnung der periodisch geordneten Bereiche und von der Kohärenz des Elektronenstrahls begrenzt. Der Kohärenzbereich R gibt den maximalen Abstand zwischen Streuzentren an, deren auslaufende Wellen noch miteinander interferieren können. Er hängt im Wesentlichen von der Energieunschärfe ΔE und der Divergenz β des Strahls ab [41].

$$R \approx \frac{\lambda}{2\beta\sqrt{1 + (\Delta E/E)^2}} \quad (2.17)$$

Für LEED-Anwendungen liegt R typischerweise zwischen 50 und 100 Å [42]. Sind die Domänen wesentlich größer, so macht es keinen Unterschied, ob die Periodizität der Oberfläche perfekt durchgehend ist oder nicht.

Da ein kleiner Teil der Elektronen unterhalb der ersten Atomlage gestreut wird, ohne dabei messbar viel Energie zu verlieren, enthält das LEED-Bild auch Informationen über die Periodizität des Kristalls normal zur Oberfläche. Dies macht sich in unterschiedlichen Intensitäten äquivalenter Beugungssspots bei verschiedenen Energien bemerkbar und kann ebenfalls zur Strukturbestimmung genutzt werden. Da die elastisch gestreuten Elektronen ein nur wenige Atomlagen tiefes Gitter „sehen“, sind dessen Fourierkomponenten normal zur Oberfläche weit weniger scharf als parallel dazu. Das reziproke Gitter einer realen Kristalloberfläche ist daher ein Mittelding zwischen den strukturlosen Geraden bzw. Stäben (*crystal truncation rods*) einer perfekt undurchdringlichen Oberfläche und einem dreidimensionalen Punktgitter. Die Stärke der Fourierkomponenten an den Schnittpunkten mit der Ewald-Kugel entspricht der Intensität der Beugungsreflexe.

Vergleicht man gemessene Kurven der Intensität eines bestimmten Beugungsspots in Abhängigkeit von der Energie (I/V-LEED) mit entsprechenden Kurven bekannter Strukturen oder mit simulierten Intensitätsverläufen, so kann man zwischen Überstrukturen unterscheiden, deren Beugungsbilder ansonsten gleich sind. Durch mehrfach gestreute Elektronen entstehen zusätzliche Intensitätsspitzen, die Hinweise auf die Anordnung der Atome innerhalb der Einheitszelle bieten können. Die genaue Bestimmung unbekannter Oberflächenstrukturen erfolgt jedoch heutzutage meist durch STM-Messungen (*scanning tunneling microscopy*) und Simulationsrechnungen.

2.3.3. Low energy ion scattering (LEIS)

Niederenergetische Ionenstreuung (*low energy ion scattering*, LEIS), auch bezeichnet als ISS (*ion scattering spectroscopy*) oder Ionenreflexionsspektroskopie, ist in erster Linie ein Verfahren zur chemischen Oberflächenanalyse. Dabei werden Ionen mit Energien von einigen hundert eV bis etwa 10 keV auf die Probe beschleunigt und das Energiespektrum der unter einem bestimmten Winkel reflektierten Ionen oder Atome untersucht. Durch Auswertung mehrerer unter verschiedenen Winkeln aufgenommenen Spektren können aufgrund von Abschattungseffekten auch Informationen über die Struktur der Oberfläche gewonnen werden.

Die Wechselwirkung zwischen Ion und Festkörperatom kann in guter Näherung als elastischer Stoß zwischen klassischen Teilchen angenommen werden. Die de-Broglie-Wellenlängen beider Stoßpartner sind genauso zu vernachlässigen wie die Energien der Bindungskräfte (\sim eV) und Gitterschwingungen ($\sim kT$) im Vergleich zur kinetischen Energie des einfallenden Ions. Zudem ist die Zeitkonstante der Gitterschwingungen ($\sim 10^{-12}$ s) wesentlich länger als die Dauer des Stoßes ($\sim 10^{-15}$ s), sodass das Atom im Wesentlichen als ruhend angesehen werden kann. Aus Energie- und Impulserhaltung folgt die Energie des gestreuten Ions nach dem Stoß (im Ruhesystem des Oberflächenatoms) zu

$$E'_1 = E_1 \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \left(\cos \vartheta \pm \sqrt{\left(\frac{m_2}{m_1}\right)^2 - \sin^2 \vartheta} \right) \right)^2 \quad (2.18)$$

E_1 und E'_1 bezeichnet die Energie des Ions vor und nach dem Stoß, ϑ den Streuwinkel, m_1 und m_2 die Massen der beiden Teilchen. Ist das einfallende Ion leichter als das Oberflächenatom ($m_1 < m_2$), gilt nur das Pluszeichen in Gleichung 2.18. Für $m_1 > m_2$ sind beide Vorzeichen möglich, im LEIS-Spektrum entstehen daher zwei Peaks mit verschiedenen Energien. Der Streuwinkel ist in diesem Fall immer kleiner als 90° .

Die Massenaufösung (Gl. 2.19) hängt vom Streuwinkel und dem Massenverhältnis m_2/m_1 ab. Sie ist umso höher, je größer der Streuwinkel ϑ ist (mehr Energieverlust) und je ähnlicher die Massen der Stoßpartner sind.

$$\frac{m_2}{\Delta m_2} = \frac{E_1}{\Delta E_1} \frac{2r}{r+1} \sqrt{\frac{r + \sin^2 \vartheta - \cos \vartheta (r^2 - \sin^2 \vartheta)}{r^2 - \sin^2 \vartheta + \cos \vartheta (r^2 - \sin^2 \vartheta)}} \quad r = \frac{m_2}{m_1} \quad (2.19)$$

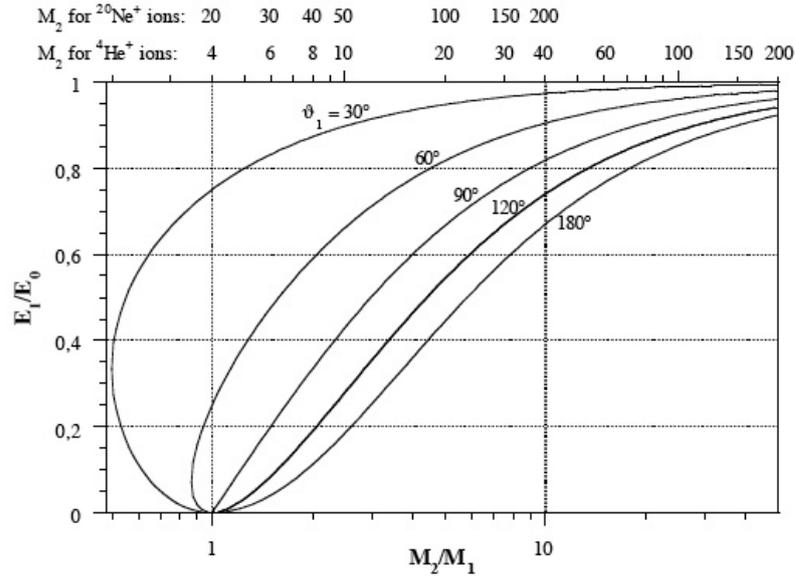


Abbildung 2.9.: Relative Energie E_1/E_0 ($= E'_1/E_1$) des gestreuten Ions als Funktion des Massenverhältnisses m_2/m_1 für verschiedene Streuwinkel ϑ [43]

Für $\vartheta = 90^\circ$ vereinfacht sich die Beziehung zu

$$\frac{m_2}{\Delta m_2} = \frac{E_1}{\Delta E_1} \frac{2r}{r^2 - 1}. \quad (2.20)$$

Ein Großteil der einfallenden Ionen wird bei der Wechselwirkung mit der Oberfläche neutralisiert. Da üblicherweise nur Ionen detektiert werden, stammt das ISS-Signal praktisch ausschließlich von Atomen der ersten Lage. Nur bei sehr „offenen“ Oberflächen (z. B. fcc- $\{110\}$) hat die zweite Atomlage einen nennenswerten Einfluss. Die Neutralisation des Ions erfolgt durch Einfang eines Elektrons aus dem Valenzband des Festkörpers. Die freiwerdende Energie wird dabei fast immer durch Emission eines Elektrons abgegeben, entweder aus dem Ion selbst (Resonanz-Neutralisation mit Auger-Abregung) oder aus dem Valenzband (Auger-Neutralisation). Die Überlebenswahrscheinlichkeit P des Ions (Gl. 2.21) hängt von dessen Geschwindigkeitskomponente v_\perp normal zur Oberfläche ab (v_c ist eine ionen- und materialabhängige Konstante) [44].

$$P \propto \exp(-v_c/v_\perp) \quad (2.21)$$

Die Streuintensität bei einer bestimmten Energie hängt im wesentlichen von der Dichte der Streuzentren, der Neutralisationswahrscheinlichkeit und dem differentiellen Streuquerschnitt im betrachteten Raumwinkelbereich ab. Zur Berechnung der Streuquerschnitte wird die Wechselwirkung zwischen Ion und Oberflächenatom durch ein abgeschirmtes Coulomb-Potential (*Thomas-Fermi, Ziegler-Biersack-Littmark* etc.)

angesetzt und über den Stoßparameter integriert. Leider weichen die für verschiedene Potentiale berechneten Streuquerschnitte zum Teil erheblich voneinander ab, sodass damit nur sehr ungenaue Aussagen über Oberflächenkonzentrationen möglich sind.

Das beschriebene Einzelstoßmodell ist nicht exakt gültig. Durch Mehrfachstreuung und Abschattungseffekte ist die Streuintensität in Wirklichkeit nicht nur vom Streuwinkel abhängig, sondern auch von der Orientierung des einfallenden und reflektierten Strahls zum Kristallgitter. Hinter jedem Oberflächenatom liegt ein Bereich, in den einfallende Ionen nur schwer eindringen können (*shadowing*); knapp außerhalb dieses Schattenkegels ist die Intensität dafür entsprechend höher (*focusing*). Beim reflektierten Strahl treten analoge Effekte auf (*blocking* und *focusing*).

Für quantitative Analysen benötigt man Vergleichsspektren von Reinelementen bzw. von Proben bekannter Oberflächenzusammensetzung. Die Vergleichskurven müssen bei gleicher Energie und gleichem Streuwinkel, wenn möglich mit derselben Apparatur unter gleichen Bedingungen aufgenommen worden sein. Die Konzentrationsverhältnisse der Oberfläche können dann durch Überlagerung der Spektren und Anpassung der relativen Signalstärken ermittelt werden.

Da der differenzielle Streuquerschnitt mit steigendem Streuwinkel abnimmt, die Massenauflösung aber umso höher ist, je mehr Energie das Ion beim Stoß verliert, ist der Streuwinkel bei LEIS-Messungen immer ein Kompromiss zwischen Empfindlichkeit und Massenauflösung.

Für niederenergetische Ionenstreuung werden meist leichte Edelgas-Ionen (He^+ , Ne^+ , Ar^+) benutzt, wegen der geringeren Neutralisationswahrscheinlichkeit manchmal auch Erdalkali-Ionen (z. B. Na^+).

2.3.4. Surface magneto-optical Kerr-effect (SMOKE)

Das für unsere Experimente gebaute SMOKE-System (*surface magneto-optical Kerr-effect*) zur Messung magnetischer Eigenschaften von Oberflächen beruht auf dem magnetooptischen Kerr-Effekt (Abschnitt 2.1). Dabei wird die Probe in einem äußeren Feld magnetisiert und die Änderung der Polarisation von an der Probenoberfläche reflektiertem Licht gemessen.

Der Effekt der Oberflächenmagnetisierung auf die Polarisation ist sehr gering, weshalb zur Trennung des Signals vom Rauschuntergrund die Lock-in-Technik angewandt wird. Indem ein Parameter der Messung (in diesem Fall die Polarisation) mit einer bestimmten Frequenz moduliert wird, überträgt sich die Modulation auf das Messsignal, während thermisches Rauschen und die meisten Störsignale davon unbeeinflusst bleiben. Ein Lock-in-Verstärker verstärkt selektiv den Anteil des Detektorsignals, der mit der Modulatorfrequenz (oder höherer Harmonischer davon) korreliert, und erlaubt so die Messung von Signalen, die wesentlich schwächer sind als umgebende Rausch- oder Störsignale.

Abb. 2.10 zeigt den prinzipiellen Aufbau des SMOKE-Systems. Der linear polarisierte Strahl eines Helium-Neon-Lasers (632,8 nm, 2 mW) wird durch ein Glan-Taylor-Prisma geschickt, um (eventuell vorhandene) nicht parallel zur Polarisationsrichtung schwingende Lasermoden herauszufiltern. Danach durchläuft der Strahl einen photo-

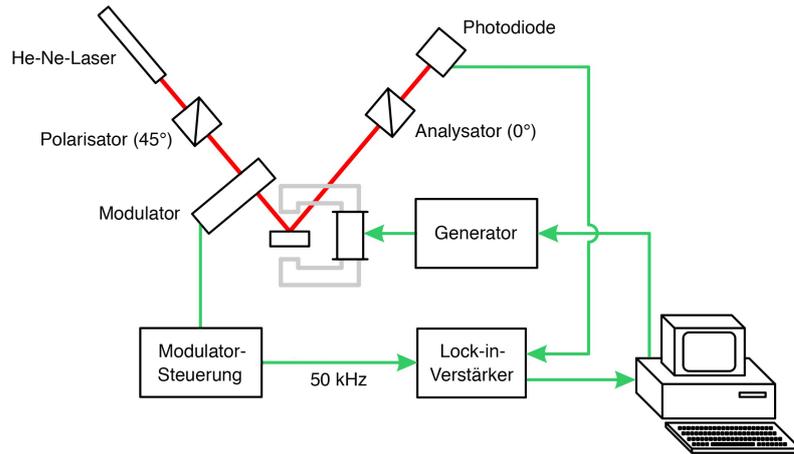


Abbildung 2.10.: SMOKE-System (schematisch)

elastischen Modulator (PEM), dessen Modulationsrichtung im Winkel von 45° zur Polarisationsrichtung steht. Der Modulator besteht im wesentlichen aus einem Stück Quarzglas, das von einem piezoelektrischen Transducer zu Schwingungen bei einer Resonanzfrequenz von etwa 50 kHz angeregt wird. Durch Dehnung und Stauchung des Materials ändert sich mit der mechanischen Schwingung auch der Brechungsindex, sodass das Laserlicht nach dem Durchgang zyklisch zwischen links- und rechtszirkular elliptischer Polarisation hin und her wechselt.

Der modulierte Strahl wird an der Probe reflektiert und erfährt dabei abhängig von deren Oberflächenmagnetisierung eine kleine Änderung der Polarisation. Während der SMOKE-Messung befindet sich die Probe im Spalt eines Elektromagneten, dessen Reineisenkern außerhalb der Vakuumkammer durch zwei Spulen mit je 2800 Windungen magnetisiert wird. Das Magnetfeld im Spalt wird über den Spulenstrom geregelt und erreicht bei 1,6 A einen Maximalwert von ca. 100 mT. Durch Drehen des Probenhalters um die vertikale Achse wird die Probe in die richtige Position zur Messung des polaren oder longitudinalen Kerr-Effekts gebracht, d. h. entweder senkrecht oder parallel zum angelegten Feld. Das Laserlicht durchquert den Eisenkern durch eigens angelegte Bohrungen und läuft, je nach SMOKE-Orientierung, über eines von zwei gegenüberliegenden Flanschgläsern nach draußen. Dort wird der Strahl durch ein weiteres Glan-Taylor-Prisma im Winkel von 45° (bezogen auf die Durchlassrichtung des ersten Polarisators) analysiert und von einer Photodiode detektiert.

Durch die Wirkung des Analysators vor dem Detektor ist der Strom der Photodiode mit derselben Frequenz moduliert wie die Polarisation des einfallenden Strahls. Aus diesem Photostrom, zusammen mit dem Referenzsignal des photoelastischen Modulators, errechnet ein Lock-in-Verstärker die Phasenverschiebung durch den Kerr-Effekt an der Probenoberfläche.

Da der zu messende Effekt sehr klein ist, mussten die durch das Magnetfeld ent-

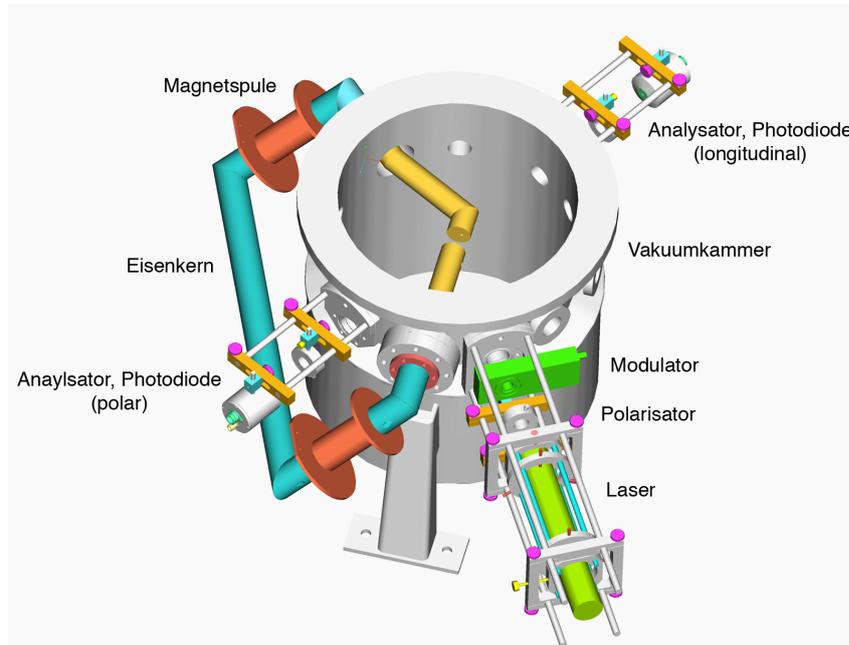


Abbildung 2.11.: SMOKE-System (CAD-Modell), oberer Teil der Vakuummkammer und Laser-Abschirmung zur besseren Sichtbarkeit entfernt

stehenden Kräfte auf die Messapparatur beim Entwurf berücksichtigt werden. Das Vakuumgefäß besteht aus nicht-ferromagnetischem Material, auch beim Probenhalter und bei den Halterungen der optischen Komponenten (Flanschgläser, Polarisatoren, Photodioden) wurde darauf geachtet, keine magnetischen Materialien zu verwenden. Der He-Ne-Laser und der photoelastische Modulator entsprachen diesen Anforderungen nicht, sie wurden deshalb mit einer Abschirmung aus ein Millimeter dickem Transformatorblech umgeben.

Der äußere Teil des Eisenkerns ist an zwei Verbindungsflanschen mit der Vakuummkammer verbunden, über die das Magnetfeld auf den inneren Teil übertritt. Er besteht aus drei Teilen, die vor dem Ausheizen der Anlage auseinandergeschraubt und entfernt werden.

Das Lock-in-Signal wird über eine Messkarte und *LabView* von einem PC aufgezeichnet, der auch den Strom der Magnetspulen steuert (Abb. 2.10). Aus vielen Messpunkten bei unterschiedlichem Spulenstrom entsteht schließlich eine Hysteresekurve der Kerr-Rotation oder -Elliptizität in Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld. Rotation und Elliptizität (Abschnitt 2.1) sind beide direkt proportional zur Oberflächenmagnetisierung und gleichermaßen für SMOKE-Messungen geeignet. Der Unterschied besteht im Wesentlichen darin, dass zur Messung der Kerr-Elliptizität die zweite Harmonische des Photosignals analysiert wird ($2f$ - statt $1f$ -Modus des Lock-in-Verstärkers).

Gesteuert werden die SMOKE-Messungen von einem *LabView*-Modul („virtual

instrument“), das die Messdaten vorauswertet, graphisch darstellt und automatisch abspeichert. Über eine Benutzerschnittstelle werden die Parameter eingegeben: Zeitdauer pro Messpunkt, maximale Spannung der Magnetspulen, Anzahl der Durchgänge und Anzahl der Messpunkte pro Durchgang (bzw. Schrittweite in Volt). In ein Textfeld können Präparation, Messposition und andere Kommentare eingegeben werden, die zusammen mit allen Parametern und gemessenen Daten in einer Datei gespeichert werden. Das Signal des Lock-in-Verstärkers wird in Einheiten der Kerr-Rotation bzw. -Elliptizität umgerechnet, wobei *sensitivity* (Messbereich in mV) und *reference mode* ($1f$ oder $2f$) automatisch in die Berechnung eingehen. Der jeweilige Messwert wird über dem aktuellen Spulenstrom als Punkt dargestellt, sodass nach und nach eine Hysteresekurve entsteht.

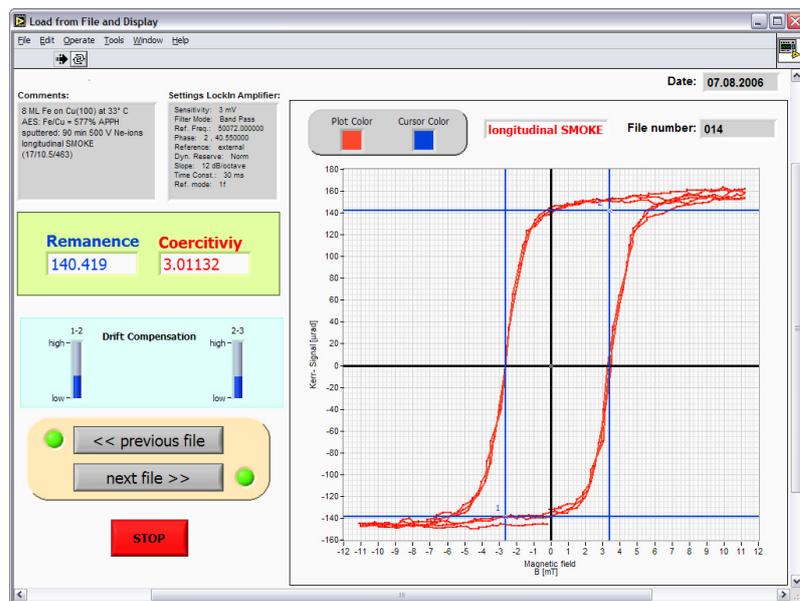


Abbildung 2.12.: Screenshot des *LabView*-Moduls zum Auswerten der SMOKE-Messdaten

Die Messdatei kann in einem beliebigen Tabellenkalkulationsprogramm weiter bearbeitet werden. Es steht jedoch auch ein eigenes *LabView*-Modul zur genaueren Auswertung zur Verfügung (Abb. 2.12), das die Hysteresekurve zentriert, indem von jedem Messpunkt der arithmetische Mittelwert aller Punkte abgezogen wird ($\overline{M(H)} \stackrel{!}{=} -\overline{M(-H)}$). Eine konstante Drift des Messsignals wird ebenfalls automatisch ausgeglichen.

Die zwei wichtigsten Kenngrößen für die Eigenschaften eines ferromagnetischen Materials, die sich aus der Hysteresekurve ablesen lassen, sind Remanenz und Koerzitivfeld. Sie sind im allgemeinen (nicht nur bei ultradünnen Schichten!) abhängig von der Richtung des äußeren Feldes. Die Remanenz ist definiert als die zurückbleibende Magnetisierung, nachdem das Material bis zur Sättigung magnetisiert wurde und das

äußere Feld wieder auf Null zurückgegangen ist. Das Koerzitivfeld ist jene Feldstärke, die nötig ist, um die remanente Magnetisierung wieder auf Null zu reduzieren. Beide Größen, bzw. die entsprechenden Werte der Kerr-Rotation und des Spulenstroms, können mit dem Auswertungs-Modul recht einfach und schnell ermittelt werden.

Bei extrem weichmagnetischen Proben macht sich die nicht verschwindende Remanenz des Magnetkerns oft dadurch bemerkbar, dass die Hysteresekurve in horizontaler Richtung verschoben erscheint. In diesen Fällen wird das Zentrum der Kurve als Ursprung der Magnetfeldskala angenommen und zur Bestimmung der Remanenz verwendet.

Ablauf einer SMOKE-Messung

Zunächst wird der Probenhalter in den Spalt des Eisenkerns abgesenkt und in gleichem Abstand zu den beiden Polen positioniert, damit das Magnetfeld während der Messung möglichst homogen ist. Durch Drehen um die vertikale Achse wird die Probe so ausgerichtet, dass die Kristalloberfläche normal bzw. parallel zum Magnetfeld liegt, je nachdem ob polar oder longitudinal gemessen werden soll. Durch Feineinstellung aller Winkel und Positionen muß sichergestellt werden, dass der Laserstrahl durch die Bohrungen des Eisenkerns und das jeweilige Flanschglas nach außen gelangt und auf das Analysator-Prisma trifft. Wenn das Profil des Laserstrahls keine unerwünschten Reflexionen zeigt, wird die Photodiode im Strahl positioniert und durch Verschieben/Verdrehen der Photostrom maximiert ($U \simeq 3,5 \text{ mV}$).

Danach werden die Analysator-Richtung und die Phase des Lock-in-Verstärkers (bezogen auf das Referenzsignal des photoelastischen Modulators) so eingestellt, dass der Photostrom des an der unmagnetisierten Probe reflektierten Strahls ein Nullsignal liefert und der Verstärker gleichzeitig mit maximaler Empfindlichkeit auf jede Änderung der Oberflächenmagnetisierung reagiert. Schließlich werden über *LabView* die Messparameter eingegeben und die Messung gestartet.

Die Dauer der SMOKE-Messung hängt von der Anzahl der Messpunkte und der Zeit pro Messpunkt ab (typische Werte: 3 mal 81 Einzelmessungen, 300 Millisekunden pro Messpunkt). Der Bereich, über den die Spulenspannung variiert wird, beträgt $\pm 40 \text{ Volt}$, was einem maximalen Feld von ca. 100 Millitesla im Spalt entspricht. Zur genauen Bestimmung der Koerzitivfeldstärke weichmagnetischer Schichten wird die Spannung meist über einen kleineren Bereich variiert, um die Remanenz und das Koerzitivfeld möglichst genau bestimmen zu können.

2.4. Experimenteller Aufbau

Die Präparationen und Messungen wurden an einer speziell für SMOKE-Messungen ausgerüsteten Ultrahochvakuumanlage durchgeführt (Abb. 2.13, aus historischen Gründen „*PINUP*“ genannt). Der Basisdruck der Vakuumkammer beträgt etwa $5 \cdot 10^{-11} \text{ mbar}$.

Die UHV-Bedingungen werden durch zwei wassergekühlte Turbomolekularpumpen aufrecht erhalten, denen jeweils eine Drehschieberpumpe vorgeschaltet ist. Bei Bedarf

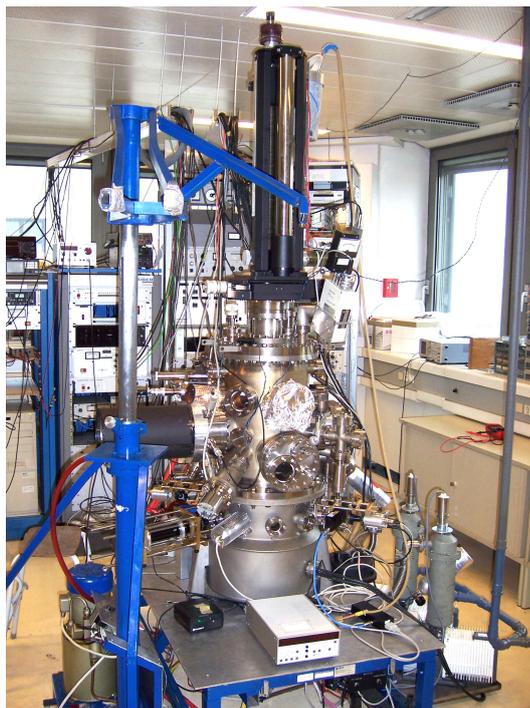


Abbildung 2.13.: Experimenteller Aufbau

kann der Druck durch eine gekühlte Titansublimationspumpe weiter gesenkt werden. Dazu wird die Oberfläche der Sublimationspumpe durch Anfüllen eines Reservoirs mit flüssigem Stickstoff gekühlt und gleichzeitig von einem geheizten Filament (85 % Ti, 15 % Mo) mit einer dünnen Schicht Titan bedampft. Die frische Titanschicht hat ein hohes Saugvermögen für reaktive Gase (H_2O , CO , CO_2 , O_2), die durch Adsorption oder chemische Bindung haften bleiben und von der wachsenden Titanschicht eingeschlossen werden. Die Kühlung erhöht die Verweilzeit der Teilchen auf der Oberfläche, sodass auch H_2 und N_2 effektiv gepumpt werden.

Zur Druckmessung stehen eine Bayard-Alpert- und eine Penning-Messzelle zur Verfügung, für Partialdruckmessungen ein Quadrupolmassenspektrometer. Der Druck auf der Vorvakuumseite wird von zwei Pirani-Messzellen überwacht. Beim Überschreiten eines Schwellenwertes, sowie beim Ausfall der Kühlwasserversorgung, werden die Turbomolekularpumpen automatisch heruntergefahren und die Anlage durch Druckluftventile isoliert. Wie jede UHV-Anlage muss die Apparatur nach jeder Belüftung für längere Zeit ausgeheizt werden (etwa zwei Tage bei 180°C), um adsorbiertes Wasser und in den Behälterwänden gelöste Gase abpumpen zu können.

Der Probenhalter ist am Ende eines senkrechten Stabes befestigt und kann elektrisch angetrieben innerhalb der Vakuumkammer auf- und abbewegt werden. Durch Stellschrauben kann der Stab zusätzlich in der horizontalen Ebene verschoben und um die senkrechte Achse gedreht werden. Der Probenträger ist senkrecht im Probenhalter befestigt und wird in die jeweils benötigte Position gefahren. Die gerade nicht

benötigten Probenträger werden in einem Probenregal gelagert und von dort bei Bedarf mit einem Manipulator (*wobble stick*) in den Probenhalter eingeschoben. Das Probenregal bietet Platz für maximal sechs Probenträger, eine Prüfspitze und einen Faraday-Cup zur genauen Messung von Teilchenströmen. In einem „Kühlregal“ können erhitzte Proben durch Kontakt mit einer Kupferfläche rasch auf Raumtemperatur gebracht werden.

Durch Widerstandsheizung und Elektronenbeschuss kann der Probenträger bis auf etwa 700 °C erhitzt werden. Ein Thermoelement im Probenhalter misst laufend die Temperatur, anhand derer der Filamentstrom geregelt wird. Über Kühlleitungen im Probenhalter kann auch gekühlt werden, wobei mit gasförmigem Stickstoff aus einem Stickstoff-Dewar etwa 120 Kelvin erreichbar sind.

Zur Erzeugung von Ionenstrahlen stehen zwei Ionenquellen zur Verfügung. Die „Leybold-Gun“ dient praktisch ausschließlich der Substratreinigung mit 500-eV-Argon-Ionen (Abschnitt 2.5.2). Die „VG-Gun“ ist feiner abstimmbare und wird zur Modifikation von Oberflächen und für Ionenstreu-spektroskopie (Abschnitt 2.3.3) eingesetzt. Durch Einstellen der Fokussierspannungen wird der Ionenstrom für die jeweilige Gasart und Beschleunigungsspannung maximiert. Ein Wien-Filter und ein leichter Knick im Strahlengang blenden mehrfach geladene Ionen und Neutralteilchen aus. Beide Ionenquellen werden über eigene Leitungen differentiell gepumpt, sodass der Druck in der Vakuumkammer während des Betriebs möglichst niedrig gehalten werden kann. Durch Ablenkplatten, deren Spannung von einem Rastergenerator gesteuert wird, kann der fokussierte Ionenstrahl über einen definierten Bereich gerastert werden. Der Ionenstrom wird von einem Picoamperemeter entweder mit dem Faraday-Cup als Flächenstrom oder über den Probenhalter gemessen.

Zum Aufdampfen von Schichtsystemen (Abschnitt 2.5.3) verfügt die Anlage über zwei wassergekühlte Elektronenstrahlverdampfer, von denen einer zur Zeit mit Eisen bestückt ist, der andere mit Gold. Die Bestimmung der Beschichtungsrate erfolgt über eine Quartz-Kristall-Mikrowaage, deren Betriebstemperatur von einem Heizelement konstant gehalten wird.

Als analytische Methoden stehen AES (Augerelektronenspektroskopie), LEED (Elektronenbeugung), LEIS (Ionenstreu-spektroskopie) und das in Abschnitt 2.3.4 beschriebene SMOKE-System für magnetische Oberflächenmessungen zur Verfügung.

Das AES-System (Abschnitt 2.3.1) besteht im Wesentlichen aus einer Elektronenquelle (3 keV, 1 mA Filamentstrom) und einem dazu koaxialen Zylinderspiegelanalysator, die an einem Biegeflansch vor- und zurückgefahren werden können. Die Messelektronik wird von einem Messrechner gesteuert, an dem auch die Spektren gespeichert, differenziert und ausgewertet werden.

Am selben Rechner läuft auch das Steuerprogramm für LEIS-Messungen (Abschnitt 2.3.3). Die gestreuten Ionen werden von einem kleinen Halbkugelanalysator analysiert (Winkelauflösung 2,7°, Energieauflösung 1/40 der Passenergie), wobei der Streuwinkel durch Verschieben des Analysators verändert werden kann. Die verbleibenden Ionen werden nachbeschleunigt und durch ein Channeltron detektiert, dessen Impulse verstärkt und am Messrechner gezählt werden.

Das LEED-System zur Bestimmung von Oberflächenstrukturen (Abschnitt 2.3.2) ist in der üblichen *reverse-view*- Bauweise konstruiert. Die Beugungsreflexe am Leuchtschirm werden von einer Videokamera aufgezeichnet, deren Signal per Videokarte auf einen PC übertragen wird. Indem die Beschleunigungsspannung über eine serielle Schnittstelle gesteuert wird, können vom PC aus nicht nur Standbilder gespeichert, sondern auch automatische Bildstapel erzeugt werden.

Zum Ein- und Ausschleusen einzelner Proben steht ein eigenes Schleusensystem zur Verfügung. Es besteht im Wesentlichen aus einem Probenhalter in einem auf einer Seite verschlossenem Rohr. Der Probenhalter ist an einem Magnetstab befestigt und kann dadurch von außen bewegt werden. Die Schleuse wird an einem Flansch befestigt, der durch ein Schiebeventil von der Vakuumkammer getrennt und über eine eigene Pumpleitung evakuiert werden kann. Bei Atmosphärendruck wird die Hauptkammer von trockenem Stickstoff aus einem Stickstoff-Dewar durchströmt, sodass nach dem Anpumpen nur die Flansche und Leitungen zwischen Schleuse und Turbomolekularpumpe ausgeheizt werden müssen. Dann wird das Ventil geöffnet, der Probenhalter hineingeschoben und die Probe mit dem Manipulator ins Probenregal bzw. von dort in den Probenhalter geschoben. Die restlichen Arbeitsschritte verlaufen analog in umgekehrter Reihenfolge: Probenhalter zurückfahren, Ventil schließen, Anlage mit Stickstoff fluten, Schleuse abnehmen, Flansch verschließen, Anpumpen und Ausheizen.

2.5. Schichtpräparation

2.5.1. Der Cu(100)-Kristall

Die Probe besteht aus einem Kupfer-Einkristall in Form eines runden Scheibchens, geschnitten und poliert entlang einer {100}-Ebene. Der Kristall hat einen Durchmesser von 10 mm, eine Höhe von ca. 2 mm und ist mit Tantal-Draht auf einem Probenplättchen aus Molybdän befestigt.

Leider ist der Kristall durch zahlreiche Heizzyklen schon stark verformt, die Unebenheiten der Oberfläche sind mit freiem Auge sichtbar.

2.5.2. Substratreinigung

Zur Reinigung des Cu(100)-Kristalls von Adsorbaten und aufgedampften Schichten wird die Oberfläche etwa 20 Minuten lang durch Beschuss mit 500-eV- Ar^+ -Ionen zerstäubt (*sputtering*). Der Strahl der Ionenquelle ist dabei so weit defokussiert, dass die Probe annähernd gleichmäßig bestrahlt und trotzdem eine hohe Flächendosis erreicht wird. Die Ionen treffen senkrecht auf die Oberfläche, führen durch Impulsübertrag zur Desorption von Atomen der jeweils obersten Lagen und tragen dadurch Material ab. Der über den Probenhalter gemessene Probenstrom beträgt dabei etwa $3 \mu\text{A}$, der angezeigte Druck etwa $3 \cdot 10^{-6}$ mbar.

Durch lokale Schwankungen des Abtrags durch Ionenbeschuss wird die Oberfläche stark aufgeraut. Zudem entstehen zahlreiche Strahlenschäden in den oberen

Kristallschichten: Fehlstellen (*vacancies*), Zwischengitteratome (*interstitials*) und implantierte Ionen. Durch 20-minütiges Heizen (*annealing*) auf etwa 550°C wird ein Großteil der Defekte wieder ausgeheilt. Schwach gebundene Verunreinigungen, vor allem implantiertes Argon, diffundieren zur Oberfläche und desorbieren.

Nach dem Abkühlen wird ein Auger-Spektrum aufgenommen, um die Reinheit der Oberfläche zu überprüfen.

2.5.3. Aufdampfen

Zur Präparation der Eisen- und Goldschichten wurden zwei Elektronenstrahlverdampfer verwendet. Bei dieser Beschichtungsmethode werden Elektronen von einem Wolfram-Filament auf ein Target beschleunigt und fokussiert. Das Target ist entweder ein mit dem zu verdampfenden Material gefüllter Tigel (Gold) oder die Spitze eines etwa zwei Millimeter dicken Drahts (Eisen). Durch die hohe Strom- und Energiedichte wird das Material lokal bis zur Schmelztemperatur erhitzt und verdampft. Die erzeugte Wärme wird von einem Kühlwassersystem abgeführt, um das Ausgasen zu minimieren und die Beschichtungsbedingungen konstant zu halten.

Der Strom zwischen Filament und Target (I_{flux}) wird von einem Netzteil geregelt, wobei entweder Spannung (~ 1 kV) oder Leistung (~ 13 W für Fe, ~ 23 W für Au) konstant gehalten werden. I_{flux} wird zusätzlich über eine Ringelektrode vor dem Target gemessen und beträgt im Eisenverdampfer typischerweise ca. 60 nA, im Goldverdampfer (aufgrund der größeren Fläche des Tigels im Vergleich zum Draht im Eisenverdampfer) ca. $6 \mu\text{A}$.

Zum Kalibrieren der Beschichtungsrate wird eine Quartz-Kristall-Mikrowaage verwendet. Sie besteht aus einem piezoelektrischer Schwingquartz, der im Verdampferstrahl positioniert und auf konstanter Temperatur gehalten wird. Durch die zusätzliche Masse der aufgedampften Schicht ändert sich geringfügig die Resonanzfrequenz des Kristalls, wobei die Änderung dieser Frequenz proportional zur deponierten Masse ist. Nach Eingabe von zwei materialspezifischen Parametern (*density* und *Z-ratio*) zeigt das Steuergerät direkt das Wachstum der Schichtdicke in Ångstrom an.

Unter idealen Bedingungen lassen sich mit dieser Methode Schichtdicken mit einer Genauigkeit von bis zu 0.5 % einer Monolage messen. Leider sind die Schwankungen der Beschichtungsrate weit höher als die theoretische Messgenauigkeit. Insbesondere beim Eisenverdampfer ändern sich durch leichte Assymetrien im Abtrag des Eisendrahts Geometrie und Stärke des Elektronenstroms, was wiederum zu ungleichmäßigem Abtrag führt. Zudem muß der Eisendraht von Zeit zu Zeit nachgeführt werden. Die Fluktuationen beim Verdampfen von Gold aus dem Tigel sind im Allgemeinen schwächer, da sich der Strom auf eine größere Fläche verteilt.

Nach dem Einschalten des Verdampfers wurde üblicherweise etwa 15 Minuten gewartet, bis die Bedingungen stabil waren. Dann wurde mit der Bestimmung der Beschichtungsrate begonnen, wobei die Schwingquartz-Oberfläche gleich positioniert war wie später der zu beschichtende Kristall. Sobald die Rate (ca. 40–50 Sekunden pro ML für Fe) einigermaßen konstant blieb, wurde der Verdampferstrahl durch einen mechanischen Shutter abgeschattet und die Probe in Position gebracht. Um zu verhin-

dem, dass durch den Elektronenstrahl entstandene Ionen auf die Probe beschleunigt werden, wurde zwischen Probe und Ringelektrode eine positive Gegenspannung von 1 kV angelegt.

Zur Herstellung der Schicht wurde der Shutter geöffnet und nach Ablauf der errechneten Beschichtungszeit wieder geschlossen, wobei die Gegenspannung immer wieder kurz abgeschaltet wurde, um über die Ringelektrode den Elektronenstrom zu messen. Falls I_{flux} nicht konstant geblieben war, wurde dies entweder durch eine kleine Änderung des Filamentstroms ausgeglichen oder der Effekt auf die Beschichtungsrate abgeschätzt und die Zeit entsprechend angepasst.

Der gemessene Druck während des Aufdampfens lag in der Regel unter $2 \cdot 10^{-10}$ mbar.

2.5.4. Schichtdickenkontrolle

Eisenschichten

Nach dem Aufdampfen wurden an einer oder mehreren Stellen der Probenoberfläche Auger-Spektren aufgenommen und zur Schichtdickenkontrolle ausgewertet. Die Differenzen zwischen Maximum und Minimum des differenzierten Signals (*Auger peak-to-peak height*, APPH) der jeweils stärksten Auger-Linie von Eisen (703 eV) und Kupfer (920 eV) wurden ausgemessen und zueinander in Verhältnis gesetzt. Dieses APPH-Verhältnis wurde dann mit theoretisch errechneten Werten verglichen, um die tatsächliche Dicke der Eisenschicht abschätzen zu können.

Die wichtigste Größe zur Charakterisierung der Reichweite von Auger-Elektronen in Festkörpern ist die inelastische mittlere freie Weglänge (*inelastic mean free path*, λ_i). Sie gibt die mittlere lineare Distanz zwischen aufeinanderfolgenden inelastischen Stößen des Elektrons mit den Atomen des Festkörpers an. Jene Auger-Elektronen, die durch inelastische Wechselwirkungen einen Teil ihrer Energie verlieren, werden entweder absorbiert oder Teil des kontinuierlichen Signalhintergrunds. Auf jeden Fall scheinen sie nicht im diskreten Teil des Spektrums auf.

Andere wichtige Transportparameter sind die elastische mittlere freie Weglänge (*elastic mean free path*, λ_e), die die mittlere Distanz zwischen aufeinanderfolgenden elastischen Stößen angibt, sowie jene Distanz (*transport mean free path*, λ_{tr}), nach der das Elektron seine ursprüngliche Bewegungsrichtung typischerweise „vergessen“ hat.

Das zur Berechnung der APPH-Verhältnisse angewandte Modell geht von der Näherung einer exponentiellen Abschwächung der Auger-Elektronen auf ihrem Weg zur Oberfläche aus. Die dafür maßgebliche inelastische mittlere freie Weglänge gibt die durchschnittliche Distanz bis zum ersten inelastischen Stoß an, nach dem ein Elektron für die Höhe des jeweiligen Auger-peaks nicht mehr relevant ist.

Durch elastische Wechselwirkungen mit den umgebenden Atomen verliert das Elektron zudem nach und nach die Richtung seines Anfangsimpuls, wodurch die lineare Bewegung in eine Diffusionsbewegung übergeht. Für kurze Distanzen kann dieser Effekt durch eine Korrektur der inelastischen mittleren freien Weglänge berücksichtigt

werden. Für diese effektive mittlere freie Weglänge (*effective mean free path*, λ_{eff}) sind für $\lambda_i \lesssim \lambda_{\text{tr}}$ zwei einfache Näherungsformeln gebräuchlich: $\lambda_{\text{eff}}^{-1} \simeq \lambda_i^{-1} + \lambda_{\text{tr}}^{-1}$ [45, 46] und $\lambda_{\text{eff}}^{-1} \simeq \lambda_i^{-1} + (2\lambda_{\text{tr}})^{-1}$ [47]. Zur genaueren Beschreibung des Transports von Elektronen unter Berücksichtigung von Mehrfachstreuungen eignen sich Monte-Carlo-Simulationen [48].

Die Werte von λ_i und λ_{tr} in Eisen und Kupfer (Tab. 2.1) für die jeweiligen Energien wurden Tabellen [49] entnommen und für λ_i zusätzlich durch eine experimentell bestimmte Interpolationsfunktion [50] errechnet. Für die effektive mittlere freie Weglänge wurde die erste der beiden oben angegebenen Näherungsformeln benutzt.

Tabelle 2.1.: mittlere freie Weglängen λ_i [49, 50], λ_{tr} [49], λ_{eff} für Elektronen unterschiedlicher Energie in Eisen und Kupfer (Å)

	λ_i^1	λ_i^2	λ_{tr}	λ_{eff}^1	λ_{eff}^2
Fe, 703 eV	13,0	11,9	26,7	8,7	8,2
Fe, 920 eV	15,7	14,3	37,5	11,1	10,4
Fe, 3 keV	39,3	34,6	198,1	32,8	29,4
Cu, 920 eV	16,3	14,6	33,7	11,0	10,2
Cu, 3 keV	40,3	35,9	172,4	32,7	29,7

Die *Auger peak-to-peak height* einer d Monolagen dicken Eisenschicht (Gl. 2.22) läßt sich unter diesen Annahmen als Summe über die Beiträge der einzelnen Atomlagen ansetzen, gewichtet mit einem tiefenabhängigen Dämpfungsfaktor.

$$\text{APPH}_{\text{Fe}}(d) = C_{\text{Fe}} P_{\text{Fe}} d_{\text{Fe}} \sum_{n=0}^{d-1} \exp\left(-n a_{\text{Fe}} \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{3\text{keV}}} + \frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{703\text{eV}} \cos \phi}\right)\right) \quad (2.22)$$

- a_{Fe} Lagenabstand
- d_{Fe} Atomdichte pro Flächeneinheit
- C_{Fe} Materialkonstante (Gl. 2.24)
- P_{Fe} Auger-Empfindlichkeitsfaktor
- λ_{Fe} effektive mittlere freie Weglänge λ_{eff}
- ϕ CMA-Einfallswinkel (42,3°)

Die Primärelektronen treten senkrecht zur Oberfläche in die Schicht ein, gelangen abgeschwächt zur Tiefe $n \cdot a_{\text{Fe}}$ und führen dort zur Emission von Auger-Elektronen. Diese werden von einem Zylinderanalysator unter dem Winkel ϕ zur Flächennormale detektiert, weshalb der Weg der Elektronen zur Oberfläche (unter der Annahme geradliniger Ausbreitung) um den Faktor $\frac{1}{\cos \phi}$ länger ist. Bei pseudomorph gewachsenen Eisenschichten sind für d_{Fe} und a_{Fe} die entsprechenden Werte des Substrats einzusetzen.

Das Auger-Signal des Kupfersubstrats wird von der darüber liegenden Eisenschicht abgeschwächt. Dadurch ergibt sich die *Auger peak-to-peak height* des Cu-peaks,

abhängig von der Dicke der Eisenschicht, zu

$$\begin{aligned} \text{APPH}_{\text{Cu}}(d) = C_{\text{Cu}} P_{\text{Cu}} d_{\text{Cu}} \exp\left(-d a_{\text{Cu}} \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{3\text{keV}}} + \frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{920\text{eV}} \cos \phi}\right)\right) \cdot \\ \cdot \sum_{n=d}^{\infty} \exp\left(-(n-d) a_{\text{Cu}} \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{3\text{keV}}} + \frac{1}{\lambda_{\text{Cu}}^{920\text{eV}} \cos \phi}\right)\right). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Die Materialkonstanten C_{Fe} und C_{Cu} wurden durch Auger-Messungen an reinen Eisen- und Kupferoberflächen bestimmt. Für C_{Fe} (Gl. 2.24) wurde (in Ermangelung eines Eisenkristalls) eine ca. 20 ML dicke Eisenschicht auf Cu(100) präpariert, und die *Auger peak-to-peak height* des Fe-Signals ($\text{APPH}_{\text{Fe}}^{20\text{ML}}$) über 3 Messungen an verschiedenen Positionen gemittelt. Für C_{Cu} (Gl. 2.25) wurde das Cu-Signal des gereinigten Kupferkristalls ($\text{APPH}_{\text{Cu}}^{\text{rein}}$) über 6 verschiedene Messungen gemittelt.

$$C_{\text{Fe}} = \text{APPH}_{\text{Fe}}^{20\text{ML}} P_{\text{Fe}} d_{\text{Fe}} \sum_{n=0}^{19} \exp\left(-n a_{\text{Fe}} \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{3\text{keV}}} + \frac{1}{\lambda_{\text{Fe}}^{703\text{eV}} \cos \phi}\right)\right) \quad (2.24)$$

$$C_{\text{Cu}} = \text{APPH}_{\text{Cu}}^{\text{rein}} P_{\text{Cu}} d_{\text{Cu}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-n a_{\text{Cu}} \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Cu}}^{3\text{keV}}} + \frac{1}{\lambda_{\text{Cu}}^{920\text{eV}} \cos \phi}\right)\right) \quad (2.25)$$

Tab. 2.2 zeigt die Werte für das APPH-Verhältnis von Eisen- zu Kupfer-peak, abhängig von der Dicke der Eisenschicht auf Cu(100), gerechnet mit λ_{eff}^1 und λ_{eff}^2 aus Tab. 2.1. Die Schichtdicke in Monolagen (ML) ist, wegen des pseudomorphen Wachstums im betrachteten Dickebereich, auf den Lagenabstand der Cu(100)-Oberfläche (1.81 Å) bezogen.

Die mit λ_{eff}^1 und λ_{eff}^2 gerechneten Werte unterscheiden sich zwar deutlich, durch die Schwankungen der Beschichtungsrate liegt ihre Differenz aber durchaus im Unsicherheitsbereich der Schichtdicke. Für die meisten Präparationen war eine Dicke von 14–15 Å (~ 8 ML) gewünscht, was einem APPH-Verhältnis von etwa 600 % entspricht.

Goldschichten

Zur Quantifizierung aufgedampfter Goldschichten auf Kupfer bzw. Eisen war die oben beschriebene Methode nicht anwendbar. Die Auger-Empfindlichkeit für Gold beträgt nur etwa ein Zehntel der Empfindlichkeit für Kupfer oder Eisen [40]. Vor allem aber sind die mittleren freien Weglängen für Primär- und Augerelektronen in Gold deutlich kürzer, und die präparierten Schichten waren meist dicker. Dadurch ist die angenommene Näherung (geradlinige Ausbreitung und exponentielle Abschwächung) nicht mehr anwendbar.

Da die Beschichtungsrate beim Elektronenstrahlverdampfen aus einem Tigel leichter konstant zu halten ist als beim Verdampfen von Drahtmaterial, können die Dickschwankungen der Goldschichten weitgehend vernachlässigt werden.

Tabelle 2.2.: APPH-Verhältnis von Eisen- zu Kupfer-peak (Fe auf Cu(100)), abhängig von der Schichtdicke d , errechnet für λ_{eff}^1 und λ_{eff}^2

d (Å)	d (~ML)	$\frac{\text{APPH}_{\text{Fe}}^1}{\text{APPH}_{\text{Cu}}} (\%)$	$\frac{\text{APPH}_{\text{Fe}}^2}{\text{APPH}_{\text{Cu}}} (\%)$
10	5,5	244	287
11	6,1	293	348
12	6,6	350	420
13	7,2	416	504
14	7,7	493	603
15	8,3	582	719
16	8,9	686	856
17	9,4	806	1017
18	10,0	946	1206
19	10,5	1109	1429
20	11,1	1299	1692

3. Experimente

3.1. Ionenbeschuss von 8 ML Fe auf Cu(100)

Beim Ionenbeschuss ultradünner Schichten treten eine Reihe von Effekten auf, deren theoretische Beschreibungen zum Teil noch recht unvollkommen sind (Abschnitt 2.2). Weder analytische Modelle noch Simulationen können zuverlässig vorhersagen, welche Auswirkungen auf die Struktur der Schicht die kurzzeitig hohe lokale Energiedeposition bei Einschlag eines Ions hat. Da die magnetischen Eigenschaften ultradünner Eisenschichten von deren Kristallstruktur bestimmt werden, lag es nahe zu untersuchen, unter welchen Bedingungen magnetische Phasenumandlungen durch Ionenbeschuss ausgelöst werden können.

Als Dicke der für unsere Experimente hergestellten Eisenschichten wurden acht Monolagen gewählt, damit Variationen der Schichtdicke zwischen verschiedenen Präparationen möglichst wenig Einfluss auf die Schichtstruktur haben. Acht Monolagen liegt genau im Zentrum jenes Dickenbereichs (Phase II), in dem Eisen auf Cu(100) pseudomorph kubisch-flächenzentriert wächst. Diese fcc-Eisenschichten sind bei Raumtemperatur paramagnetisch. Erst unterhalb von etwa 250 K bildet sich die „*magnetic live layer*“, eine ferromagnetisch geordnete Oberflächenrekonstruktion (Abschnitt 1.2). Da die in diesem Kapitel beschriebenen Experimente, soweit nicht anders angegeben, bei Raumtemperatur durchgeführt wurden, spielt die *magnetic live layer* in diesem Zusammenhang keine Rolle.

Für die Versuche wurden möglichst gleichartige Eisenschichten bei Raumtemperatur auf dem Kupferkristall präpariert (Abschnitt 2.5) und mit Edelgas-Ionen verschiedener Masse und Energie beschossen. Nach jeweils definierten Ionendosen wurde der Ionenbeschuss gestoppt und die magnetischen Eigenschaften der Schicht parallel zur Oberfläche durch SMOKE in longitudinaler Orientierung gemessen. Dafür wurden in der Regel zwei Hysteresekurven mit jeweils drei Durchläufen an verschiedenen Punkten der Probe aufgenommen und die Werte für Remanenz und Koerzitivfeld gemittelt.

Da der Probenhalter im Spalt des Eisenkerns nicht beliebig positioniert werden kann, wird bei SMOKE-Messungen im Allgemeinen nur die senkrechte Position variiert. Aufgrund der Unebenheit der Probenoberfläche wird der Lichtstrahl bei der Reflexion an verschiedenen Punkten des Kristalls verschieden stark aufgefächert, was die möglichen Messpunkte noch weiter einschränkt.

Zur Optimierung des Ionenstroms für die jeweilige Beschleunigungsspannung wird der Ionenstrahl auf den Faraday-Cup gelenkt und „zusammengerastert“ (die Amplitude des Rastergenerators auf Null gestellt), sodass der gesamte Strahl aufgefangen wird. Durch Variation aller Parameter (Fokussierungsspannungen, Wien-Filter, Fila-

mentstrom, Gasdruck) wird dann der über den Faraday-Cup gemessene Ionenstrom maximiert. Danach wird die Rasteramplitude wieder erhöht, bis der Ionenstrahl einen Bereich etwa vom Durchmesser der Probe (10 mm) überstreicht, und das Profil des gerasterten Strahls mit dem Faraday-Cup (1 mm² Eintrittsquerschnitt) vermessen. Aus dem Ionenstrom pro Quadratmillimeter läßt sich dann leicht die Ionendosis pro Oberflächenatom und Zeiteinheit für eine gegebene Oberfläche ausrechnen.

Da die Effizienz der Ionenquelle je nach Element und Ionenenergie zum Teil sehr unterschiedlich ist, wird bei der Beschreibung der Versuche jeweils auch der Ionenstrom bzw. die Ionendosis pro Zeiteinheit angegeben. So kann der Einfluss von Verschmutzungen der Oberfläche bei der Interpretation der Ergebnisse berücksichtigt werden. Die Werte für die Ionendosis beziehen sich, soweit nicht anders angegeben, immer auf die Dichte der Cu(100)-Oberfläche ($1,531 \cdot 10^{15}$ Atome/cm² [51]).

Niederenergetische Ionenstreuung (LEIS, Abschnitt 2.3.3) erwies sich im Lauf der Versuche als wenig geeignet zur Bestimmung der Durchmischung von Eisenschicht und Kupfersubstrat. Zur Auswertung der Streuspektren benötigt man für jede Ionenenergie und -masse Vergleichsspektren von reinen Eisen- und Kupferoberflächen, wobei aufgrund der geringen Informationstiefe von LEIS bei dicht gepackte Oberflächen praktisch nur die Zusammensetzung der ersten Atomlage relevant ist. Durch Fitten des gemessenen Spektrums mit den Vergleichskurven kann so das ungefähre Konzentrationsverhältnis der zwei Elemente an der Probenoberfläche bestimmt werden. Leider ist dies um so ungenauer, je kleiner der entsprechende Peak ist. Erst bei stark fortgeschrittener Durchmischung ist die Menge von Kupfer an der Oberfläche groß genug für eine zuverlässige Quantifizierung. Der direkte Vergleich von bei unterschiedlichen Ionenenergien aufgenommenen Streuspektren ist nicht wirklich aussagekräftig.

Augerelektronenspektroskopie ist im Vergleich zur Ionenstreuspektroskopie weniger aufwändig und empfindlicher. AES eignet sich daher in unserem Fall besser zur Beurteilung der Durchmischung, auch wenn die Signalstärke in komplizierterer Weise vom Konzentrationsprofil abhängt.

Beim Beschuss der Probe mit Helium- oder Neon-Ionen wurde die Energie der elastisch gestreuten Ionen mit LEIS analysiert. Bei Argon, Krypton und Xenon war dies wegen der ungünstigeren Massenverhältnisse zu Eisen, Kupfer und Gold nicht möglich. In einigen solchen Fällen wurde vor bzw. nach dem Ionenbeschuss LEIS mit 1,5 keV-Helium-Ionen betrieben. SMOKE-Messungen zeigen zwar keinen Hinweis auf Veränderungen der Schichteigenschaften von 8 ML Fe auf Cu(100) durch Beschuss mit Helium-Ionen (Abschnitt 3.1.1), dennoch kann, solange der Mechanismus der Transformation nicht geklärt ist, ein Einfluss durch Implantation von Helium nicht ausgeschlossen werden.

Um die Ionenquelle vom Betrieb mit einem Gas auf ein anderes umzustellen, müssen die zuführenden Leitungen ausgepumpt werden, was die Gefahr von Verschmutzungen mit sich bringt. Deshalb, und auch um die Ergebnisse besser vergleichen zu können, wurde versucht die Messungen mit verschiedenen Ionenenergien desselben Elements soweit möglich hintereinander durchzuführen.

Die Experimente mit Argon- und Krypton-Ionen vor Einbau des Wien-Filters mussten wiederholt werden, da die Ergebnisse durch neutralisierte Teilchen aus der Ionenquelle verfälscht waren. Die Neutralteilchen werden durch die Felder der Ablenkplatten nicht beeinflusst und treffen daher immer am selben Bereich der Kristalloberfläche auf. Auch wenn der Strom der Neutralteilchen im Vergleich zum Ionenstrom sehr gering ist, ergibt sich dadurch lokal eine viel höhere Teilchendosis.

Wiederholte SMOKE-Messungen unter ansonsten gleichen Bedingungen führen in der Regel zu unterschiedlichen Messwerten. Sind die Unterschiede unerwartet groß, kann dies eine Reihe von Ursachen haben: Schichtdickenschwankungen, Ionenstromschwankungen durch kleine Änderungen der Fokussierspannungen (Temperaturdrift), unterschiedliche Eigenschaften an verschiedenen Punkten der Kristalloberfläche etc. Da dem Leser einer Diplomarbeit ein vergleichsweise hohes Maß an Aufrichtigkeit zugemutet werden kann, wurden in solchen Fällen keine Messungen verworfen oder mit anderen Messungen gemittelt. Ergebnisse wurden nur aufgrund nachvollziehbarer Fehler verworfen.

Wegen der breiten Aufgabenstellung konnte nur ein kleiner Teil der Messungen mehrmals wiederholt werden. Auf die Angabe von Fehlerbalken bei der Darstellung der Ergebnisse wird daher verzichtet.

Die folgenden Unterkapitel sind nicht chronologisch geordnet, sondern nach der Ordnungszahl des verwendeten Edelgases. Eine chronologische Zusammenstellung aller Präparationen und Messungen findet sich in Anhang A.

3.1.1. Helium

Beim Beschuss mit Heliumionen zeigte sich, unabhängig von der Ionenenergie, keine signifikante Änderung der magnetischen Eigenschaften von acht Monolagen dicken Eisenschichten auf Cu(100). Wegen der geringen Ionenmasse ist der Zerstäubungsfaktor auf Eisen (Anhang B) relativ klein, sodass vergleichsweise hohe Gesamtdosen aufgebracht werden konnten ohne die Schicht zu stark abzutragen. Tabelle 3.1 zeigt die Oberflächendosen pro Stunde für die verwendeten Ionenenergien.

Tabelle 3.1.: Ionenstrom und Dosis pro Cu(100)-Oberflächenatom, He-Ionen

Energie (eV)	Ionenstrom (A/mm ²)	Dosis pro Stunde (Ionen/Oberflächenatom)
500	$8,4 \cdot 10^{-11}$	0,12
1500	$2,9 \cdot 10^{-10}$	0,43
3000	$4,0 \cdot 10^{-10}$	0,59

SMOKE-Messungen während insgesamt 300 Minuten Ionenbeschuss mit 500-eV-Helium-Ionen (entspricht einer Gesamtdosis von 0,62 Ionen pro Oberflächenatom) zeigten keine Änderung der magnetischen Eigenschaften parallel zur Oberfläche. Das APPH-Verhältnis (AES) zwischen Eisen und Kupfer blieb praktisch konstant.

Bei 1,5 keV Ionenenergie zeigte sich ebenfalls keine magnetische Phasenumwandlung. Nach insgesamt 180 Minuten Ionenbeschuss ($\sim 1,28$ Ionen pro Oberflächenatom) war das APPH-Verhältnis von 614 % auf 554 % geringfügig zurückgegangen.

Auch beim Beschuss mit 3-keV-He-Ionen zeigte sich nach 90 und 210 Minuten keine Änderung der magnetischen Eigenschaften. In Anbetracht des geringen Zerstäubungsfaktors (0,15 nach [33]) wurde der Versuch über Nacht fortgesetzt. Nach insgesamt 912 Minuten ($\sim 8,92$ Ionen pro Oberflächenatom) wurde eine sehr niedrige Remanenz von etwa $10 \mu\text{rad}$ parallel zur Schicht gemessen. Allerdings war die Eisenschicht zu diesem Zeitpunkt bereits 20 Stunden alt und den größten Teil dieser Zeit einem Druck von $3 \cdot 10^{-7}$ mbar Helium ausgesetzt. Das APPH-Verhältnis von Eisen und Kupfer war durch Sputtering und Durchmischung von anfangs 580 % auf 285 % gesunken. Die APPH-Verhältnisse von Kohlenstoff und Sauerstoff, den zwei wichtigsten Adsorbaten, waren von unter 1 % auf rund 25 % gestiegen; die Probe war also schon stark verschmutzt.

3.1.2. Neon

Versuche mit Neon-Ionen verschiedener Energie zeigen deutlich, dass sich die magnetischen Eigenschaften von acht Monolagen dicken Eisenschichten auf Cu(100) durch Ionenbeschuss verändern lassen. Die Energie der Ionen betrug zwischen 500 und 3000 Elektronenvolt. Nach verschiedenen Ionendosen wurden Hysteresekurven der *in-plane*-Magnetisierung gemessen.

Generell zeigt sich, dass die Remanenz zunächst ansteigt, ein Maximum erreicht und danach langsam wieder abfällt (Abb. 3.1). Dabei ist die maximale Remanenz umso höher, je niedriger die Energie der Ionen ist. Die zum Erreichen der maximalen Remanenz nötige Ionendosis steigt hingegen mit der Ionenenergie.

Das Koerzitivfeld (Abb. 3.2) fällt mit der Dauer der Ionenbehandlung ab und nähert sich einem konstanten Wert von etwa einem Millitesla. Dies geschieht umso rascher, je geringer die Energie der verwendeten Ionen ist. Auch nach hohen Ionendosen, wenn die Remanenz nach Überschreiten ihres Maximums wieder absinkt, bleibt die Eisenschicht weichmagnetisch.

Schichten, die mit Neon-Ionen von 500 eV bis 1000 eV beschossen wurden, erreichten ihre maximale Remanenz ($125\text{--}150 \mu\text{rad}$ in Einheiten der Kerr-Rotation) bei einer Dosis von 0,5–1 Ionen pro Oberflächenatom. Bei Beschuss mit Ionen von 1,2 keV bis 1,5 keV betrug die maximale Remanenz nur $90\text{--}105 \mu\text{rad}$, nach 1–1,5 Ionen pro Oberflächenatom. Beim Beschuss mit höheren Ionenenergien blieb die Remanenz sehr viel niedriger (unter $35 \mu\text{rad}$). Zwischen der Geschwindigkeit des Abfalls der Remanenz nach Überschreiten des Maximums und der Ionenenergie war kein Zusammenhang erkennbar.

Für geringe Ionendosen verlaufen sowohl die Zerstäubung der Eisenschicht als auch die Durchmischung mit dem Kupfersubstrat annähernd proportional zur Dosis. Wie schon erwähnt, war eine Quantifizierung der Durchmischung an der Oberfläche anhand der aufgenommenen LEIS-Spektren leider nicht möglich. Das Verhältnis der Auger-Peaks von Eisen und Kupfer wiederum ist abhängig vom gesamten Konzen-

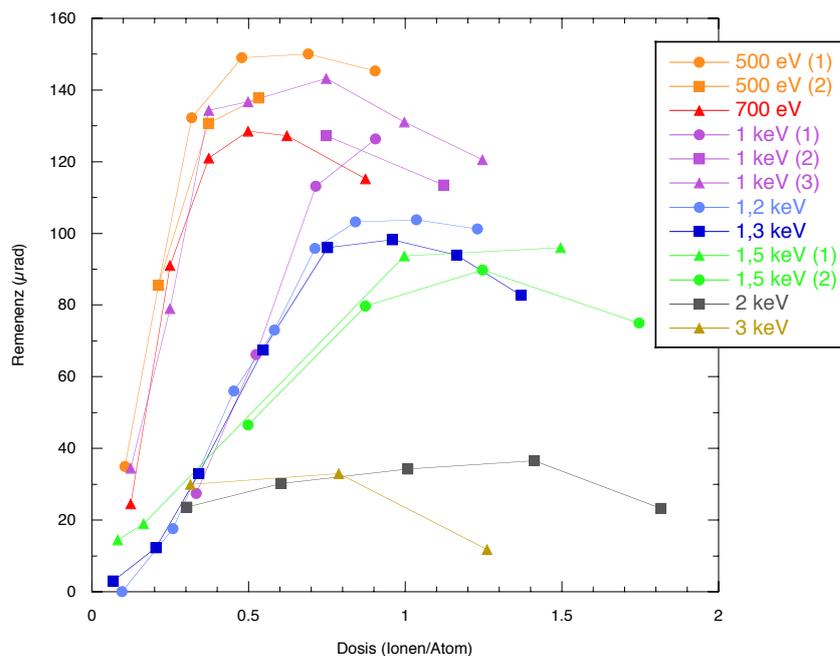


Abbildung 3.1.: Remanenz (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Ne-Ionen von 500 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

trationsprofil und wird bei geringen Ionendosen vor allem von der Zerstäubung der Eisenschicht beeinflusst. Der Zerstäubungsfaktor steigt im betrachteten Bereich mit der Ionenenergie. Die gemessenen Auger-Verhältnisse zwischen Eisen und Kupfer waren daher bei vergleichbarer Ionendosis tendenziell umso niedriger, je höher die Energie der Ionen war.

3.1.3. Argon

SMOKE-Messungen nach Beschuss mit Argon-Ionen von 500 eV bis 3 keV Energie zeigen einen ähnlichen Verlauf der magnetischen Remanenz parallel zur Oberfläche (Abb. 3.3). Die Remanenz steigt mit zunehmender Ionendosis zunächst an, erreicht ein Maximum und fällt danach langsam wieder ab. Im Unterschied zu den Versuchen mit Neon-Ionen wird die maximale Remanenz jedoch schon bei deutlich niedrigeren Dosen erreicht.

Abb. 3.4 zeigt exemplarisch die Veränderung der magnetischen Eigenschaften anhand von SMOKE-Kurven nach 15, 30, 60, 90 und 155 Minuten Beschuss mit 500-eV-Argon-Ionen.

Die schnellste Umwandlung mit der größten maximalen Remanenz wurde beim Beschuss mit 1-keV-Ionen gemessen ($150 \mu\text{rad}$ nach $0,25 \text{ Ionen/Atom}$). Die bei 700 eV und 1,2 keV Ionenenergie gemessenen Kurven verlaufen relativ ähnlich, wobei die unterschiedlichen Höhen der zwei Kurven für 1,2 keV möglicherweise durch unter-

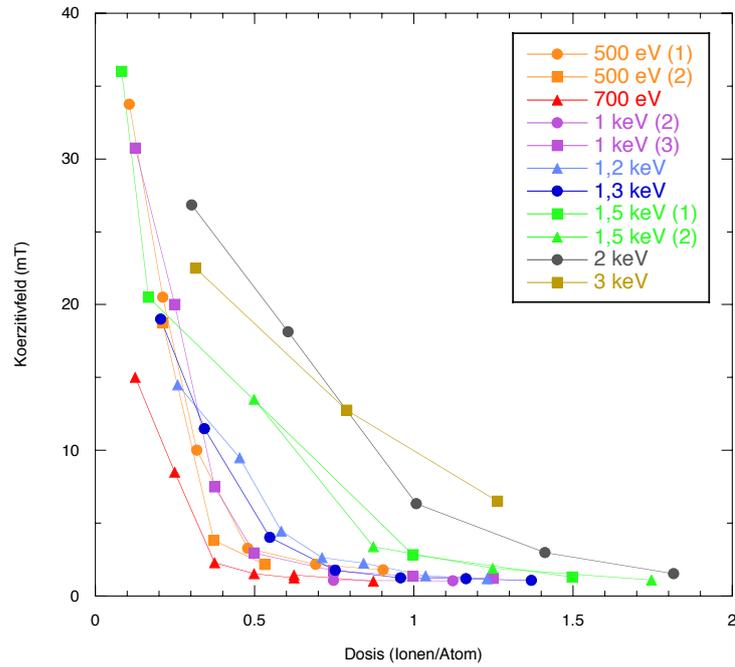


Abbildung 3.2.: Koerzitivfeld (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Ne-Ionen von 500 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

Tabelle 3.2.: Ionenstrom und Dosis pro Cu(100)-Oberflächenatom, Ne-Ionen

Energie (eV)	Ionenstrom (A/mm ²)	Dosis pro Stunde (Ionen/Oberflächenatom)
500	$1,45 \cdot 10^{-10}$	0,21
700	$1,7 \cdot 10^{-10}$	0,25
1000	$3,4 \cdot 10^{-10}$	0,50
1200	$2,65 \cdot 10^{-10}$	0,39
1300	$2,8 \cdot 10^{-10}$	0,41
1500	$3,4 \cdot 10^{-10}$	0,50
2000	$2,75 \cdot 10^{-10}$	0,40
3000	$4,3 \cdot 10^{-10}$	0,63

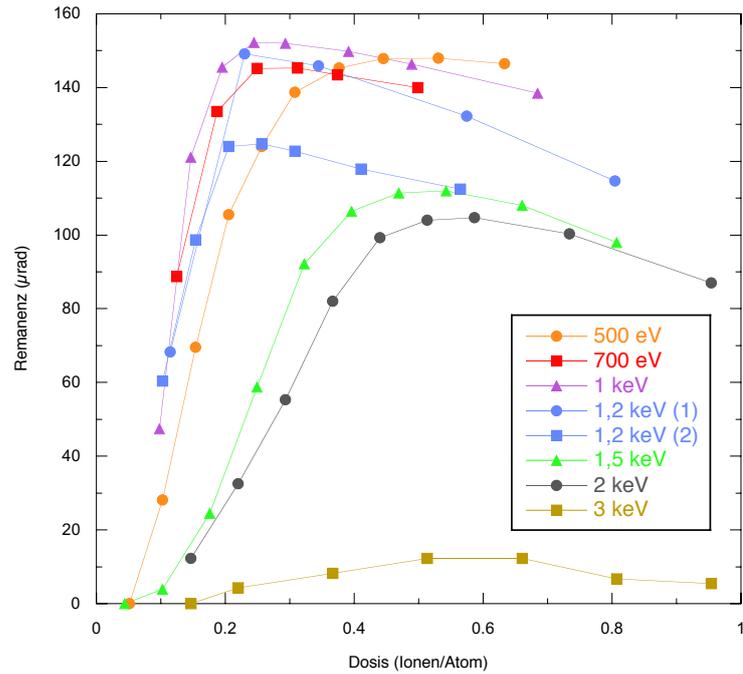


Abbildung 3.3.: Remanenz (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Ar-Ionen von 500 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

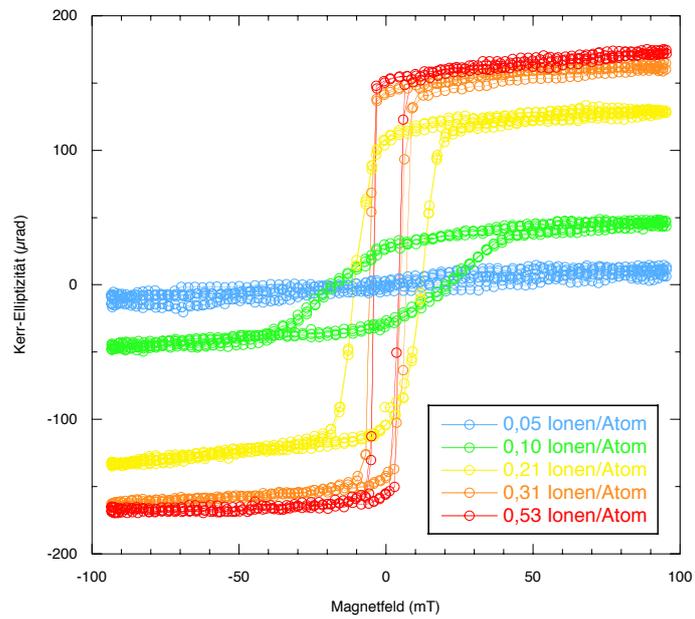


Abbildung 3.4.: Magnetisierung in Abhängigkeit vom angelegten Feld (*in-plane*) nach 15–155 Minuten Ionenbeschuss (Ar, 500 eV), longitudinal SMOKE

schiedliche Schichtdicken zu erklären sind (Fe/Cu-APPH-Verhältnis 620 % und 565 % bei der höheren bzw. niedrigeren Kurve). Bei 500 eV verläuft die Transformation deutlich langsamer, erreicht aber dennoch fast die gleiche maximale Remanenz ($145 \mu\text{rad}$). Beim Beschuss mit 1,5 und 2 keV Ionenenergie steigt die Remanenz noch langsamer an. Das Maximum beträgt hier nur mehr $100\text{--}110 \mu\text{rad}$, nach einer Dosis von rund 0,5 Ionen pro Oberflächenatom. Mit 3-keV-Ionen lässt sich die Eisenschicht fast gar nicht mehr umwandeln. Die maximale Remanenz wird nach etwa 0,6 Ionen pro Atom erreicht und ist gerade noch mit SMOKE messbar.

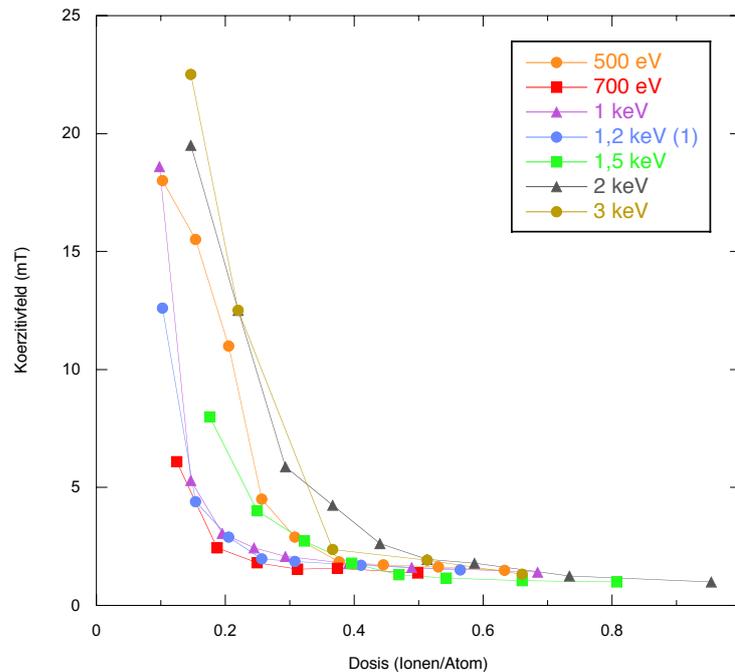


Abbildung 3.5.: Koerzitivfeld (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Ar-Ionen von 500 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

Das Koerzitivfeld in Abhängigkeit von der Ionendosis und Ionenenergie (Abb. 3.5) zeigt den gleichen Trend, wie schon die Kurven beim Beschuss mit Neon-Ionen (Abb. 3.2). Je schneller bei einer bestimmten Ionenenergie die maximale Remanenz erreicht wird, umso steiler verläuft auch die entsprechende Kurve für das Koerzitivfeld. Wie in Abb. 3.2 nähern sich alle Kurven dem selben Wert von rund einem Millitesla. Am schnellsten sinkt das Koerzitivfeld bei Energien von 700 eV bis 1,2 keV. Bei 500 eV und 1,5 keV dauert der Prozess schon deutlich länger, und am längsten bei 2 keV und 3 keV. Die zweite Kurve für 1,2 keV Ionenenergie wurde in Abb. 3.5 zur besseren Übersichtlichkeit weggelassen, sie verläuft praktisch deckungsgleich mit der dargestellten.

LEED-Bilder der Eisenschicht in verschiedenen Stadien der Transformation durch 1,5-keV-Argon-Ionen sind auf Seite 53 abgebildet (Abb. 3.10).

Tabelle 3.3.: Ionenstrom und Dosis pro Cu(100)-Oberflächenatom, Ar-Ionen

Energie (eV)	Ionenstrom (A/mm ²)	Dosis pro Stunde (Ionen/Oberflächenatom)
500	$1,4 \cdot 10^{-10}$	0,21
700	$2,55 \cdot 10^{-10}$	0,37
1000	$3,0-4,0 \cdot 10^{-10}$	0,44-0,59
1200	$4,7 \cdot 10^{-10}$	0,69
1500	$6,0 \cdot 10^{-10}$	0,88
2000	$6,0 \cdot 10^{-10}$	0,88
3000	$6,0 \cdot 10^{-10}$	0,88

3.1.4. Krypton

Die Kurven der in-plane-Remanenz von acht Monolagen Eisen auf Cu(100) nach Beschuss mit Krypton-Ionen verschiedener Energie in Abhängigkeit von der Ionendosis sind einander relativ ähnlich (Abb. 3.6). Im Unterschied zu den Experimenten mit Neon- und Argon-Ionen ließ sich die Eisenschicht mit allen untersuchten Ionenenergien über 300 eV magnetisch umwandeln. Die maximale Remanenz in Einheiten der Kerr-Rotation lag dabei immer im Bereich von 90 bis 140 μ rad.

Auffallend ist der deutlich verzögerte Anstieg der Remanenz bei Beschuss mit 2-keV-Krypton-Ionen im Vergleich zu anderen Energien. Um Fehler bei der Präparation oder beim Ionenbeschuss ausschließen zu können, wurde der Versuch zweimal mit ähnlichen Ergebnissen wiederholt.

Bei mittleren Energien von 700 eV bis 2,5 keV wurde die maximale Remanenz nach 0,2 bis 0,4 Ionen pro Oberflächenatom erreicht. Die Kurven ähneln stark denen der Experimente mit Argon-Ionen zwischen 700 eV und 1,2 keV, nur dass der Abfall der Remanenz bei hohen Ionendosen deutlich steiler verläuft. Dies hängt vermutlich mit dem höheren Zerstäubungsfaktor und der stärkeren Durchmischung von Schicht und Substrat durch die Krypton-Ionen zusammen. Der Anstieg während kleiner Ionendosen verläuft bei allen Energien von 700 eV bis 2,5 keV (mit Ausnahme von 2 keV) praktisch gleich und relativ steil.

Am schnellsten verläuft die Transformation bei 4 keV und 5 keV Ionenenergie. Bereits nach 2 Minuten Beschuss mit 5-keV-Krypton-Ionen ($\sim 1/15$ Ion pro Oberflächenatom) betrug die Remanenz der Eisenschicht 125 μ rad. Bei 4 keV zeigt der erste Messpunkt nach der Nullmessung zugleich die höchste Remanenz. Da die Scheitelpunkte der Kurven für 3 keV und 5 keV ungefähr gleich hoch liegen, ist nicht anzunehmen, dass bei einer noch geringeren Dosis von 4-keV-Ionen eine wesentlich höhere Remanenz erzielt worden wäre.

Mit 500 eV Ionenenergie wird das Maximum der Remanenz erst nach einer Dosis von etwa 0,5 erreicht und fällt danach nur geringfügig ab. Bei 300 eV entwickelte sich nur eine sehr geringe Remanenz ($\sim 14 \mu$ rad nach 205 Minuten Ionenbeschuss). Der

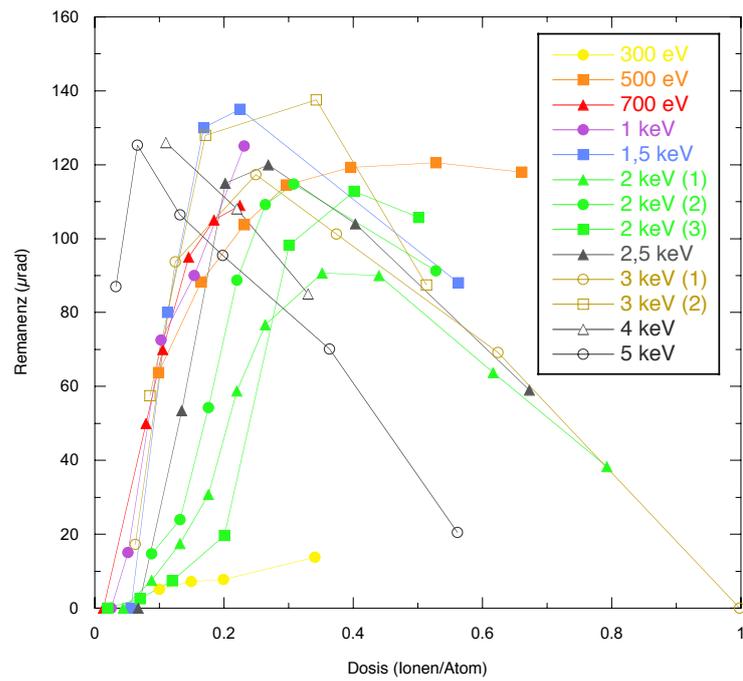


Abbildung 3.6.: Remanenz (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Kr-Ionen von 300 eV bis 5 keV, longitudinal SMOKE

Versuch mit 700 eV konnte wegen des geringen Ionenstroms nicht bis zum Erreichen der maximalen Remanenz fortgesetzt werden.

Der Abfall der Remanenz für höhere Ionendosen scheint bei hohen Energien generell steiler zu verlaufen als bei tiefen.

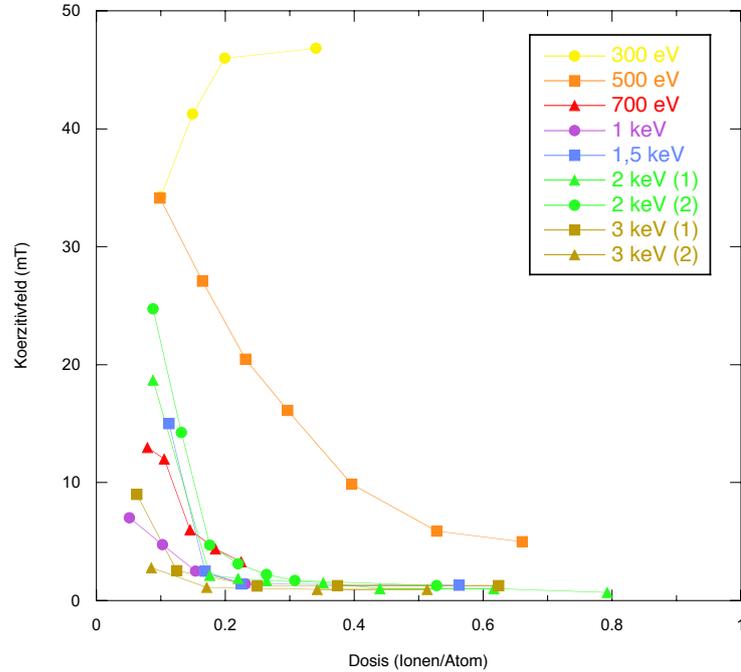


Abbildung 3.7.: Koerzitivfeld (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Kr-Ionen von 300 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

Der Verlauf der Koerzitivfeldstärke in Abhängigkeit von der Ionendosis (Abb. 3.7) ist, mit Ausnahme der Kurven für 300 eV und 500 eV, ähnlich dem bei Neon- und Argon-Ionenbeschuss. Das Koerzitivfeld sinkt zu Beginn relativ rasch und nähert sich danach demselben konstanten Wert für alle Ionenenergien. Die Kurven für 2 keV (3), 2,5 keV, 4 keV und 5 keV wurden zur besseren Übersichtlichkeit weggelassen.

Bei 300 eV wurde zum ersten und einzigen Mal beobachtet, wie die Eisenschicht durch Ionenbeschuss hartmagnetischer wurde. Da die Remanenz nur rund ein Zehntel der mit höheren Ionenenergien erreichten Werte betrug, sind die Hysteresekurven allerdings nur bedingt miteinander vergleichbar.

Interessant ist ein Vergleich der Remanenz- und Koerzitivfeldkurven für 500 eV mit denen der nächsthöheren und -tieferen Ionenenergie. Während der Anstieg der Remanenz für kleine Ionendosen bei 500 eV praktisch parallel zu dem bei 700 eV erfolgt, entwickelt sich bei 300 eV fast gar keine Remanenz. Das Koerzitivfeld wiederum bleibt bei 500 eV deutlich oberhalb der Werte für 700 eV und sinkt wesentlich langsamer ab. Der Verlauf der Koerzitivfeldstärke bei 300 eV ist, wie oben erwähnt, nur bedingt mit den anderen Kurven vergleichbar.

Tabelle 3.4.: Ionenstrom und Dosis pro Cu(100)-Oberflächenatom, Kr-Ionen

Energie (eV)	Ionenstrom (A/mm ²)	Dosis pro Stunde (Ionen/Oberflächenatom)
300	$6,8 \cdot 10^{-11}$	0,10
500	$9,0 \cdot 10^{-11}$	0,13
700	$3,6 \cdot 10^{-11}$	0,053
1000	$1,0 \cdot 10^{-10}$	0,15
1500	$4,6 \cdot 10^{-10}$	0,68
2000	$3,6 \cdot 10^{-10}$	0,53
2500	$5,5 \cdot 10^{-10}$	0,81
3000	$5,1 \cdot 10^{-10}$	0,75
4000	$9,0 \cdot 10^{-10}$	1,32
5000	$13,5 \cdot 10^{-10}$	1,98

3.1.5. Xenon

Die zur magnetischen Phasenumwandlung der Eisenschicht durch Beschuss mit Xenon-Ionen nötige Ionendosis ist generell niedriger als bei den Experimenten mit leichteren Ionen. Alle untersuchten Ionenenergien von 500 eV bis 3 keV führten ungefähr zur gleichen maximalen Remanenz von $130 \mu\text{rad}$ (Abb. 3.8).

Der anfängliche Anstieg der Remanenz verläuft bei allen Energien annähernd gleich. Mit Ausnahme von 500 eV liegt die zum Erreichen der maximalen Remanenz nötige Ionendosis zwischen 0,1 und 0,2 Ionen pro Oberflächenatom. Bei 500 eV erreicht die Remanenz ihr Maximum ein wenig später und bleibt danach im Wesentlichen konstant. Bei den anderen Ionenenergien sinkt die Remanenz nach Überschreiten des Maximums wieder ab. Dies geschieht umso schneller, je höher die Energie der Ionen ist.

Tabelle 3.5.: Ionenstrom und Dosis pro Cu(100)-Oberflächenatom, Xe-Ionen

Energie (eV)	Ionenstrom (A/mm ²)	Dosis pro Stunde (Ionen/Oberflächenatom)
500	$1,2 \cdot 10^{-10}$	0,18
700	$1,85 \cdot 10^{-10}$	0,27
1000	$2,9 \cdot 10^{-10}$	0,43
2000	$6,7 \cdot 10^{-10}$	0,98
3000	$6,4 \cdot 10^{-10}$	0,94

Die Koerzitivfeldstärke in Abhängigkeit von der Ionendosis (Abb. 3.9) sinkt bei höheren Ionenenergien ebenfalls schneller als bei niedrigeren Energien.

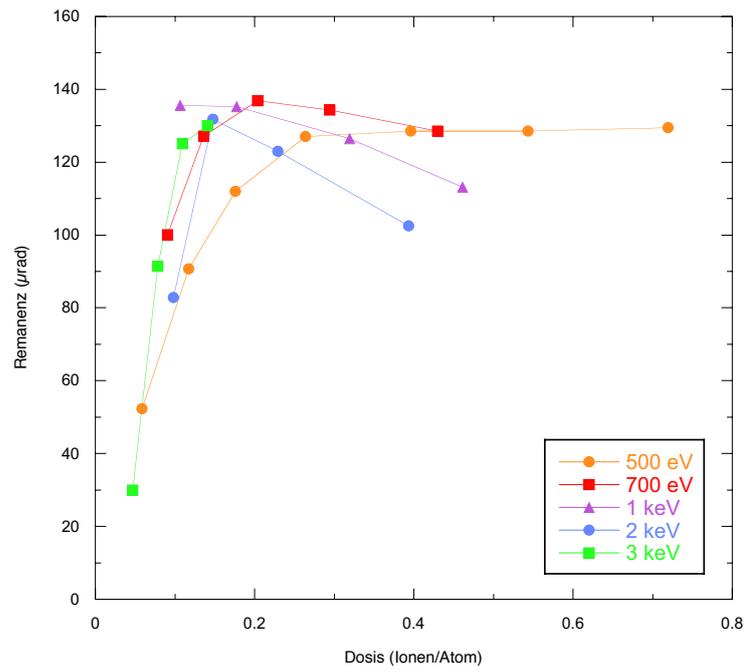


Abbildung 3.8.: Remanenz (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Xe-Ionen von 500 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

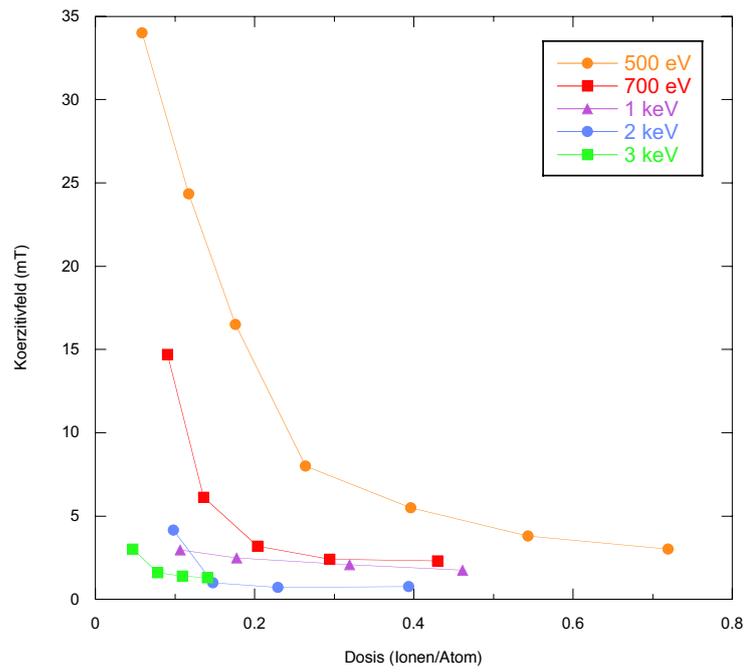


Abbildung 3.9.: Koerzitivfeld (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Beschuss mit Xe-Ionen von 500 eV bis 3 keV, longitudinal SMOKE

3.1.6. LEED-Messungen

Mit LEED lässt sich die Veränderung der Oberflächenstruktur direkt verfolgen. Um den Übergang der Eisenschicht von fcc in Richtung bcc nicht nur über die Messung der magnetischen Eigenschaften sondern auch direkt zu verfolgen, wurden während der Experimente mit Ionenbeschuss immer wieder LEED-Bilder aufgenommen. Ein wesentlicher Vorteil gegenüber SMOKE ist in unserem Fall, dass bei LEED die gesamte Probenoberfläche experimentell zugänglich ist. Dies war besonders hilfreich bei der Aufklärung von Problemen mit der Ionenquelle vor Einbau des Wien-Filters.

Bei allen untersuchten Ionenarten und Ionenenergien zeigte sich im LEED-Bild, unabhängig von der Geschwindigkeit der Umwandlung, immer derselbe Ablauf.

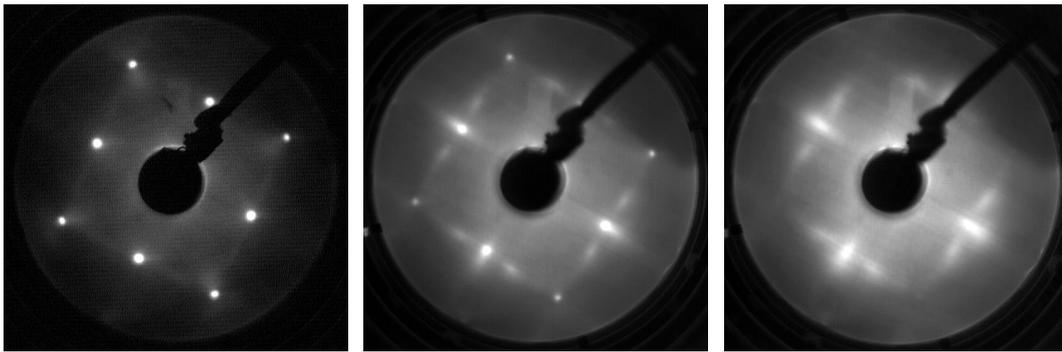


Abbildung 3.10.: LEED-Bilder (120 eV), 8 ML Fe auf Cu(100): unbehandelt (links), nach 15 Min. (Mitte) und 30 Min. (rechts) Beschuss mit 1,5-keV-Argon-Ionen (entspricht 0,22 und 0,44 Ionen pro Oberflächenatom)

Die Veränderung der Oberflächenstruktur wird anhand der drei LEED-Bilder in Abb. 3.10 deutlich. Sie wurden bei Raumtemperatur nach 0, 15 und 30 Minuten Beschuss mit 1,5-keV-Argon-Ionen aufgenommen. Das LEED-Bild der frischen Eisenschicht zeigt klare Beugungsreflexe des fcc(100)-Oberflächengitters. Mit zunehmender Ionendosis werden die fcc(100)-Reflexe immer schwächer und unschärfer. Gleichzeitig erscheinen zusätzliche Reflexe, die den reziproken Gittervektoren der verzerrten bcc(110)-Oberfläche der in Abschnitt 1.2 beschriebenen Nanokristalle entsprechen. Wird der Ionenbeschuss fortgesetzt, verschwinden zunächst die fcc-Reflexe und schließlich auch die der bcc-Struktur. Die Oberfläche ist dann durch den Ionenbeschuss so ungeordnet und mit dem Substratmaterial durchmischt, dass keine Beugungsreflexe mehr messbar sind.

Abbildung 3.11 zeigt einen Vergleich der Beugungsreflexe, die durch Ionenbeschuss von acht Monolagen Eisen auf Cu(100) entstehen, mit den bcc-Beugungsreflexe einer vierzehn Monolagen dicken Schicht. Um die Ähnlichkeit der Oberflächengitter zu verdeutlichen, sind die Reflexe jeweils einer bcc-Richtungsdomäne in beiden LEED-Bildern durch rote Linien hervorgehoben. Wie man sieht, sind die Winkel zwischen den reziproken Gittervektoren der bcc-Struktur im linken Bild nur geringfügig verschieden

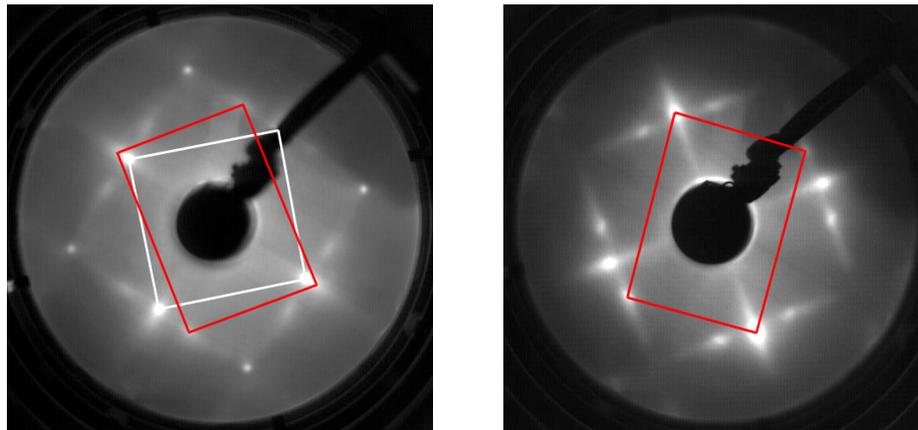


Abbildung 3.11.: LEED-Bilder (120 eV), links: 8 ML Fe auf Cu(100), Beugungsreflexe des fcc(100)-Gitters (weiß) und einer Richtungsdomäne der verzerrten bcc(110)-Struktur (rot) nach 15 Min. Beschuss mit 1,5-keV-Argon-Ionen, rechts: 14 ML Fe auf Cu(100), Beugungsreflexe der bcc(110)-Struktur (unterschiedliche Kristallorientierung links und rechts)

von den entsprechenden Winkeln der entspannten bcc-Struktur im rechten Bild. Die kubisch-flächenzentrierten LEED-Spots im linken Bild fehlen rechts völlig, da epitaktische Schichten von Eisen auf Cu(100) nur bis zu einer Dicke von etwa zehn Monolagen pseudomorph wachsen. Die unterschiedliche Kristallorientierung im linken und rechten Bild kommt daher, dass der Kristall zwischenzeitlich neu fixiert werden musste.

Wie bereits erwähnt, erwies sich LEED als sehr hilfreich bei der Aufklärung von Problemen mit der Ionenquelle vor Einbau des Wien-Filters. Nachdem SMOKE-Messungen an verschiedenen Punkten der mit Ionen beschossenen Eisenschicht zum Teil stark abweichende Ergebnisse gezeigt hatten, wurde der Kristall mit LEED untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass die Oberfläche in einem Bereich von etwa zwei Millimeter Durchmesser bereits stark „zerschossen“ war, während sich der Rest der Oberfläche erst in einem frühen Stadium der Umwandlung befand. Auger-Messungen zeigten außerdem, dass Eisen und Kupfer innerhalb dieses Bereichs deutlich stärker durchmischt waren als außerhalb. Weitere Versuche unter Anlegung eines elektrischen Feldes, bestätigten schließlich unsere Vermutung, dass die zusätzliche Teilchendosis durch neutralisierte Ionen verursacht worden war. Diese werden vom Wechselfeld der Ablenkplatten nicht beeinflusst und treffen daher immer die selbe Stelle auf der Probe. Auch wenn nur ein geringer Teil der Ionen zwischen Beschleunigung und Auftreffen neutralisiert wird, ergibt sich dadurch lokal eine deutlich höhere Teilchendosis.

3.1.7. LEIS-Messungen

Ionenstreuungsspektroskopie (LEIS) erwies sich leider als ungeeignet zur Quantifizierung der Durchmischung zwischen Schicht und Substrat.

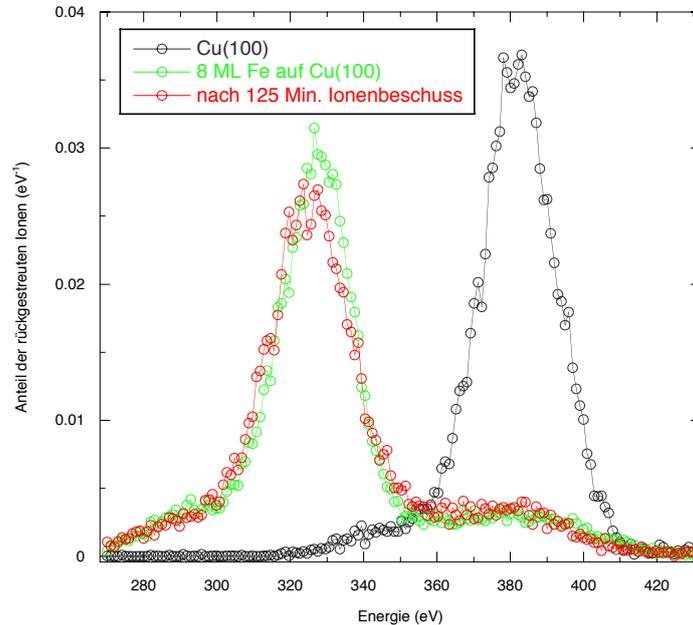


Abbildung 3.12.: Ionenstreuungsspektrum von 8 ML Fe auf Cu(100) vor und nach Beschuss mit 1-keV-Neon-Ionen, 125 Min. \cong 1 Ion/Oberflächenatom

Abb. 3.12 und 3.13 zeigen als Beispiel die Energieverteilungsspektren der an acht Monolagen Eisen auf Cu(100) rückgestreuten Neon-Ionen, jeweils zu Beginn der Ionenbehandlung und nach einer Gesamtdosis von einem Ion pro Oberflächenatom. Die Primärenergie der Ionen betrug 1 keV bzw. 2 keV, der Streuwinkel $\vartheta = 120^\circ$. In Abb. 3.12 ist zum Vergleich zusätzlich das Streuspektrum des reinen Cu(100)-Kristalls dargestellt. Die Zählraten wurden jeweils durch das Integral über die Counts im gemessenen Energieintervall dividiert, sodass die gezeigten Werte dem relativen Anteil der mit Energien im dargestellten Intervall rückgestreuten Ionen pro Elektronenvolt entsprechen. Da die Intervalle in Abb. 3.12 und 3.13 unterschiedlich breit sind, sind die Zahlenwerte nicht eins zu eins vergleichbar.

Den SMOKE-Messungen zufolge entspricht 1 Ion pro Oberflächenatom bei beiden Energien in etwa jener Ionendosis, bei der die Remanenz der Eisenschicht ihr Maximum erreicht (vgl. Abb. 3.1). Dennoch unterscheiden sich die Spektren zu wenig voneinander und ist der diffuse Signaluntergrund zu stark, als dass man durch Fitten mit entsprechenden Vergleichsspektren zuverlässig den Grad der Durchmischung in der ersten Atomlage bestimmen könnte. Obwohl die Detektorrate optimiert worden war, betrug die Dauer einer Messung jeweils etwa zehn Minuten. Die Messgenauigkeit ließ sich also nicht mehr wesentlich steigern.

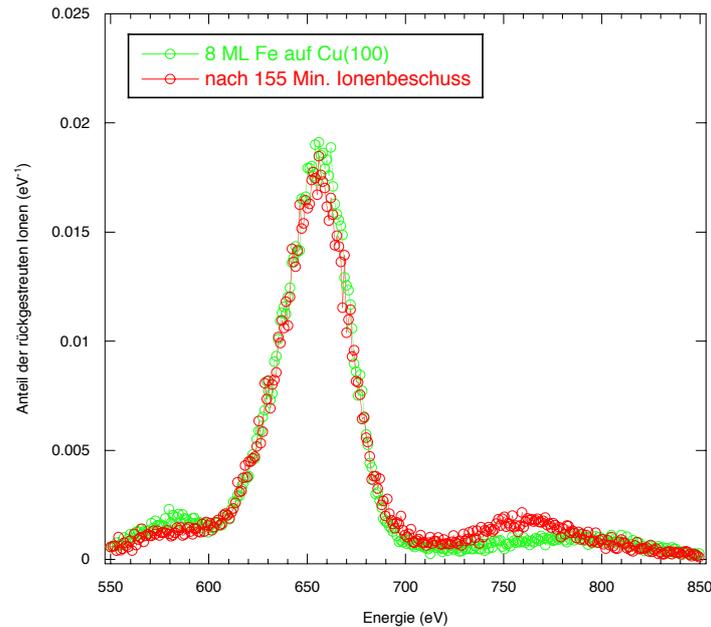


Abbildung 3.13.: Ionenstreuungsspektrum von 8 ML Fe auf Cu(100) vor und nach Beschuss mit 2-keV-Neon-Ionen, 155 Min. $\hat{=}$ 1 Ion/Oberflächenatom

Ein weiteres Problem für die Auswertung ist das Fehlen von Vergleichsspektren einer reinen Eisenoberfläche. Da die Modifikation und Optimierung der Ionenquelle für ein neues Gas bzw. eine neue Beschleunigungsspannung einige Zeit in Anspruch nimmt, hätten die Vergleichsspektren für jedes Gas und jede Energie vor oder nach den eigentlichen Messungen an einer eigens präparierten dicken Eisenschicht aufgenommen werden müssen. In Anbetracht der geringen zusätzlichen Information der Streuspektren schien uns ein solcher Aufwand nicht gerechtfertigt.

Das APPH-Verhältnis der differenzierten Auger-Peaks von Eisen und Kupfer ging beim Beschuss mit 1-keV-Ionen von anfangs 660 % auf 234 % zum Zeitpunkt des in Abb. 3.12 rot dargestellten Spektrums zurück. Bei 2 keV Neon (Abb. 3.13) sank das APPH-Verhältnis im Zeitraum zwischen den den zwei Spektren von 664 % auf 193 %. Da die Zerstäubungsfaktoren von Neon auf Eisen bei 1 keV und 2 keV (s. Anhang) nicht besonders hoch sind, ist ein Großteil der Änderung des Auger-Signals vermutlich auf die Durchmischung von Eisen und Kupfer zurückzuführen.

3.2. Ionenbeschuss von 5,4 Å + 10–12 Å Fe auf Cu(100)

Bei diesen Experimenten wurde eine drei Monolagen (5,4 Å) dicke Eisenschicht auf Cu(100) präpariert und mit derselben Dosis 1-keV-Argon-Ionen beschossen, nach der bei acht Monolagen Eisen auf Cu(100) die stärkste Remanenz gemessen worden war (150 μ rad nach 0,25 Ionen/Atom, s. Abschnitt 3.1.3). Anschließend wurde weiter

Eisen aufgedampft, bis die Eisenschicht insgesamt rund acht Monolagen (14,4 Å) dick war. Dann wurde der Ionenbeschuss fortgesetzt und in regelmäßigen Abständen die Remanenz parallel zur Schicht gemessen.

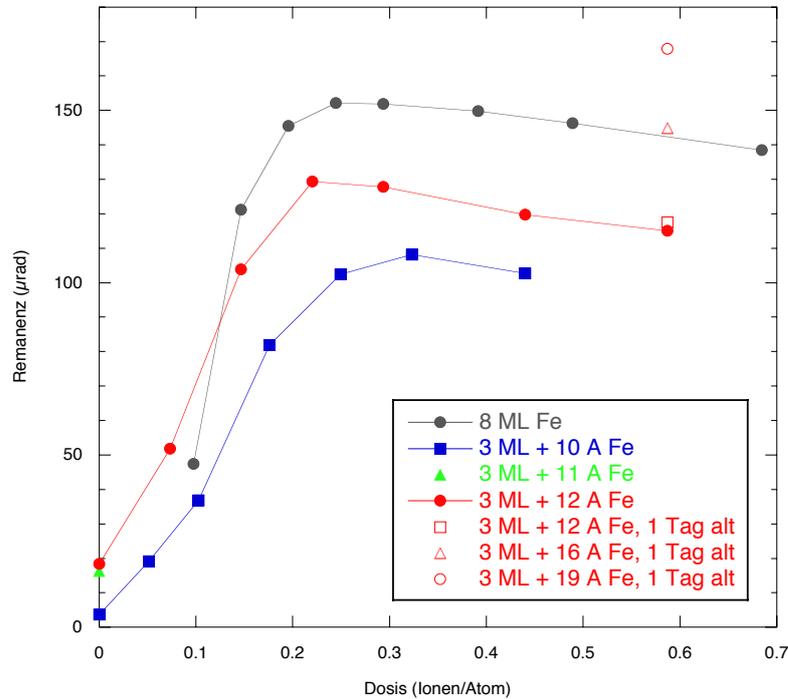


Abbildung 3.14.: Remanenz (*in-plane*) nach Beschuss mit 1-keV-Argon-Ionen: 8 ML Fe auf Cu(100) (grau), 3 ML Fe auf Cu(100) + Ionenbeschuss (1 keV Ar, 0,25 Ionen/Atom) + 10–12 Å Fe (blau, grün, rot)

Zweck der Versuchsreihe war es herauszufinden, inwiefern das Wachstum der Eisenschicht auf einer mit Ionen beschossenen 3-ML-Schicht anders verläuft als auf dem Cu(100)-Substrat und ob sich die magnetischen Eigenschaften der fertigen Schicht unter Ionenbeschuss anders entwickeln als die Eigenschaften der „normal“ gewachsenen Schicht.

Nach dem Aufdampfen der ersten drei Monolagen Eisen wurde die Schichtdicke mit Augerelektrospektroskopie kontrolliert. Das APPH-Verhältnis zwischen Eisen und Kupfer war bei allen drei Präparationen praktisch gleich (71–72%). Danach wurde die Schicht 34 Minuten lang mit 1-keV-Argon-Ionen beschossen, was einer Dosis von 0,25 Ionen pro Oberflächenatom entspricht. Das Fe/Cu-APPH-Verhältnis ging auf 46% zurück.

SMOKE-Messungen der magnetischen Eigenschaften parallel und normal zur Oberfläche zeigten keinerlei Ferromagnetismus. Die Eisenschicht war also, anders als 8-ML-Schichten nach Beschuss mit der gleichen Ionendosis, nicht *in-plane*-ferromagnetisch. Dem Phasendiagramm (Abb. 1.2) zufolge sind 3-ML-Schichten bei Raumtemperatur

out-of-plane-ferromagnetisch geordnet. Auf die beschossene Eisenschicht trifft dies offenbar nicht mehr zu.

Da der Abtrag der drei Monolagen Eisen anhand der Änderung der Auger-Peak-Höhen und des Zerstäubungsfaktors (ca. 1,7 nach [33]) nur ungefähr geschätzt werden kann, wurden in drei Versuchen weitere 10–12 Å Eisen ($\sim 5,6$ – $6,7$ ML) aufgedampft. Anschließend wurden wieder Auger-Spektren aufgenommen: die Fe/Cu-APPH-Verhältnisse betragen 358 %, 427 % und 655 %.

Abbildung 3.14 zeigt den Verlauf der Remanenz *in-plane* bei Beschuss mit 1-keV-Argon-Ionen in Abhängigkeit von der Dosis. Die 0,25 Ionen pro Atom, mit denen die ersten drei Monolagen während der Präparation bestrahlt wurden, sind nicht miteingerechnet, weshalb die Kurven bei Null beginnen. Zum Vergleich ist zusätzlich der Verlauf der Remanenz von acht Monolagen Fe auf Cu(100) bei Beschuss mit Argon-Ionen der gleichen Energie angegeben (graue Kurve). Die Messwerte der Koerzitivfeldstärke sind in Abbildung 3.15 dargestellt.

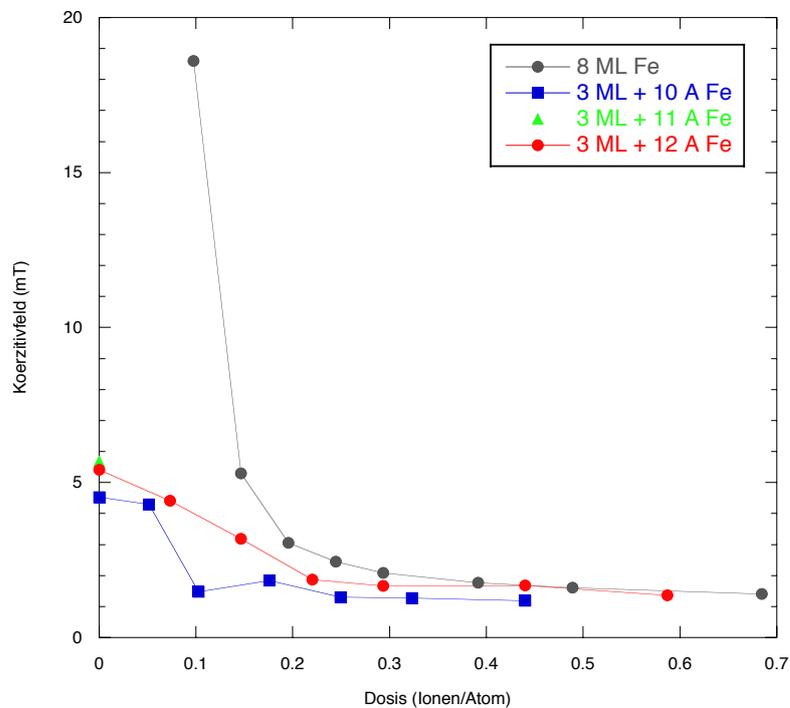


Abbildung 3.15.: Koerzitivfeld (*in-plane*) nach Beschuss mit 1-keV-Argon-Ionen: 8 ML Fe auf Cu(100) (grau), 3 ML Fe auf Cu(100) + Ionenbeschuss (1 keV Ar, 0,25 Ionen/Atom) + 10–12 Å Fe (blau, grün, rot)

Beim ersten Experiment wurden 11 Å Fe auf die mit Ionen beschossenen 3 ML Fe auf Cu(100) aufgedampft (grüner Messpunkt in Abb. 3.14 u. 3.15) und die magnetischen Eigenschaften der resultierenden Schicht gemessen. Bei den zwei anderen Experimenten wurden 10 Å bzw. 12 Å Eisen aufgedampft und der Beschuss mit 1-keV-

Argon-Ionen fortgesetzt (blaue und rote Kurve). Bei einem Versuch (3 ML + 12 Å Fe) wurden einen Tag später weitere 4 Å und 3 Å Eisen aufgedampft (einzelne rote Messpunkte). Das APPH-Verhältnis (AES) von Eisen zu Kupfer nach 80 Minuten Ionenbeschuss ($\sim 0,59$ Ionen/Atom) betrug 216 %, nach Aufdampfen der 4 + 3 Å Eisen am Tag darauf 421 %.

Vergleicht man den Verlauf der Remanenz in Abhängigkeit von der Ionendosis für die Präparationen auf der vorbehandelten 3-ML-Eisenschicht mit dem der ungestört gewachsenen Schicht, sieht man, dass die maximale Remanenz bei praktisch derselben Dosis erreicht wird. Die zusätzlichen 0,25 Ionen/Atom, mit denen die ersten drei Monolagen beschossen wurden, führen offenbar nicht zu einem wesentlich stärkerem Wachstum der für den Ferromagnetismus verantwortlichen bcc-Strukturen. Die Maxima der Remanenz liegen tiefer als die maximale Remanenz der 8-ML-Präparation, vermutlich wegen der stärkeren Durchmischung mit dem Kupfersubstrat und der geringeren Schichtdicke.

Das Koerzitivfeld aller drei Präparationen ist zu Beginn deutlich niedriger als das Koerzitivfeld der 8-ML-Schicht und nähert sich ab ungefähr 0,25 Ionen pro Atom (der Ionendosis, bei der die maximale Remanenz gemessen wird) dem gleichen konstanten Wert wie das Koerzitivfeld der 8-ML-Schicht. Das Koerzitivfeld von 3 ML + 12 Å Fe blieb auch nach dem Aufdampfen weiterer 7 Å Eisen konstant. Die entsprechenden Messpunkte in Abbildung 3.15 wurden zur besseren Übersichtlichkeit weggelassen.

3.3. Abkühlversuche

Ein weiterer Weg, die magnetischen Eigenschaften von etwa 5–10 Monolagen dicken Eisenschichten auf Cu(100) zu verändern, ist das Abkühlen der Probe [9]. Aus dem magnetischen Phasendiagramm (S. 3, Abb. 1.2) geht hervor, dass die Curie-Temperatur für den Übergang zur in Abschnitt 1.2 beschriebenen *magnetic live layer* unterhalb von 300 K liegt und in diesem Dickenbereich weitgehend unabhängig von der Schichtdicke ist. Das magnetische Moment steht normal zur Oberfläche und kann daher durch polar SMOKE gemessen werden.

3.3.1. 6 ML Fe auf Cu(100)

Für diesen Versuch wurden sechs Monolagen Eisen auf Cu(100) präpariert (AES: 279 % APPH Fe/Cu) und auf etwa 130 K abgekühlt. Beim langsamen Wiedererwärmen der Probe auf Raumtemperatur wurde eine Reihe von SMOKE-Messungen durchgeführt. Abb. 3.16 und 3.17 zeigen die Entwicklung der magnetischen Eigenschaften normal zur Oberfläche während des Aufwärmens.

Die Koerzitivfeldstärke steigt ungefähr linear mit sinkender Temperatur. Unterhalb von 140 K wird die Hysteresekurve sogar so breit, dass das maximale äußere Feld (ca. 100 mT) nicht mehr ausreicht die Magnetisierung der Eisenschicht umzukehren. Beim Erwärmen sinkt die Remanenz zunächst langsam und fällt zwischen etwa 260 K und 270 K steil ab. In diesem Bereich sinkt auch die Koerzitivfeldstärke auf Null. Erneutes

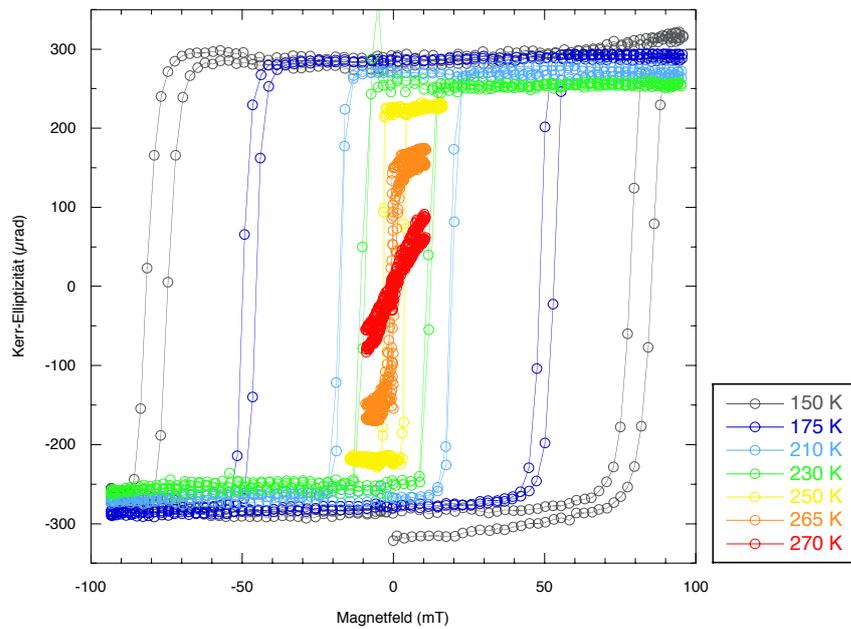


Abbildung 3.16.: Hysteresekurven der *out-of-plane*-Magnetisierung von 6 ML Fe auf Cu(100) bei verschiedenen Temperaturen, polar SMOKE

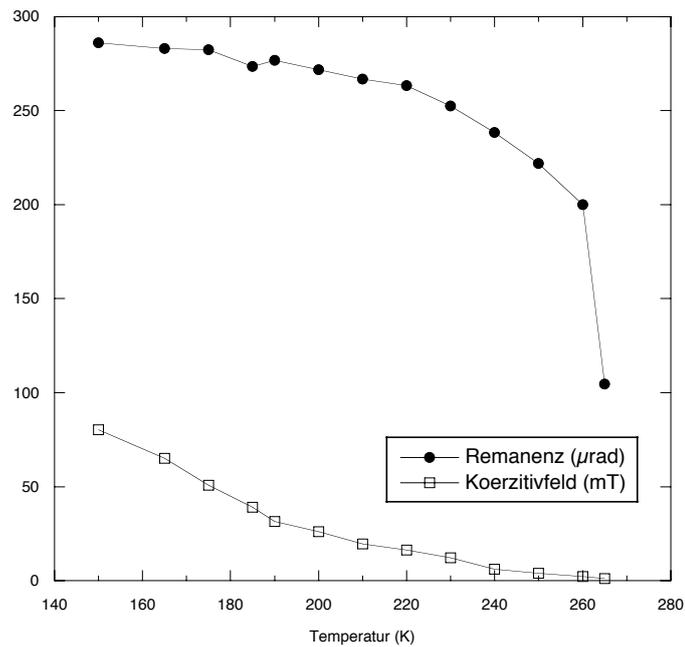


Abbildung 3.17.: Remanenz und Koerzitivfeld (*out-of-plane*) von 6 ML Fe auf Cu(100) in Abhängigkeit von der Temperatur, polar SMOKE

Abkühlen der Probe unter die Curie-Temperatur führt wieder zu den gleichen Werten, der Übergang zur *magnetic live layer* ist also reversibel.

Die magnetischen Eigenschaften *in-plane*, d. h. parallel zur Oberfläche, sind bei tiefen Temperaturen nur schwer zu messen, da das hohe *out-of-plane*-Moment der rekonstruierten Oberfläche bei jeder geringsten Abweichung von der idealen Ausrichtung zwischen äußerem Feld und Probenoberfläche auch das SMOKE-Signal bei longitudinaler Messkonfiguration beeinflusst. Die magnetischen Eigenschaften parallel und normal zur Schicht sind also nicht perfekt voneinander zu trennen. Dies stellt aber in der Regel kein Problem dar, da die magnetische Ordnungsrichtung immer entweder *in-* oder *out-of-plane* orientiert ist.

Longitudinale SMOKE-Messungen der Probe bei Raumtemperatur zeigten keinerlei Ferromagnetismus, das Abkühlen der 6-ML-Eisenschicht führt also offenbar zu keiner Strukturänderung in Richtung bcc.

3.3.2. 9 ML Fe auf Cu(100)

In dieser Versuchsreihe wurden zweimal etwa neun Monolagen Eisen auf Cu(100) präpariert (AES: 811 % und 771 % APPH Fe/Cu) und die magnetischen und strukturellen Eigenschaften der Schicht bei verschiedenen Temperaturen mit SMOKE bzw. LEED untersucht.

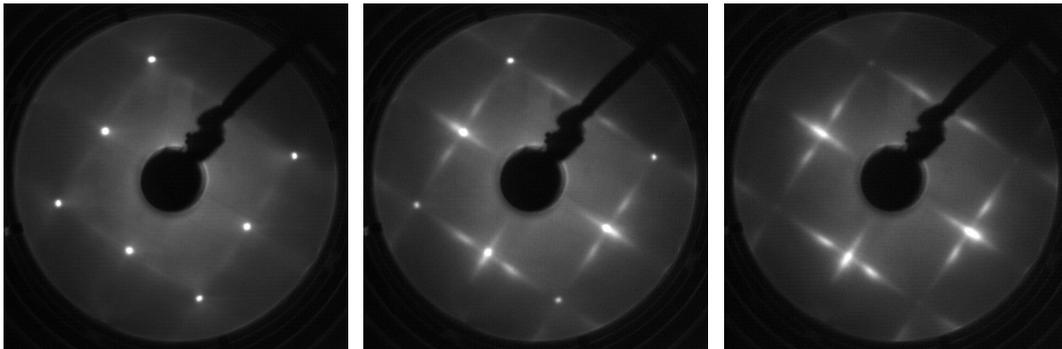


Abbildung 3.18.: LEED-Bilder (120 eV), 9 ML Fe auf Cu(100) bei 280 K (links), 190 K (Mitte) und 130 K (rechts)

Abb. 3.18 zeigt die Veränderungen der Oberflächenstruktur einer 9-ML-Schicht beim Abkühlen auf 130 K. Die Entwicklung von fcc in Richtung bcc verläuft sehr ähnlich zu der beim Beschuss einer 8-ML-Schicht mit 1-keV-Argon-Ionen (s. Abb. 3.10). Da in diesem Fall keine Strahlungsschäden auftreten, bleiben die Beugungsreflexe vergleichsweise scharf. Die bcc-Struktur bleibt auch beim Wiedererwärmen auf Raumtemperatur erhalten.

Die *out-of-plane*-Magnetisierung der 9-ML-Schicht (Abb. 3.19) zeigt nach dem Abkühlen von Raumtemperatur (rote Kurve) auf 245 K (grüne Kurve) eine für die *magnetic live layer* typische Hysterese. Wird die Probe weiter abgekühlt, verschwindet

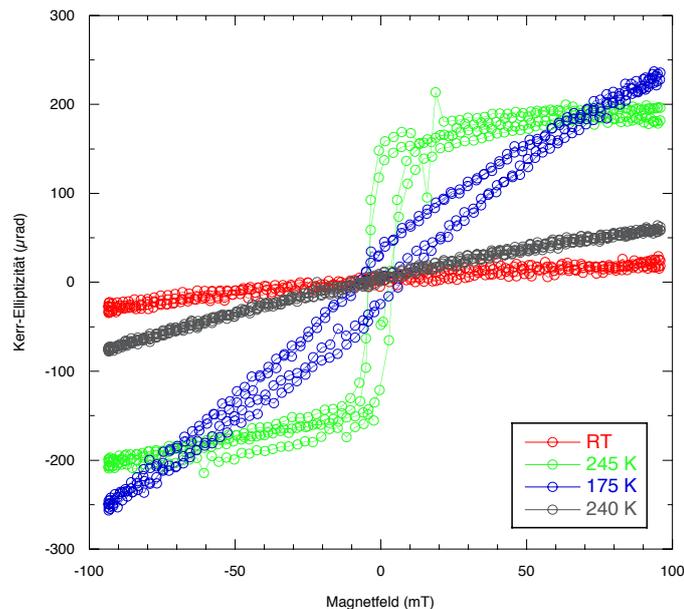


Abbildung 3.19.: 9 ML Fe auf Cu(100), *out-of-plane*-Magnetisierung in Abhängigkeit vom äußeren Feld bei RT, 245 K, 175 K und nach dem Wiedererwärmen auf 240 K, polar SMOKE

die Hysteresekurve. Bei 175 K (blaue Kurve) ist zwar weiterhin eine Hysterese messbar, die Schicht kann aber nicht mehr in Sättigung gebracht werden. Dieses Verhalten deutet darauf hin, dass die Eisenschicht zwar ferromagnetisch ist, die Vorzugsrichtung der magnetischen Ordnung aber nicht mehr normal zur Oberfläche steht. Auch beim Wiedererwärmen auf 240 K (graue Kurve) tritt keine *magnetic live layer* mehr auf. Wie schon die LEED-Messungen (Abb. 3.18) gezeigt haben, ist der Übergang der 9-ML-Schicht durch Abkühlen von kubisch-flächenzentriert zu kubisch-raumzentriert irreversibel.

Longitudinal-SMOKE-Messungen (Abb. 3.20) zeigen, dass die 9-ML-Schicht beim Abkühlen tatsächlich *in-plane*-ferromagnetisch wird. Diese Eigenschaft bleibt beim Wiedererwärmen erhalten. Die Remanenz ist mit $125 \mu\text{rad}$ ähnlich hoch wie die bei der Umwandlung von 8-ML-Schichten durch Ionenbeschuss erreichten Werte. Die Koerzitivfeldstärke ist hingegen vergleichsweise hoch, die Schicht ist also wesentlich hartmagnetischer als durch Ionenbeschuss umgewandelte Eisenschichten.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die pseudomorphe fcc-Struktur von 9-ML-Eisenschichten im Vergleich zu der von 6-ML-Schichten offenbar weniger stabil ist. Der Übergang in Richtung kubisch-raumzentrierter Ordnung kann durch Senkung der Temperatur ausgelöst werden und verläuft irreversibel.

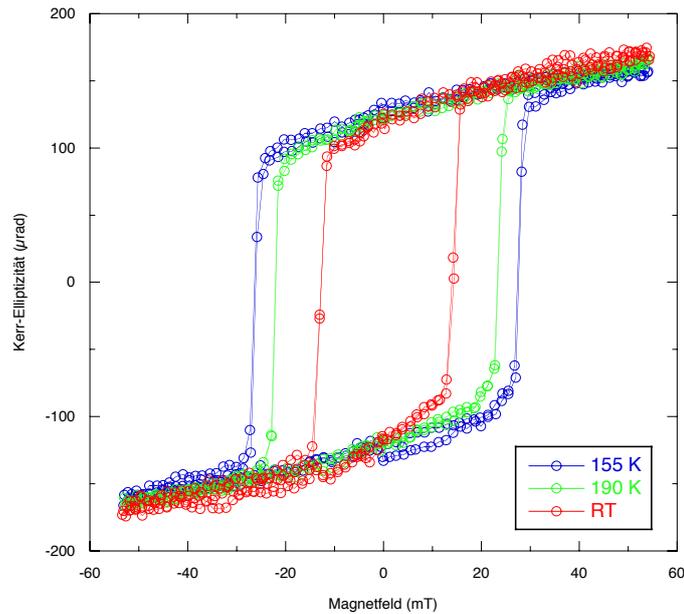


Abbildung 3.20.: 9 ML Fe auf Cu(100), Hysteresekurven der *in-plane*-Magnetisierung beim Aufwärmen von 155 K auf RT, longitudinal SMOKE

3.4. Goldschichten auf 8 ML Fe auf Cu(100)

Um die Probe für weitere Untersuchungen bzw. Präparationsschritte (STM- oder MFM-Messungen, Ionenbeschuss in einer anderen Vakuumanlage) ausschleusen zu können, ohne dabei die Eisenschicht durch Oxidation zu zerstören, ist eine zusätzliche isolierende Deckschicht nötig. Abgesehen von der Stabilität gegenüber Luft sollte die Schicht die magnetischen Eigenschaften der Oberfläche möglichst wenig beeinflussen. Als Material für eine solche Isolierschicht wurde Gold gewählt.

3.4.1. SMOKE-Messungen durch Goldschichten variabler Dicke

Um herauszufinden, inwieweit aufgedampft Gold die magnetooptischen Eigenschaften der Oberfläche bzw. die Intensität des SMOKE-Signals beeinflusst, wurde eine acht Monolagen dicke Eisenschicht auf Cu(100) präpariert (AES: 620 % APPH Fe/Cu) und durch 100 Minuten Beschuss mit 1-keV-Neon-Ionen ferromagnetisch umgewandelt. Die Dosis (0,64 Ionen pro Oberflächenatom) wurde gewählt, um ein möglichst hohes magnetisches Moment zu erzielen (vgl. Abb. 3.1, S. 43).

Nach der ersten SMOKE-Messung wurde in mehreren Schritten Gold aufgedampft und dazwischen immer wieder gemessen. Abbildungen 3.21 und 3.22 zeigen den Verlauf der Remanenz und Koerzitivfeldstärke *in-plane* in Abhängigkeit von der Dicke der Goldschicht.

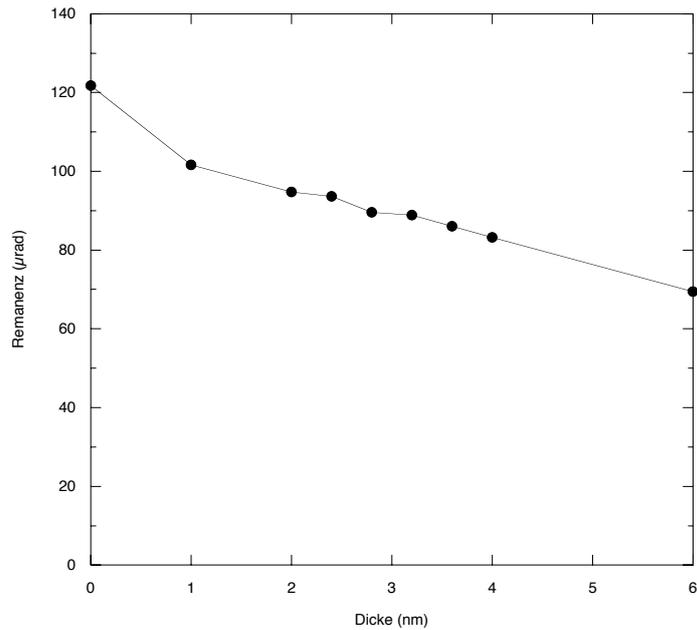


Abbildung 3.21.: Remanenz (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach 100 min Beschuss mit 1-keV-Neon-Ionen (0,64 Ionen pro Oberflächenatom), anschließend bedeckt mit Goldschichten variabler Dicke

Die Kerr-Rotation sinkt im betrachteten Bereich linear mit der Schichtdicke, und der Abfall des Signals zwischen den ersten zwei Messungen ist nur wenig steiler als die Ausgleichsgerade durch alle Messpunkte. Man kann also davon ausgehen, dass das Aufdampfen von Gold die magnetische Ordnung der Eisenschicht nicht wesentlich beeinflusst.

Das Koerzitivfeld (Abb. 3.22) steigt zwischen der ersten und zweiten Messung von etwa 1,5 mT auf etwa 3,5 mT. Die Eisenschicht wird also hartmagnetischer, lässt sich aber immer noch durch eine sehr geringe Feldstärke ummagnetisieren. Durch weiteres Aufdampfen von Gold geht die Koerzitivfeldstärke wieder zurück und bleibt ab 2,8 nm Schichtdicke konstant bei ca. 2,7 mT.

3.4.2. Dichtigkeit einer 2-nm-Goldschicht

In einem späteren Experiment wurde acht Monolagen Eisen auf Cu(100) durch Ionenbeschuss ferromagnetisch umgewandelt und mit 2 nm Gold bedampft. Remanenz und Koerzitivfeld der Probe wurde mit longitudinal SMOKE gemessen.

Um zu testen, ob die Goldschicht dicht bzw. dick genug ist, um die Oxidation der Eisenschicht bei Umgebungsluftdruck zu verhindern, wurde die Probe anschließend aus- und wieder eingeschleust. Eine erneute SMOKE-Messung zeigte keine signifikante Änderung der magnetischen Eigenschaften, die Goldschicht war also offenbar dick genug.

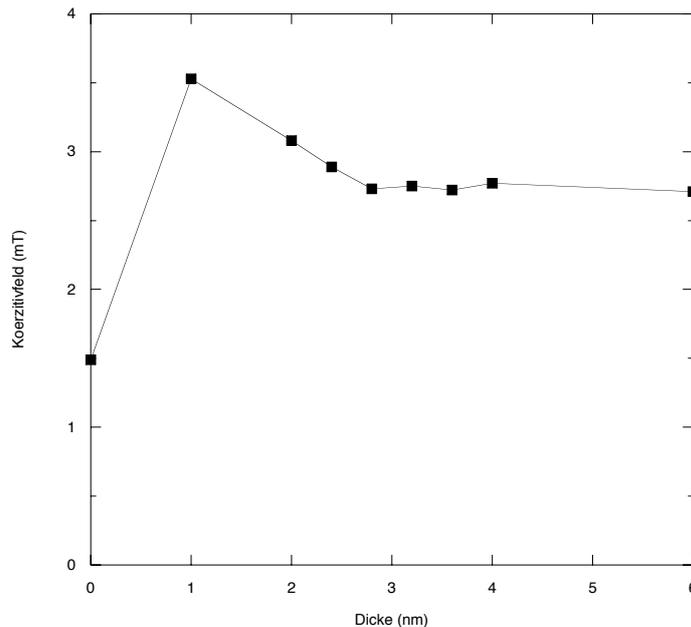


Abbildung 3.22.: Koerzitivfeld (*in-plane*) von 8 ML Fe auf Cu(100) nach 100 min Beschuss mit 1-keV-Neon-Ionen (0,64 Ionen pro Oberflächenatom), anschließend bedeckt mit Goldschichten variabler Dicke

3.4.3. Ionenbeschuss durch 2,3 nm Gold

Um zu untersuchen, ob das fcc-Eisen auch durch eine Goldschicht hindurch umgewandelt werden kann, wurden wieder acht Monolagen Eisen auf Cu(100) präpariert und mit 2,3 nm Gold bedampft. Danach wurde die Probe mit 700-eV-Neon-Ionen beschossen (Ionenstrom $1,3 \cdot 10^{-10}$ A/mm²) und in regelmäßigen Abständen SMOKE-Messungen durchgeführt.

Abb. 3.23 zeigt ein LEED-Bild des Kristalls nach dem Aufdampfen der Goldschicht. Die zwölfzählige Symmetrie des Beugungsbilds deutet auf zwei verschieden orientierte fcc(111)-Domänen hin. Da die Beugungsreflexe relativ unscharf sind, dürften die geordneten Bereiche eher klein sein. Unter der Annahme, dass die Goldschicht im Wesentlichen (100)-orientiert ist, entsprechen die 2,3 nm ungefähr elf Monolagen.

Die *in-plane*-Remanenz in Abhängigkeit von der Ionendosis (Abb. 3.24) verläuft viel flacher als beim entsprechenden Versuch ohne Goldschicht (S. 43). Während die maximale Remanenz der unbedeckten Eisenschicht auf Cu(100) bei einer Gesamtdosis von ca. 0,5 Ionen pro Oberflächenatom erreicht war, dauerte die Umwandlung der goldbedeckten Eisenschicht erwartungsgemäß deutlich länger, sodass die Probe an zwei aufeinanderfolgenden Tagen beschossen werden musste. Die Remanenz wächst anfangs linear mit der Ionendosis und erreicht erst bei 1,4 Ionen pro Atom ein Maximum.

Die maximal erreichte Remanenz ist mit $120 \mu\text{rad}$ praktisch gleich hoch wie beim

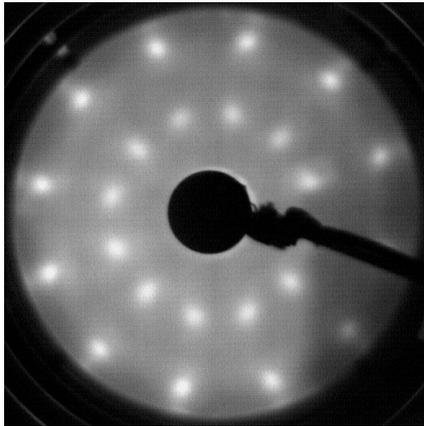


Abbildung 3.23.: LEED-Bild (145 eV), 23 Å Gold auf 8 ML Fe auf Cu(100)

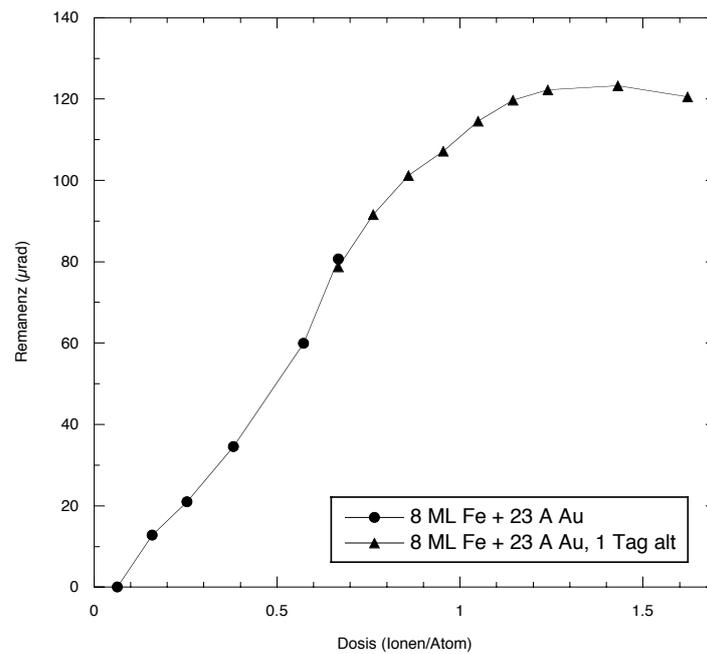


Abbildung 3.24.: Remanenz (*in-plane*) nach Beschuss mit 700-eV-Neon-Ionen, 8 ML Fe auf Cu(100) bedeckt mit 23 Å Gold, longitudinal SMOKE

Beschuss der unbedeckten Eisenschicht. Man kann also davon ausgehen, dass die zusätzliche Goldschicht, abgesehen von der Absorption eines Großteils der Ionen, die ferromagnetische Umwandlung der Eisenschicht durch Ionenbeschuss nicht behindert.

Das Koerzitivfeld betrug bei allen, auch den ersten SMOKE-Messungen konstant etwa 4 mT. Die Schicht war also, anders als bei den Experimenten ohne Goldschicht, von Anfang an sehr weichmagnetisch.

4. Simulationen

Die magnetischen Eigenschaften von acht Monolagen dicken Eisenschichten auf Cu(100) nach Ionenbeschuss hängen in komplexer Weise von der Energie, Masse und Dosis der Ionen ab. Die Ergebnisse der in Abschnitt 3.1 beschriebenen Experimente sind daher nicht leicht zu interpretieren.

Um eine ungefähre Idee vom Verhalten der beim Ioneneinschlag ablaufenden Prozesse bei verschiedenen Ionenenergien und -massen zu bekommen, wurden Monte-Carlo-Simulationen mit dem Programmpaket SRIM durchgeführt [52]. SRIM ist für kristalline Targets nur bedingt geeignet, hat aber den Vorteil, dass die Berechnungen sehr schnell ablaufen, sodass auf einem „normalen“ Windows-PC in kurzer Zeit Tausende Ioneneinschläge simuliert werden können. Der Simulationscode basiert auf einem stark vereinfachten, statischen Modell des Festkörpers. Kumulative Effekte, die erst nach und nach durch den Effekt vieler unabhängiger Einschlagereignisse zustande kommen (Änderungen der Schichtdicke oder -zusammensetzung), werden daher nicht berücksichtigt.

4.1. SRIM

SRIM (*The Stopping and Range of Ions in Matter*) ist ein Programmpaket für Monte-Carlo-Simulation von Ionen in Festkörpern. Der zugrunde liegende TRIM-Code (*The Transport of Ions in Matter*) wurde 1985 von Ziegler, Biersack und Littmark entwickelt [53] und wendet eine Reihe von Näherungen an, um die Berechnungen möglichst effizient zu machen.

SRIM bzw. TRIM simuliert eindimensionale Systeme aus bis zu acht Schichten, deren Material jeweils durch isotrope Eigenschaften charakterisiert wird. Diese Näherung trifft streng genommen nur für amorphe Schichten zu. Sämtliche Stöße werden als reiner Zweierstoß (*binary collision approximation*) zwischen abgeschirmten Coulomb-Potentialen berechnet, wobei Austausch- und Korrelationswechselwirkungen im Überlappungsbereich der Elektronenschalen durch Näherungen berücksichtigt werden.

Die Teilchentrajektorien werden nach einer Monte-Carlo-Methode berechnet, indem nur die Stöße simuliert und die Auswirkungen der Stöße gemittelt werden. Die Stoßpartner, Stoßparameter und freien Weglängen werden dabei nach einer statistischen Verteilung zufällig gewählt. Daraus werden die inelastischen Verluste, sowie die neuen Richtungen und Energien der Teilchen berechnet, wonach die Teilchen zum nächsten Stoß weiter springen. Auf diese Weise werden alle an der Stoßkaskade beteiligten Teilchen verfolgt, bis sie zur Ruhe kommen bzw. ihre Energie einen Schwellenwert unterschreitet.

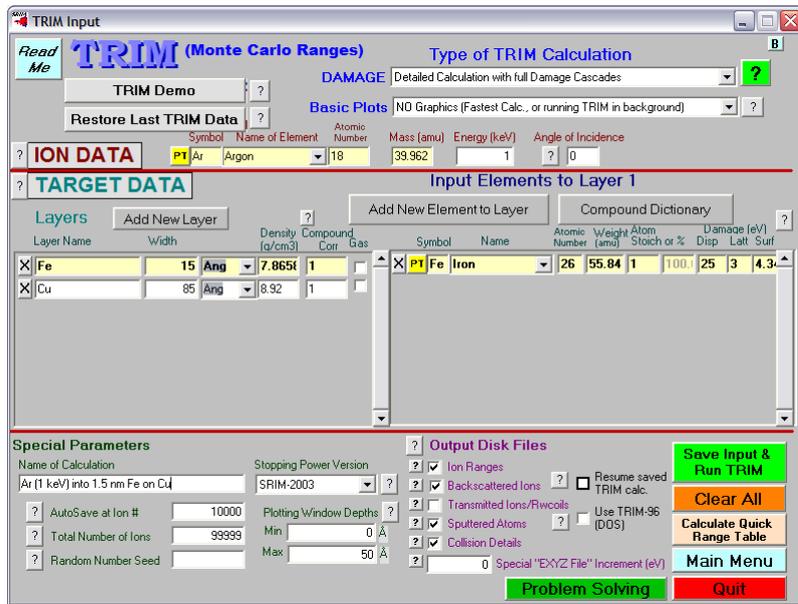


Abbildung 4.1.: SRIM Simulation, Eingabefenster

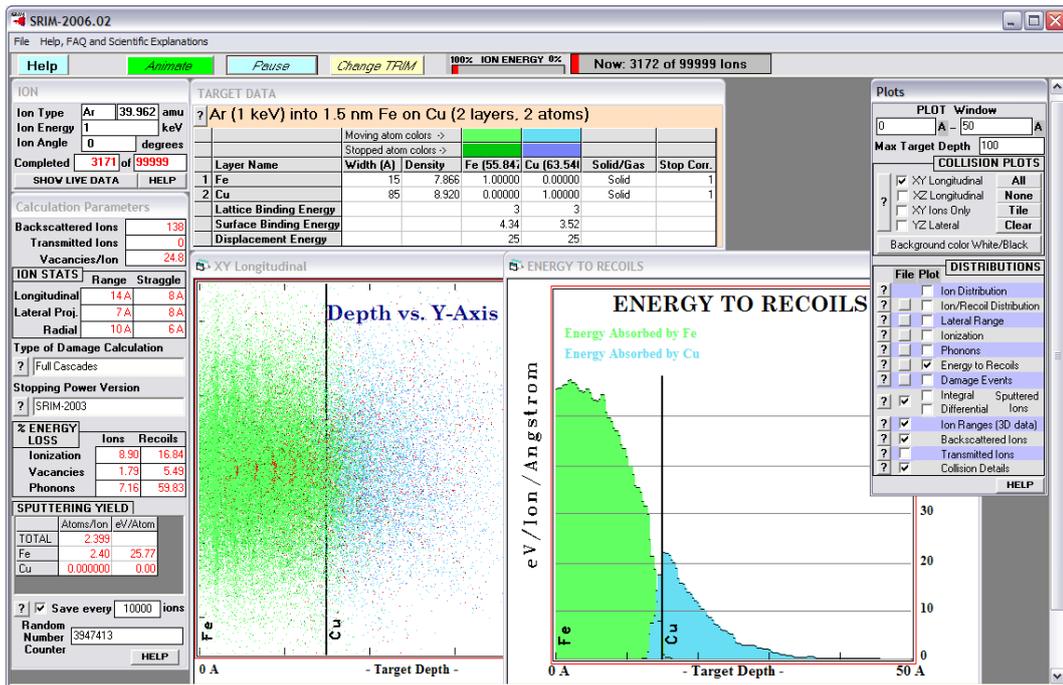


Abbildung 4.2.: SRIM Simulation, 1-keV-Ar-Ionenbeschuss von 1,5 nm Fe auf Cu

Zur Beschreibung der primären Ionen im Festkörper wird eine geschwindigkeitsabhängige effektive Ionenladung benutzt. Durch Wechselwirkung mit den Festkörperelektronen wird die Ionenladung langreichweitig abgeschirmt, und das Ion verliert Energie durch Elektronenanregungen und die Erzeugung von Plasmonen. Ein kleiner Teil der in der Stoßkaskade freiwerdenden Energie geht durch gesputterte Teilchen verloren, der Rest wird durch Ionisation, sowie zur Erzeugung von Phononen und Strahlenschäden verbraucht. Die verschiedenen Arten von Energieverlusten und Strahlenschäden werden für jede Tiefe und über alle Ioneneinschläge aufsummiert.

Als Ergebnis der Simulationen erhält man eine dreidimensionale Verteilung der implantierten Ionen und eine Reihe von Tabellen mit den Häufigkeiten der unterschiedlichen Defekte und den verschiedenen Energieverlusten in Abhängigkeit von der Tiefe. Bei den Energieverlusten werden die durch Stöße übertragene Energie (*energy to recoils*), Ionisation und die Anregung von Phononen unterschieden. Die Stöße, bei denen Energie übertragen wird (*recoil collisions*), die zur Bildung von Fehlstellen (*vacancies*) führen oder bei denen ein Teilchen den Platz des anderen einnimmt (*replacement collisions*), werden getrennt voneinander für jede Tiefe aufsummiert. Teilchen die den simulierten Bereich nach innen (*transmission*) oder über die Oberfläche (*sputtering, backscattering*) verlassen, werden ebenfalls berücksichtigt.

Die Bedienung von SRIM ist denkbar einfach: Man definiert die Dicke und Zusammensetzung der einzelnen Schichten, wählt Ionenart, Ionenenergie und Einfallswinkel und startet die Simulation (Abb. 4.1, 4.2). Materialparameter wie die Bindungsenergie im Inneren und an der Oberfläche oder die zur Erzeugung eines Frenkel-Defekts nötige Energie (*displacement energy*, s. Abschnitt 2.2) können aus Tabellen automatisch übernommen und beliebig verändert werden.

Durch die Verwendung richtungsunabhängiger Materialeigenschaften werden Kristalleffekte wie *Channeling*, die Eindringtiefen und mittlere freie Weglängen im Festkörper wesentlich beeinflussen, nicht berücksichtigt. Eine weitere wichtige Einschränkung des Simulationscodes ist durch das statische Targetmodell bedingt. Da die Endpositionen der durch vorhergehende Stoßkaskaden versetzten Atome nicht in weitere Berechnungen einfließen, können sich keine Strahlenschäden anhäufen. Das Konzentrationsprofil des Targets bleibt konstant, nur die Zufallsparameter für die Simulation der Stöße werden variiert.

Der größte Teil der in der Stoßkaskade entstandenen Strahlenschäden wird durch das Aufschmelzen und die Rekristallisation im Verlauf des *Thermal Spikes* (s. Abschnitt 2.2) wieder ausgeheilt. Da SRIM nur direkte Zweierstöße verfolgt und die thermische Bewegung generell vernachlässigt, kann es diesen Effekt nicht reproduzieren. Eine vollständige Simulation des Ioneneinschlags in der dazu nötigen Genauigkeit wäre nur durch Molekulardynamik-Rechnungen möglich, die allerdings einen um mehrere Größenordnungen höheren Rechenaufwand erfordern.

4.2. Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu

Der Beschuss von 1,6 nm Eisen auf Kupfer mit Edelgasionen unterschiedlicher Energie wurde mit SRIM simuliert. Wie bei den beschriebenen Experimenten betrug der Einfallswinkel stets 0° . Für jede Kombination aus Ionentyp und Ionenenergie wurden jeweils 10 000 Ioneneinschläge mit der Einstellung „*Detailed Calculation with full Damage Cascades*“ simuliert (Abb. 4.1).

Mit Ausnahme der Simulationen mit Heliumionen wurde die Dicke der Kupferschicht jeweils so gewählt, dass der Anteil der transmittierten Ionen zu vernachlässigen war (ca. 10 nm). Die Eindringtiefe von Helium in Eisen und Kupfer ist so hoch, dass die Berechnung der vollen Stoßkaskade bzw. die Simulation eines entsprechend dicken Kupfertargets in diesem Fall nur den Rechenaufwand erhöht hätte, ohne zusätzliche Informationen über die Entwicklung der Oberflächenschicht zu liefern.

Die von SRIM für 1,6 nm Eisen auf Kupfer errechneten Zerstäubungsfaktoren waren durchwegs höher als die für eine reine (polykristalline) Eisenoberfläche erwarteten. Bei 1 keV Argon betrug der Wert beispielsweise 2,4 statt 1,7 [33] bzw. 1,8 [35]. Da SRIM die höhere Eindringtiefe normal einfallender Ionen durch *Channeling* entlang der (100)-Richtung nicht berücksichtigt, dürfte der reale Zerstäubungsfaktor eher noch niedriger sein. Wie sehr die vermutlich geringere Oberflächenbindungsenergie von pseudomorphem fcc-Eisen auf Cu(100) diesen Effekt wieder ausgleicht, ist nicht bekannt.

SRIM liefert eine Reihe von Tiefenverteilungen: die Endpositionen der Ionen und unterschiedlichen Atomsorten, die Verteilung der durch Stöße übertragenen Energie (*energy to recoils*), sowie die Verteilungen der verschiedenen Stoßprozesse, die zur Bildung von Leerstellen oder Phononen, zu Ionisation oder zu Teilchenaustausch (*replacement collisions*) führen. Da die Häufigkeiten dieser Stoßprozesse stark miteinander korrelieren, werden die Ergebnisse der Simulationen im Folgenden nur anhand der Verteilungen der Ionenimplantation und des Energieübertrags durch Stöße dargestellt.

4.2.1. Energieübertrag durch Stöße

Abbildungen 4.3 bis 4.7 zeigen die Verteilung des Energieübertrags durch Stöße in Abhängigkeit von der Tiefe für Helium-, Neon-, Argon-, Krypton- und Xenon-Ionen unterschiedlicher Energie. Die Werte, angegeben in Elektronenvolt pro Nanometer und Ion, wurden jeweils über 10 000 simulierte Ioneneinschläge gemittelt. Der senkrechte Strich bei 1,6 nm markiert die Grenze zwischen der Eisenschicht und dem Kupfersubstrat.

Abbildung 4.8 stellt den relativen Anteil der durch Stöße übertragenen Energie in Abhängigkeit von der Tiefe für unterschiedliche Ionenarten bei 1 keV Energie dar.

Der Anteil der innerhalb der Eisenschicht durch Stöße abgegebenen Energie ist wenig überraschend umso höher, je schwerer das Ion und je geringer die Ionenenergie ist.

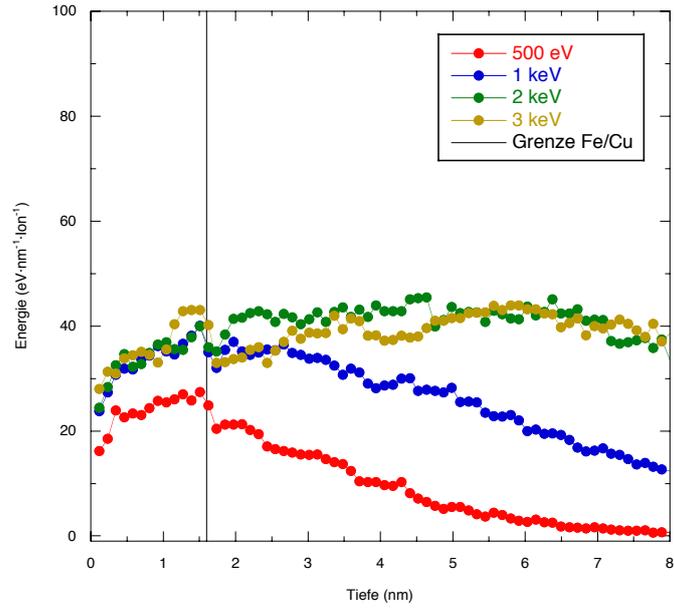


Abbildung 4.3.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) bei Helium-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

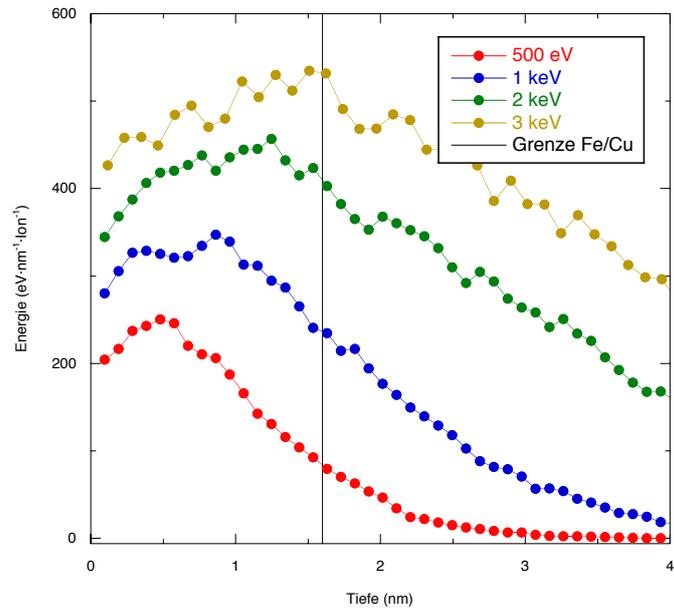


Abbildung 4.4.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) bei Neon-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

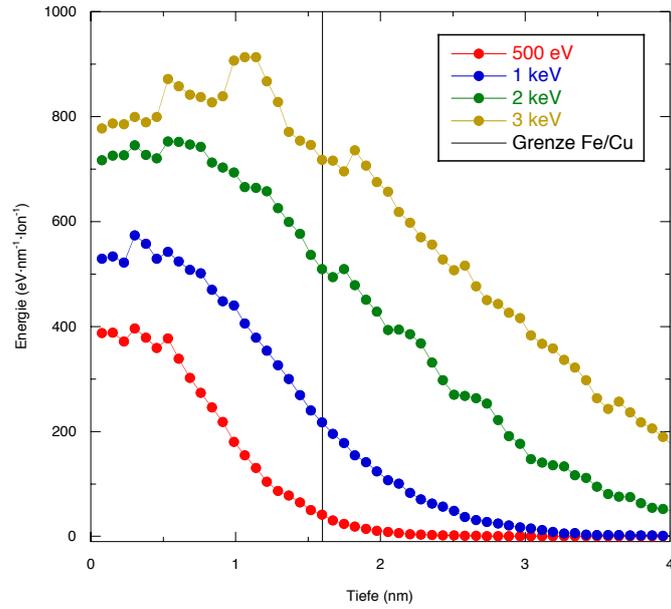


Abbildung 4.5.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) bei Argon-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

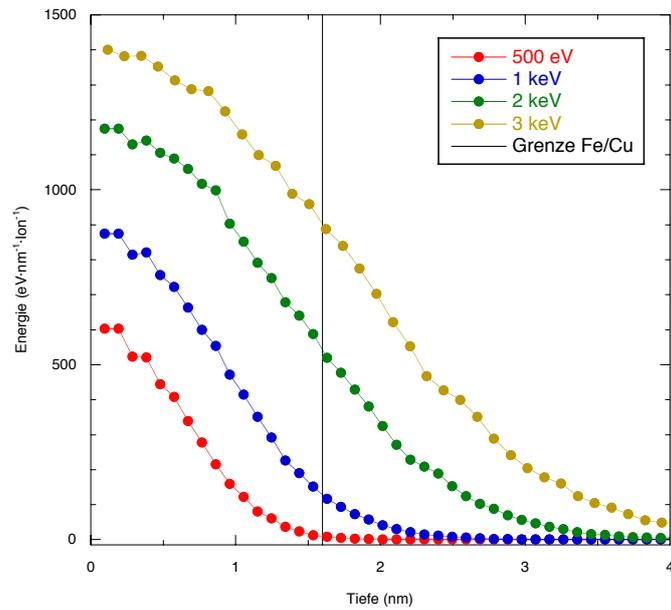


Abbildung 4.6.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) bei Krypton-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

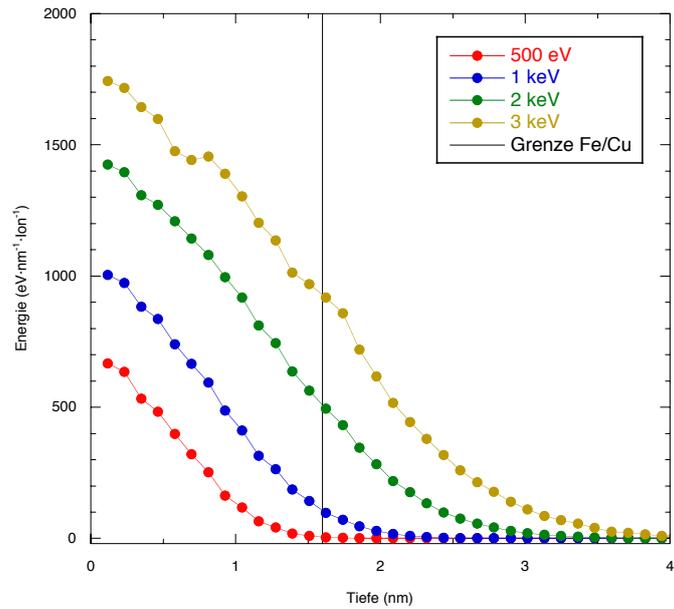


Abbildung 4.7.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) bei Xenon-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

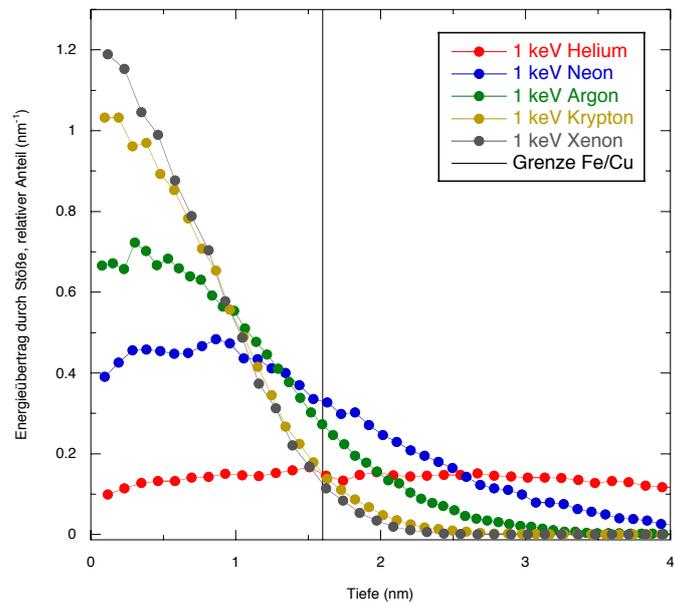


Abbildung 4.8.: Tiefenverteilung des Energieübertrags durch Stöße (*energy to recoils*) bei Beschuss von 1,6 nm Fe auf Cu mit 1-keV-Edelgasionen, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen

4.2.2. Ionenimplantation

Abbildungen 4.9 bis 4.13 zeigen die Verteilung der implantierten Edelgasionen in Abhängigkeit von der Tiefe für Helium-, Neon-, Argon-, Krypton- und Xenon-Ionen unterschiedlicher Energie. Die Werte, angegeben in Ionen pro Nanometer und Ion, wurden wieder über je 10 000 simulierte Ioneneinschläge gemittelt.

Erwartungsgemäß dringen die Ionen umso tiefer in den Festkörper ein, je höher ihre Energie ist. Der Anteil der innerhalb der Eisenschicht implantierten Ionen ist deshalb bei allen Ionenarten umso höher, je niedriger die Ionenenergie ist.

Je schwerer die Ionen sind, umso schmaler ist der Tiefenbereich, innerhalb dessen sie zur Ruhe kommen. Innerhalb einer Ionenart steigt die Breite dieser Tiefenverteilung mit der Ionenenergie (ungefähr proportional zur Quadrat- oder Kubikwurzel der Energie).

Abbildung 4.14 stellt den relativen Anteil der Ionenimplantation in Abhängigkeit von der Tiefe für unterschiedliche Ionenarten bei 1 keV Energie dar. Die Werte sind auf die Gesamtzahl der nicht reflektierten Ionen bezogen, sodass das Integral der Kurven über eine ausreichend hohe Eindringtiefe jeweils 1 betragen sollte. Wie man sieht, liegt der Anteil der implantierten Heliumionen im betrachteten Bereich viel niedriger als der der schwereren Ionen, es wird also nur ein sehr kleiner Teil innerhalb der Eisenschicht gestoppt. Am größten ist der Anteil der in der Eisenschicht implantierten 1-keV-Ionen bei Argon und Krypton, gefolgt von Neon und Xenon. Der Anteil der in der Nähe der Grenze zwischen Eisen und Kupfer implantierten Ionen ist bei Krypton und Xenon am höchsten.

Abbildung 4.15 zeigt die mittlere Eindringtiefe von Edelgasionen in 1,6 nm Eisen auf Kupfer in Abhängigkeit von der Ionenenergie. Für Helium sind keine Werte angegeben, da die Dicke des simulierten Kupfertargets zu gering war, um zuverlässige Eindringtiefen bestimmen zu können. Der waagrechte Strich zeigt wieder die Tiefe der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer an.

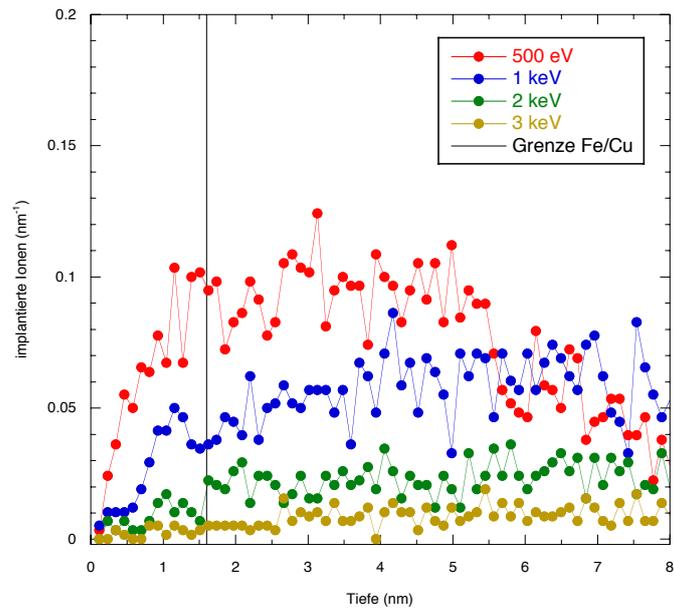


Abbildung 4.9.: Ionenimplantation bei Helium-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

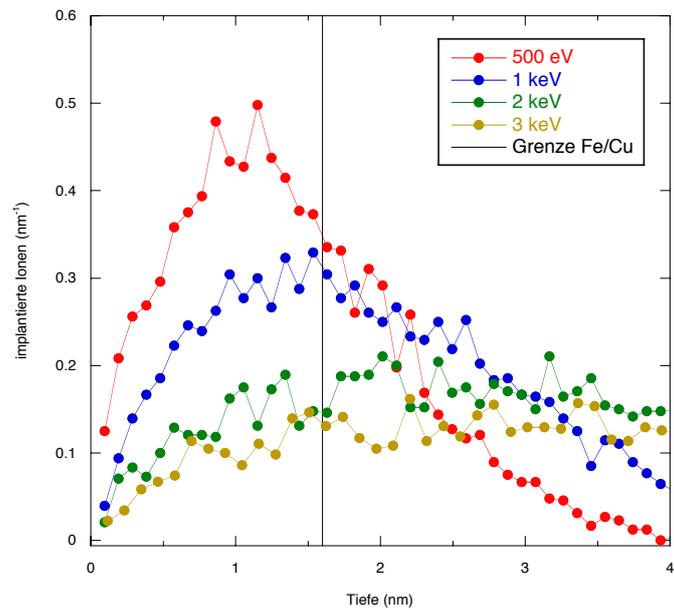


Abbildung 4.10.: Ionenimplantation bei Neon-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

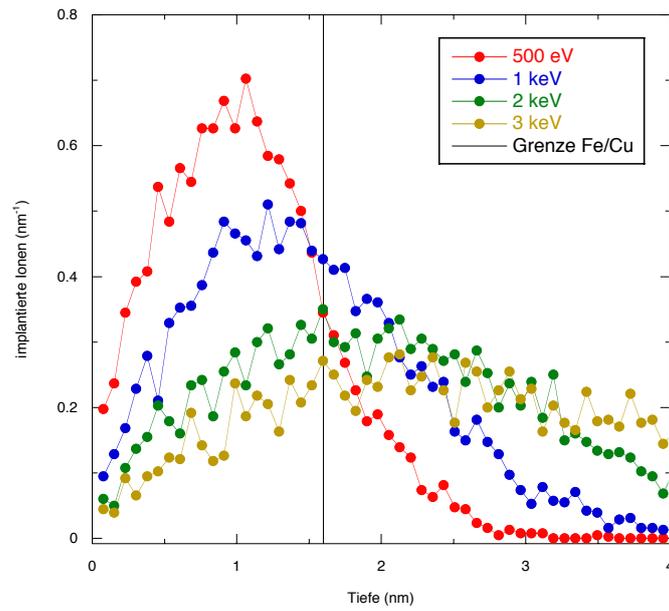


Abbildung 4.11.: Ionenimplantation bei Argon-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

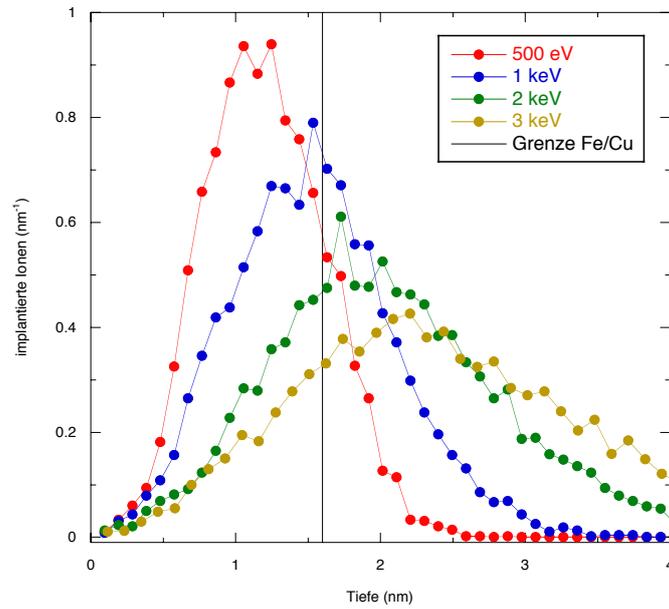


Abbildung 4.12.: Ionenimplantation bei Krypton-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

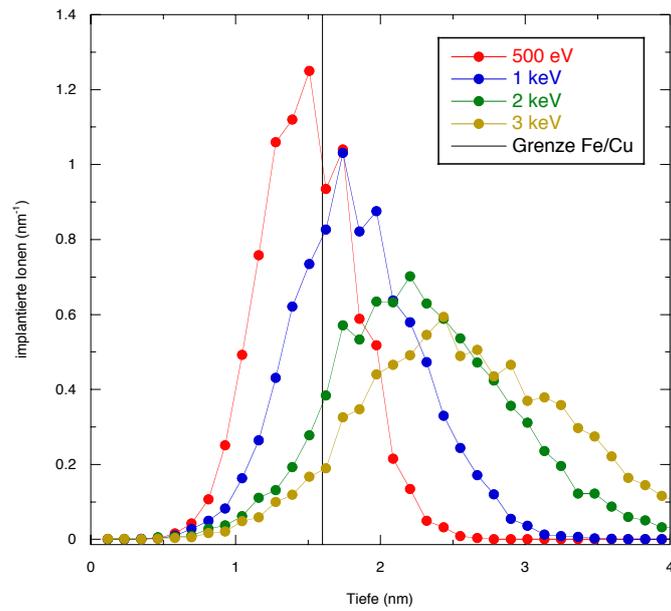


Abbildung 4.13.: Ionenimplantation bei Xenon-Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen, 0,5–3 keV Ionenenergie

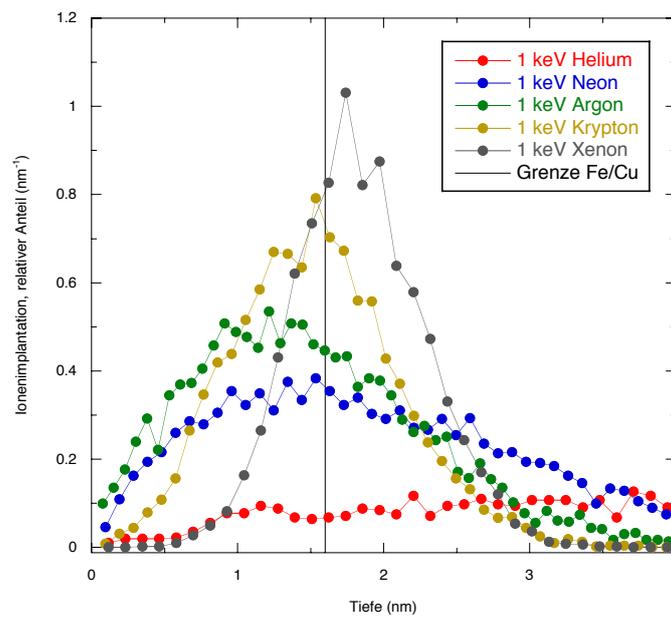


Abbildung 4.14.: Tiefenverteilung der implantierten Ionen bei Beschuss von 1,6 nm Fe auf Cu mit 1-keV-Edelgasionen, SRIM-Simulationen mit je 10^4 Ionen

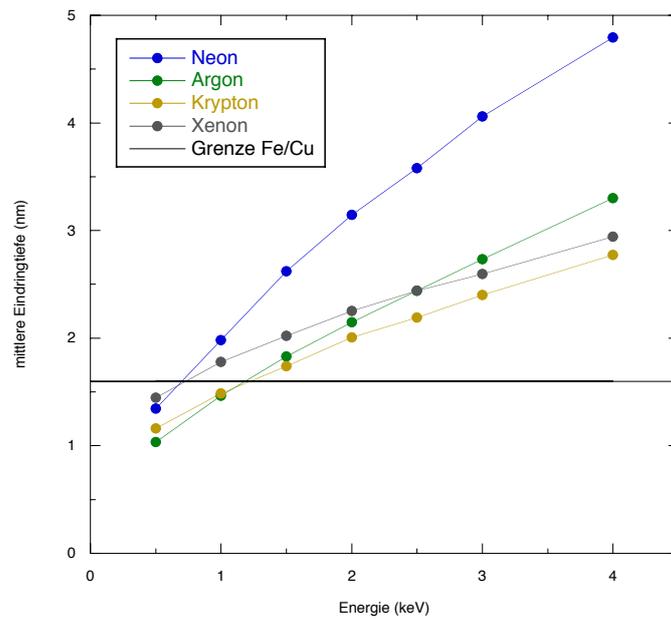


Abbildung 4.15.: mittlere Eindringtiefe (SRIM) von Edelgasen (Ne–Xe) in 1,6 nm Fe auf Cu in Abhängigkeit von der Ionenenergie

5. Diskussion

Da viele der in Abschnitt 3.1 beschriebenen Experimente nicht wiederholt wurden, sind die Messergebnisse mit einiger statistischer Unsicherheit behaftet. Dennoch lassen sich deutliche Trends beim Zusammenhang zwischen den magnetischen Eigenschaften von acht Monolagen Eisen auf Cu(100) nach Ionenbeschuss und der Energie und Art der verwendeten Ionen beobachten. Abb. 5.1 und 5.2 fassen die wesentlichen Ergebnisse der SMOKE-Messungen zusammen.

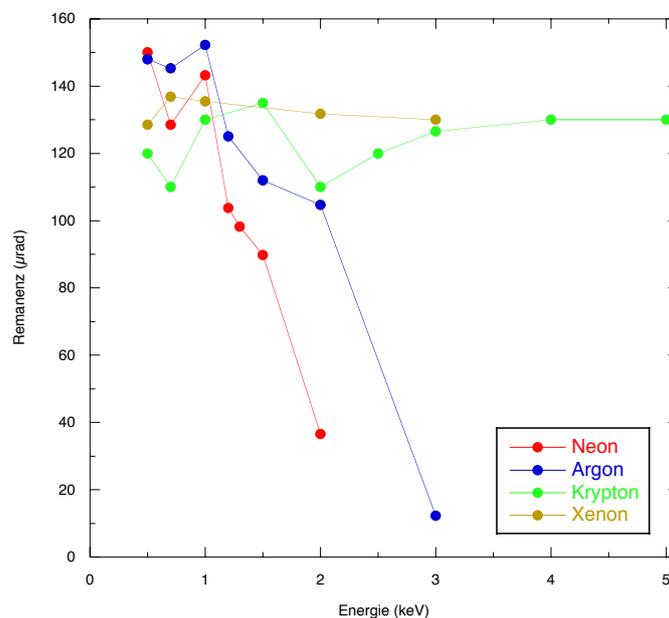


Abbildung 5.1.: Maximum der *in-plane*-Remanenz von 8 ML Fe auf Cu(100) nach Ionenbeschuss (0,5–5 keV), longitudinal SMOKE

Abb. 5.1 zeigt die maximal erreichte *in-plane*-Remanenz für verschiedene Ionenenergien und -arten. Die zum Erreichen des Maximums nötige Ionendosis war jeweils unterschiedlich. Bei mehrfach durchgeführten Experimenten ist der Mittelwert der maximalen Remanenz dargestellt. Experimente mit Helium-Ionenbeschuss haben keine nennenswerten Änderungen der magnetischen Schichteigenschaften gezeigt. Die entsprechenden Messergebnisse sind hier nicht dargestellt.

Die höchste Remanenz wurde für alle Ionenarten bei niedrigen Energien um etwa 1 keV erzielt. Während die maximale Remanenz beim Beschuss mit Krypton-

und Xenon-Ionen praktisch energieunabhängig ist, sinkt der Wert für Neon- und Argon-Ionen deutlich mit steigender Energie.

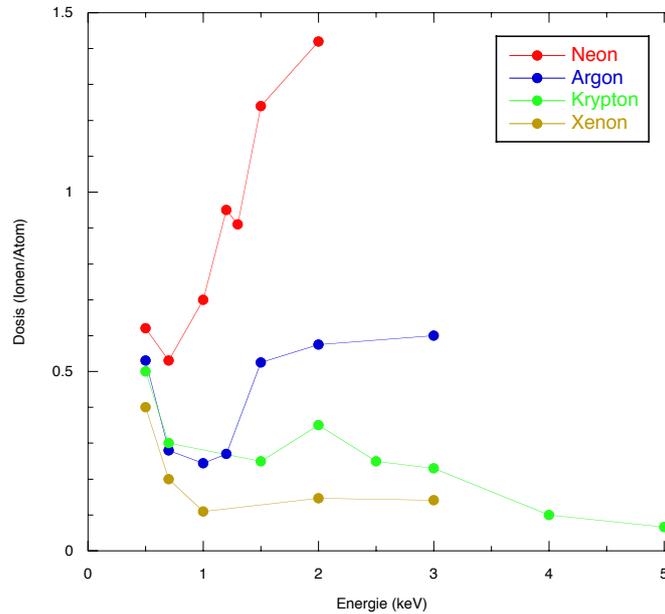


Abbildung 5.2.: zum Erreichen der maximalen *in-plane*-Remanenz von 8 ML Fe auf Cu(100) nötige Gesamtdosis (Ionen pro Oberflächenatom), longitudinal SMOKE

Abb. 5.2 stellt die zum Erreichen der jeweils maximalen Remanenz nötigen Ionendosen dar. Auch hier zeigt sich ein unterschiedlich stark ausgeprägter Extremwert um 1 keV. Bei sehr niedrigen Ionenenergien sinkt die Maximaldosis für alle Edelgasionen mit steigender Energie. Zwischen etwa 1 keV und 2 keV steigt die Dosis mit der Energie, und zwar umso steiler, je leichter die verwendeten Ionen sind.

Generell sind die Schwankungen der maximalen Remanenz und der zum Erreichen dieser Remanenz nötigen Ionendosis umso ausgeprägter, je geringer die Masse der Ionen ist. Da die mittlere Eindringtiefe (s. Abb. 4.15) bei leichten Ionen wesentlich stärker von deren kinetischer Energie abhängt als bei schwereren Ionen, ist dies nicht überraschend.

Was sind nun die Mechanismen, die die Entstehung und Zerstörung einer ferromagnetischen Schichtstruktur beim Beschuss mit Ionen bestimmen? Offenbar laufen hier mehrere Prozesse parallel, die jeweils unterschiedlich von der Energie und Art der Ionen abhängen.

Betrachtet man den Verlauf der Remanenz mit steigender Ionendosis (Abb. 3.1, 3.3, 3.6 u. 3.8), so ist bei allen Ionenarten der Abfall der Remanenz nach Überschreiten des Maximums umso steiler, je höher die Energie der Ionen ist. Dies legt die Vermutung nahe, dass die Zerstörung der ferromagnetischen Eigenschaften durch den Abtrag der Schicht (Sputtering) und die Durchmischung zwischen Schicht und Substrat verursacht

wird. Beide Prozesse korrelieren stark mit der kinetischen Energie der Ionen. Da bei schweren Ionen wie Xenon die Eindringtiefen geringer und die Sputter Yields größer sind als bei leichteren Elementen, ist der Abfall der Remanenz entsprechend stärker von der Ionenenergie abhängig (Abb. 3.8, S. 51).

Vergleiche der vor und nach Ionenbeschuss gemessenen Ionenstreuenspektren (z. B. Abb. 3.12 u. 3.13, S. 55) zeigen, dass sich die Zusammensetzung der obersten Atomlage nur wenig ändert. Dennoch geht das APPH-Verhältnis (AES) von Eisen und Kupfer typischerweise von 600–700 %, gemessen an der frischen Eisenschicht, auf etwa 200–300 % zum Zeitpunkt der maximalen Remanenz zurück. Die Erklärung dafür ist, dass die Eisenschicht einerseits immer dünner wird, und andererseits der Anteil von Kupfer innerhalb der Schicht ansteigt. Welcher dieser zwei Prozesse für bestimmte Ionenenergien und -massen jeweils überwiegt, ist schwer zu sagen. Diese Frage ließe sich am ehesten durch Molekular-dynamik-Simulationen beantworten.

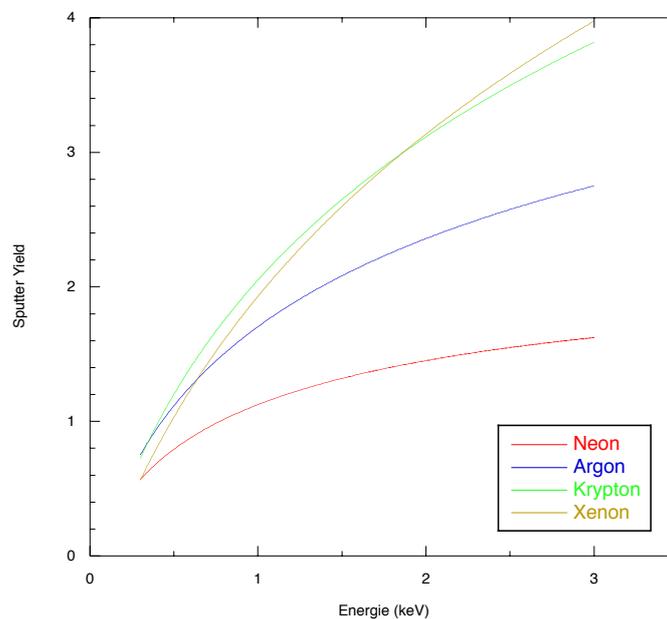


Abbildung 5.3.: Zerstäubungsfaktoren von Edelgasionen auf Eisen [33]

Abb. 5.3 zeigt die Zerstäubungsfaktoren der Edelgasionen von Neon bis Xenon auf bulk-Eisen (bcc polykristallin) in Abhängigkeit von der Energie, berechnet nach einer empirischen Näherungsformel [33]. Auch wenn die Faktoren für pseudomorphes fcc-Eisen auf Cu(100) möglicherweise ganz andere sind, der qualitative Verlauf und die Relationen zwischen den Kurven stimmen mit einiger Sicherheit.

Da die SRIM-Rechnungen auf einem statischen Modell beruhen, ist der Grad der Durchmischung von Schicht und Substrat nicht direkt aus den Simulationsergebnissen ablesbar. Die Durchmischung hängt aber im Wesentlichen von der in der Umgebung der Grenze zwischen Eisen und Kupfer deponierten Energie ab. Abb. 5.4 stellt den Betrag der in diesem Bereich durch Stöße abgegebenen kinetischen Energie dar (*energy*

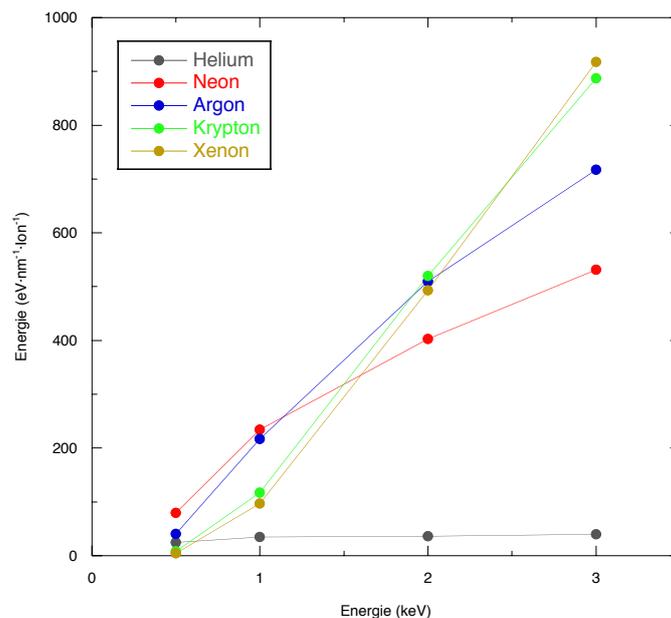


Abbildung 5.4.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) an der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer bei Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen (je 10^4 Ionen)

to recoils), ein vermutlich ganz guter Indikator für den Grad der Durchmischung pro einfallendem Ion. Während die Zerstäubungsfaktoren für niedrige Ionenenergien proportional zur Wurzel der Energie sind (Gl. 2.12 auf S. 18), steigt die Durchmischung ungefähr linear mit der Energie.

Wenn Sputtering und Durchmischung die Schicht zerstören, welche Prozesse sind für die Bildung der ferromagnetischen Strukturen maßgeblich? Die Antwort darauf liegt offensichtlich im linken Bereich der Remanenz- und Koerzitivfeldkurven aus Abschnitt 3.1, in der Entwicklung der magnetischen Eigenschaften für kleine Ionendosen.

Von STM-Bildern wissen wir, dass die für die ferromagnetischen Eigenschaften der Eisenschicht verantwortlichen kubisch-raumzentrierten Nanokristalle (Abb. 1.5 auf S. 6) schon sehr früh im Verlauf der Ionenbestrahlung entstehen. Mit steigender Ionendosis kommen nur mehr wenig zusätzliche bcc-Kristalle hinzu; die Entwicklung besteht hauptsächlich im Wachsen der schon bestehenden Kristalle. Ihre nadelartige Form entsteht dadurch, dass das Wachstum entlang einer Richtung viel schneller voranschreitet als quer dazu.

Die Tiefe der bcc-Nadeln lässt sich anhand von STM-Bildern nur näherungsweise bestimmen (Abb. 1.6). Schätzt man das Volumen der Nanokristalle unter der Annahme ab, dass diese hauptsächlich entlang der Schicht wachsen und sich die Tiefe der Nadeln dabei nur wenig ändert, so zeigt ein Vergleich mit den Ergebnissen

von SMOKE-Messungen an ähnlich präparierten Schichten, dass sich die ferromagnetischen Eigenschaften langsamer entwickeln, als es dem geschätzten Volumen an bcc-Eisen entspricht. Möglicherweise verhindert Superparamagnetismus die Kopplung der magnetischen Momente bei Raumtemperatur, sodass die Nanokristalle erst ab einer gewissen Breite ferromagnetisch werden.

Um eine bessere Vorstellung vom Mechanismus bei der Entstehung und dem Wachstum der Nanokristalle zu bekommen, scheint es sinnvoll, die beim Einschlag der Ionen in die Eisenschicht ablaufenden Prozesse näher zu analysieren. Ein Vergleich mit den Energie- und Massenabhängigkeiten der gemessenen Schichteigenschaften lässt möglicherweise Schlüsse zu, ob die wesentlichen Prozesse an der Oberfläche ablaufen, eher an der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer, oder ob sie über die ganze Eisenschicht verteilt stattfinden.

Da die Atome der ersten Lage mit weniger Nachbaratomen koordiniert sind als die Atome im Inneren des Festkörpers, und Stufenkanten sowie Oberflächendefekte die Bildung von Clustern einer anderer Kristallstruktur als der vorherrschenden begünstigen, ist es naheliegend, zunächst die direkt an der Oberfläche stattfindenden Prozesse zu betrachten.

Ein vorgeschlagener Mechanismus für die Bildung eines bcc-Nanokristalls an der Oberfläche basiert auf dem in Abschnitt 2.2 beschriebenen *outflow*-Mechanismus beim Einschlag eines Ions mit geeigneter Energie und Masse. Im Anschluss an die Stoßkaskade verteilt sich die kinetische Energie, und es bildet sich für kurze Zeit ein geschmolzener Bereich (*thermal spike*). Wenn dieser Bereich bis zur Oberfläche reicht, wird, da die Flüssigkeit unter Druck steht, ein Teil des Materials nach außen gepresst und erstarrt dort. Es ist leicht vorstellbar, dass sich auf diese Weise ab und zu ein bcc-Cluster bilden könnte, der als Keim für das Wachstum der ferromagnetischen Nadeln dienen kann.

Dieses Modell ist insofern attraktiv, als es erklären könnte, warum die maximale Remanenz und die zum Erreichen der maximalen Remanenz nötige Ionendosis bei leichten Ionen stärker energieabhängig ist als bei schwereren (Abb. 5.1 u. 5.2). Dennoch ist es falsch. Die in Abschnitt 3.4.3 beschriebene Versuchsreihe hat gezeigt, dass sich die Eisenschicht auch mit Ionenbeschuss durch eine zusätzlich aufgedampfte Schicht Gold hindurch ferromagnetisch umwandeln lässt (700 eV Neon, 2,3 nm Gold). Die dazu nötige Ionendosis ist zwar deutlich höher als ohne Goldschicht, die maximale Remanenz ist aber in beiden Fällen praktisch gleich groß. Man kann also davon ausgehen, dass die zusätzliche Goldschicht, von der Abschwächung des Ionenstrahls abgesehen, Bildung und Wachstum der bcc-Nadeln nicht behindert. An der Grenzfläche zwischen Eisen und Gold kann der *outflow*-Mechanismus nicht funktionieren, er dürfte also bei der Transformation der Eisenschicht keine wesentliche Rolle spielen.

Sind die Vorgänge an der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer für die Bildung der bcc-Nadeln wichtig? Da wir nicht wissen, wie tief die Nanokristalle reichen, wäre ein Bildungsprozess, dessen Ursprung an der Grenze zwischen Schicht und Substrat liegt, durchaus vorstellbar.

Abb. 5.5 zeigt die Ergebnisse der SRIM-Simulationen für Edelgasionen verschiedener Energie bezüglich Ionenimplantation an der Grenzfläche zwischen Eisen und

Kupfer. Die dargestellten Werte entsprechen jeweils dem Anteil der in 1,6 nm Tiefe zur Ruhe gekommenen Ionen, skaliert mit der Breite des Tiefenintervalls, über das summiert wurde.

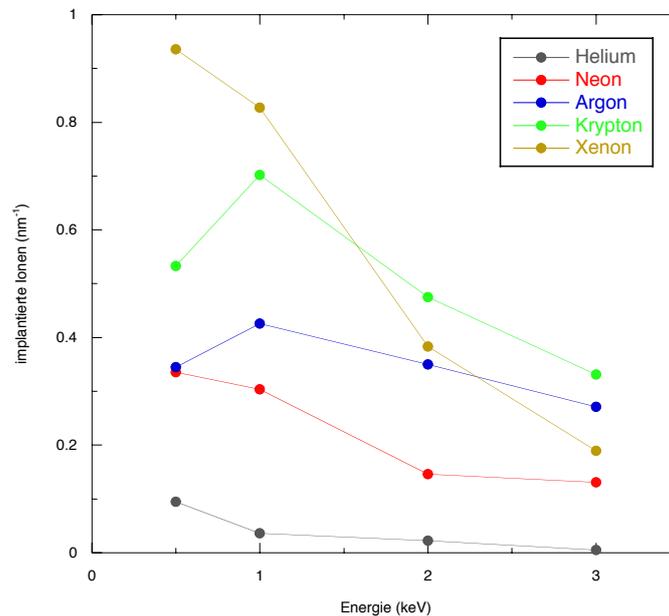


Abbildung 5.5.: Ionenimplantation an der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer bei Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen (je 10^4 Ionen)

Die relativ hohen Werte bei 500 eV und 1 keV weisen zwar in die richtige Richtung, dennoch zeigt allein ein Vergleich der Simulationen für Xenon mit den Ergebnissen der SMOKE-Messungen, dass die Ionenimplantation am Interface vermutlich keine wichtige Rolle bei der Transformation spielt. Während der Anteil der in 1,6 nm Tiefe implantierten Xenon-Ionen zwischen 500 eV und 3 keV fast um den Faktor fünf abnimmt, war die maximale Remanenz bei den SMOKE-Messungen so gut wie unabhängig von der Ionenenergie (Abb. 5.1). Die zum Erreichen der maximalen Remanenz nötige Gesamtdosis wiederum war bei 500 eV etwa viermal höher als bei 1 keV (Abb. 5.2), während sich der Anteil der Implantation (Abb. 5.5) bei diesen Energien nur geringfügig unterscheidet. Wäre Ionenimplantation ein wichtiger Prozess für die Umwandlung der Eisenschicht, so wäre in Abb. 5.1 und 5.2 ein deutliches Maximum bzw. Minimum bei niedrigen Energien zu erwarten, zumal Durchmischung und Zerstäubung dort weniger stark ins Gewicht fallen.

Abb. 5.6 zeigt die an der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer durch Stöße abgegebene Ionenenergie, skaliert mit der Primärenergie. In dieser Darstellung wird besser als in Abb. 5.4 sichtbar, bei welchen Energien und Ionenmassen der in der Tiefe des Interface deponierte Anteil der Ionenenergie besonders hoch ist. Auch hier

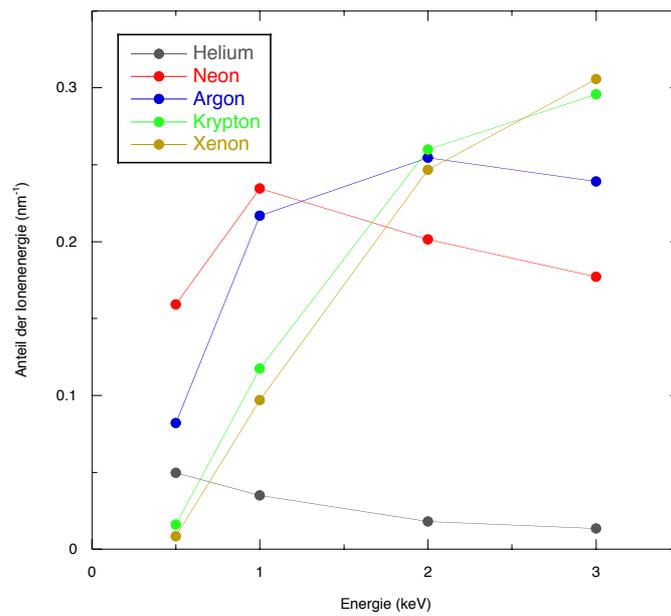


Abbildung 5.6.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) an der Grenzfläche zwischen Eisen und Kupfer geteilt durch die Primärenergie bei Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen (je 10^4 Ionen)

ließe sich mit etwas Phantasie einen Zusammenhang zu den experimentellen Daten für leichte Ionen konstruieren, nicht aber zu den Ergebnissen für schwere Ionen. Den Simulationen zufolge dringen Krypton- und Xenon-Ionen mit 500 eV gar nicht weit genug in den Festkörper ein, um einen bedeutenden Teil ihrer Energie an der Grenze zum Substrat zu deponieren. Dennoch unterscheiden sich die maximale Remanenz (Abb. 5.1) und die Gesamtdosis zur optimalen Umwandlung (Abb. 5.2) bei 500 eV nur wenig von denen der leichteren Ionen.

Die Ergebnisse der in Abschnitt 3.2 beschriebenen Versuchsreihe weisen in die gleiche Richtung. Bei diesen Versuchen wurde jeweils eine drei Monolagen dicke Eisenschicht auf Cu(100) mit derselben Dosis 1-keV-Argon-Ionen beschossen, nach der bei acht Lagen dicken Schichten die maximale Remanenz gemessen worden war. Anschließend wurde weiter Eisen aufgedampft, bis die Dicke der Schicht ungefähr acht Monolagen entsprach. Die gemessenen Werte der Remanenz unterschieden sich nur wenig von den Vergleichswerten der auf üblichem Weg erzeugten 8-ML-Schicht (Abb. 3.14).

Die Vorgänge am Interface zwischen Schicht und Substrat sind also vermutlich nicht bestimmend für die Entstehung der ferromagnetischen Strukturen. Erst bei der Zerstörung der Schicht bei höheren Ionendosen dürfte die Durchmischung von Eisen und Kupfer eine Rolle spielen.

Wenn weder ein Oberflächenmechanismus noch die Prozesse an der Grenze zwischen Eisen und Kupfer für die Transformation der Schicht verantwortlich sind, müssen die entscheidenden Vorgänge irgendwo dazwischen ablaufen.

Abb. 5.7 stellt den Anteil der Ionenenergie dar, der insgesamt durch Stöße in der Eisenschicht abgegeben wird. Dieser Anteil ist umso größer, je schwerer die verwendeten Ionen sind, da leichtere Ionen im Mittel tiefer eindringen als schwerere. Die Maxima des Energieanteils liegen bei 500 eV bzw. 1 keV, was zu den gemessenen Werten in Abb. 5.1 und 5.2 passt. Nicht erklärbar anhand dieser Grafik scheinen die Unterschiede der optimalen Ionendosis zwischen 500 eV und 1 keV zu sein (Abb. 5.2). Vor allem bei Argon zeigt sich ein deutliches Minimum der Idealdosis um 1 keV, das offenbar nicht mit der in der Eisenschicht deponierten Energie korreliert.

Abb. 5.8 zeigt das ungefähre mittlere Volumen des aufgeschmolzenen Bereichs innerhalb der Eisenschicht nach dem Einschlag eines Ions. Das Volumen des *Thermal Spikes* wurde anhand einer Näherungsformel abgeschätzt (Gl. 2.11, S. 16) und der innerhalb der Eisenschicht liegende Volumensanteil unter der Annahme berechnet, dass der geschmolzene Bereich als Kugel in einer effektiven Tiefe vorliegt. Als effektive Tiefe des *Thermal Spikes* wurde jene Tiefe gewählt, bis zu der in den SRIM-Simulationen jeweils die Hälfte der insgesamt durch Stöße abgegebenen Energie absorbiert worden war.

Dieses Modell ist stark vereinfacht und sollte nur als grobe Näherung verstanden werden. Das aufgeschmolzene Volumen in der *Thermal-Spike*-Phase ist tatsächlich eher tropfen- als kugelförmig und hat für jede Ionenenergie und -masse im Mittel eine etwas andere Form. Dennoch passen die Ergebnisse dieser Abschätzung besser zu den experimentellen Daten als die allein aus den Ergebnissen der SRIM-Simulationen gewonnenen Kurven. Da die Simulationen und die daraus erhaltene effektive Tiefe

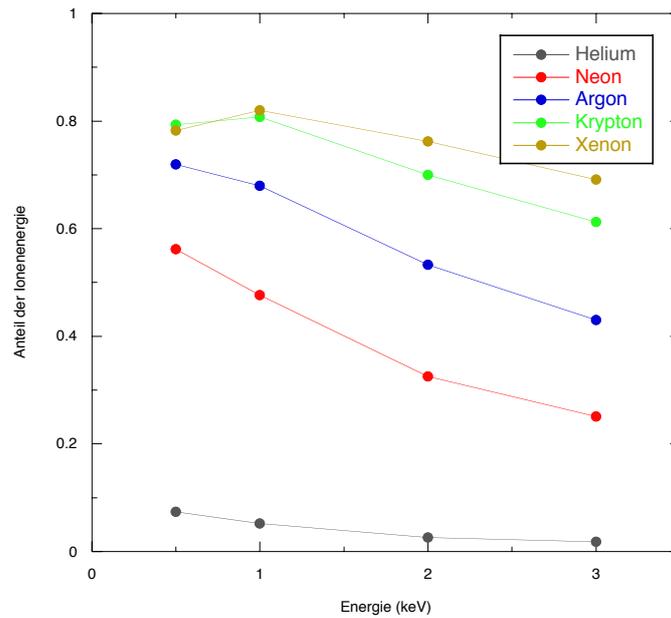


Abbildung 5.7.: Energieübertrag durch Stöße (*energy to recoils*) in der Eisenschicht geteilt durch die Primärenergie bei Ionenbeschuss von 1,6 nm Fe auf Cu, SRIM-Simulationen (je 10^4 Ionen)

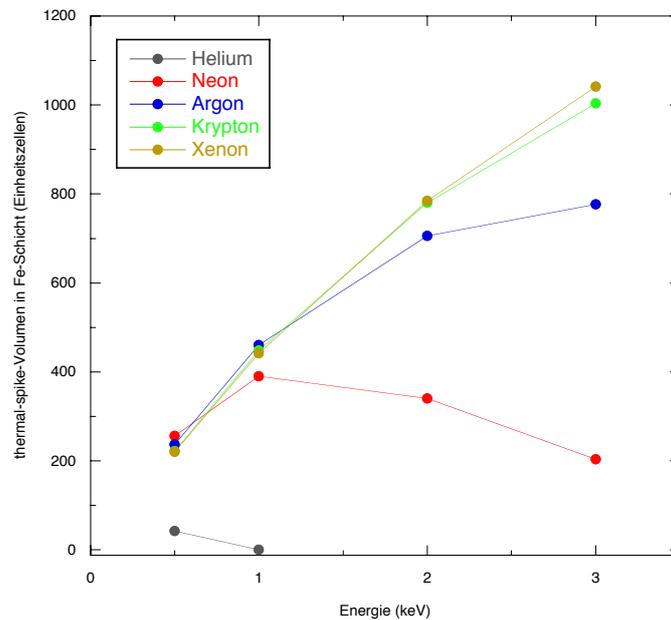


Abbildung 5.8.: Volumen des *Thermal Spikes* in der Eisenschicht, abgeschätzt anhand von SRIM-Simulationen und Gl. 2.11 [28]

des *Thermal Spikes* ebenfalls auf einem vereinfachten Modell beruhen, scheint es wenig sinnvoll, die beschriebene Rechnung noch weiter zu verfeinern.

Bei 500 eV liegen, mit Ausnahme von Helium, alle Punkte eng beieinander (Abb. 5.8). Das Volumen des *Thermal Spikes* ist also so gut wie unabhängig von der Ionenmasse. Dies korrespondiert mit den Ergebnissen der SMOKE-Messungen, wonach die maximale Remanenz und die ideale Transformationsdosis bei allen Edelgasen mit Ausnahme von Helium sehr ähnlich sind (Abb. 5.1 u. 5.2). Über 1 keV weicht die Kurve für Neon in Abb. 5.8 deutlich von denen der anderen Edelgasen ab. Ab etwa 1 keV fällt auch die Kurve der maximalen Remanenz (Abb. 5.1) deutlich ab und die Ionendosis für maximale Remanenz (Abb. 5.2) steigt ebenso deutlich an. Etwas weiter rechts in Abb. 5.8 trennt sich auch die Kurve für Argon von denen der schwereren Edelgase, was ebenso mit einem Abfall der maximalen Remanenz und einem Anstieg der Idealdosis in Abb. 5.1 und 5.2 korrespondiert. Die Kurven für Krypton und Xenon bleiben sowohl in Abb. 5.8 als auch bei den experimentellen Daten relativ nahe beieinander.

Berücksichtigt man zusätzlich die Zerstörung der Schicht durch Sputtering und die Durchmischung am Interface, so könnte ein Modell auf der Basis des aufschmelzenden Eisenvolumens durchaus geeignet sein, den Zusammenhang zwischen den magnetischen Eigenschaften der Schicht und den Parametern beim Ionenbeschuss zu erklären. Da jedoch sowohl das für Abb. 5.8 verwendete Rechenmodell als auch das Festkörpermodell der SRIM-Simulationen auf starken Vereinfachungen beruhen, ist es sicher nicht sinnvoll, sich allein aufgrund der Überlegungen in diesem Kapitel für oder gegen einen bestimmten Transformationsmechanismus zu entscheiden. Die Simulationen können nur Hinweise auf die Natur der Umwandlungsprozesse liefern.

Der SRIM-Code verfolgt die Stoßkaskade bis zu einer bestimmten Grenzenergie, die weitere Verteilung der kinetischen Energie durch thermische Diffusion wird dadurch vollständig vernachlässigt. Ebenfalls vernachlässigt werden sämtliche richtungsabhängigen Effekte und die Änderung des Konzentrationsprofils aufgrund der Durchmischung von Eisen und Kupfer (s. Kap. 4). Um eine realistischere Vorstellung von den Vorgängen beim Einschlag der Ionen in die Eisenschicht, insbesondere in der *Thermal-Spike*-Phase, zu erhalten, wären Molekulardynamik-Simulationen nötig.

Insgesamt deuten die Ergebnisse auf folgenden Bildungsmechanismus der ferromagnetischen Strukturen hin: Durch den Ioneneinschlag entsteht für kurze Zeit ein geschmolzener Bereich, dessen Form und Größe von der Energie und Masse des Ions abhängt. Da die fcc- und bcc-Struktur energetisch sehr ähnlich sind, entsteht bei der Rekristallisation der Schmelze in seltenen Fällen ein bcc-artig geordneter Nanokristall innerhalb der Eisenschicht. Da das flüssige Volumen von außen nach innen erstarrt, wird das Material jedoch in der Regel die fcc-Struktur der Umgebung annehmen. Wenn das *Thermal-Spike*-Volumen bis in die Tiefe der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat reicht, führt das Aufschmelzen auch zur Durchmischung von Eisen und Kupfer. Einmal entstanden, wächst der bcc-Kristall durch weitere Aufschmelzvorgänge in seiner Umgebung. Die pseudomorphe fcc-Eisenschicht steht unter mechanischer Spannung, sodass Umordnungsprozesse an der Grenze zum bcc-Kristall ebenfalls zu dessen Wachstum beitragen können.

Da Kupfer nicht in die kubisch-raumzentrierte Eisenstruktur passt, reicht schon ein geringer Anteil von Kupferatomen in der Eisenschicht, um die Nukleation neuer bcc-Kristalle zu verhindern. Dies erklärt die Ergebnisse früherer STM-Messungen, wonach der überwiegende Teil der bcc-Nadeln sehr früh entsteht, solange die Schicht aus noch praktisch reinem Eisen besteht. Die zunehmende Durchmischung bringt nach und nach auch das Wachstum der schon vorhandenen bcc-Kristalle zum Stillstand. Gleichzeitig nimmt durch Sputtering das Gesamtvolumen der Eisenschicht laufend ab.

Da die Geschwindigkeiten all dieser Prozesse von den Eigenschaften der verwendeten Ionen abhängen, steigt und sinkt das Volumen an ferromagnetischem Eisen jeweils unterschiedlich mit der Ionendosis. Bei niedrigen Energien, wo Durchmischung und Sputtering vergleichsweise schwach sind, sind die maximale Remanenz der Eisenschicht und die zur Umwandlung nötige Ionendosis fast unabhängig von der Ionenmasse. Für geringe Ionenmassen steigt das *Thermal-Spike*-Volumen innerhalb der Eisenschicht weniger stark mit wachsender Energie als die Effekte von Durchmischung und Sputtering. Die Kurven in Abb. 5.1 und 5.2 weichen deshalb bei hohen Ionenenergien stärker voneinander ab als bei niedrigen.

6. Zusammenfassung

Acht Monolagen dicke Eisenschichten auf Cu(100) wachsen pseudomorph kubisch-flächenzentriert und sind dadurch paramagnetisch. Durch Beschuss mit Edelgasionen entwickeln die Schichten ferromagnetische Eigenschaften, wobei die magnetische Ordnungsrichtung parallel zur Schicht (*in-plane*) liegt. Die maximal erreichbare Remanenz hängt genauso wie die benötigte Gesamtdosis von der Energie und Art der verwendeten Ionen ab. Ab einer bestimmten Idealdosis sinkt die Remanenz mit steigender Dosis. Durch Ionenzerstäubung wird die Schicht zunehmend dünner und rauher, gleichzeitig steigt die Durchmischung von Eisen und Kupfer an der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat.

Die magnetischen Eigenschaften der Eisenschicht lassen sich durch SMOKE-Messungen quantifizieren. Die Änderungen der Oberflächenstruktur und Schichtzusammensetzung können mittels LEED, AES und LEIS verfolgt werden.

Bei 500 eV Ionenenergie ist die maximale Remanenz und die zum Erreichen des Maximums nötige Ionendosis praktisch unabhängig von der Ionenmasse. Mit zunehmender Energie sinkt die durch Beschuss mit Neon- oder Argon-Ionen maximal erreichbare Remanenz, während sie bei Krypton- und Xenon-Ionen annähernd konstant bleibt. Die ideale Dosis zur Transformation der Schicht ist bei Neon- und Argon-Ionen minimal um etwa 1 keV. Bei Krypton und Xenon ist die Idealdosis oberhalb von 1 keV kaum von der Ionenenergie abhängig. Beschuss durch Helium-Ionen hat auch bei extremen Ionendosen zu keiner wesentlichen Änderung der magnetischen Eigenschaften von 8 ML Fe auf Cu(100) geführt.

Eisenschichten unter einer zusätzlich aufgedampften Goldschicht können ebenfalls ferromagnetisch umgewandelt werden. Die bei Beschuss mit 700-eV-Neon-Ionen durch eine 2,3 nm dicke Goldschicht erreichte maximale Remanenz von 8 ML Fe auf Cu(100) war praktisch gleich groß wie beim entsprechenden Versuch ohne Goldschicht. Allein die benötigte Ionendosis lag aufgrund der zusätzlichen Absorption deutlich höher.

Eine Goldschicht von 2 nm Dicke reicht aus, die Zerstörung der ferromagnetischen Eisenschicht durch Oxidation bei Umgebungsdruck zu verhindern. Die Probe kann dadurch für weitere Untersuchungen ausgeschleust und transferiert werden. Magnetische Oberflächenmessungen werden durch die Goldschicht nicht behindert.

Unterhalb von etwa 260 K zeigen sich bei sechs und neun Monolagen dicke Eisenschichten auf Cu(100) im LEED-Bild und bei magnetischen Messungen die Auswirkungen der *magnetic live layer*, einer Oberflächenrekonstruktion mit ferromagnetischen Eigenschaften, deren Ordnungsrichtung normal zur Schicht (*out-of-plane*) liegt. Neun Monolagen dicke Schichten werden durch weiteres Abkühlen schließlich ferromagnetisch *in-plane*. Beim Wiedererwärmen bleibt der *in-plane*-Ferromagnetismus der 9-ML-Schichten erhalten. Wird die Schicht danach wieder abgekühlt, tritt die *ma-*

gnetic live layer nicht mehr auf. Die fcc-Struktur von 6-ML-Schichten bleibt auch beim Abkühlen unter 150 K erhalten. Der Übergang zur *magnetic live layer* verläuft bei dieser Schichtdicke reversibel.

Der Beschuss von acht Monolagen Eisen auf Kupfer mit Edelgasionen unterschiedlicher Energie wurde mit SRIM simuliert. Ein Vergleich der Ergebnisse dieser Simulationen mit den experimentellen Daten lässt vermuten, dass für Entstehung und Wachstum der ferromagnetischen bcc-Kristalle in der Eisenschicht das lokale Aufschmelzen und Wiedererstarren (*Thermal Spike*) beim Einschlag der Ionen hauptverantwortlich ist. Das Aufschmelzen des Festkörpers führt auch zur Durchmischung zwischen Eisen und Kupfer. Da bereits eine geringe Konzentration von Kupferatomen innerhalb der Eisenschicht die Nukleation und das weitere Wachstum der bcc-Kristalle behindert, entsteht ein Großteil der Kristalle sehr früh. Durch die weitere Durchmischung und den Abtrag der Schicht durch Ionenzerstäubung nimmt das Gesamtvolumen an bcc-Eisen nach dem Überschreiten der idealen Ionendosis wieder ab. Da die Entstehungs- und Wachstumsraten der bcc-Kristalle, sowie die Zerstäubungs- und Durchmischungsraten der Schicht von den Eigenschaften der verwendeten Ionen abhängen, steigt und sinkt das magnetische Moment der Eisenschicht jeweils unterschiedlich mit der Ionendosis.

Danksagung

Ich danke meinen Eltern für ihre Unterstützung und ihr unerschütterliches Vertrauen, dass aus mir früher oder später schon etwas werden wird.

Meinen beiden Professoren Peter Varga und Michael Schmid danke ich für die kollegiale Aufnahme in ihr Forschungsteam, zahlreiche interessante Diskussionen und unzählige Tassen Kaffee. Auch den anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Oberflächenphysik danke ich für die freundliche Arbeitsatmosphäre und für alle Ratschläge und Hilfestellungen. Besonders die Zusammenarbeit mit Werner Rupp, mit dem ich die meiste Zeit verbracht habe, wird mir durch seine fröhliche Art und seinen Hang zum früh Aufstehen (sehr praktisch für mich!) in angenehmer Erinnerung bleiben.

Danke Heidi, für alles.

Anhang A.

Liste aller Präparationen

Datum	Präparation	$\frac{APPH_{Fe}}{APPH_{Cu}}$	SMOKE	Ionen	Besonderheiten
16. 3. 06	8 ML Fe	473 %	long./pol.	1 keV Ar	Testlauf nach Umbau (PEM, Abschirmung)
17. 3. 06	3 ML Fe		long./pol.		Testlauf
20. 3. 06	8 ML Fe	354 %	long.	1,5 keV Ar	LEED
21. 3. 06	8 ML Fe	752 %	long.	1,5 keV Ar	LEED
22. 3. 06	8 ML Fe	616 %	long./pol.	1,5 keV Ar	abgekühlt auf 130 K
23. 3. 06	8 ML Fe	579 %	long.	2 keV Ar	LEED
24. 3. 06	8 ML Fe	560 %	long./pol.	3 keV Ar	abgekühlt auf 230 K
27. 3. 06	6 ML Fe	279 %	long./pol.	1 keV, 2 keV Ar	abgekühlt auf 130 K
28. 3. 06	6 ML Fe	259 %	long.	500 eV Ar	abgekühlt auf 220 K
29. 3. 06	7 ML Fe	482 %	long.	500 eV Ar	abgekühlt auf 125 K
30. 3. 06	7,5 ML Fe	582 %	long.	1 keV Ar	LEED bei 245 K u. RT
31. 3. 06	8 ML Fe	486 %	long.		abgekühlt auf 125 K, LEED bei 230 K u. RT
3. 4. 06	9 ML Fe	484 %	long./pol.	1 keV Ar	abgekühlt auf 130 K, Fehler beim Sputtern
4. 4. 06	9 ML Fe	811 %	long.	1 keV Ar	LEED
5. 4. 06	9 ML Fe	771 %	long./pol.	1 keV Ar	abgekühlt auf 130 K
12. 4. 06	8 ML Fe	422 %	long.	1 keV Kr	
13. 4. 06	3 ML Au				Test Goldverdampfer
19. 4. 06	8 ML Fe	471 %	long.	1 keV Kr	LEED

Fortsetzung nächste Seite

Datum	Präparation	$\frac{\text{APPH}_{\text{Fe}}}{\text{APPH}_{\text{Cu}}}$	SMOKE	Ionen	Besonderheiten
20. 4. 06	8 ML Fe	538 %	long.	1 keV Kr	
21. 4. 06	8 ML Fe	535 %	long.	1 keV Kr	
24. 4. 06	8 ML Fe	511 %	long.	1 keV Kr	
25. 4. 06	vom Vortag		long.	1 keV Kr	LEED
26. 4. 06	8 ML Fe	426 %	long.	1,5 keV Kr	
27. 4. 06	8 ML Fe	512 %	long.	500 eV Kr	LEED
28. 4. 06	8 ML Fe	435 %	long.	1 keV Kr	
3. 5. 06	8 ML Fe	426 %	long.	1 keV Kr	
4. 5. 06	8 ML Fe	498 %	long.	700 eV Kr	
8. 5. 06	8 ML Fe	510 %	long.	1 keV Kr	LEED
9. 5. 06	8 ML Fe	763 %	long.	1 keV Kr	LEED
10. 5. 06	8 ML Fe	669 %		1 keV Kr	LEED
17. 5. 06	8 ML Fe	505 %	long.	1 keV Kr	Ionenquelle umgebaut (Wien-Filter), LEED
18. 5. 06	8 ML Fe	565 %		1 keV Kr	LEED
19. 5. 06	8 ML Fe	439 %	long.	1 keV Kr	LEED
22. 5. 06	8 ML Fe	814 %	long.	1,5 keV Kr	LEED
23. 5. 06	8 ML Fe	566 %	long.	1,5 keV Kr	
24. 5. 06	14 ML Fe		long.	1,5 keV Kr	LEED
1. 6. 06	8 ML Fe	546 %	long.	500 eV Kr	
2. 6. 06	8 ML Fe	429 %	long.	700 eV Kr	
6. 6. 06	8 ML Fe	488 %	long.	2 keV Kr	
7. 6. 06	8 ML Fe	566 %	long./pol.	3 keV Kr	
8. 6. 06	8 ML Fe	585 %	long./pol.	2 keV Kr	
9. 6. 06	8 ML Fe	645 %	pol.	2 keV Kr	
12. 6. 06	3,5 ML Fe	89 %	pol.	500 eV Kr	LEED
13. 6. 06	vom Vortag		long./pol.	500 eV Kr	LEED
14. 6. 06	8 ML Fe	566 %	long./pol.	3 keV Kr	
19. 6. 06	8 ML Fe	587 %	long./pol.	2,5 keV Kr	
20. 6. 06	8 ML Fe	498 %	long.	300 eV Kr	
21. 6. 06	8 ML Fe	586 %	long.	500 eV Kr	
22. 6. 06	8 ML Fe	515 %	long.	4 keV Kr	
	8 ML Fe	517 %	long.	5 keV Kr	
23. 6. 06	8 ML Fe	559 %	long.	2 keV Kr	

Fortsetzung nächste Seite

Datum	Präparation	$\frac{\text{APPH}_{\text{Fe}}}{\text{APPH}_{\text{Cu}}}$	SMOKE	Ionen	Besonderheiten
27. 6. 06	8 ML Fe		long.	1 keV Ar	Verdampfer defekt
4. 7. 06	5 ML Fe	205 %			LEIS (1 keV Ne)
5. 7. 06	8 ML Fe	632 %	long.	1 keV Ne	LEIS, LEED
6. 7. 06	8 ML Fe	626 %	long.	1 keV Ne	LEIS
7. 7. 06	vom Vortag		long.	1 keV Ne	LEIS
10. 7. 06	8 ML Fe	664 %	long.	2 keV Ne	LEIS
11. 7. 06	vom Vortag		long.	2 keV Ne	LEIS
12. 7. 06	8 ML Fe	481 %	long.	700 eV Ne	LEIS
13. 7. 06	vom Vortag		long.	700 eV Ne	LEIS
17. 7. 06	8 ML Fe	689 %	long.	500 eV Ne	LEIS
18. 7. 06	8 ML Fe	609 %	long.	500 eV Ne	LEIS
19. 7. 06	8 ML Fe	660 %	long.	1,5 keV Ne	LEIS
21. 7. 06	8 ML Fe	619 %	long.	1,5 keV Ne	LEIS
24. 7. 06	8 ML Fe	555 %	long.	1 keV Ne	LEIS
25. 7. 06	8 ML Fe	662 %	long.	3 keV Ne	LEIS
26. 7. 06	8 ML Fe	660 %	long.	1 keV Ne	LEIS
27. 7. 06	8 ML Fe	550 %	long.	1,3 keV Ne	LEIS
28. 7. 06	8 ML Fe	544 %	long.	1,2 keV Ne	LEIS
31. 7. 06	8 ML Fe	1085 %	long.	1 keV Ar	LEIS
1. 8. 06	8 ML Fe	817 %	long.	1 keV Ar	
2. 8. 06	8 ML Fe	503 %	long.	1,5 keV Ar	
3. 8. 06	8 ML Fe	636 %	long.	2 keV Ar	
4. 8. 06	8 ML Fe	535 %	long.	3 keV Ar	
7. 8. 06	8 ML Fe	577 %	long.	500 eV Ar	
8. 8. 06	8 ML Fe	908 %	long.	1 keV Ar	
9. 8. 06	8 ML Fe	616 %	long.	1 keV Ar	
10. 8. 06	8 ML Fe	547 %	long.	700 eV Ar	
11. 8. 06	8 ML Fe	620 %	long.	1,2 keV Ar	
16. 8. 06	20 ML Fe		long.		+ 3 × 20 Å Au
17. 8. 06	vom Vortag		long.	500 eV He	LEIS
18. 8. 06	8 ML Fe	549 %	long.	500 eV He	LEIS
21. 8. 06	8 ML Fe	614 %	long.	1,5 keV He	LEIS
22. 8. 06	8 ML Fe	580 %	long.	3 keV He	
23. 8. 06	8 ML Fe	565 %	long.	1,2 keV Ar	LEIS (1,5 keV He)

Fortsetzung nächste Seite

Datum	Präparation	$\frac{\text{APPH}_{\text{Fe}}}{\text{APPH}_{\text{Cu}}}$	SMOKE	Ionen	Besonderheiten
24. 8. 06	8 ML Fe	648 %	long.		+ 2 × 18,5 Å Au, LEIS (1,5 keV He)
25. 8. 06	8 ML Fe	534 %			+ 11,6 + 18,5 Å Au, LEIS (1,5 keV He), LEED
28. 8. 06	vom 25. 8.		long.	700 eV Ne	LEIS
29. 8. 06	8 ML Fe	540 %	long.	700 eV Ne	+ 2 × 18,5 Å Au
30. 8. 06	8 ML Fe	546 %	long.	700 eV Ne	+ 23 Å Au, LEED
31. 8. 06	vom Vortag		long.	700 eV Ne	LEIS (1,5 keV He)
1. 9. 06	8 ML Fe	620 %	long.	1 keV Ne	+ 2 × 10 Å + 5 × 4 Å + 20 Å Au
5. 9. 06	> 30 ML Fe	∞	long./pol.		LEED
9. 10. 06	8 ML Fe	690 %	long.	1 keV Xe	
10. 10. 06	vom Vortag		long.	1 keV Xe	
11. 10. 06	8 ML Fe	536 %	long./pol.	3 keV Xe	LEED
12. 10. 06	8 ML Fe	593 %	long.	500 eV Xe	Xe verunreinigt!
13. 10. 06	8 ML Fe	555 %	long.	500 eV Kr	
16. 10. 06	8 ML Fe	569 %	long.	2 keV Kr	
17. 10. 06	8 ML Fe	578 %	long.	2 keV Kr	
18. 10. 06	8 ML Fe	570 %	long.	2 keV Kr	
19. 10. 06	3 ML Fe	72 %	long./pol.	1 keV Ar	gesputtert (0,25 L), + 12 Å Fe, LEED
20. 10. 06	3 ML Fe	71 %	long.	1 keV Ar	gesputtert (0,25 L), + 10 Å Fe
30. 10. 06	3 ML Fe	71 %	long.	1 keV Ar	gesputtert (0,25 L), + 12 Å Fe
31. 10. 06	vom Vortag		long.		+ 4 + 3 Å Fe, geheizt auf 300°C
7. 11. 06	8 ML Fe	527 %	long.	1 keV Xe	
8. 11. 06	8 ML Fe	527 %	long.	2 keV Xe	
	8 ML Fe	541 %	long.	700 eV Xe	
9. 11. 06	8 ML Fe	560 %	long.	500 eV Xe	

Anhang B.

Zerstäubungsfaktoren (*sputter yields*)

Zerstäubungsfaktoren von Edelgas-Ionen auf Eisen und Gold (nur relevante Werte angegeben), berechnet nach Matsunami *et al.* (1983) [33]

	Energie (eV)	Fe	Au
He:	500	0,12	
	1500	0,16	0,18
	3000	0,15	
Ne:	500	0,79	
	700	0,95	1,13
	1000	1,13	1,37
	1500	1,32	
	2000	1,45	
	3000	1,62	
Ar:	500	1,12	
	700	1,39	
	1000	1,70	2,43
	1500	2,08	2,98
	2000	2,36	
	3000	2,75	
Kr:	500	1,20	
	700	1,59	
	1000	2,05	
	1500	2,65	
	2000	3,12	
	3000	3,82	
Xe:	500	1,03	
	700	1,43	
	1000	1,93	
	2000	3,14	
	3000	3,98	

Abbildungsverzeichnis

1.1. Phasendiagramm von Eisen	2
1.2. Ferromagnetische Phasen I–III von Fe auf Cu(100)	3
1.3. (1×6)-Nanomartensit-Struktur von Fe auf Cu(100)	4
1.4. (2×2) _{p4g} -Oberflächenrekonstruktion von 7 ML Fe auf Cu(100)	5
1.5. bcc-Nanokristalle in 6 ML Fe auf Cu(100), STM	6
1.6. bcc-Nanokristalle in 6 ML Fe auf Cu(100), STM	6
1.7. Struktur und Gitterverzerrung der bcc-Nanokristalle	7
1.8. Potentielle Energien der bcc-, Nanomartensit- und fcc-Eisenstruktur	8
2.1. polarer, longitudinaler und transversaler Kerr-Effekt	10
2.2. Kerr-Rotation ϕ und -Elliptizität ε	11
2.3. Stoßkaskade	16
2.4. Entstehung von Adatominseln durch lokales Aufschmelzen	17
2.5. Durchmischung	17
2.6. Augerprozess, KLL-Übergang	20
2.7. Energie der wichtigsten Auger-Linien	21
2.8. LEED, Funktionsweise	22
2.9. LEIS, Relative Energie des gestreuten Ions	25
2.10. SMOKE-System, schematisch	27
2.11. SMOKE-System, CAD-Modell	28
2.12. <i>LabView</i> -Auswertungsmodul, Screenshot	29
2.13. Experimenteller Aufbau, Foto	31
3.1. Remanenz nach Beschuss mit Ne-Ionen (500 eV bis 3 keV)	43
3.2. Koerzitivfeld nach Beschuss mit Ne-Ionen (500 eV bis 3 keV)	44
3.3. Remanenz nach Beschuss mit Ar-Ionen (500 eV bis 3 keV)	45
3.4. SMOKE-Kurven (longitudinal), 500 eV Argon	45
3.5. Koerzitivfeld nach Beschuss mit Ar-Ionen (500 eV bis 3 keV)	46
3.6. Remanenz nach Beschuss mit Kr-Ionen (300 eV bis 5 keV)	48
3.7. Koerzitivfeld nach Beschuss mit Kr-Ionen (300 eV bis 3 keV)	49
3.8. Remanenz nach Beschuss mit Xe-Ionen (500 eV bis 3 keV)	51
3.9. Koerzitivfeld nach Beschuss mit Xe-Ionen (500 eV bis 3 keV)	52
3.10. Ionenbeschuss von 8 ML Fe auf Cu(100), LEED	53
3.11. bcc(110)-Reflexe von 8 und 14 ML Fe auf Cu(100), LEED	54
3.12. LEIS vor und nach Ionenbeschuss, 1 keV Neon	55
3.13. LEIS vor und nach Ionenbeschuss, 2 keV Neon	56

3.14. 1-keV-Argon-Ionen auf 3 ML + 10–12 Å Fe auf Cu(100), Remanenz	57
3.15. 1-keV-Argon-Ionen auf 3 ML + 10–12 Å Fe auf Cu(100), Koerzitivfeld	58
3.16. 6 ML Fe auf Cu(100), Hysteresekurven in Abhängigkeit von T	60
3.17. 6 ML Fe auf Cu(100), Remanenz und Koerzitivfeld in Abh. von T	60
3.18. 9 ML Fe auf Cu(100) bei RT, 280 K und 190 K, LEED	61
3.19. 9 ML Fe auf Cu(100), SMOKE-Kurven (polar) in Abh. von T	62
3.20. 9 ML Fe auf Cu(100), SMOKE-Kurven (longitudinal) in Abh. von T	63
3.21. SMOKE-Messungen durch 0–6 nm dicke Goldschichten, Remanenz	64
3.22. SMOKE-Messungen durch 0–6 nm dicke Goldschichten, Koerzitivfeld	65
3.23. 23 Å Au auf 8 ML Fe auf Cu(100), LEED	66
3.24. Remanenz nach Beschuss mit 700-eV-Ne-Ionen durch 23 Å Au	66
4.1. SRIM Eingabefenster, Screenshot	69
4.2. SRIM Simulation, Screenshot	69
4.3. He-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße	72
4.4. Ne-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße	72
4.5. Ar-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße	73
4.6. Kr-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße	73
4.7. Xe-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße	74
4.8. 1-keV-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße	74
4.9. He-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation	76
4.10. Ne-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation	76
4.11. Ar-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation	77
4.12. Kr-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation	77
4.13. Xe-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation	78
4.14. 1-keV-Ionen auf 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation	78
4.15. mittlere Eindringtiefe von Ionen in 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM)	79
5.1. max. <i>in-plane</i> -Remanenz nach Ionenbeschuss, 8 ML Fe auf Cu(100)	80
5.2. Ionendosis für max. <i>in-plane</i> -Remanenz, 8 ML Fe auf Cu(100)	81
5.3. Zerstäubungsfaktoren von Edelgasionen auf Eisen	82
5.4. 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße am Interface	83
5.5. 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Ionenimplantation am Interface	85
5.6. 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße am Interface	86
5.7. 1,6 nm Fe auf Cu (SRIM), Energieübertrag durch Stöße in Fe-Schicht	88
5.8. <i>thermal-spike</i> -Volumen in der Eisenschicht	88

Tabellenverzeichnis

2.1.	mittlere freie Weglängen für Elektronen in Eisen und Kupfer	36
2.2.	APPH-Verhältnis von Eisen- zu Kupfer-peak	38
3.1.	Ionenstrom und Oberflächendosis, He-Ionen	41
3.2.	Ionenstrom und Oberflächendosis, Ne-Ionen	44
3.3.	Ionenstrom und Oberflächendosis, Ar-Ionen	47
3.4.	Ionenstrom und Oberflächendosis, Kr-Ionen	50
3.5.	Ionenstrom und Oberflächendosis, Xe-Ionen	50
A.	Liste aller Präparationen	94
B.	Zerstäubungsfaktoren (<i>sputter yields</i>)	98

Literaturverzeichnis

- [1] DOWNS, ROBERT T. und JIBA GANGULY: *Mineralogy of the Earth's Core*. online lecture notes, University of Arizona, Department of Geosciences, 2006. <http://www.geo.arizona.edu/xtal/geos306/geos306.html>.
- [2] KEUNE, W., R. HALBAUER, U. GONSER, J. LAUER und D. L. WILLIAMSON: *Antiferromagnetism of fcc Fe thin films*. J. Appl. Phys., 48:2976–2979, 1977.
- [3] TSCHELIESSNIG, RUPERT: *BCC-Strukturen in dünnen Fe-Schichten auf Cu(100) und Cu(111)*. Dissertation, Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, 2003.
- [4] BIEDERMANN, ALBERT, RUPERT TSCHELIESSNIG, MICHAEL SCHMID und PETER VARGA: *Local atomic structure of ultra-thin Fe films grown on Cu(100)*. Appl. Phys. A, 78:807–816, 2004.
- [5] THOMASSEN, J., F. MAY, B. FELDMANN, M. WUTTIG und H. IBACH: *Magnetic Live Surface Layers in Fe/Cu(100)*. Phys. Rev. Lett., 69:3831–3834, 1992.
- [6] LIU, C., E. R. MOOG und S. D. BADER: *Polar Kerr-Effect Observation of Perpendicular Surface Anisotropy for Ultrathin fcc Fe Grown on Cu(100)*. Phys. Rev. Lett., 60:2422–2425, 1988.
- [7] DONGQI LI, M FREITAG, Z. Q. QIU und S. D. BADER: *Magnetic Phases of Ultrathin Fe Grown on Cu(100) as Epitaxial Wedges*. Phys. Rev. Lett., 72:3112–3115, 1994.
- [8] STRAUB, M., R. VOLLMER und J. KIRSCHNER: *Surface Magnetism of Ultrathin γ -Fe Films Investigated by Nonlinear Magneto-optical Kerr Effect*. Phys. Rev. Lett., 77:743–746, 1996.
- [9] QIAN, D., X. JIN, J. BARTHEL, M. KLAUA und J. KIRSCHNER: *Temperature-induced structure instability and magnetism of Fe/Cu(100)*. Phys. Rev. B, 66:172406, 2002.
- [10] BIEDERMANN, ALBERT, RUPERT TSCHELIESSNIG, MICHAEL SCHMID und PETER VARGA: *Crystallographic Structure of Ultrathin Fe Films on Cu(100)*. Phys. Rev. Lett., 87:086103, 2001.
- [11] BIEDERMANN, ALBERT, RUPERT TSCHELIESSNIG, CHRISTOPH KLEIN, MICHAEL SCHMID und PETER VARGA: *Reconstruction of the clean and H covered magnetic live surface layer of Fe films grown on Cu(100)*. Surf. Sci., 563:110–126, 2004.

- [12] BIEDERMANN, ALBERT, RUPERT TSCHELIESSNIG, MICHAEL SCHMID und PETER VARGA: *Nucleation of bcc Iron in Ultrathin fcc films*. Phys. Rev. Lett., 86:464–467, 2001.
- [13] RUPP, WERNER: *Ionenstrahl-induzierte Magnetisierung ultradünner Fe-Schichten auf Cu(100)*. Dissertation, Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, 2008.
- [14] HEINZ, K., S. MÜLLER und P. BAYER: *Iron multilayers on Cu(100) — a case of complex reconstruction investigated by quantitative LEED*. Surf. Sci., 352:942–950, 1996.
- [15] VOLLMER, R. und J. KIRSCHNER: *Influence of H₂ adsorption on magnetic properties of Fe films on Cu(100)*. Phys. Rev. B, 61:4146–4154, 2000.
- [16] BERNHARD, T., M. BARON, M. GRUYTERS und H. WINTER: *Surface Structure of Ultrathin Fe films on Cu(001) Revisited*. Phys. Rev. Lett., 95:087601, 2005.
- [17] WUTTIG, MATTHIAS und XIANGDONG LIU: *Ultrathin Metal Films*. Springer, 2004.
- [18] MORONI, E. G., G. KRESSE und J. HAFNER: *Coherent epitaxy and magnetism of face-centered-cubic Fe films on Cu(100)*. J. Phys.: Condens. Matter, 11:L35–L42, 1999.
- [19] CAMLEY, R. E. und DONGQI LI: *Theoretical Calculation of Magnetic Properties of Ultrathin Fe Films on Cu(100)*. Phys. Rev. Lett., 84:4709–4712, 2000.
- [20] KERR, JOHN: *On Rotation of the Plane of Polarization by Reflection from the Pole of a Magnet*. Phil. Mag., 3:321–343, 1877.
- [21] BADER, S. D.: *SMOKE*. J. Magn. Magn. Mater., 100:440–454, 1991.
- [22] QIU, Z. Q. und S. D. BADER: *Surface magneto-optic Kerr effect (SMOKE)*. J. Magn. Magn. Mater., 200:664–678, 1999.
- [23] WEBER, K.: *Polarisation und Doppelbrechung des Lichts*. In: *Bergmann-Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik*, Band 3. Walter de Gruyter, 1987.
- [24] HETZEL, MARTIN: *Theoretische und experimentelle Aspekte des magneto-optischen Kerr-Effekts*. Projektarbeit, Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, 2005.
- [25] ARGYRES, PETROS N.: *Theory of the Faraday and Kerr Effects in Ferromagnetics*. Phys. Rev., 97(2):334–345, 1955.
- [26] MANSURIPUR, MASUD: *The Physical Principles of Magneto-optical Recording*. Cambridge University Press, 1995.

- [27] LINDHARD, J., M. SCHARFF und H. E. SCHIØTT: *Range Concepts and Heavy Ion Ranges*. K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., 33(14), 1963.
- [28] SCHILLING, WERNER und HANS ULLMAIER: *Physics of Radiation Damage in Metals*. In: *Materials Science and Technology*, Band 10. Verlag Chemie, 1993.
- [29] WILLIAMS, J. S.: *Materials modification with ion beams*. Rep. Prog. Phys., 49:491–587, 1986.
- [30] BUSSE, CARSTEN, HENRI HANSEN, UDO LINKE und THOMAS MICHELY: *Atomic Layer Growth on Al(111) by Ion Bombardment*. Phys. Rev. Lett., 85:326–329, 2000.
- [31] DIAZ DE LA RUBIA, T., R. S. AVERBACK, R. BENEDEK und W. E. KING: *Role of Thermal Spikes in Energetic Displacement Cascades*. Phys. Rev. Lett., 59:1930–1933, 1987.
- [32] ROOSEDAAL, H. E.: *Sputtering Yields of Single Crystalline Targets*. In: BEHRISCH, R. (Herausgeber): *Sputtering by Particle Bombardment I*. Springer, 1981.
- [33] MATSUNAMI, N., Y. YAMAMURA und Y. ITIKAWA: *Energy dependence of the yields of ion-induced sputtering of monatomic solids*. Institute of Plasma Physics, Nagoya University, 1983.
- [34] BOHDANSKY, J., J. ROTH und H. L. BAY: *An analytic formula and important parameters for low-energy ion sputtering*. J. Appl. Phys., 51:2861–2865, 1980.
- [35] NATIONAL PHYSICAL LABORATORY: *Sputtering Yields for Neon, Argon and Xenon Ions*, 2006. http://www.npl.co.uk/nanoanalysis/sputtering_yields.html.
- [36] GARCÍA-ROSALES, C., W. ECKSTEIN und J. ROTH: *Revised formulae for sputtering data*. J. Nucl. Mater., 218:8–17, 1994.
- [37] ECKSTEIN, W. und R. PREUSS: *New fit formulae for the sputtering yield*. J. Nucl. Mater., 320:209–213, 2003.
- [38] MAHAN, JOHN E. und ANDRÉ VANTOMME: *Trends in sputter yield data in the film deposition regime*. Phys. Rev. B, 61(12):8516–8525, 2000.
- [39] WERNER, WOLFGANG: *Tutorial on Quantitative Electron Spectroscopy*. <http://www.iap.tuwien.ac.at/~werner/qes-tut.html>.
- [40] DAVIS, LAWRENCE E., NOEL C. MACDONALD, PAUL W. PALMBERG, GERALD E. RIACH und ROLAND E. WEBER: *Handbook of Auger Electron Spectroscopy*. Physical Electronics Industries, 2. Auflage, 1976.

- [41] BRÜMMER, OTTO, JOHANNES HEYDENREICH, KARL HEINZ KREBS und HELMUT GÜNTHER SCHNEIDER (Herausgeber): *Handbuch Festkörperanalyse mit Elektronen, Ionen und Röntgenstrahlen*. Vieweg, 1980.
- [42] VARGA, PETER: *Grundlagen der Oberflächenphysik*. Vorlesungsskript, Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, 1999.
- [43] SCHMID, MICHAEL: *Experimentelle Methoden der Oberflächenphysik*. Vorlesungsskript, Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, 2006.
- [44] NIEHUS, HORST, WERNER HEILAND und EDMUND TAGLAUER: *Low-energy ion scattering at surfaces*. Surf. Sci. Rep., 17:213–303, 1993.
- [45] TILININ, I. S., J. ZEMEK und S. HUCEK: *Escape Probability of Signal Auger and Photoelectrons from Ultrathin Overlayers*. Surf. Interface Anal., 25:683–687, 1997.
- [46] JABLONSKI, A. und S. TOURGAARD: *Practical Correction Formula for Elastic Electron Scattering Effects in Attenuation of Auger Electrons and Photoelectrons*. Surf. Interface Anal., 26:17–29, 1998.
- [47] DWYER, V. M. und J. A. D. MATTHEW: *The effect of elastic scattering on the effective inelastic mean free path*. Vacuum, 33:767–769, 1983.
- [48] WERNER, WOLFGANG: *Electron transport in solids for quantitative surface analysis*. Surf. Interface Anal., 31:141–176, 2001.
- [49] WERNER, WOLFGANG: *Data for physical parameters for electron spectroscopy and related techniques*, 2006. <http://www.iap.tuwien.ac.at/~werner/data.html>.
- [50] TANUMA, S., T. SHIRATORI, T. KIMURA, K. GOTO, S. ICHIMURA und C. J. POWELL: *Experimental determination of electron inelastic mean free paths in 13 elemental solids in the 50 to 5000 eV energy range by elastic-peak electron spectroscopy*. Surf. Interface Anal., 37:833–845, 2005.
- [51] SCHMID, MICHAEL: *The Surface Structure, Deposition & Adsorption Calculator*, 2003. <http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/script/surfcryst.html>.
- [52] ZIEGLER, JAMES F.: *SRIM*. Version 2006.02, <http://www.srim.org>.
- [53] ZIEGLER, JAMES F., JOCHEN P. BIRSACK und UFFE LITTMARK: *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Pergamon Press, 1985.