

**Strukturelle und magnetische Untersuchungen von Ferromagnetschichten auf  
Verbindungshalbleitern**

Masterarbeit

im

Studiengang

„Master of Science“

im Fach Physik

an der Fakultät für Physik und Astronomie  
der Ruhr-Universität Bochum

von

Mustafa Samet Özkan

aus Istanbul (Türkei)

Bochum

Wintersemester 2010/2011

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation und Zielsetzung	1
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Epitaktisches Wachstum	3
2.2	Rastertunnelmikroskopie	6
2.2.1	Der quantenmechanische Tunneleffekt	7
2.2.2	Die eindimensionale rechteckige Potenzialbarriere	7
2.2.3	WKB-Näherung für die Transmissionswahrscheinlichkeit	12
2.2.4	Der dreidimensionale Tunneleffekt	14
2.3	LEED (Low Energy Electron Diffraction)	16
2.4	Der magnetooptische Kerr-Effekt	21
2.5	Das supraleitende Quanteninterferenzmagnetometer (SQUID)	24
<b>3</b>	<b>Experimentelle Techniken</b>	<b>25</b>
3.1	UHV-Bedingungen	25
3.2	Pumpsystem	27
3.3	Verdampfer	30
3.3.1	Fe-Verdampfer	30
3.3.2	Si-Verdampfer	31
3.4	Aufbau des STM	33
3.4.1	Messmodi des Rastertunnelmikroskops	35
3.5	Aufbau des LEED-Systems	37

3.6	Aufbau der UHV-MOKE-Kammer	39
3.7	Rutherford-Back-Scattering (RBS)	41
3.8	Schichtdickenbestimmung durch Klein-Winkel-Röntgen- Reflektometrie	47
3.9	Die Ionensputterquelle	48
3.10	Probenhalter	49
3.11	Probenhalter-Adapter für ZnSe	50
<b>4</b>	<b>Verwendete Materialien</b>	<b>52</b>
4.1	GaAs(001)-Substrat	52
4.1.1	Oberflächenrekonstruktionen und Oberflächengeometrie	54
4.1.1.1	Die GaAs (001) (2x4)-Rekonstruktion	56
4.1.1.2	Die GaAs(001)c(4x4)-Rekonstruktion	58
4.1.1.3	GaAs(001)(2x6) und GaAs(001)(4x2)/c(8x2)	60
4.1.1.4	(4x6)-Phasen	63
4.2	ZnSe(001)-Substrat	66
4.2.1	Die ZnSe(2x1)-Rekonstruktion	67
4.2.2	Die c(2x2)-Rekonstruktion der ZnSe-Oberfläche	68
4.3	Eisensilizid ( $\text{Fe}_3\text{Si}$ )	70
4.4	Eisen	72
<b>5</b>	<b>Ergebnisse und Auswertung</b>	<b>73</b>
5.1	$\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten auf GaAs(001)	73
5.1.1	Präparation reiner GaAs(001)-Oberfläche	73

5.1.2	Untersuchung der GaAs(001)-Substratoberfläche mittels LEED und STM	76
5.1.3	Deposition von Eisensilizid	78
5.1.4	STM-Untersuchungen der Eisensilizid-Schichten auf GaAs(001)	81
5.1.4.1	STM-Untersuchungen nach der Deposition und bei 250°C	81
5.1.4.2	STM-Untersuchungen nach dem Tempern bei 300°C	82
5.1.4.3	STM nach dem Tempern bei 400°C und 500°C	91
5.1.5	LEED-Untersuchung der Fe <sub>3</sub> Si-Schichten auf GaAs(001)	96
5.1.6	Magnetische Untersuchungen der Eisensilizid-Schicht auf GaAs(001)	97
5.1.7	Untersuchungen von Fe <sub>3</sub> Si/GaAs(001) bei einer Wachstumstemperatur von 250°C	98
5.2	Fe-Schichten auf ZnSe(001)-Oberfläche	100
5.2.1	Präparation des ZnSe(001)-Substrats	100
5.2.2	Strukturelle Untersuchungen an der reinen ZnSe(001)-Oberfläche	101
5.2.3	Deposition von Eisen auf der ZnSe(001)-Oberfläche	102
5.2.4	LEED-Analyse der Fe-Schichten auf ZnSe(001)	102
5.2.5	STM-Untersuchungen an Fe/ZnSe(001)	104
5.2.6	Weitere thermische Behandlung	105
5.2.7	Auflösung auf atomarer Skala	107
5.2.8	Magnetische Untersuchungen der Eisenschicht auf ZnSe	109

<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>111</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>114</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>122</b>

# 1 Einleitung

---

## 1.1 Motivation und Zielsetzung

Die Entwicklung und die Herstellung magnetoelektronischer Bauelemente sind ein zentrales Thema der heutigen Nanoelektronik. Dieses als Spintronik bezeichnete Forschungsgebiet nutzt neben der Ladung auch den Spin der Elektronen beziehungsweise Löcher zur Speicherung und Verarbeitung von Daten. Der Spin als zusätzlicher Freiheitsgrad des Elektrons verspricht die Realisierung neuartiger Bauelemente. Voraussetzung dafür ist die Injektion von spinpolarisierten Ladungsträgern, die so genannte Spininjektion, in Halbleiter. Ein möglicher Ansatz dafür ist die Kombination eines Halbleiters mit einem Ferromagneten zu einer Hybridstruktur. Die Suche nach geeigneten Materialkombinationen steht im Fokus der aktuellen Forschung.

Ferromagnetische Materialien mit hohen Curie-Temperaturen ermöglichen die Spininjektion bei Raumtemperatur und so den Betrieb bei adäquaten Temperaturen. Zudem müssen sie strukturell mit den III-V- und II-VI-Verbindungshalbleitern kompatibel sein, um ein epitaktisches Wachstum zu gewährleisten. Eisen (Fe) und seine Legierung  $\text{Fe}_3\text{Si}$  erfüllen diese Voraussetzungen und sind daher vielversprechende Kandidaten für die Konstruktion magnetischer Bauelemente [Klä97].

Im Rahmen dieser Arbeit wurden an zwei unterschiedlichen Ferromagnet/Halbleiter-Hybridssystemen gearbeitet:  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$  und  $\text{Fe}/\text{ZnSe}(001)$ . Die strukturellen und magnetischen Charakterisierungen standen dabei im Mittelpunkt.

Das System  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$  ist aufgrund der geringen Fehlanpassung zwischen den  $\text{Fe}_3\text{Si}$ - und  $\text{GaAs}$ -Gittern epitaktisch leicht herstellbar. Volumen- $\text{Fe}_3\text{Si}$  hat eine Curie-Temperatur von  $840^\circ\text{C}$  [Nak88]. Die optimale  $\text{GaAs}$ -Substrattemperatur für das Wachstum von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  durch MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) liegt bei circa  $200^\circ\text{C}$  [Her03]. Bei dieser Temperatur entstehen stabile ferromagnetische  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Phasen mit hoher Kristallordnung und Grenzflächenperfektion. Die Grenzflächenperfektion und die thermische Stabilität der  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}$ -Grenzfläche sind für die Spininjektion von großer Bedeutung [Her04].

Zur weiteren Aufgabenstellung dieser Arbeit gehört die Herstellung und Charakterisierung von reinen Fe-Schichten auf dem ZnSe(001)-Substrat. Es ist bekannt, dass Eisen aufgrund seiner Reaktivität mit dem GaAs-Halbleiter magnetisch inaktive Schichten an der Fe/GaAs-Grenzfläche bildet [Rei00]. Dies führt zur Reduzierung der Spinpolarisation aufgrund von Spin-Relaxationsmechanismen. Dieses Problem wird durch die Anwendung von ZnSe anstelle von GaAs-Substraten bewältigt.

Die Fe/ZnSe-Heterostruktur hat eine geringere Gitterfehlpassung von 1,1% bezüglich der doppelten Gitterkonstante von Eisen im Vergleich mit der Gitterkonstante von ZnSe. Noch wichtiger ist, dass die Fe-Reaktivität im Vergleich mit GaAs geringer ist. Daher lässt sich Eisen, das bei Raumtemperatur epitaktisch auf ZnSe aufwächst, ohne magnetisch inaktive Lagen bilden [Rei00]. Desweiteren besitzt Fe/ZnSe eine hohe thermische Stabilität. Diese Eigenschaften machen dieses System interessant für die Forschung von Ferromagnet/Halbleiter(FM/SC)-Hybridstrukturen.

In der vorliegenden Arbeit wurden folgende Fragen experimentell bearbeitet:

- Wie entwickelt sich die Struktur der abgeschiedenen Schichten in Abhängigkeit von Wachstumstemperatur und weiterer thermischer Behandlung?
- Was für einen Zusammenhang gibt es zwischen Morphologie und Magnetismus?

## 2 Theoretische Grundlagen

---

### 2.1 Epitaktisches Wachstum

Da im Allgemeinen die magnetischen Eigenschaften einer Schicht mit ihren strukturellen Eigenschaften korrelieren, ist es erstrebenswert, den Wachstumsprozess zu verstehen. Das Schichtwachstum wird durch eine Vielzahl von Parametern, wie Substrattemperatur, Aufdampfrate, Druck, Substratorientierung, Gitterfehlpassung zwischen Substrat und Adsorbat etc. beeinflusst.

Während des Wachstumsprozesses finden verschiedene zeitabhängige Vorgänge auf der Oberfläche statt. In der Abb. 2.1 sind die atomaren Prozesse, die für Nukleationen und Wachstum von Clustern relevant sind, zu sehen.

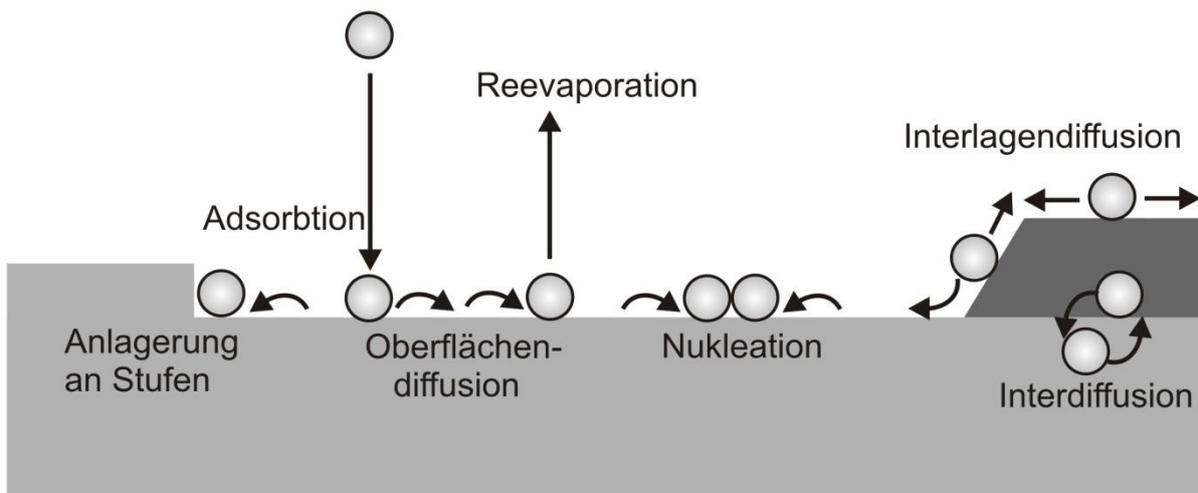


Abb. 2.1: Schematische Darstellung der Oberflächenprozesse

In dieser Arbeit wurden die Eisen- und Eisensilizid-Schichten mittels Molekularstrahlepitaxie (MBE) hergestellt. Von Epitaxie spricht man, wenn Kristallwachstum des aufgedampften Materials auf einem Substrat stattfindet, dessen kristalline Ordnung auf die aufgewachsene Schicht weitergegeben wird. Epitaxie unterteilt sich in Homo- und Heteroepitaxie. Bestehen das Substrat und das Adsorbat aus demselben Material, spricht man von Homoepitaxie, ansonsten von Heteroepitaxie. Aufgrund unterschiedlicher Gitterkonstanten bei der Heteroepitaxie bauen sich Verspannungen in der Adsorbatschicht auf, so dass experimentell

drei verschiedene Wachstumsmodi beobachtet werden: Frank van der Merwe-, Volmer-Weber- und Stranski-Krastanov-Wachstum.

Die Verspannung in der Adsorbatschicht kann durch den Misfitparameter  $\eta$  ausgedrückt werden:

$$\eta = \frac{a_A - a_S}{a_S} \quad (2.1)$$

Hierbei sind  $a_A$  und  $a_S$  die lateralen Gitterkonstanten von Adsorbat A und Substrat S.

Beim **Frank-van der Merwe-Wachstum** fängt eine neue Schicht an zu wachsen, wenn die vorherige geschlossen ist (Frank und van der Merwe, 1949) (s. Abb. 2.2A). Dieser „Schicht für Schicht-Wachstum“ genannte Modus ist [Fra49] auf die hohe Oberflächenenergie des Substrats zurückzuführen und ist sowohl bei Homoepitaxie als auch bei Heteroepitaxie zu beobachten. Im zweiten Fall wird jedoch vorausgesetzt, dass es nur einen minimalen Unterschied zwischen den Gitterkonstanten von Adsorbat und Substrat gibt. Sind die Gitterkonstanten bei Heteroepitaxie nur wenig unterschiedlich, passt sich die laterale Gitterkonstante des Adsorbats der lateralen Substratgitterkonstante an. Dieses Wachstum wird als pseudomorph bezeichnet. Dabei entstehen Verspannungen in der aufgewachsenen Schicht, die sich im weiteren Verlauf des Wachstums durch Versetzungen abbauen können. Mit zunehmender Schichtdicke verringert sich der Einfluss des Substrats, so dass ein Übergang zur Gitterstruktur des Adsorbats erfolgt. Diesen Prozess nennt man Relaxation.

Beim **Volmer-Weber-Modus** werden dagegen sofort dreidimensionale Inseln gebildet, ohne dass die Oberfläche des Substrats vollständig von dem deponierten Material bedeckt wird (Volmer und Weber, 1926) [Vol26] (s. Abb. 2.2B). Die Inseln werden bis zum Zusammenwachsen mit steigender Bedeckung größer. Solange die Inseln jedoch isoliert bleiben, befindet sich die unbedeckte Substrat-Oberfläche zwischen den Inseln.

Beim **Stranski-Krastanov-Wachstum** wird die Oberfläche zunächst von einer dünnen Schicht belegt, die Benetzungsschicht genannt wird [Str37]. Hierbei passt sich die Gitterkonstante



Oberflächenenergie des Adsorbats und die Grenzflächenenergie ist (d.h.  $\Delta s < 0$ ), ist die Bindung der Adsorbatatome untereinander schwächer als ihre Bindung an das Substrat. Da das vollständige Benetzen des Substrates energetisch bevorzugt wird, findet der Frank-van der Merwe-Modus statt.

Beim Volmer-Weber-Modus ( $\Delta s > 0$ ) ist die Bindung der Adsorbatatome untereinander größer als zur Oberfläche. Dies führt zur Ausbildung von Inseln, da die Benetzung energetisch ungünstiger ist.

Bei dem Stranski-Krastanov-Modus geht das anfängliche Schicht-für-Schicht-Wachstum ab einer bestimmten kritischen Schichtdicke in Inselwachstum über. Dies wurde von Bauer (1958) durch die Änderung der Grenzflächenenergie zwischen den einzelnen Schichten erklärt. Bei der Erhöhung der aufgewachsenen Schichtdicke wird die Oberflächenenergie durch Verspannungen so groß, dass der Wachstumsmodus zum Volmer-Weber-Wachstum wechselt.

### 2.2 Rastertunnelmikroskopie

Das Rastertunnelmikroskop (STM, *Scanning Tunneling Microscope*) wurde im Jahr 1982 von G. Binnig und H. Rohrer entwickelt. Die Rastertunnelmikroskopie ist eine direkt abbildende Untersuchungsmethode, mit der sich lokale Oberflächenstrukturen mit atomarer Auflösung beobachten lassen. Dazu wird eine sehr feine elektrisch leitende Spitze bis auf wenigstens  $3$  bis  $10 \text{ \AA}$  an die zu untersuchende leitfähige Probenoberfläche angenähert, ohne sie zu berühren. Dann kommt es zu einem Überlapp der Wellenfunktionen der Spitzen- und Probenelektronen. Die Spitzenelektronen haben daher eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Probe, die von Null verschieden ist. Gleiches gilt für die Probenelektronen. Durch quantenmechanisches Tunneln können also Elektronen von Spitze zu Probe und von Probe zu Spitze gelangen. Der resultierende Nettostrom ist dabei Null. Durch eine zwischen Spitze und Oberfläche angelegte Spannung (Biasspannung) fließt ein (Netto-)Strom im Bereich von wenigen Nanoampere, der auf dem quantenmechanischen Tunneleffekt basiert.

Diesen sogenannten Tunnelstrom dürfte es nach den Gesetzen der klassischen Physik gar nicht geben, weil sich zwischen Spitze und Probe kein stromleitendes Material befindet.

Der Tunnelstrom reagiert äußerst sensibel, wenn sich der Abstand zwischen der Spitze des Mikroskops und der Probe auch nur minimal ändert. Aus diesem Grund wird der Tunnelstrom fast ausschließlich vom Abstand des äußersten Spitzenatoms zum nächstgelegenen Atom oder Molekül auf der untersuchten Oberfläche bestimmt.

Da der quantenmechanische Tunneleffekt eine so entscheidende Rolle für die Messmethode spielt, werden die theoretischen Grundlagen des quantenmechanischen Tunneleffektes zunächst beschrieben.

### **2.2.1 Der quantenmechanische Tunneleffekt**

Das System aus Spitze und Probe muss eigentlich als quantenmechanisches dreidimensionales Vielteilchenproblem betrachtet werden. Hier wird jedoch zuerst von einer eindimensionalen Tunnelbarriere im Ein-Teilchen-Bild ausgegangen, das alle wichtigen Merkmale beschreibt. Anschließend werden die Berechnungen auf die tatsächlichen Verhältnisse einer Proben-Spitzen-Geometrie übertragen wie sie beim Rastertunnelmikroskop vorliegt. Bei dem zunächst betrachteten Modell handelt es sich um die rechteckige Potenzialbarriere.

### **2.2.2 Die eindimensionale rechteckige Potenzialbarriere**

Man betrachte einen Potenzialwall endlicher Höhe  $U_0$  und endlicher Breite  $a$  (Abb. 2.3). Sollte ein Teilchen der Masse  $m$  mit einer Energie  $E < U_0$  von links ( $a = -\infty$ ) gegen das Potenzial anlaufen, würde es nach der klassischen Betrachtung vollkommen reflektiert. Es ist jedoch bekannt, dass ein quantenmechanisches Teilchen bis zu einem gewissen Grad in klassisch verbotenes Gebiet eindringen kann. In dem Fall, dass an der rechten Seite des Walls der exponentielle Verlauf der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  noch nicht vollständig abgeklungen ist, kann das Teilchen den Wall durchdringen und in positiver Richtung weiterlaufen.

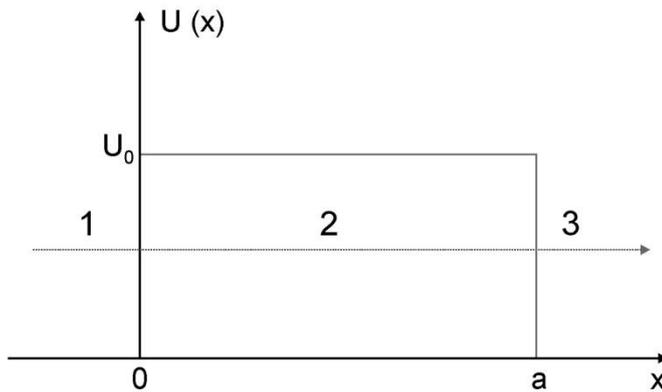


Abb. 2.3: Eindimensionale rechteckige Potenzialbarriere der Höhe  $U_0$  und Breite  $a$ .

Die de Broglie-Wellenlänge des Teilchens wird allerdings innerhalb und außerhalb des Potenzialwalls unterschiedlich sein. Wenn man von der Schrödinger-Gleichung

$$\left( -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.3)$$

ausgeht, erhält man außerhalb des Potenzialwalls (in den Bereichen 1 und 3 der Abbildung 2.3) die Schrödingergleichung,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (2.4)$$

und innerhalb des Walls,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2\psi = 0. \quad (2.5)$$

Dabei sind die Wellenzahlen  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  und  $\kappa = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$ . Die Lösungen in den einzelnen Gebieten lauten

$$\begin{aligned}
 \psi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \\
 \psi_2(x) &= B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \\
 \psi_3(x) &= C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}.
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

Sind die Teilchen am Anfang im ersten Gebiet und laufen in positiver x-Richtung, können sich in dem Gebiet 3 nur Teilchen befinden, die sich in positiver x-Richtung bewegen. Somit beträgt  $C_2$  null. Um den Zusammenhang der restlichen Konstanten  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  und  $C_1$  aus (2.6) zu erhalten, verwendet man die Stetigkeitsforderungen für die Wellenfunktion  $\psi$  und ihre Ableitung.

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}$$

$$\left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}$$

Es folgt daraus:

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2$$

$$B_1 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = C_1 e^{ika} \tag{2.7}$$

$$ik(A_1 - A_2) = ik(B_1 - B_2)$$

$$ik(B_1 e^{ika} - B_2 e^{-ika}) = ikC_1 e^{ika}$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit eines Teilchens durch einen Potenzialwall ergibt sich aus

$$T(E) = \left| \frac{J_{\text{auslaufende}}}{J_{\text{einfallende}}} \right| \quad (2.8)$$

$J$  ist hier die Wahrscheinlichkeitsflussdichte und die definiert man durch:

$$J = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (2.9)$$

Für einfallende und auslaufende Teilchen setzt man  $A_1 e^{ikx}$  bzw.  $C_1 e^{ikx}$  in (2.9) ein und erhält:

$$J_{\text{ein}} = \frac{\hbar}{m} k |A_1|^2$$

$$J_{\text{aus}} = \frac{\hbar}{m} k |C_1|^2$$

Daraus ergibt sich die Transmissionswahrscheinlichkeit nach (2.8):

$$T(E) = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} \quad (2.10)$$

Wenn man aus (2.7) die Konstante  $C_1$  als eine Funktion von  $A_1$  bestimmt und in (2.8) einsetzt, erhält man  $T(E)$ ;

$$T(E) = \frac{4k^2 \kappa^2}{(k^2 - \kappa^2) \sin^2(a\kappa) + 4k^2 \kappa^2} \quad (2.11)$$

Unter der Voraussetzung  $E < U_0$ ;

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) = -\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = -\alpha^2$$

$\alpha$ , ist hier eine positive Zahl und  $\kappa = \pm i\alpha$ . Setzt man dies in (2.11) ein, so erhält man

$$T(E) = \frac{4k^2(-\alpha^2)}{(k^2 + \alpha^2)\sin^2(ai\alpha) + 4k^2(-\alpha^2)}. \quad (2.12)$$

In der letzten Gleichung (2.12) wurde berücksichtigt, dass  $\sin(ix) = i \sinh(x)$  ist. Somit ergibt sich die Transmissionswahrscheinlichkeit im Fall  $E < U_0$  durch den Potenzialwall:

$$T(E) = \frac{4k^2\alpha^2}{(k^2 + \alpha^2)\sinh^2(a\alpha) + 4k^2\alpha^2} \quad (2.13)$$

Da  $T(E)$  in jedem Fall von Null verschieden ist, findet also eine klassisch nicht erlaubte Transmission statt. Dies nennt man Tunnel-Effekt.

Die Tunnelwahrscheinlichkeit  $T(E)$  wird besonders übersichtlich, wenn  $a\alpha \gg 1$  angenommen werden kann. Dann dominiert in (2.13) die hyperbolische Sinusfunktion in der Form

$$\sinh(a\alpha) = \frac{e^{a\alpha} - e^{-a\alpha}}{2} \approx \frac{1}{2}e^{a\alpha}$$

Hier wurde  $e^{-a\alpha}$  vernachlässigt und somit nimmt  $T(E)$  folgende einfache Gestalt an:

$$T(E) \approx \frac{4k^2\alpha^2}{(k^2 + \alpha^2)^2 \frac{1}{4} e^{2a\alpha} + 4k^2\alpha^2} = \frac{1}{\left(\frac{k^2 + \alpha^2}{2k\alpha}\right)^2 \frac{1}{4} e^{2a\alpha} + 1} \approx \frac{16k^2\alpha^2}{(k^2 + \alpha^2)^2} e^{-2a\alpha}$$

Es ist leicht zu zeigen, dass sich der Multiplikator vor dem exponentiellen Term mit der Energie E nur leicht ändert. Somit ist die Transmissionswahrscheinlichkeit in dem Fall  $a\alpha \gg 1$ :

$$|T(E)| = T_0 \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right) \quad (2.14)$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt also exponentiell mit der Breite a des Potenzialwalls und der Wurzel aus der effektiven Potenzialbarriere  $U_0 - E$  ab.

### 2.2.3 WKB-Näherung für die Transmissionswahrscheinlichkeit

Im realen Fall ist die Form der Potenzialbarriere nicht exakt rechteckig. Unterschiedliche Austrittsarbeiten der Elektroden verursachen eine Trapezform der Potenzialbarriere. Die Rechteckform des Potentials wird auch durch das elektrische Feld der Biasspannung zusätzlich verzerrt. Damit die tatsächliche Form der Potenzialbarriere genauer theoretisch beschrieben werden kann, wird die Schrödinger-Gleichung für einen kontinuierlichen Potenzialverlauf näherungsweise gelöst, indem man die WKB-Näherung (benannt nach **W**entzel, **K**ramers und **B**rillouin) verwendet, die das Potenzial in Rechtecke zerlegt.

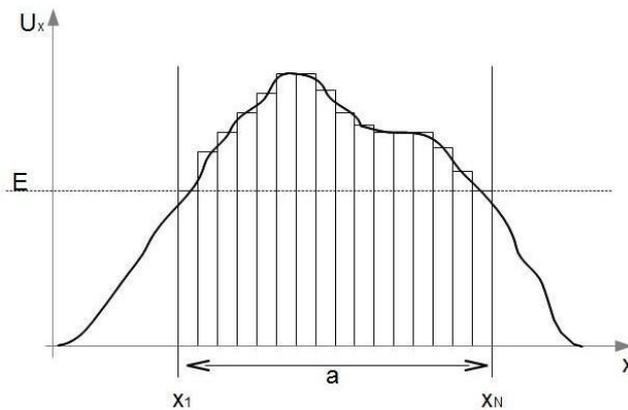


Abb. 2.4: Kastenpotenziale als Näherung eines kontinuierlichen Potenzials.

Eine kontinuierliche Potenzialbarriere kann als eine Reihe von  $N$  Kastenpotenzialen betrachtet werden, die eine Breite von  $\Delta x_i$  haben. Deswegen muss die Breite des Kastenpotenzials  $a$  durch  $\Delta x_i$  sowie die Potenzialhöhe  $U_0$  durch  $U(\Delta x_i)$  ersetzt werden. Die gesamte Tunnelwahrscheinlichkeit als Produkt der einzelnen Tunnelwahrscheinlichkeiten von jedem dieser Kastenpotenziale lautet

$$T(E) \approx \prod_{i=1}^N \exp\left(-\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i) - E)}\right)$$

$$= \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sum_{i=1}^N \Delta x_i \sqrt{2m(U(x_i) - E)}\right).$$

Wenn der Übergang zu unendlich kleinen Intervallen  $\Delta x_i \rightarrow 0$  (bzw.  $N \rightarrow \infty$ ) vollgezogen wird, so kann die Summe durch ein Integral ersetzt werden:

$$T(E) \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_1+a} dx \sqrt{2m(U(x) - E)}\right) \quad (2.15)$$

Wie bei der rechteckigen Potenzialbarriere findet man hier auch einen exponentiellen Zusammenhang zwischen der Transmissionswahrscheinlichkeit und der Breite der Barriere  $a$ .

Außerdem nimmt die Tunnelwahrscheinlichkeit aus zwei Gründen zu; zum einen, weil die effektive Tunnelbarriere kleiner wird, zum anderen, weil der Integrationsbereich eingeschränkt wird. Dagegen sinkt der Transmissionskoeffizient mit zunehmender Teilchenmasse  $m$ .

### 2.2.4 Der dreidimensionale Tunneleffekt

Die Grundannahme der dreidimensionalen Betrachtung ist, dass die Spitze eine kugelförmige Form hat. In diesem Fall wird die Wechselwirkung der Spitze mit der Probenoberfläche im Abstand  $d$  mit Störungsrechnung erster Ordnung beschrieben. Der Tunnelstrom hat nach einem Formalismus von Bardeen dann die Form:

$$I_T = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu\nu} f(E_\mu) (1 - f(E_\mu + eU_B)) |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu) \quad (2.16)$$

Dabei bezeichnen  $E_\mu$  bzw.  $E_\nu$  die Energieeigenwerte des Zustands  $\psi_\mu$  der Spitze bzw.  $\psi_\nu$  der Probe,  $f(E)$  ist die Fermi-Funktion,  $U_b$  die angelegte Biasspannung. Die  $\delta$ -Funktion schränkt die Betrachtung auf elastische Tunnelprozesse ein und  $M_{\mu\nu}$  ist das Matrixelement für den Elektronentransfer zwischen den Zuständen  $\psi_\mu$  und  $\psi_\nu$

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar}{2m} \int ds (\psi_\mu^* \nabla \psi_\nu - \psi_\mu \nabla \psi_\nu^*) \quad (2.17)$$

Die Integration wird über die Querschnittfläche  $S$  ausgeführt, die vollständig im Bereich zwischen der Spitze und der Probe liegt. Zur einfacheren Auswertung des Matrixelements wird die Spitze durch eine s-Wellenfunktion beschrieben. Der betrachtete Übergang ist eine Metall-Vakuum-Metall-Konfiguration.

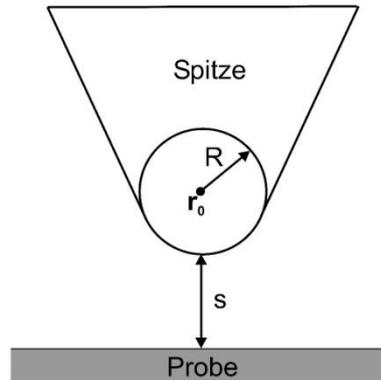


Abb.2.5: Die Spitze hat ein sphärisches Ende mit dem Krümmungsradius  $R$ , das seinen Mittelpunkt am Ort  $r_0$  hat. Der geringste Spitzen-Proben-Abstand ist  $d$ .

Für die Näherung einer monoatomaren, sphärischen Spitze, kleine Tunnelspannungen ( $E_\mu \approx E_\nu$ ) und niedrige Temperaturen ( $f(E_f) \approx 1$ ) ergibt sich:

$$I_T \sim U_B R^2 \exp\left(-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m\Phi}\right) \rho(r_0, E_F) \quad (2.18)$$

Hier bezeichnet  $\Phi$  die Austrittsarbeit,  $r_0$  die Koordinate des Spitzenschwerpunktes und  $R$  den Spitzenradius. Der Tunnelstrom zwischen Spitze und Probe ist in dieser Näherung proportional der Zustandsdichte der Probe bei der Fermienergie am Ort der Spitze. Der Strom ist auch exponentiell vom Abstand  $d$  abhängig, wie schon am einfachen eindimensionalen Fall zu sehen war. Diese Tatsache ist bei der Interpretation von Rastertunnelmikroskopie-Aufnahmen zu beachten. Wie in der Gleichung (2.18) zu erkennen ist, liefern die Daten, die beim Messprozess gewonnen werden nicht nur Informationen über die Geometrie der Probenoberfläche sondern auch die Zustandsdichten der Elektronen. Dies ermöglicht spektroskopische Messungen mit dem Rastertunnelmikroskop.

### 2.3 LEED (Low Energy Electron Diffraction)

Zur Charakterisierung von einkristallinen Oberflächen ist das LEED eine bekannte Untersuchungsmethode, bei der Elektronen von einer Elektronenkanone mit einer geeigneten Energie auf die geerdete Probe geschossen werden. Die kinetische Energie der Elektronen wird so gewählt, dass die de Broglie Wellenlänge der Elektronen in der Größenordnung der atomaren Abstände liegt. Die definiert man durch:

$$\lambda = \frac{h_p}{m_e v_e} = \frac{h_p}{\sqrt{2m_e E}} \quad (2.19)$$

Dabei ist  $h_p$ : Planck'sches Wirkungsquantum,  $m_e$ : die Elektronenmasse,  $v_e$ : Elektronengeschwindigkeit und  $E$ : die Elektronen-Energie,

Elektronen besitzen im Festkörper nur eine geringe Eindringtiefe. Die mit einer geeigneten Energie auf die Oberfläche einfallenden Elektronen werden dort gebeugt und erzeugen auf einem Leuchtschirm Reflexe, die Informationen über das reziproke Gitter des Kristalls liefern.

Zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen den Reflexen auf dem Schirm und dem reziproken Gitter des Kristalls müssen zunächst die Laue Gleichungen erklärt werden. Die Grundannahme der Laue-Gleichungen ist, dass Interferenzmaxima am Beobachtungsort erscheinen, wenn alle Gangunterschiede der Strahlen, die an den einzelnen Gitterpunkten gestreut werden, ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  sind. Bei der einfachen eindimensionalen Streuung an zwei Gitterpunkten, die voneinander um den Translationsvektor  $\mathbf{a}_1$  entfernt sind, ist der Gangunterschied  $z$  (Abb. 2.6).

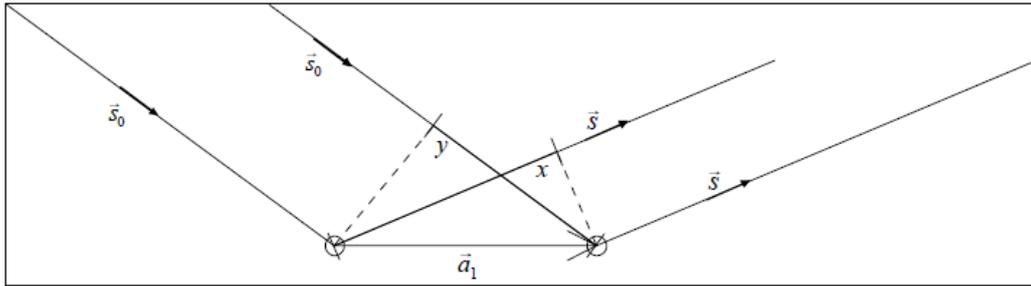


Abb. 2.6: Gangunterschied der Strahlen bei der einfachen eindimensionalen Streuung

Hierbei ist  $\vec{s}_0$  der Einheitsvektor in Einfallsrichtung,  $\vec{s}$  der Einheitsvektor in Ausfallsrichtung und der Gangunterschied  $z$  ergibt sich zu:

$$z = x - y = \vec{a}_1 \cdot \vec{s} - \vec{a}_1 \cdot \vec{s}_0 = \vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) \quad (2.20)$$

Man kann sich leicht überlegen, dass sich aus der allgemeinen Bedingung für eine konstruktive Interferenz der beiden gestreuten Strahlen ergibt:

$$\Delta \vec{s} = \vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) = h\lambda \quad \text{mit } h \in \mathbb{Z}$$

Diese Gleichung erfüllt nur die Beugungsbedingung für eine Raumrichtung. Bei einem Kristall bezieht es sich auf eine dreidimensionale Struktur mit den Vektoren  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  und  $\vec{a}_3$ . Damit ergeben sich drei Laue-Gleichungen:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) &= h\lambda & h, k, l \in \mathbb{Z} \\ \vec{a}_2 (\vec{s} - \vec{s}_0) &= k\lambda \\ \vec{a}_3 (\vec{s} - \vec{s}_0) &= l\lambda \end{aligned} \quad (2.21)$$

Sind alle drei Gleichungen bei der Beugung erfüllt, tritt ein Interferenzmaximum auf. Zur Konstruktion eines Beugungsbildes im zweidimensionalen Fall reichen die ersten beiden

Laue-Gleichungen aus, da die Oberfläche in Richtung der Flächennormalen keine Periodizität besitzt.

Unter Berücksichtigung der Wellenvektoren der einfallenden und der gebeugten Welle

$$\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{s}_0 \quad \text{und} \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{s}$$

ergibt sich für Laue-Gleichungen:

$$\vec{a}_1 \Delta \vec{k}_1 = 2\pi h \tag{2.22}$$

$$\vec{a}_2 \Delta \vec{k}_2 = 2\pi k$$

Dabei sind  $\Delta \vec{k}_1$  und  $\Delta \vec{k}_2$  die Komponenten des Streuvektors  $\Delta \vec{k}$  mit  $\Delta \vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0$ . Bei Beugungsprozessen an Oberflächen ist die zur Oberfläche senkrechte Komponente  $\Delta \vec{k}_3$  nicht zu berücksichtigen, dementsprechend auch die dritte Laue-Gleichung. Der zweidimensionale Streuvektor, der aus den beiden verbleibenden Komponenten aufgebaut wird, liegt in der gleichen Ebene, wie die Gittervektoren  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  und wird als  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  bezeichnet.

Zur weiteren Vereinfachung der Beschreibung von den Beugungsphänomenen an einem Kristall wird das reziproke Gitter benutzt. Das reziproke Gitter eines Kristalls ist aus dem realen Gitter zu konstruieren:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1^* &= \frac{2\pi}{V_E} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 & \text{Mit } V_E &= \vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{a}_2^* &= \frac{2\pi}{V_E} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 \\ \vec{a}_3^* &= \frac{2\pi}{V_E} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \end{aligned} \tag{2.23}$$

$\vec{a}_1^*$  und  $\vec{a}_2^*$  sind hier die Einheitszellen des reziproken Oberflächengitters. Jeder beliebige Punkt des reziproken Oberflächengitters lässt sich von einem anderen Punkt des reziproken Oberflächengitters durch einen Translationsvektor erreichen.

$$\vec{G} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* \quad \text{mit } h, k \in \mathbf{Z} \quad (2.24)$$

Daraus ergeben sich die Laue Gleichungen zu:

$$\Delta\vec{k}_1 = h\vec{a}_1^* \quad (2.25)$$

$$\Delta\vec{k}_2 = k\vec{a}_2^*$$

Damit ergibt sich für den Streuvektor:

$$\Delta\vec{k}_{\parallel} = \Delta\vec{k}_1 + \Delta\vec{k}_2 = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^*$$

$$\Delta\vec{k}_{\parallel} = \vec{G} \quad (2.26)$$

Die Gleichungen (2.22) sind erfüllt, wenn die Beziehung (2.26) gilt. Dieser Zusammenhang kann mit Hilfe der sogenannten Ewald-Konstruktion (Abb. 2.7) veranschaulicht werden. Die Ewaldkugel ist eine Konstruktion zur geometrischen Bestimmung der Beugungsmaxima.

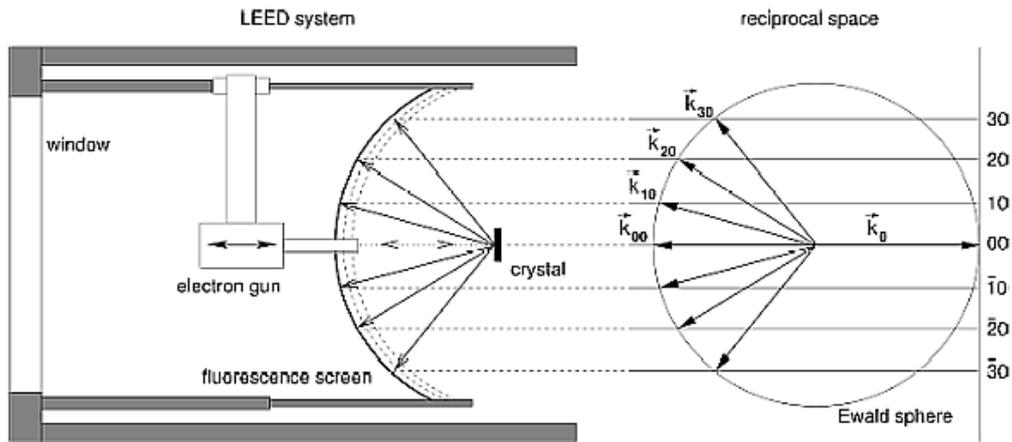


Abb. 2.7: Ewald-Konstruktion

Dabei wird eine Kugel (bzw. ein Kreis) mit dem Radius  $|\vec{k}_0|$  gezeichnet, dessen Anfangspunkt im Mittelpunkt der Ewaldkugel liegt. Mit der Annahme, dass bei einer elastischen Streuung  $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$  gilt, beschreibt die Ewald-Kugel die möglichen Werte von  $\Delta\vec{k}$ . Da es sich bei einer Oberfläche um den zweidimensionalen Fall handelt, liegt in senkrecht zur Oberfläche keine Periodizität vor. Daher werden die Punkte des reziproken Gitters als reziproke Gitterstangen senkrecht auf der Oberfläche dargestellt (s. Abb. 2.7).

Mit Hilfe der Ewald-Kugel-Konstruktion werden auf der Oberfläche die Stellen der Beugungsreflexe bestimmt, die sich an den Schnittpunkten von der Ewald-Kugel und den Stangen befinden. Da die Bedingung  $\Delta\vec{k}_{\parallel} = \vec{G}$  für den Fall elastischer Streuung an diesen Schnittpunkten erfüllt ist, werden dort die LEED Reflexe gebildet.

Bei der Vergrößerung der Elektronenenergie wird die Ewaldkugel größer. Dies führt zu einer Verkleinerung des Winkels zwischen den Vektoren  $\vec{k}$  und  $\vec{k}_0$ , so dass die Abstände zwischen den Reflexen auf dem Schirm verringert werden.

Der Aufbau des LEEDs ist in Kapitel 3.5 ausführlich beschrieben.

## 2.4 Der magnetooptische Kerr-Effekt

Beim magnetooptischen Kerr-Effekt (MOKE) handelt es sich um eine Wechselwirkung von Licht mit durch äußere Magnetfelder magnetisierten ferromagnetischen Schichten. Durch eine quasi-klassische Betrachtung kann man einige wichtige Aspekte dieses Phänomens verdeutlichen: Die Leitungselektronen in der untersuchten Schicht werden durch das oszillierende elektrische Feld des einfallenden linear polarisierten Lichtes zu Schwingungen angeregt. Durch die Magnetisierung in der Schichtebene, die nicht parallel zum elektrischen Feldvektor des einfallenden Lichtes gerichtet ist, entsteht eine Lorentzkraft, die die Elektronen auf Ellipsenbahnen ablenkt. Somit ändert sich der Polarisationszustand des linear polarisierten Lichtstrahls bei der Reflektion an einer magnetisierten Schicht in ein elliptisch polarisiertes Licht. Die große Halbachse der Polarisationsellipse ist gegenüber dem einfallenden Licht um einen bestimmten Winkel  $\theta_K$  gedreht. Dieser Drehwinkel ist dabei proportional zur mittleren Magnetisierung der Schicht.

$$\theta_K = \alpha |\vec{M}|$$

Als Kerrelliptizität  $\varepsilon_K$  beschreibt man den Winkel, dessen Tangens das Verhältnis der kleinen zur großen Halbachse der Ellipse des elektrischen Vektors wieder gibt. Dies entspricht für kleine Winkel direkt diesem Verhältnis,  $\tan \varepsilon_K \cong \varepsilon_K$ . Eine anschauliche Darstellung der Winkel  $\theta_K$  und  $\varepsilon_K$  ist Abb. 2.8 zu entnehmen.

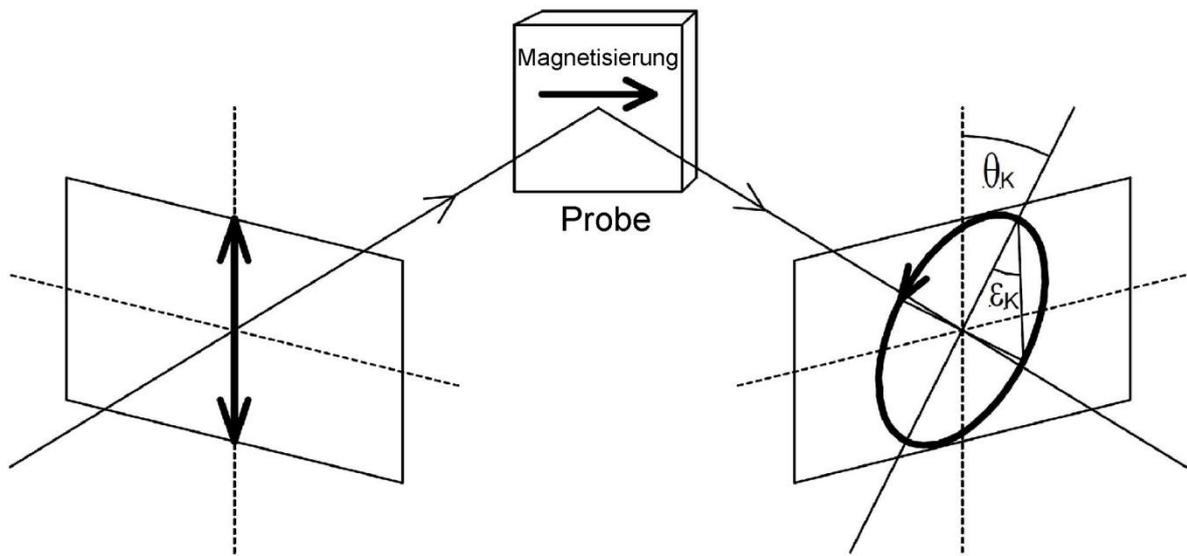


Abb. 2.8: Longitudinaler Kerr-Effekt bei s-Polarisation

Ebenso wie die Kerr-Rotation ist auch Kerrelliptizität  $\varepsilon_K$  proportional zur Vektorkomponente der Magnetisierung  $M$  in der Probe parallel zur Einfallsebene und innerhalb der Schichtebene. Die beiden sind nicht proportional zur magnetischen Flussdichte  $B$ , obwohl dies das Ergebnis in der klassischen Betrachtung nach dem Lorentz-Drude-Modell ist. Diese Tatsache kann auf der Basis einer quantenmechanischen Berechnung der austauschgespaltenen elektronischen Bandstruktur unter Einbeziehung der Spin-Bahn-Kopplung erklärt werden [Ebert 99]. Der Proportionalitätsfaktor hat einen Zusammenhang mit verschiedenen Randbedingungen, wie mit der Photonenenergie des verwendeten Laserstrahls, mit der Art und Struktur des Substrats und der magnetischen Schicht sowie mit dem Einfallswinkel und der Polarisationsrichtung des einfallenden Lichtes.

Man betrachtet den magnetooptischen Kerr-Effekt in drei fundamentalen Konfigurationen: transversal, polar- und longitudinal (Abb.2.9). Wenn die Magnetisierung der Probe senkrecht zur Oberfläche orientiert ist, spricht man vom polaren Kerr-Effekt. Beim transversalen Kerr-Effekt befindet sich der Magnetisierungsvektor parallel zur Oberfläche, die zu untersuchen ist und steht senkrecht zur Einfallsebene des Lichtes. Hierbei findet keine Änderung bei der

Polarisation statt, sondern es tritt eine Intensitätsmodulation auf. Vom longitudinalen Kerr-Effekt spricht man, wenn die Einfallsebene des linear polarisierten Lichtes parallel zur Magnetisierung orientiert ist und diese in der Probenoberfläche liegt. Man unterscheidet weiterhin p-polarisiertes Licht je nachdem, ob der elektrische Feldvektor des einfallenden Laserstrahls senkrecht oder parallel zur Einfallsebene gerichtet ist. Im Gegensatz zum transversalen Kerr-Effekt tritt beim polaren und longitudinalen Kerr-Effekt eine Drehung der großen Halbachse der Polarisationsellipse des reflektierten Lichtes gegenüber dem einfallenden Licht auf.

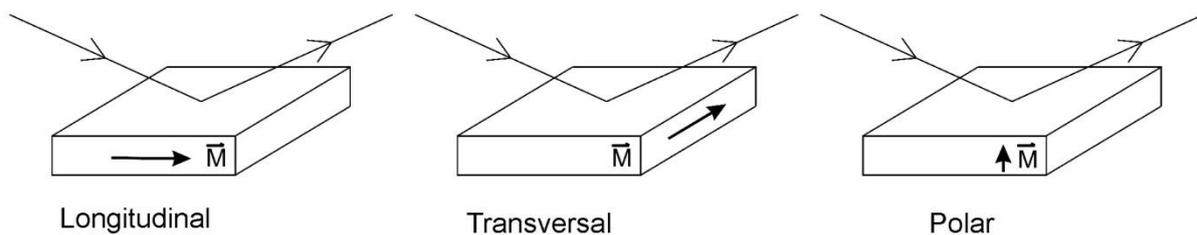


Abb. 2.9: Die drei möglichen fundamentalen Geometrien des Kerr-Effekts. Die longitudinale ist empfindlich auf die *in-plane*-Komponente der Magnetisierung im Gegensatz zur polaren Anordnung. Anders als bei diesen beiden Effekten dreht die transversale Konfiguration nicht die Polarisationssebene, sondern hier variiert die Intensität des reflektierten Strahls mit der Magnetisierung.

Bei dünnen Schichten muss die Eindringtiefe des Lichtes berücksichtigt werden, die abhängig von der Wellenlänge bei 50-100 nm liegt [Jac89]. Mit dieser Tatsache und der hohen Empfindlichkeit des Kerr-Effektes ist es möglich, dass Proben mit Schichtdicken von wenigen Monolagen bis zu Schichtdicken, die der Eindringtiefe des Lichtes entsprechen, magnetisch untersucht werden können.

## 2.5 Das supraleitende Quanteninterferenzmagnetometer (SQUID)

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein SQUID-Magnetometer zur Bestimmung des magnetischen Momentes einer Probe verwendet. Es besteht aus einem supraleitenden Ring, der von einem (rf SQUID) oder zwei Josephson-Kontakten (dc SQUID) unterbrochen ist, deren Unterbrechung so dünn ist, dass die supraleitenden Elektronenpaare durch diese Spalte hindurchtunneln können.

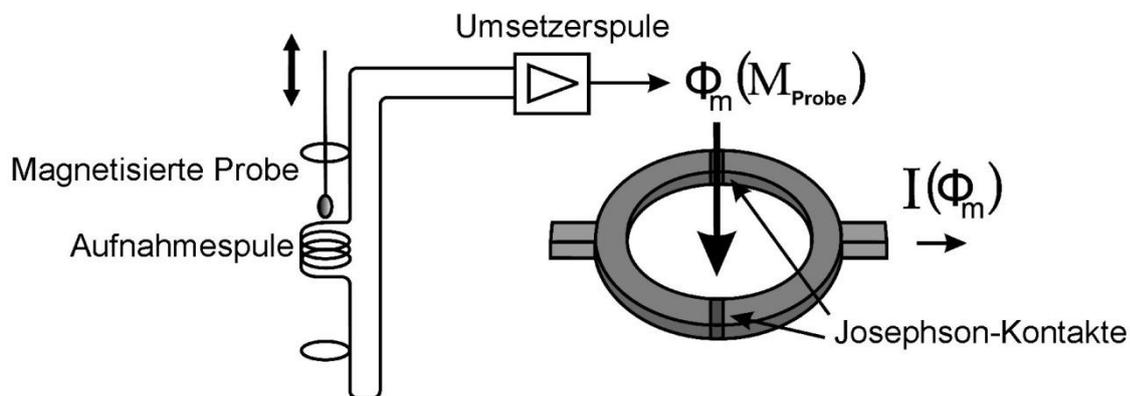


Abb. 2.10: Funktionsweise eines SQUID-Magnetometers: Die magnetisierte Probe wird innerhalb der Aufnahmespule bewegt. Somit wird in dieser eine Induktionsspannung erzeugt, die von einer Umsetzerspule in einen magnetischen Fluss übertragen wird. Dieser durchdringt den supraleitenden Ring mit den zwei Josephson-Kontakten, in dem die Cooper-Paare interferieren. Das hat eine Veränderung des mit der Magnetisierung der Probe verbundenen Stroms  $I$  zur Folge, der durch seine Periodizität sehr genau messbar ist.

In Abb. 2.10 ist ein dc-SQUID schematisch dargestellt. Die durch das von supraleitenden Magneten erzeugte Feld magnetisierte Probe wird durch eine Aufnahmespule bewegt, in der eine Induktionsspannung erzeugt wird. Diese Spannung setzt eine weitere Spule in einen magnetischen Fluss  $\Phi_m$  um, von dem das SQUID durchsetzt wird und ein Strom  $I$  durch den supraleitenden Ring in Zusammenhang mit der Probenmagnetisierung  $M_{\text{Probe}}$  genau bestimmt werden kann.

# 3 Experimentelle Techniken

---

## 3.1 UHV-Bedingungen

Zur Vermeidung von Kontaminationen durch Fremdatome wird die Untersuchung atomarer Strukturen von Oberflächen mittels STM im UHV durchgeführt. Während eine Oberfläche bei Atmosphärendruck in sehr kurzer Zeit ( $\ll$  msec) mit einer Monolage Fremdatomen belegt wird, beträgt diese Zeit unter UHV-Bedingungen ( $10^{-10}$  mbar) einige Stunden [Hen94].

Die sogenannte Bedeckungszeit ( $\tau$ ), die bei gegebenem Druck ( $p$ ) bis zur Ausbildung einer vollständigen Monolage von Restgasmolekülen (Masse  $m$ ) vergeht, kann man mit Hilfe der folgenden Formel bestimmen:

$$\tau = \frac{N_{ad}}{Z_0 S} \tag{3.1}$$

Hierbei ist  $N_{ad}$  die Flächendichte der adsorbierten Teilchen,  $Z_0$  die Flächenstoßrate und  $S$  der Haftkoeffizient. Für  $Z_0$  gilt die folgende Formel:

$$Z_0 = \frac{P}{\sqrt{2\pi mkT}} \tag{3.2}$$

Zur groben Abschätzung dieser Zeitdauer geht man von Raumtemperatur ( $T \approx 300$  K), einer Flächendichte von  $N_{ad} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  und einem maximalen Haftkoeffizienten  $S = 1$  aus, d. h. es wird angenommen, dass alle Fremdatome, die auf die Oberfläche treffen, adsorbiert werden [Lew65]. Es ergibt sich demnach für die Bedeckungszeit folgende Näherungsformel:

$$\tau = \frac{1}{p} \frac{N_{ad} \sqrt{2\pi mkT}}{S} \tag{3.3}$$

Die Bedeckungszeit sinkt mit zunehmendem Druck. Der schematische Aufbau der verwendeten UHV-Kammer lässt sich an Abb. 3.1 veranschaulichen.

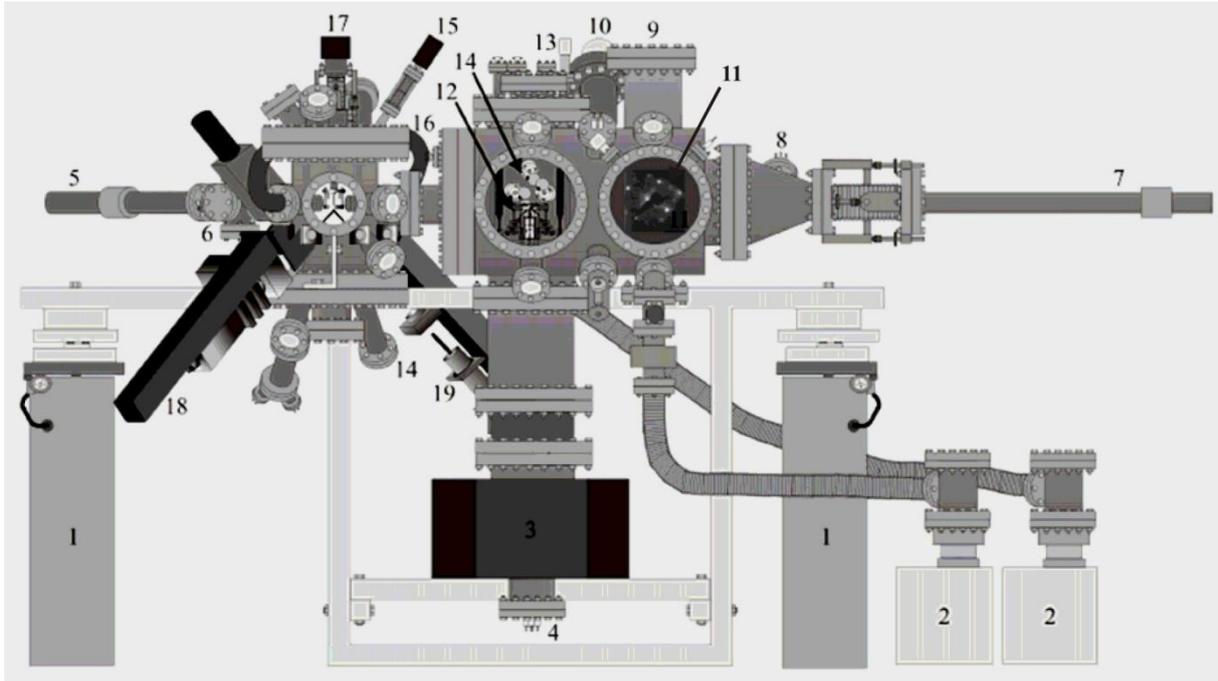


Abb. 3.1: Aufbau der verwendeten Ultrahochvakuum (UHV)-Kammer.

- |   |                                     |
|---|-------------------------------------|
| 1. Pneumatische Schwingungsdämpfer              | 11. LEED                            |
| 2. Turbomolekularpumpe                          | 12. STM                             |
| 3. Iongetterpumpe                               | 13. Ionensputterquelle (Sputtergun) |
| 4. Titansublimationspumpe                       | 14. MBE-Quellen                     |
| 5. Transferstange                               | 15. UHV-Schraubendreher             |
| 6. Schleuse                                     | 16. Elektromagnet für MOKE          |
| 7. Manipulator                                  | 17. MOKE-Kammer                     |
| 8. Elektrische Kontaktierung der Transferstange | 18. optische Bank MOKE-Aufbau       |
| 9. Anschlussmöglichkeit für AES                 | 19. Laser für MOKE-Aufbau           |
| 10. QMS (Quadrupolmassenspektrometer)           |                                     |

Um den Einfluss der äußeren Erschütterungen zu minimieren, wird die UHV-Kammer auf vier pneumatischen Schwingungsdämpfern (1) gelagert. Durch die Schleuse (6) können Proben und Spitzen in die Kammer hineingeführt werden, ohne diese zu belüften. Der Probenhalter mit Substrat wird in der Schleuse an der Transferstange (5) über einen Bajonett-Verschluss

befestigt. Zwischen Schleuse und Kammer befindet sich ein Plattenventil. Nachdem die Schleuse durch eine Turbo-Molekular-Pumpe (2) abgepumpt wurde, wird das Ventil zur UHV-Kammer geöffnet und der Probenhalter mit Hilfe der Transferstange auf dem Ablageplatz der MOKE-Kammer (17) aufgesetzt. Der Probenhalter kann nun mit dem Manipulator (7) ebenfalls über einen Bajonett-Verschluss aufgenommen werden und mit dessen Hilfe innerhalb der Kammer vor den entsprechenden Geräten positioniert werden.

Am Kopf des Manipulators befinden sich drei elektrische Kontakte, die gegen die Kammermasse isoliert und von außen über eine elektrische Durchführung kontaktierbar sind. Durch den Stromfluss über diese Kontakte wird die Probe geheizt. Die Substratoberfläche wird mittels einer Ionensputterquelle (13) von einer möglichen Oxidschicht und Fremdatomen befreit. Das in der Kammer vorhandene Restgas kann durch einen Quadrupolmassenspektrometer (QMS, 10) analysiert werden.

Mit Hilfe des STM (12) und eines LEED-Systems (11) können die Proben auf die Oberflächenstrukturen hin untersucht werden. Diese Geräte werden im Kapitel 3.4 bzw. 3.5 näher beschrieben.

## 3.2 Das Pumpsystem

Das Ultrahochvakuum in der Kammer wird durch ein Pumpsystem erzeugt, das aus einer mechanischen Vorpumpe in Kombination mit einer Turbomolekularpumpe (2), einer Ionengetterpumpe (3) sowie einer Titansublimationspumpe (4) besteht.

Die Vorpumpe dient zur Erzeugung eines Grobvakuum ( $\approx 10^{-2}$  mbar), welches der nachgeschalteten Turbomolekularpumpe (TMP) als Vordruck dient. Nach einem Ausheizprozess erzeugen die beiden Pumpen zusammen einen Kammerdruck von etwa  $1 \times 10^{-9}$  mbar.

Der Aufbau der TMP ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Sie besteht aus Rotoren und Statoren, die mit schräg gestellten Schaufeln bestückt sind. Die Rotor- und Statorschaufeln sind

hintereinander so angeordnet, dass sich die Rotoren gegenüber den Statoren drehen können.

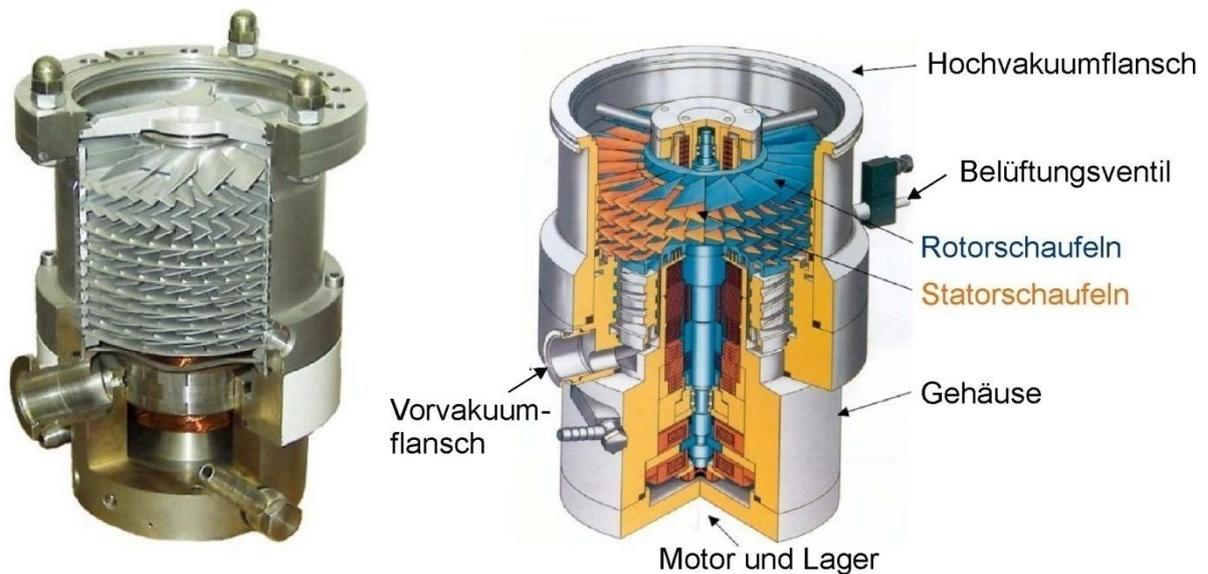


Abb. 3.2: Schnitt durch eine Turbomolekularpumpe.

Die Pumpwirkung wird erreicht, wenn die Geschwindigkeit der Rotorscheufeln in die Größenordnung der mittleren thermischen Geschwindigkeit der Gasmoleküle gelangt. Der Abstand zwischen den Schaufeln muss kleiner als die mittlere freie Weglänge der Gasteilchen sein, damit die durch die Rotorscheufeln übertragene Geschwindigkeitskomponente nicht durch Stöße mit anderen Teilchen verloren geht.

Das Funktionsprinzip der TMP beruht darauf, dass die einzelnen abzupumpenden Gasteilchen durch Zusammenstöße mit schnell bewegten Flächen der Rotorscheufeln einen zusätzlichen Impuls in die Förderrichtung bekommen. Die Teilchen werden auf den Schaufelflächen adsorbiert und verlassen diese anschließend nach einer gewissen Zeit in Richtung des Vorvakuumanschlusses. Da leichte Moleküle wie Wasserstoff bei Raumtemperatur eine sehr hohe Geschwindigkeit haben, wird auf denen nur ein kleiner zusätzlicher Impuls durch die Rotorscheufeln übertragen. Daher ist das Kompressions-

vermögen bei TMP für diese Moleküle deutlich schlechter als für andere Bestandteile der Luft.

Neben der TMP ist eine Ionengetterpumpe (IGP) mit integrierter Titansublimationspumpe (TSP) für die Erzeugung des UHV in der Kammer verantwortlich. Die leichten Moleküle, die von der TMP schlecht entfernt werden, können durch diese beiden Pumpen abgepumpt werden.

Das Prinzip der IGP beruht darauf, dass die zu pumpende Restgasteilchen zunächst durch Elektronenstoß ionisiert werden. Die ionisierten Teilchen treffen auf eine Titanelektrode, wo sie Titan herausputtern, das sich an andere Stelle niederschlägt und Restgasatome bindet. Das Magnetfeld zwingt die Elektronen auf Schraubenbahnen, wodurch die Ionisierungseffizienz erhöht wird. Die IGP ist für Edelgase nicht geeignet, da diese chemisch nicht gebunden werden können.

Zur Unterstützung der IGP wird eine TSP verwendet. Das Funktionsprinzip dieser Pumpe beruht auf der hohen Getterfähigkeit von ausgedampftem Titan. Ein dicker Titan-Draht wird durch einen starken Strom so lange erhitzt bis das Titan verdampft. Der an den kälteren Pumpenwänden kondensierte Titan-Dampf kann dort mit den Restgasen wie Sauerstoff, Kohlendioxid oder Stickstoff reagieren und sie chemisch binden.

Zur Desorption der an den Kammerwänden abgesetzten Gase und Wassermoleküle wird die Kammer mindestens zwei Tage bei 150 °C ausgeheizt. Durch das Ausheizen und die Pumpensysteme kann der für die weiteren Experimente notwendige Druck (ca.  $10^{-10}$  mbar) erreicht werden.

### 3.3 Verdampfer

#### 3.3.1 Fe-Verdampfer

Zur Präparation der epitaktischen Schichten wurden MBE-Quellen in Form von Knudsen-Zellen bzw. eines Elektronenstrahlverdampfers, der sich an der UHV-Kammer befindet, verwendet. Der Aufbau dieses Verdampfers ist in der Abb. 3.3 schematisch dargestellt.

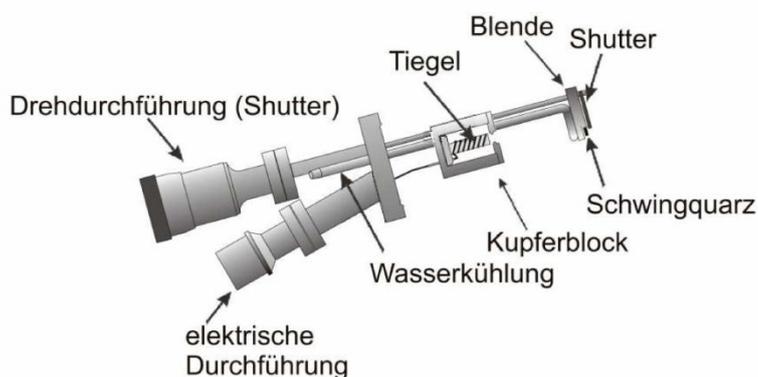


Abb. 3.3: Aufbau der verwendeten MBE-Quelle (Knudsen Zelle)

Das Verdampfungsmaterial befindet sich in einem Tiegel aus Aluminiumoxid. Das Kupfergehäuse des Verdampfers ist an eine Wasserkühlung angeschlossen, die verhindert, dass das Gehäuse und die Schwingquarze durch Überhitzung zerstört werden oder einen schlechten Druck erzeugen. Um den Tiegel ist ein Wolframdraht gewickelt, der bei Stromdurchfluss das Erhitzen des Materials innerhalb des Tiegels ermöglicht. Bei ausreichend hoher Temperatur fängt das für die Deposition benötigte Material im Tiegel an zu verdampfen. Der dadurch entstehende Atomstrahl wird durch Blenden und einen Shutter gezielt auf die Probe gebracht. Die Dicke der aufgedampften Schicht lässt sich mit Hilfe einer Schwingquarzzaage bestimmen. Hierbei wird der sich im Strahlengang befindende Schwingquarz ebenfalls mit dem verdampften Material bedeckt. Aufgrund der aufgebrachtten Masse nimmt die Resonanzfrequenz des Quarzes mit der Zeit ab. Diese

Abnahme ist proportional zur verdampften Materialmenge. Zur Kalibrierung wird eine Probe hergestellt, deren Schichtdicke mittels einer Kleinwinkel-Röntgenmessung oder RBS bestimmt wird.

### 3.3.2 Si-Verdampfer

Zur Herstellung der Eisensilizid-Schichten wurde neben einem Eisenverdampfer auch ein Si-Verdampfer in Betrieb genommen. Die Abb. 3.4 stellt den schematischen Aufbau eines Si-Elektronen-Strahl-Verdampfers dar. Das Verhältnis des eingesetzten Siliziums zu Eisen bestimmt die Zusammensetzung der entstehenden Eisensilizid-Schicht. Das zu verdampfende Si-Material besteht aus Si-Streifen, die aus einem Si-Wafer herausgebrochen wurden und mit schmalen Tantal-Steifen zu einem Paket geschnürt wurden.

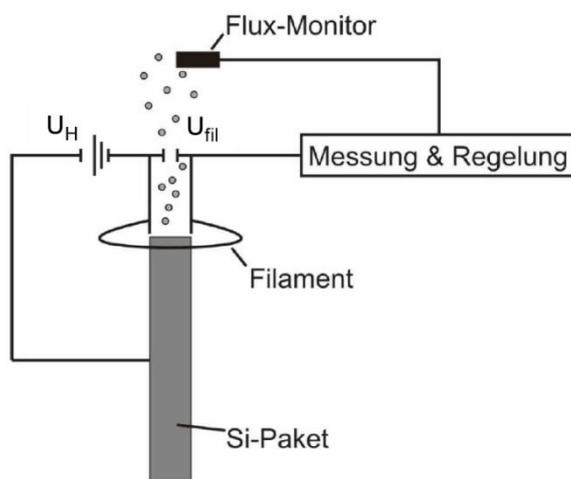


Abb. 3.4: Schematischer Aufbau eines Si-Elektronenstrahlverdampfers.

Durch das Filament erzeugte Elektronen werden auf das Si-Paket beschleunigt, da eine Hochspannung zwischen Masse und den Si-Streifen angelegt wird. Die auf die Si-Streifen gestoßenen Elektronen schießen die Si-Atome aus den Streifen. Ein bestimmter Bruchteil der ausgestoßenen Si-Atome ist geladen und trifft auf einen Flux-Monitor, wodurch dort eine

Spannung erzeugt wird. Über diese Spannung bestimmt man die Aufdampfgeschwindigkeit. Durch zeitliche Integration über diese Spannung und durch eine vorher erfolgte Kalibrierung kann man die Menge des aufgedampften Siliziums bestimmen. Durch die Schichtdickenmessung mit Hilfe von Kleinwinkel-Röntgenmessungen oder der RBS-Methode erfolgt eine Kalibrierung für den Si-Verdampfer.

Die Aufdampfrate des Siliziums wird über die Regelung des Filament-Stroms variiert. Bei diesem Verdampfer ist es schwer die Verdampfungsrate von Si bzw. die Filament-Spannung während der Beschichtung stabil zu halten. Deswegen wird dies über ein Computer-Programm durchgeführt. Dieses Programm berechnet dabei die Integration der Spannung ( $V$ ) über die Zeit ( $t(s)$ ) und liefert das Ergebnis in ( $Vs$ ), welches uns nach der erforderlichen Kalibrierung zur Verfügung steht, um die adsorbierte Schichtdicke von dem Silizium zu bestimmen.

### 3.4 Aufbau des STM

Der prinzipielle Aufbau des Rastertunnelmikroskops, das bei diesem Versuchsaufbau verwendet wird, ist Abb. 3.5 zu erkennen. Da mit STM durchgeführte Messungen sehr empfindlich auf mechanische Schwingungen reagieren, wird das gesamte Rastertunnelmikroskop durch verschiedene Dämpfungssysteme isoliert.

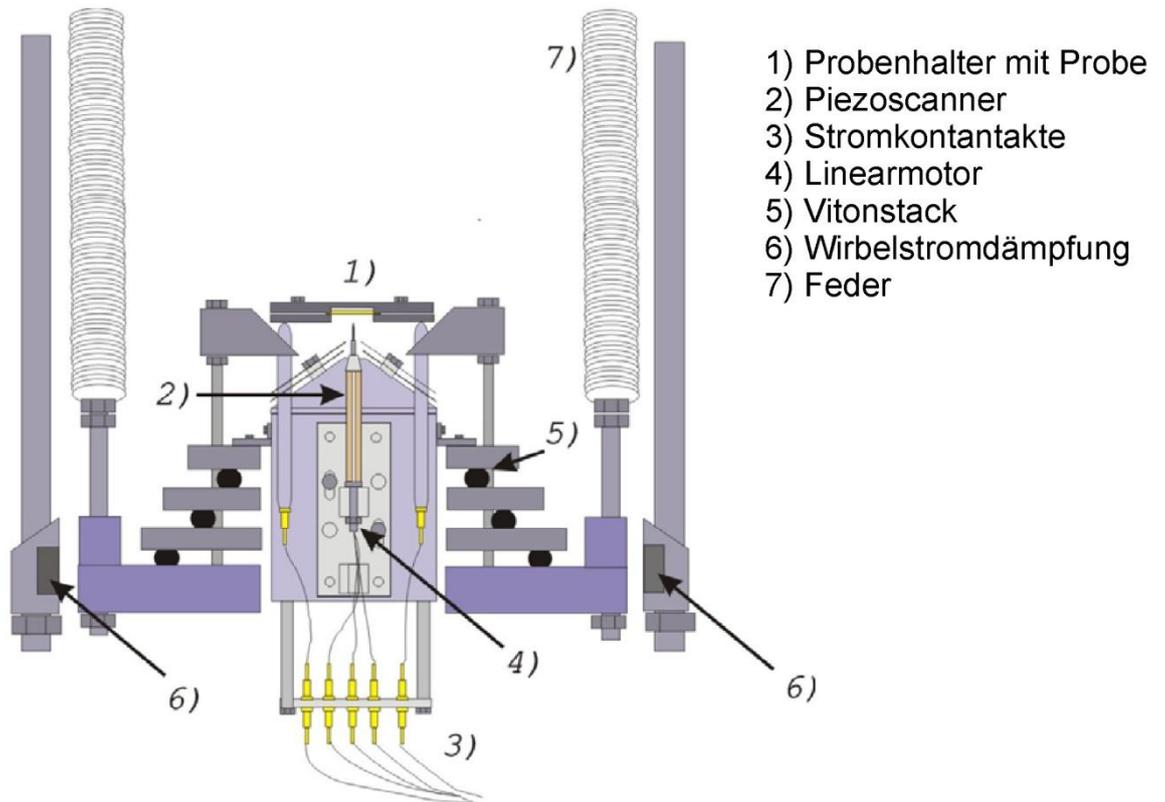


Abb. 3.5: Schematischer Aufbau des Rastertunnelmikroskops.

Im äußeren Bereich ist das STM direkt auf ein Schichtsystem von drei Edelstahlplatten befestigt. Zur mechanischen Dämpfung liegen zwischen den Edelstahlplatten Vitonstücke (5). Dieses Schichtsystem selbst befindet sich auf einer an vier Federn (7) hängend gelagerten Kupferplatte. Die Einheit aus Mikroskop und Kupferplatte steht in Verbindung mit

einer magnetischen Wirbelstrombremse, die für die nötige mechanische Schwingungsisolierung des Mikroskops vom übrigen Kammerensystem sorgt.

Im inneren Bereich des Rastertunnelmikroskops befinden sich ein Piezotubescanner, eine austauschbare Tunnelspitze und ein Linearmotor, der zur Grobnäherung der Spitze an die Probe dient. Die Spitze kann mit Hilfe einer speziell konstruierten Gabel, vom Tubescanner abgenommen werden. So kann bei Bedarf ein Spitzenwechsel vorgenommen werden, ohne die Kammer zu belüften.

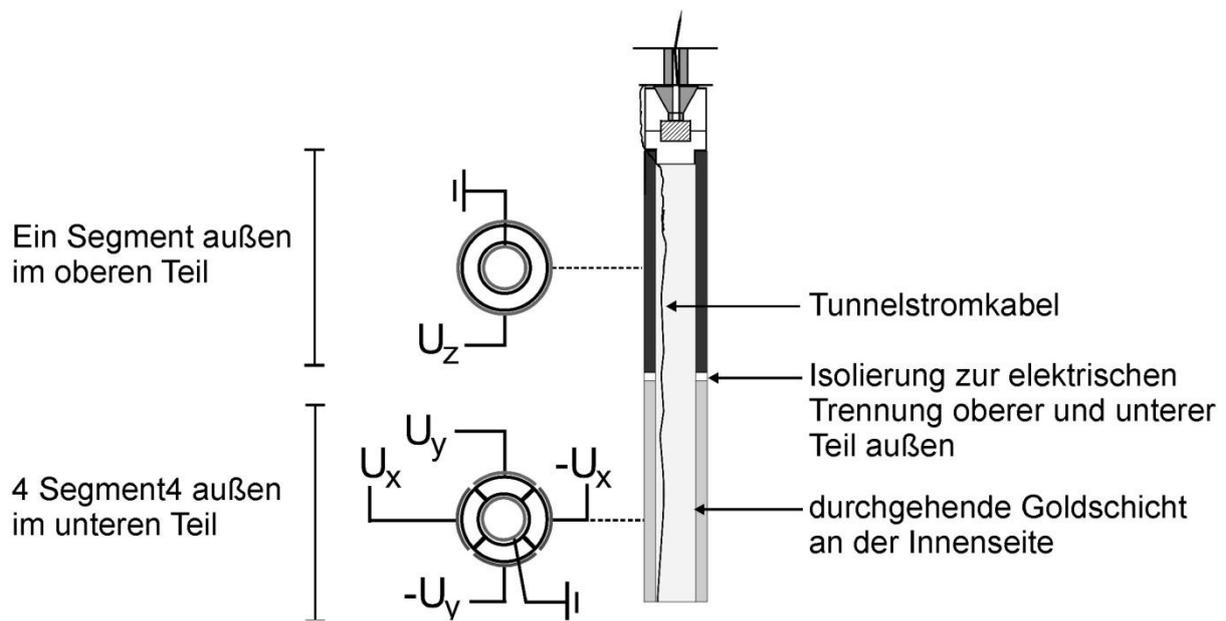


Abb. 3.6: Schematischer Aufbau des Tubescanners [nach Urb05]

Der Piezotubescanner, der von innen und außen mit Elektroden kontaktiert ist, besteht aus einem piezoaktiven Keramikröhrchen. Während die innen liegende Elektrode auf Erdpotential liegt, wird eine Bewegung in x- und y-Richtung über eine Vierteilung der Elektroden außen ermöglicht.

Anlegen einer antisymmetrischen Spannung im Bereich von -150V bis +150V an zwei gegenüberliegenden Elektroden führt zu einer Verbiegung des Röhrchens durch Stauchung

bzw. Dehnung in Querrichtung. Ein derartig angesteuerter Röhrenscanner ermöglicht so die gewünschte präzise Steuerung der Spitze in alle drei Raumrichtungen.

Die laterale Verformung in x- bzw. y- Richtung des Röhrchens steht im Zusammenhang mit der angelegten Spannung  $U$ , dem Tubedurchmesser  $D$ , der Piezomaterialkonstanten  $d_{31}$ , sowie der Dicke  $h$  und Länge  $L$  des Piezoelementes. Die Verhältnis ergibt sich [Che93] zu:

$$\Delta x \text{ (bzw. } \Delta y) = \frac{2\sqrt{2}d_{31}UL^2}{\pi Dh} \quad (3.4)$$

Für die Verformung des Piezokristalls in z-Richtung gilt die Beziehung:

$$\Delta z = \frac{d_{31}UL}{h} \quad (3.5)$$

### 3.4.1 Messmodi des Rastertunnelmikroskops

Bei Rastertunnelmikroskopen unterscheidet man drei verschiedene Messmodi: Den Konstant-Höhen-Modus (*constant height mode*), den Konstant-Strom-Modus (*constant current mode*) und den Spektroskopie-Modus. Die ersten beiden sind bildgebende Verfahren während letzterer Informationen über die elektronische Zustandsdichte liefert.

Beim **Konstant-Höhen-Modus** rastert die Spitze in konstanter Höhe über die Probe, während die Änderung des Tunnelstromes gemessen wird. Obwohl die Probe mit dieser Messmethode schneller gescannt werden kann, ist diese Methode in vielen Fällen problematisch, da insbesondere bei einer unbekanntem rauhen Oberfläche die Gefahr eines Zusammenstoßes von Spitze und Probe besteht (Abb. 2.6A). Ein weiteres Problem kann bei so einer Oberfläche der Verlust des Tunnelkontaktes sein.

Die zweite Messmethode ist der **Konstant-Strom-Modus** (Abb. 2.6B). Hier wird die Spitze Punkt für Punkt auf einen konstanten Tunnelstrom eingestellt. Als Messwert dient die

Strecke, die sich die Spitze an die Oberfläche annähern oder von ihr entfernen muss, um den konstanten Tunnelstrom einzustellen.

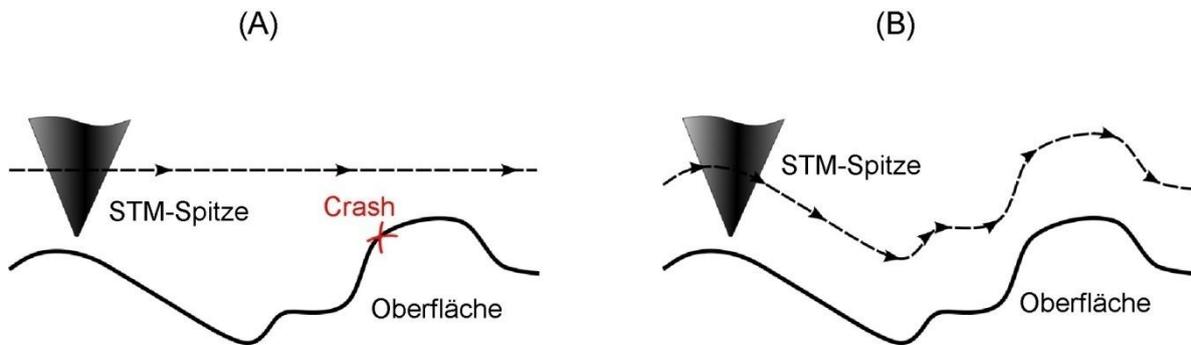


Abb. 3.7: Messmodi des Rastertunnelmikroskops. A) Konstant-Höhen-Modus. B) Konstant-Strom-Modus.

Die letzte Messmethode ist der **Spektroskopie-Modus**. Bei dieser Betriebsart wird an jedem Messpunkt aufgezeichnet, wie der Tunnelstrom mit der angelegten Spannung variiert (Strom-Spannungs-Kennlinie). Der Spektroskopie-Modus ermöglicht so einen tieferen Einblick in die elektronischen Eigenschaften einer Probe.

### 3.5 Aufbau des LEED-Systems

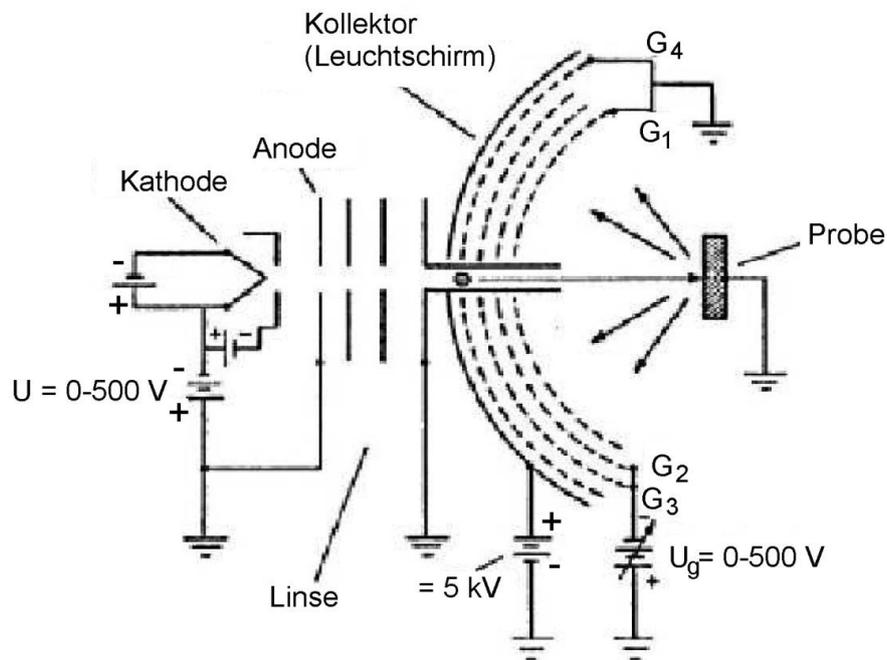


Abb. 3.8: Schematische Darstellung des LEED-Systems

In Abbildung 3.8 ist ein Vier-Gitter LEED-System schematisch dargestellt. Die Probe liegt im Krümmungsmittelpunkt des halbkugelförmigen Schirms. Die durch Glühemission in einer Glühkathode erzeugte Elektronen werden mittels eines Driftrohres senkrecht auf die Probe geschossen und dort gebeugt. Die kinetische Energie der auf die Probe gesandten Elektronen wird durch Regelung einer Spannung zur Beschleunigung der Elektronen variiert. Bei einer Energie zwischen 20 bis 500 eV liegt die de-Broglie Wellenlänge der Elektronen mit

$$\lambda[\text{\AA}] \approx \sqrt{\frac{150,4}{E[\text{eV}]}} \quad (3.6)$$

in der Größenordnung atomarer Abstände ( $\lambda=0,05$  bis  $0,3$  nm).

Elektronen können aufgrund ihrer elektrischen Ladung nur kurze Strecken in den Festkörper eindringen, so dass die Beugungsbilder beim LEED die Struktur-Informationen über die Oberfläche des Kristalls liefern. Die mittlere freie Weglänge der Elektronen im Festkörper hängt nicht von dem Material ab. Wie in der Abbildung (3.9) zu sehen ist, liegt das Minimum der mittleren freien Weglänge bei etwa 60 eV.

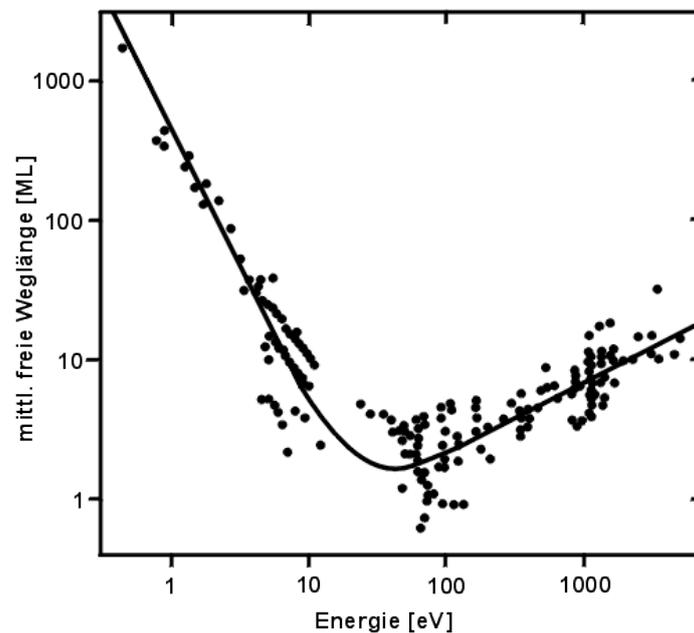


Abb. 3.9: Mittlere freie Weglänge von Elektronen in Festkörpern für verschiedene Elemente

Die auf der Oberfläche gebeugten Elektronen fliegen durch das Vier-Gitter-System auf den Fluoreszenzschirm und werden dort durch Nachbeschleunigung als grüne Leucht-Reflexe sichtbar gemacht. Das Beugungsbild ist durch ein Fenster von der Elektronenkanonenseite aus zu beobachten.

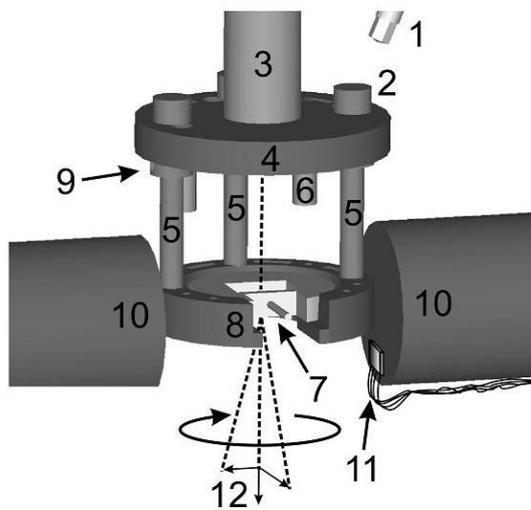
Das innerste Gitter des Vier-Gitter-Systems liegt auf dem Erdungspotenzial, um einen feldfreien Raum zwischen Analysator und Probe zu erzeugen. Somit ist es möglich, dass die Elektronen sich geradlinig ausbreiten. Auf das zweite und dritte Gitter wird ein Abbremspotenzial  $U_g$  angelegt, damit unelastisch gestreute Elektronen vom Leuchtschirm zurückgehalten werden. Das vierte Gitter liegt auch auf dem Erdungspotenzial und wird nur bei einer Energieanalyse der Elektronen verwendet.

Da Störungen in der Gitterperiodizität der Probe das Untergrundsignal erhöhen und somit die LEED-Reflexe weniger scharf werden lassen, deuten scharfe Reflexe auf eine sehr gut rekonstruierte und saubere Oberfläche hin.

#### **3.6 Aufbau der UHV-MOKE-Kammer**

Die MOKE-Messungen erfolgten im UHV in einer speziellen MOKE-Kammer, die an die vorhandene Wachstumskammer angebracht wurde [Urb05]. Die MOKE-Kammer ist aus temperaturbeständigen Materialien, die nicht ferromagnetisch sind, angefertigt. Außenwände der Kammer bestehen aus V2A-Stahl, die Bauteile des Aufnahmesystems für Probenhalter aus Panbronze, Titan oder V4A-Stahl und die Probenhalter selbst aus Titan oder Molybdän.

In der Abb. 3.10 ist das Aufnahmesystem für den Probenhalter schematisch dargestellt. Der Probenhalter mit Probe (7) befindet sich in einer Titanplatte (8), die zwischen den Polschuhen des Magneten (10) platziert ist. Diese Platte ist über drei stabile Panbronzeschrauben mit der oberen Titanplatte (4) verbunden. Die Panbronzeschrauben ermöglichen neben der Verkipfung der Bodenplatte in der Horizontalen gegen die Drehachse auch das Heben und Senken des Ablageplatzes, so dass geometrisch unterschiedliche Proben in die gleiche Höhenposition gebracht werden können. Das vorhandene Magnetfeld wird über Hallsonde (11) gemessen.



- 1 UHV-Schraubendreher
- 2 Imbuskopf der Einstellschrauben
- 3 Befestigung an Hauptdrehdurchführung
- 4 obere Titanplatte
- 5 Einstellschrauben aus Panbronze
- 6 Fänger zum Ablegen des Probenhalters
- 7 Probenhalter mit Probe
- 8 untere Titanplatte
- 9 Stellring
- 10 Polschuhe des Magneten
- 11 Hallsonde
- 12 Freiheitsgrade der Justage

Abb. 3.10: Ablagesystem für die Probenhalter

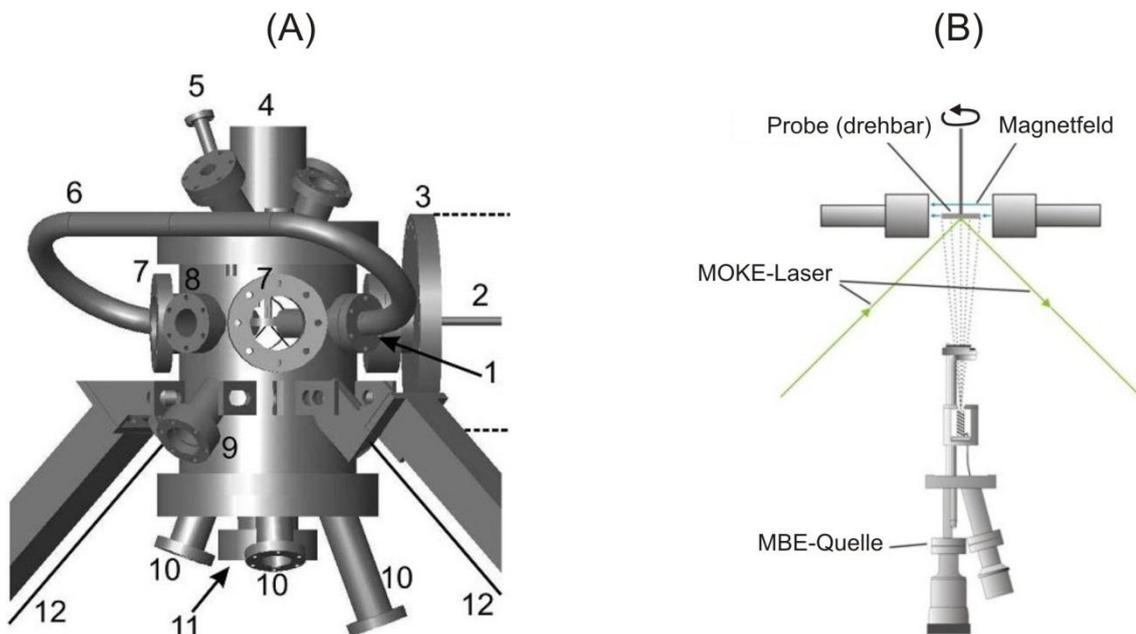


Abb. 3.11: MOKE-Aufbau. A) Aufbau der MOKE-Kammer 1: Hohlzylinder, 2: Haupttransferstange, 3: Flansch mit angedeuteter Wachstumskammer, 4: Hauptdrehdurchführung, 5: Wellbalg mit Schraubenzieher, 6: Magnetkern, 7: Sichtfenster, 8: Flansch für zweiten Magneten, 9: Zusätzlicher Strahlengang für transversalen MOKE-Effekt 10: drei *in-situ* MBE-Quellen, 11: Fenster für Kernmikroskopie, 12: Strahlengang für longitudinalen MOKE mit optischen Bänken. B) Prinzip des *in-situ* MOKE.

Abbildung 3.11 zeigt den Aufbau der MOKE-Kammer und das Prinzip des *in-situ* MOKE. Der Ablageplatz für die Probe ist drehbar und kann über einen Kühlfinger gekühlt werden. Als Lichtquelle für MOKE wird ein Dioden-Neon-Laser verwendet. Der einfallende Laserstrahl wird an der Probe reflektiert und anschließend passiert der reflektierte Strahl den PEM, den Analysator, die Fokussierlinse und den Interferenzfilter. Er trifft dann auf den Photodetektor. Die Messungen geben Informationen über die magnetischen Eigenschaften der untersuchten Schicht.

### 3.7 Rutherford Back Scattering (RBS)

RBS-Spektroskopie ist eine Methode zur Elementanalyse dünner Schichten auf einer Oberfläche, wobei schnelle leichte Ionen wie z.B. H oder He auf die Oberfläche geschossen und an den Kernen der Targetatome gestreut werden. Nach der Energieanalyse der unter einem festen Winkel rückgestreuten Teilchen kann man Aussagen über die Zusammensetzung der Probe sowie die Tiefenverteilung der Materialien treffen. Die RBS-Methode wurde in dieser Arbeit zur Kalibrierung der Verdampfer verwendet.

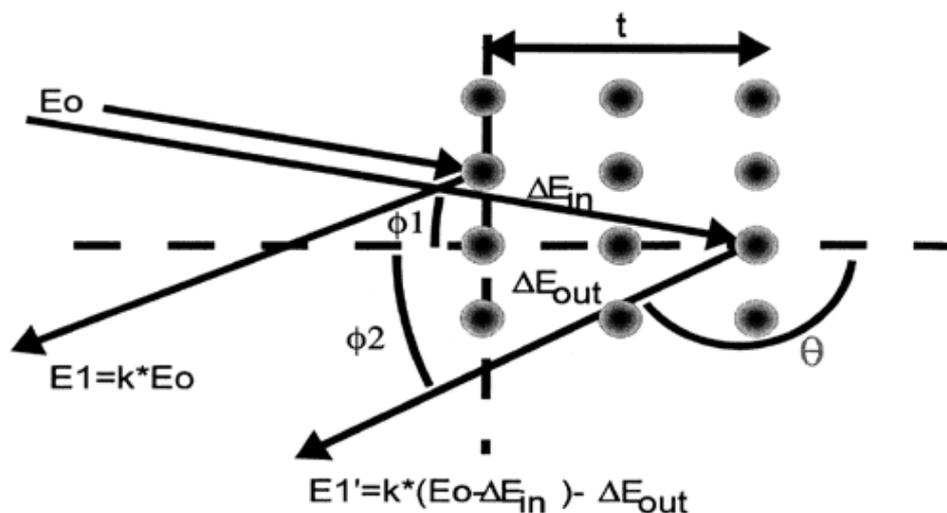


Abb. 3.12: Prinzip des RBS

Bei der elastischen Streuung der Ionen im Coulombfeld der untersuchten Atome wird ein Teil der Energie der einfallenden Ionen auf die Targetatome weitergegeben. Dieser Energieübertrag steht im Zusammenhang mit dem Massenverhältnis zwischen den Targetatomen und den Projektilen. Bei einer bekannten Anordnung von Strahl, Target und Detektor kann man die Zusammensetzung der Probe bestimmen. Aus der Analyse des Energieverlusts der Teilchen ergibt sich die Tiefenverteilung der Elemente im untersuchten Material wodurch eine tiefenaufgelöste Interpretation möglich ist. Die Wahrscheinlichkeit für die Rückstreuung der Projektil-Ionen an den Targetatomen unter einem Winkel  $\theta$  wird durch den Rutherford-Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\Omega$  beschrieben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E_0, \theta) = \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 E_0} \right) \frac{[(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2}]}{M_2 \sin^4 \theta (M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2}} \quad (3.7)$$

Dabei sind  $E_0$  die Energie der Projektil-Ionen,  $e$  die Elementarladung,  $M_1$  und  $M_2$  die Massen bzw.  $Z_1$  und  $Z_2$  Kernladungszahlen von Projektil und Targetatom. Da der Wirkungsquerschnitt für einen Stoß proportional zum Quadrat der Kernladungszahl sowie zur Kernladungszahl der Stoßpartner ist, ist RBS zur quantitativen Analyse von Nutzen.

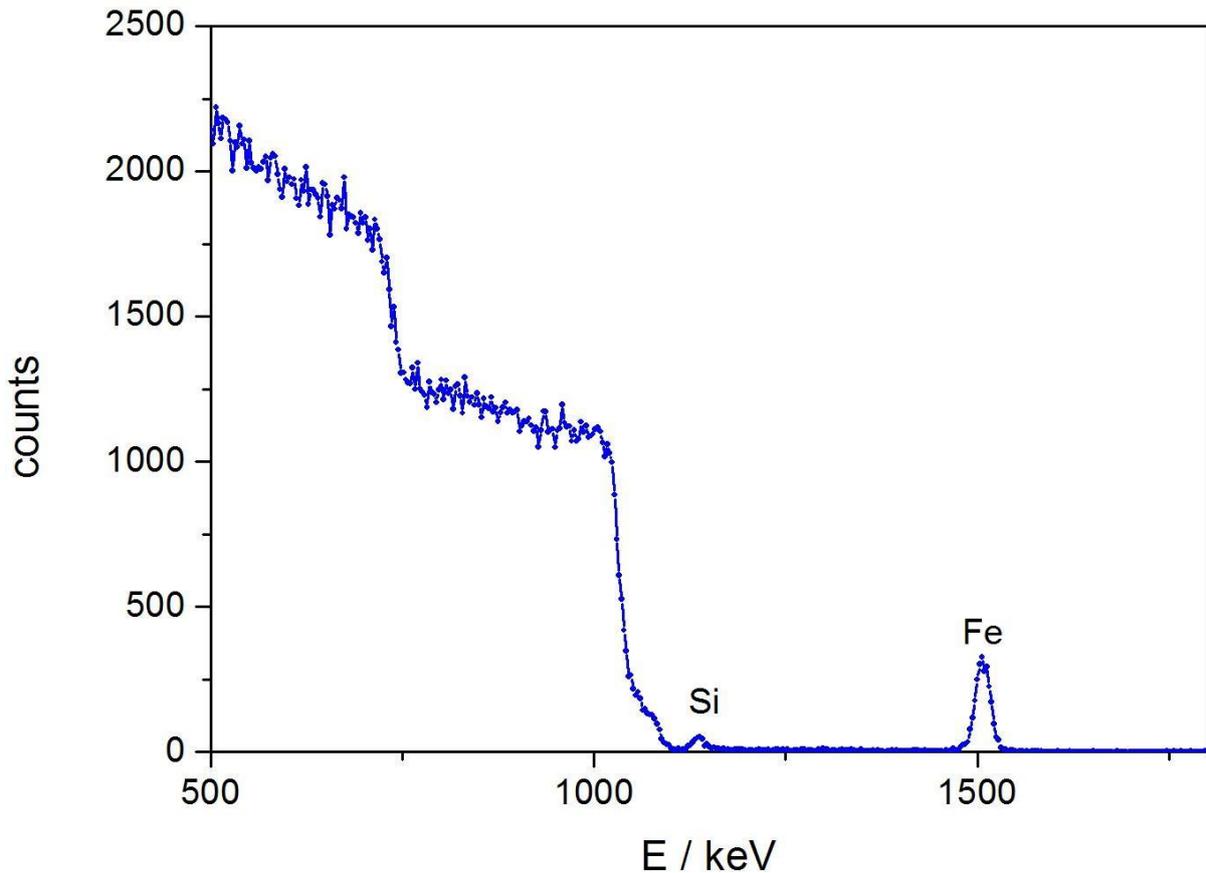


Abb. 3.13: RBS-Spektrum von Eisensilizid auf einem MgO-Substrat

Das Bild zeigt ein Energie-Spektrum einer RBS-Analyse einer MgO-Probe, die mit Eisensilizid beschichtet ist. Durch die Lage und Größe der Peaks bzw. Kanten im Energiespektrum werden die Massen und Dichten der Targetatome bestimmt. Da die Probe aus mehreren Nukliden besteht, entsteht das Spektrum als Summe einzelner RBS-Spektren der Probenmaterialien, das heißt, beim Spektrum befinden sich mehrere Kanten bzw. Peaks. Die Kanten und Peaks bei höheren Energien entsprechen der Rückstreuung an schwereren Kernen. Die Energiewerte der rechten Flanken der einzelnen Spektren zeigen die Teilchenenergien, die an den obersten Atomen des entsprechenden Probenmaterials gestreut werden. Teilchen mit geringerer Energie als der Kantenwert werden tiefer in der Probe gestreut. Aus der Energiedifferenz zum Kantenwert lässt sich die Stoßtiefe ableiten. Zur Bestimmung der Kantenenergie  $E_i$  definiert man einen kinematischen Faktor  $k$ , der das

Verhältnis der Energien der an bestimmten Probenmaterialatomen rückgestreuten Ionen ( $E_i$ ) zum einfallenden Ionenstrahl ( $E_0$ ) angibt.

$$k = \frac{E_i}{E_0} = \left[ \frac{(M_{Probe}^2 - M_{Ion}^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_{Ion} \cos \theta}{M_{Ion} + M_{Probe}} \right]^2 \quad (3.8)$$

Er hängt außer vom Streuwinkel nur vom Verhältnis der Massen der eingeschossenen Ionen und Probenatome ab, wodurch eine Massenanalyse der Probenatome möglich ist. Die Kantenenergie des entsprechenden Probenmaterials ergibt sich durch  $k_i E_0$ . Die in Abb. 3.13 bei etwa 1000keV liegende Kante gehört zu den Mg-Atomen des Substrats. Dagegen liegt die Kantenenergie der O-Atome aufgrund ihrer leichteren Kerne im Bereich von 700keV. Im Spektrum sind weiterhin die Peaks der Eisen- und Siliziumatome des Eisensilizides zu erkennen. Schwerere Eisenkerne führen zu rückgestreuten Ionen mit höherer Energie. Ihre höhere Konzentration im Vergleich mit Silizium führt zu einem höheren Peak.

Bei einer RBS-Messung wird der Detektor meistens unter einem Winkel nahe  $180^\circ$  positioniert, damit der Energieverlust bei der Streuung für eine gute Massenauflösung ausreichend groß wird.

Aufgrund elektronischer Wechselwirkung verlieren die Ionen auf dem Weg durch die Probe kontinuierlich Energie. Mit der Annahme, dass der Energieverlust der Teilchen in der Probe vor dem Stoß und beim Verlassen der Probe näherungsweise gleich ist, kann die Energie des detektierten Teilchens nach einer Streuung mit folgender Formel ermittelt werden:

$$E_{det.} = k \left[ E_0 - \int_0^{t/\cos\phi_1} \left( \frac{dE}{dx} \right) dx \right] - \int_0^{t/\cos\phi_2} \left( \frac{dE}{dx} \right) dx \quad (3.9)$$

Dabei ist  $E_0$  die Einschuss-Energie der Ionen. Das erste Integral in der eckigen Klammer beschreibt den Energieverlust bis die Ionen die Tiefe erreichen, in der sie gestreut werden.

Die Multiplikation mit dem k-Faktor und Energiedifferenz in eckigen Klammern ergibt die Energie nach der Streuung. Da die Teilchen während des Verlassens der Probe wiederum Energie verlieren, muss diese Energie auch abgezogen werden. Dabei sind  $t/\cos\phi_1$  und  $t/\cos\phi_2$  die Abstände (vor und nach dem Stoß) zwischen Oberfläche und Targetatom.  $\phi_1$  und  $\phi_2$  sind Ein- und Austrittswinkel, t ist die Eindringtiefe und der elektronische Energieverlust pro Strecke  $\left(\frac{dE}{dx}\right)$  wird durch die Bethe-Formel beschrieben.

Der zusätzliche Energieverlust gegenüber der Streuung an der Oberfläche ergibt sich zu

$$\Delta E = kE_0 - E_{det}. \quad (3.10)$$

Die Energie-Tiefen-Skala nach den Integrationen lautet

$$\Delta E = \left(\frac{dE}{dx}\right) \left(\frac{k}{\cos\phi_1} + \frac{1}{\cos\phi_2}\right) t. \quad (3.11)$$

Zur Bestimmung der Konzentration der streuenden Atome in der Probe muss die Höhe der Rückstreausubeute der an der Oberfläche gestreuten Ionen ausgewertet werden. Die Ausbeute  $H_0$  wird durch den Rutherford-Streuquerschnitt  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ , die Detektionsgeometrie, die Zahl der Streuzentren in der Probe, die Detektoreffizienz  $\varepsilon$ , die Breite des Energiefensters des Detektors  $\Delta E_{EA}$  und den elektronischen Energieverlust in der Probe  $\left(\frac{dE}{dx}\right)$  beschrieben. Die Ausbeute  $H_0$  ergibt sich zu:

$$H_0 = \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_0, \theta) \Omega Q N \Delta t \varepsilon = \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_0, \theta) \Omega Q N \frac{\Delta E_{EA}}{dE/dx} \frac{\cos\phi_2}{(1 + k\cos\phi_2)} \varepsilon \quad (3.12)$$

Dabei ist  $\Omega$  der detektierte Raumwinkel, Q die Zahl der einfallenden Teilchen, N die Atomdichte des betrachteten Materials in der Probe,  $\Delta t$  die vom Detektor erfasste

Schichtdicke und  $\phi_2$  der Austrittswinkel. Die Zusammensetzung einer binären Legierung  $A_xB_y$  kann durch folgende Beziehung ermittelt werden:

$$\frac{y}{x} = \frac{N_y}{N_x} = \frac{H_y \sigma_x(E_0, \theta)}{H_x \sigma_y(E_0, \theta)} \quad (3.13)$$

Als Beispiel Nach der Auswertung der Messergebnisse für  $Fe_3Si$  wurde das Verhältnis der Anzahl der Si-Atome zu der der Fe-Atome zu 0,347 bestimmt, was gut in der  $Fe_3Si$ -Phase liegt. Aus dem Experiment wurde die Eisendichte zu  $(10,8 \pm 0,2) \times 10^{15} \text{ at/cm}^2$  und Si-Dichte zu  $(3,75 \pm 0,32) \times 10^{15} \text{ at/cm}^2$  bestimmt. Damit kann die Kalibrierung des Eisen-Verdampfers durchgeführt werden. Zunächst muss die Flächengröße der Elementarzelle einer Monolage Eisen berechnet werden. Aus der Gitterkonstanten von Eisen,  $a_{Fe} = 2,8 \times 10^{-8} \text{ cm}$ , ergibt sich  $a_{Fe}^2 = 8,25 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ . Danach berechnet man wie viele Elementarzellen sich auf einer Fläche von  $1 \text{ cm}^2$  befinden. Man erhält  $1 \text{ cm}^2 / a_{Fe}^2 = 1,21 \times 10^{15} \text{ at}$ . Da eine Elementarzelle von bcc-Eisen in der Ebene insgesamt nur ein Eisenatom enthält, entspricht dies der Atomzahl von Eisen pro  $\text{cm}^2$  für eine Monolage. Wenn das Eisen allein aufgedampft worden wäre, würde man die Schichtdicke in Monolagen so angeben:

$$\frac{\text{Gemessene Atomzahl pro cm}^2}{\text{Atomzahl bei einer Monolage pro cm}^2} = \frac{10,8 (\pm 0,2) \times 10^{15} \text{ at/cm}^2}{1,21 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}} = 8,93 \text{ ML} \quad (3.14)$$

Da weiterhin die Frequenzänderung des Schwingquarzes beim Aufdampfprozess bekannt ist, kann somit die Kalibrierung der Fe-MBE-Quelle erfolgen.

### 3.8 Schichtdickenbestimmung durch Klein-Winkel-Röntgen-Reflektometrie

Klein-Winkel-Röntgen-Reflektometrie ist eine Oberflächenanalysemethode, über die man Informationen über die Schichtdicken des abgedeckten Materials, die Rauigkeit der Oberfläche und Grenzflächen auf der Oberfläche sowie die Dichte erhält. Das Hauptanwendungsgebiet der Röntgenreflektometrie ist die Schichtdickenbestimmung. Diese Methode beruht auf Interferenz der in der obersten Lage der Schicht und des Substrats reflektierten Strahlen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde diese Methode zur Kalibrierung der Schwingquarze, die sich während der Schichtherstellung einsetzen lässt, verwendet.

Bei dieser Methode wird monochromatische Röntgenstrahlung an Festkörperoberflächen reflektiert und gelangt zu einem Detektor. Während einer Messung erhöht sich der Röntgen-Einfallswinkel  $\theta$  durch Kippen der Probe kontinuierlich. Gleichzeitig wird der Detektor mit  $2\theta$  mitgeföhren, da Einfallswinkel und Ausfallswinkel stets gleich groß sind.

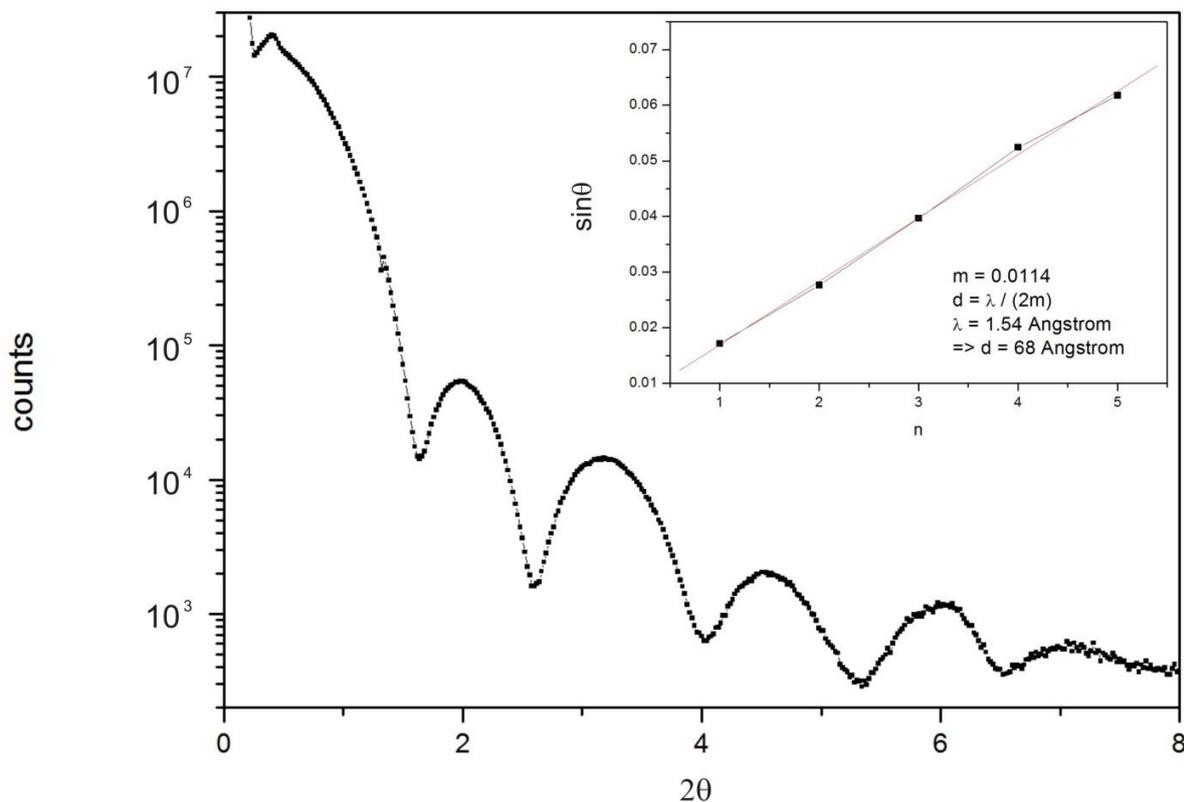


Abb. 3.14: Klein-Winkel-Röntgen-Messung an Fe/GaAs(001)

Für kleine Winkel dringt der Röntgenstrahl in die Schicht ein. Es kommt zu Reflexen an der Oberseite und an der Unterseite der Schicht. Dies führt zu winkelabhängigen Interferenzen. In Abb. 3.14 ist eine Reflektivitätsmessung einer Eisen-Schicht zu sehen. Aus der Periodizität der Maxima lässt sich die Schichtdicke bestimmen. Dazu werden die Sinuswerte der Winkel  $\theta_n$ , unter denen die Maxima auftreten, durch die verwendete Wellenlänge  $\lambda$  geteilt und über die Ordnung  $n$  der Maxima aufgetragen. Anschließend wird eine Ausgleichsgerade durch diese Punkte gelegt, aus deren Steigung die Schichtdicke des Adsorbates berechnet werden kann. Dies geschieht, indem man die Sinuswerte von  $\theta_n$  gegen die Ordnungszahl des Maximums aufträgt. Teilt man nun die Wellenlänge  $\lambda$  durch  $2m$ , wobei  $m$  die Steigung der Ausgleichsgeraden im  $\sin(\theta_n)$ - $n$ -Diagramm ist, so erhält man die Schichtdicke  $d$ .

### 3.9 Die Ionensputterquelle

An der Kammer befindet sich eine Ionensputterquelle, die zur Reinigung der Substratoberfläche von Fremdatomen sowie zum Entfernen der Oxidschicht dient. Zum Sputtern wird Argongas über ein Nadelventil in die gesamte Kammer eingelassen. Die Dosierung des Argonpartialdruckes erfolgt über dieses Nadelventil. In der Sputtergun befindet sich eine geheizte Elektrode, welche Elektronen emittiert. Diese Elektronen werden durch eine Spannung von 100 V beschleunigt und ionisieren anschließend das Argon. So können die Argonionen mit Energien zwischen 0 und 2 keV beschleunigt werden. Die Probe wird vorher mit dem Manipulator üblicherweise auf einen Sputterwinkel von  $45^\circ$  zur Sputtergun ausgerichtet. Durch den Ionenbeschuss werden die oberen Atome des Substrats abgetragen und dadurch wird die Oberfläche von Fremdatomen befreit. Nach dem Sputter-Vorgang wird die Oberfläche des Substrats amorphisiert und muss anschließend durch Heizen ausgeheilt und rekonstruiert werden.

Die Ionengetterpumpe wird während des Sputterns abgeschaltet, weil der Druck in der Kammer nach Einlassen des Argongases außerhalb des Arbeitsbereiches der Ionengetterpumpe liegt und sie nicht in der Lage ist, Edelgase zu binden.

### 3.10 Probenhalter

Damit die Probe im UHV mit Hilfe der Manipulatoren positioniert werden kann, befindet sie sich in einem Probenhalter, der in Abb. 3.15 schematisch dargestellt ist. Dieser ermöglicht außerdem die elektrische Kontaktierung der Probe.

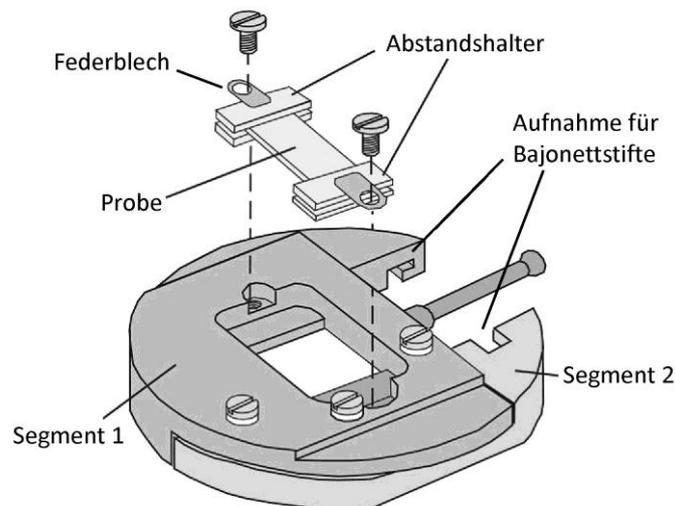


Abb. 3.15: Schematischer Aufbau des Probenhalters. Die Probe befindet sich zwischen den Abstandshaltern. Sie wird mit Hilfe zweier Federbleche im Probenhalter fixiert. Durch die Abstandshalter hat die Halbleiterprobe keinen direkten Kontakt zum Probenhaltermaterial. Somit wird eine Interdiffusion verhindert und die Probe kann durch den Stromfluss geheizt werden.

Der Probenhalter wird in zwei voneinander elektrisch isolierten Segmente aufgeteilt (s. Abb. 3.15). Bei direkter Heizung stellt die Probe die einzige elektrische Verbindung zwischen den beiden Segmenten dar. Bei indirekter Heizung wird eine der Kontaktstellen der Probe mit den Segmenten durch eine Saphir-Platte isoliert. Das Saphir-Material ist elektrisch nicht leitend und besitzt eine gute Wärmeleitfähigkeit. Eine weitere Saphir-Platte, die genauso groß wie die Probe ist, wird auf die Probe gelegt. Zuletzt wird ein Si-Streifen auf die Saphir-Platte mittels der Federbleche fixiert. Der Stromfluss erfolgt über die Bajonettstifte der Transferstange, die an jedem Segment einrasten. Der Strom fließt durch den Si-Streifen und

diese wird dadurch geheizt. Die Saphir-Platte zwischen der Probe und dem Si-Streifen leitet die Wärme an die Probe weiter. Die Temperatur der Probe wird mit Hilfe eines Infrarotpyrometers bestimmt.

Bei dem Bau der Probenhalter werden ausschließlich Titan, Molybdän und Tantal verwendet, da das Material des Probenhalters bei erforderlichen hohen Probertemperaturen (bis zu 1300 °C bei Si) einen sehr geringen Dampfdruck besitzt.

### 3.11 Probenhalter-Adapter für ZnSe

Aufgrund der geringen Verfügbarkeit und um möglichst viele Experimente durchführen zu können, wurde die (10mmx10mm) ZnSe-Probe in vier (5mmx5mm) kleine Stücke geschnitten. Aufgrund ihrer kleinen Maße war es nicht mehr möglich, die Probe mit dem herkömmlichen Probenhalter zu untersuchen. Aus diesem Grund musste ein spezieller Probenhalter für die kleineren Proben entwickelt werden, der in dem großen Probenhalter liegen kann.

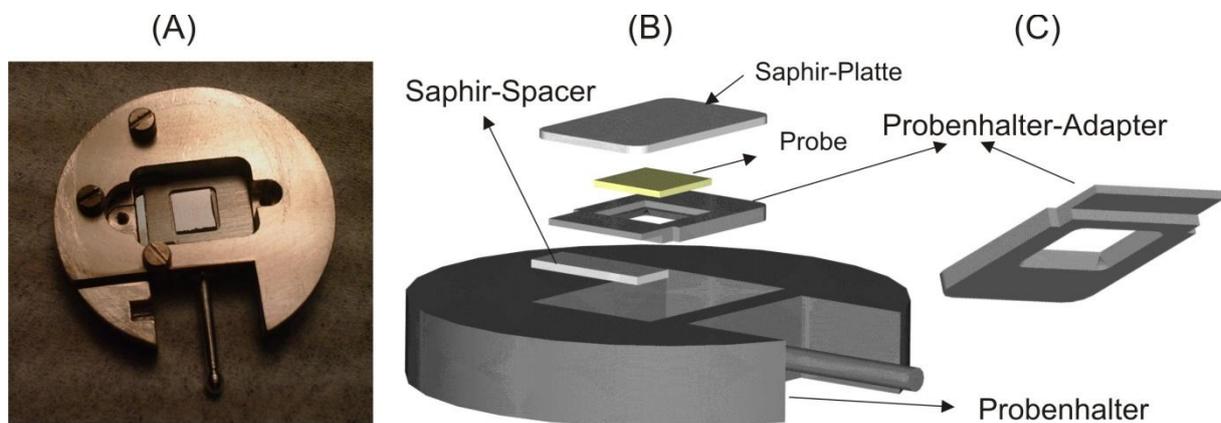


Abb. 3.16: Adaptersystem für ZnSe-Probe. A) Foto von bereits eingesetztem Adapter mit Probe im Probenhalter B) Schematische Darstellung des Adaptersystems C) Ansicht des Adapters von unten

Der neue UHV-Probenhalter wurde so hergestellt, dass er mit möglichst wenigen Bestandteilen in den Halbleiter-Probenhalter eingebaut werden kann. Da Titan schon elektrisch leitend ist, wurde ein Spacer auf einer Seite weggelassen und der zweite Spacer zur Isolierung wurde in den kleinen Probenhalter so eingebettet, dass die Probe aufgrund der Höhe des zusätzlichen Probenhalters nicht tiefer liegt als in ihrer herkömmlichen Position. Daher gibt es sowohl bei der Annäherung der STM-Spitze, als auch beim Scannen keine Probleme.

Die Probe wird in die Vertiefung des Probenhalter-Adapters hineingelegt und von oben mit dem Saphir-Plättchen fixiert, so dass eine Verschiebung während des Einbaus und des Transportierens in der Kammer ausgeschlossen werden kann. Eine indirekte Heizung ist wie bei dem herkömmlichen Probenhalter weiterhin über den Stromfluss durch einen Si-Streifen möglich.

Wie schon in Kapitel 3.10 beschrieben wurde, besteht der äußere Probenhalter, in den der ZnSe-Probenhalteradapter eingesetzt wird, aus zwei voneinander elektrisch isolierten Segmenten. Um einen Kurzschluss zwischen diesen beiden Segmenten über den ZnSe-Adapter zu vermeiden, wurde dieser so entworfen, dass er nur ein Segment kontaktiert wenn sich wie in Abb. 3.16 gezeigt wird auf dem gegenüberliegenden Segment ein Saphir-Spacer befindet. Desweiteren wurde das Fenster des Adapters, durch das die ZnSe-Probe sichtbar ist, mit Fasen versehen. Dadurch wird sichergestellt, dass sowohl beim Sputtern als auch bei MOKE-Messungen, Prozesse, die jeweils unter einem Winkel von etwa  $45^\circ$  zur Probenoberfläche stattfinden, diese vollständig getroffen werden kann.

## 4 Verwendete Materialien

---

### 4.1 GaAs(001)-Substrat

Die binäre Verbindung GaAs ist ein III-V-Halbleiter, der sowohl mit Elementen aus den Gruppen II, IV und VI des Periodensystems dotiert als auch undotiert sein kann. GaAs kristallisiert kubisch in der Zinkblendestruktur und besteht aus zwei ineinander gestellten kubisch-flächenzentrierten Gittern (s. Abb. 4.1). Ein Ga-Atom (Gruppe III) liegt auf der Basis  $(0, 0, 0)$  und das As-Atom (Gruppe V) ist um ein Viertel Raumdiagonalen verschoben auf  $(1/4, 1/4, 1/4)$ .

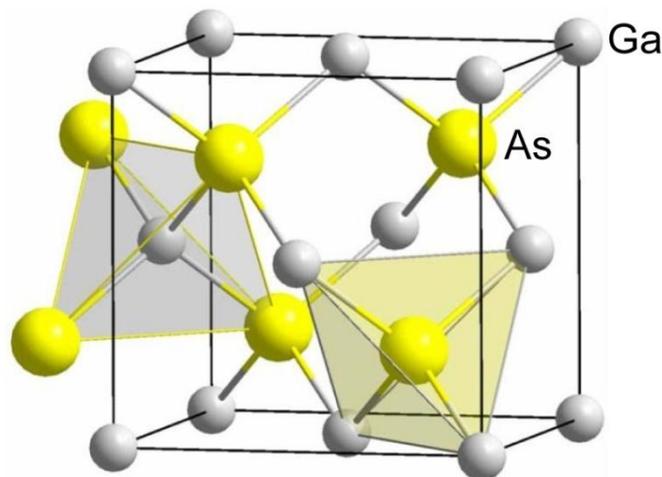


Abb. 4.1: Kristallstruktur von GaAs

Das System aus GaAs-Substrat mit darauf abgeschiedenen epitaktischen Schichten ist ein Ausgangsprodukt zur Herstellung elektronischer Bauelemente. Ein Großteil der auf GaAs basierenden Bauelemente wird auf Substraten mit der (001)-Orientierung hergestellt. Aufgrund ihrer technologischen Bedeutung ist die GaAs(001)-Oberfläche unter III-V-Materialien die am häufigsten untersuchte Oberfläche. Sie besitzt zahlreiche Rekonstruktionen, die sich in ihrer Stöchiometrie und Struktur stark unterscheiden. Die Oberflächenrekonstruktionen können As-reiche oder Ga-reiche Phasen darstellen. Diese unterschiedlichen Rekonstruktionen werden mittels MBE durch Variation der Präparationsbedingungen hergestellt.

Im einfachsten Fall erhält man eine saubere Oberfläche durch Spaltung des Materials im UHV. Diese Methode hat aber einen Nachteil. Man kann nur Oberflächen untersuchen, die tatsächlich Bruch- bzw. Spaltflächen des Materials sind. Die Spaltflächen sind die Oberflächen, die die niedrigste Energie haben. Bei den Zinkblendestrukturen sind dies die {110} orientierten Oberflächen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde bei der Probenpräparation die IBA- (engl. *ion-bombardment and annealing*) Methode verwendet, um eine saubere Substratoberfläche zu erhalten. Bei dieser Methode wird das Substrat mit schweren Edelgasionen (z.B.  $\text{Ar}^+$ ) beschossen. Auf diese Weise werden die Verunreinigungen an der Probenoberfläche entfernt und anschließend wird diese durch Tempern ausgeheilt. Durch mehrmalige Wiederholung des gesamten Prozesses werden die obersten Schichten der Oberfläche abgetragen und man erhält schließlich durch diese Präparationsmethode eine saubere Oberfläche des Substrates. Da die verschiedenen Materialien sowohl unterschiedliche Abtragungsraten als auch Verdampfungstemperaturen haben, können bei Verbindungshalbleitern nicht alle möglichen Rekonstruktionen mit dieser Methode hergestellt werden. Es können nur die Oberflächen und die entsprechenden Rekonstruktionen von Atomen untersucht werden, die eine stärkere Bindungsenergie haben. Diese starken Bindungsenergien liegen im Fall von GaAs bei den Rekonstruktionen der Ga-reichen Oberfläche.

Eine weitere Methode zur Herstellung von saubereren Probenoberflächen ist die so genannte Molekular-Strahl-Epitaxie (MBE). Dabei wird im UHV eine epitaktisch gewachsene dünne Schicht aus den Komponenten des Substratmaterials auf das kristalline Substrat aufgewachsen. Die Komponenten werden dabei in atomarer oder molekularer Form auf das Substrat geführt. Dort werden sie adsorbiert und diffundieren aus der Gas- in die feste Phase. So wächst auf dem Substrat ein Film kristallin auf. Durch Variation der Aufdampfrate der Materialien hat man bei dieser Methode einen direkten Einfluss auf die atomare Zusammensetzung der Oberfläche. Dies ist eine der wichtigsten Vorteile dieser Methode. In dieser Arbeit wurde die MBE-Methode nicht zur Probenpräparation, sondern beim Aufwachsen von Eisen- und Eisensilizid-Schichten auf das gereinigte Substrat verwendet.

### 4.1.1 Oberflächenrekonstruktionen und Oberflächengeometrie

Angenommen, dass die Atome an der Oberfläche genau so angeordnet wären wie im Volumen, dann befänden sich an der Oberfläche ungesättigte Bindungen (*dangling bonds*), die eine ungünstige Oberflächenenergie verursachen würden. Eine Möglichkeit der Minimierung der Energie dieser Bindungen besteht darin, dass zwei benachbarte Oberflächenatome ein bindendes Orbital bilden. Diese Bindungen werden Dimere genannt. Die Dimerisierung führt zur Änderung der Symmetrieeigenschaften der Oberfläche. Somit findet die Ausbildung einer Oberflächenrekonstruktion statt, die aus der Kombination von freien Atomplätzen und Dimeren besteht und die der energetisch niedrigsten Anordnung entspricht. Diese Oberflächenrekonstruktionen werden durch die Symmetrie der Oberflächeneinheit zelle beschrieben. Die Bezeichnung für eine Rekonstruktion leitet sich ab von dem Verhältnis der Periodizitätslänge der rekonstruierten Oberflächeneinheit zelle relativ zu der Gitterkonstante des Kristalls. Dabei ist die Periodizitätslänge einer rekonstruierten Elementarzelle ein vielfaches der Gitterkonstante  $a$ .

Zur Erklärung des Zusammenhangs zwischen der Periodizität einer Rekonstruktion und dem jeweiligen Element des Verbindungshalbleiters, das die Dimere bildet, ist eine schematische *bulk-truncated* GaAs (001)-Oberfläche in Abb. 4.2 dargestellt.

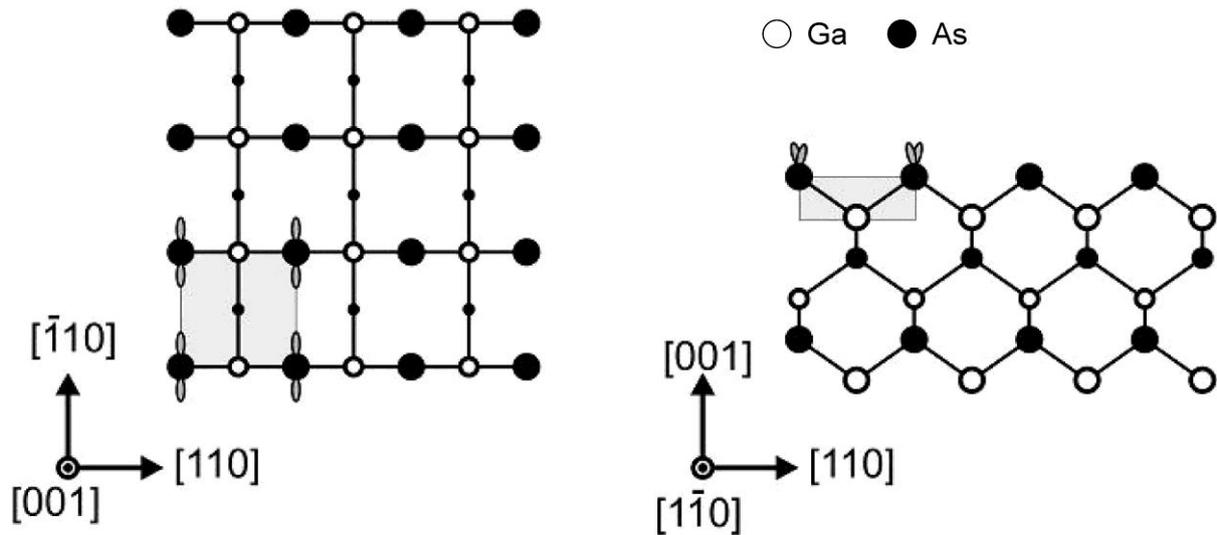


Abb. 4.2: Schematische Auf- und Seitenansicht der GaAs(001)-Oberfläche. Das grau unterlegte Quadrat zeigt die Größe der Einheitszelle, wobei As-Atome durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise bezeichnet sind.

An der Oberfläche befindet sich immer eine Lage, die nur aus einem Element des Verbindungshalbleiters besteht. In dieser Darstellung ist die oberste Lage durch As-Atome gebildet. Es sind auch die As-Atome mit zwei hängenden Bindungen erkennbar.

Infolge der kovalenten Bindung des GaAs können einige Schlussfolgerungen im Bezug auf die Periodizität einer Rekonstruktion gezogen werden. Vorausgesetzt, dass sich keine Doppellagen-Bildung an der Oberfläche befindet, die aus gleichen Elementen besteht, kann man sagen, dass die doppelten Perioden entlang  $[\bar{1}10]$  (bzw.  $[1\bar{1}0]$ ) auf As-Dimeren zurückgeht und eine Periodizität senkrecht dazu, d.h. entlang  $[110]$  bzw.  $[\bar{1}\bar{1}0]$  durch Ga-Dimere bedingt ist.

Da das Kristallwachstum der aufzuwachsenden Schicht von den Oberflächenrekonstruktionen des Substrates beeinflusst wird, werden die Rekonstruktionen in diesem Teil etwas detaillierter erklärt.

#### 4.1.1.1 Die GaAs (001) (2x4)-Rekonstruktion

Eine der wichtigsten GaAs(001)-Rekonstruktion ist die  $\beta_2(2\times 4)$ -Rekonstruktion. Diese weist eine sehr gut geordnete Oberfläche auf und ist daher für technologische Anwendungen von großer Bedeutung. Ihre Struktur wurde sowohl theoretisch als auch experimentell bestimmt. Sie ist die gängigste Wachstumsoberfläche für MBE. Diese Rekonstruktion bleibt bei Variation der Wachstumsbedingungen (z. B. Temperatur und molekulare Flüsse) stabil.

Die Abb. 4.3 zeigt das schematische Strukturmodell der  $\beta_2(2\times 4)$ -Rekonstruktion von GaAs(001).

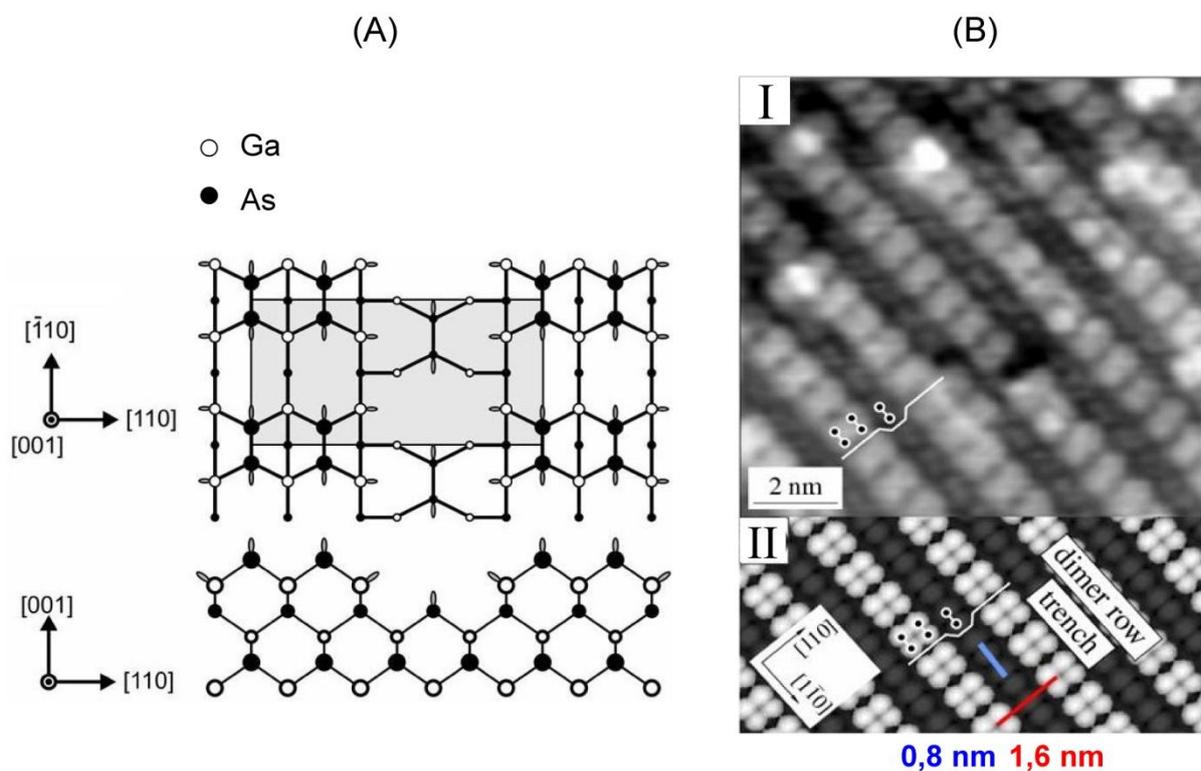


Abb. 4.3: GaAs  $\beta_2(2\times 4)$ -Rekonstruktion. A) Schematische Darstellung der  $\beta_2(2\times 4)$ -Rekonstruktion; oben: Draufsicht und unten: Seitenansicht. Die Einheitszelle ist hier grau dargestellt. B) (I) STM-Bild der gefüllten Zustände, mit  $V_{\text{Bias}} = -2,1 \text{ V}$  in einer Bildgröße von  $11 \text{ nm} \times 11 \text{ nm}$  gemessen. (II): Simuliertes STM-Bild des  $\beta_2$ -Strukturmodells [LaB01].

Ein STM-Bild dieser Struktur ist in der Abb. 4.3B veranschaulicht. Auf dem Bild sind As-Dimer-Reihen zu erkennen. Die hellen Reihen in der Richtung  $[\bar{1}\bar{1}0]$  haben einen Abstand von 1,6 nm von der jeweiligen Mitte zur Mitte gemessen und repräsentieren die 4x-Periodizität der (2x4)-Rekonstruktion. Entlang der Richtung  $[\bar{1}\bar{1}0]$  befindet sich eine andere Oszillation von grau eingezeichneten As-Dimeren zwischen den Reihen, deren Frequenz doppelt so groß ist. Folglich beträgt der Abstand zwischen den Dimeren 0,8 nm. Dies zeigt die 2x Periodizität der (2x4)-Rekonstruktion.

Hier handelt sich um ein Vielfaches des  $[110]$ - bzw.  $[\bar{1}\bar{1}0]$  -Netzebenen-Abstandes einer flächenzentrierten Oberfläche. Dieser Abstand ergibt sich zu:

$$d = \frac{\text{Gitterkonstante } a}{\sqrt{2}} \quad (4.1)$$

Die  $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion ist nicht die einzige vorgeschlagene (2x4)-Rekonstruktion. Es gibt noch weitere Modelle für GaAs(001)(2x4)-Oberflächenrekonstruktionen. Dazu gehören die  $\alpha(2 \times 4)$ ,  $\beta(2 \times 4)$  und  $\gamma(2 \times 4)$  Rekonstruktion.

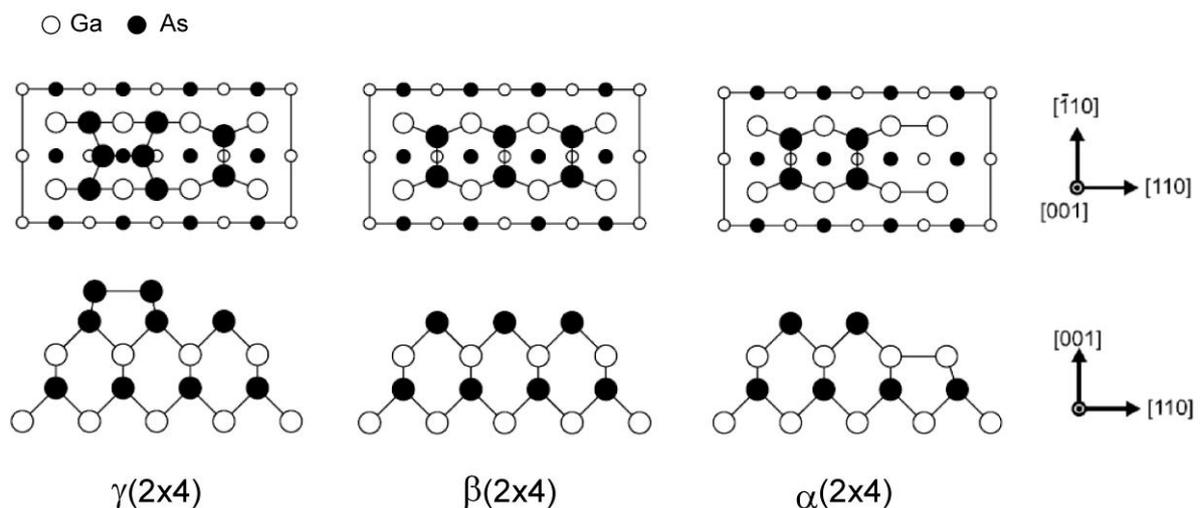


Abb. 4.4: (2x4)Rekonstruktionsmodelle

Bei steigender Proben­temperatur erfolgt der Übergang zu As-ärmeren Oberflächenstrukturen. Dies führt dazu, dass die As-Dimer-Reihen kürzer werden und sich Versetzungen in den Dimer-Reihen einstellen. Eine dieser Strukturen wurde von Farrell und Palmstrom [Far90] vorgeschlagen und nennt sich  $\alpha(2\times 2)$ -Struktur (Abb. 4.4). Sie hat entlang  $[\bar{1}10]$  angeordnete As-Dimere in der obersten Lage, wie die  $\beta 2(2\times 4)$ -Struktur. Allerdings befindet sich eine Bindung der Ga-Atome in der zweiten Lage.

Ein weiteres Strukturmodell ist das  $\beta(2\times 4)$ -Modell von Chadi et al. [Cha94] (Abb. 4.4). Dieses Modell ist mit drei As-Dimeren und einer Dimer-Fehl­stelle versehen, wobei die As-Dimere entlang der  $[\bar{1}10]$  Richtung orientiert sind und Gräben zwischen den Dimer-Reihen durch die Dimer-Fehl­stellen hervorgerufen werden. Zur Erklärung der gleichen Phase wie die  $\beta 2(2\times 4)$ , wurde dieses Modell lange Zeit als das korrekte Modell für GaAs(001)(2x4)-Oberfläche angesehen. Allerdings haben Experimente und theoretische Rechnungen erkennen lassen, dass dieses Modell in der Natur nicht existiert.

Das  $\gamma(2\times 4)$  Modell wurde von Farrell und Palmstrom für etwas As-reichere Präparationsbedingungen vorgeschlagen. Das Strukturmodell basiert auf dem  $\beta(2\times 4)$  Modell. Beim  $\gamma(2\times 4)$  Modell befindet sich nur ein zusätzliches As-Dimer auf den As-Atomen, das entlang  $[110]$  orientiert ist.

#### 4.1.1.2 Die GaAs(001)c(4x4)-Rekonstruktion

Diese Rekonstruktion ist die As-reichste Phase der GaAs(001)-Oberfläche und lässt sich dadurch präparieren, dass eine GaAs(001)(2x4)-Oberfläche im As-Strahl langsam abgekühlt wird. Der Übergang zur c(4x4) findet bei einer Proben­temperatur von etwa 475°C statt. Ein typisches LEED-Bild ist in Abb. 4.5C dargestellt. Aus den markierten Einheitszellen, die der unrekonstruierten (*bulk truncated*) und der rekonstruierten Oberfläche entsprechen, kann man erkennen, dass die rekonstruierte Einheitszelle einen Winkel von 45° mit der Einheitszelle der unrekonstruierten Struktur einschließt. Aus diesem Grund wird für die Periodizität der c(4x4)-Rekonstruktion auch die Bezeichnung  $(\sqrt{2}x\sqrt{2})/R45^\circ$  verwendet. In Abb. 4.5B ist eine mit einem STM abgebildete GaAs(001) c(4x4)-Oberfläche zu sehen. Im

Vergleich zur  $\beta$ -Phase zeigt die  $c(4\times 4)$ -Rekonstruktion eine geringe Anzahl von Defekten und zeigt eine sehr geordnete Oberflächen-Rekonstruktion. Auf dem STM-Bild sind rechteckige Strukturen zu erkennen, deren Abmessungen  $8\times 12 \text{ \AA}^2$  betragen. Diese bilden eine  $16\times 16 \text{ \AA}^2$  große Zelle, die als zentrierte Einheitszelle betrachtet wird. Im Vergleich dazu ist die primitive Einheitszelle gegenüber der zentrierten halb so groß und um  $45^\circ$  rotiert (Abb. 4.5A).

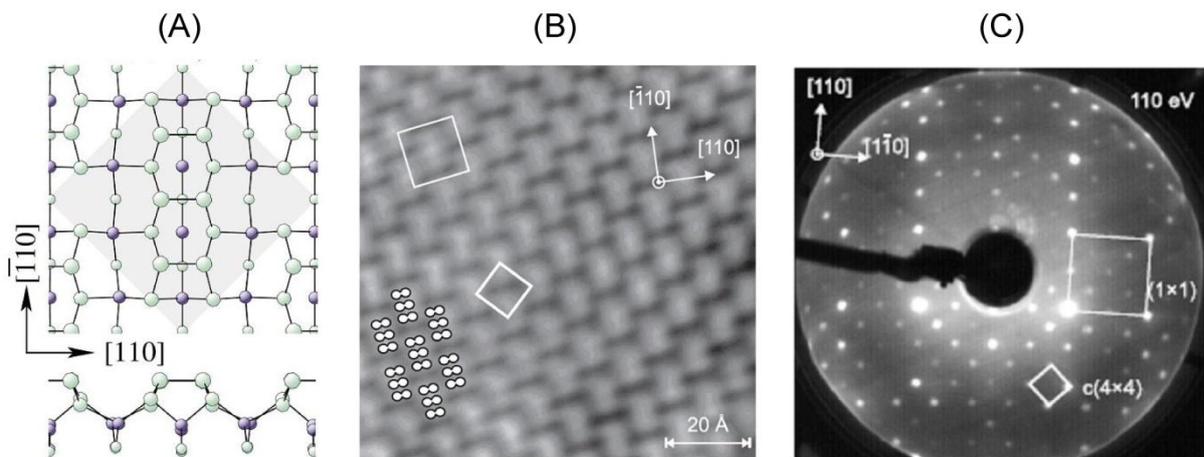


Abb. 4.5: GaAs(001)  $c(4\times 4)$ -Rekonstruktion. A) Schematische Darstellung B) STM-Bild C) LEED-Bild

In Abb. 4.5A ist ein Strukturmodell von Biegelsen et al. für GaAs(001)  $c(4\times 4)$  dargestellt. Das Modell stammt aus der unrekonstruierten (*bulk truncated*) As-terminierten Oberfläche. Zur Sättigung des *Dangling-Bonds* der darunterliegenden As-Atome werden in dem Modell (zusätzlich jeweils) Gruppen von drei As-Dimeren adsorbiert. Diese Gruppen sind als Bestandteile der Rekonstruktion auf den STM-Bildern erkennbar. Bei der  $c(4\times 4)$ -Struktur treten Dimer-Fehlstellen selten auf. Man kann davon ausgehen, dass diese Struktur eine sehr stabile Bindungskonfiguration hat.

### 4.1.1.3 GaAs(001)(2x6) und GaAs(001)(4x2)/c(8x2)

Wenn ein GaAs-Substrat im UHV ohne Zugabe von As bei einer Temperatur von etwa 500°C getempert wird, entstehen (2x6) und (4x2)-Rekonstruktionen. Aufgrund der niedrigen Desorptionstemperatur der As-Atome werden beim Heizen immer Ga-reichere Strukturen hergestellt. Bei der Herstellung Ga-reicher Strukturen besteht immer ein Risiko, dass Ga-Cluster (Ga-Droplets) auftreten, die die Probe lokal verunreinigen.

Die in dieser Arbeit untersuchten Ga-reichen Substratoberflächen zeigten häufig (4x2) und (2x6)-Rekonstruktionen. Das (4x2)-Strukturmodell erhält man nach Xue et al. [Xue95] dadurch, dass man bei dem  $\beta 2(2x4)$ -Rekonstruktionsmodell die As-Atome durch die Ga-Atome ersetzt. Somit entstehen Ga-Dimer-Reihen bzw. bei deren Fehlen kommt es zur Ausbildung von Dimer-Fehlstellen. Dagegen ergibt sich die zentrierte Struktur der c(8x2)-Rekonstruktion aus der Umordnung der (4x2)-Struktur. Das Verschieben einer Reihe von Ga-Dimeren der (4x2)-Struktur entlang [110] um die Länge einer Gitterkonstante bringt eine Struktur der doppelten Periodizität mit sich.

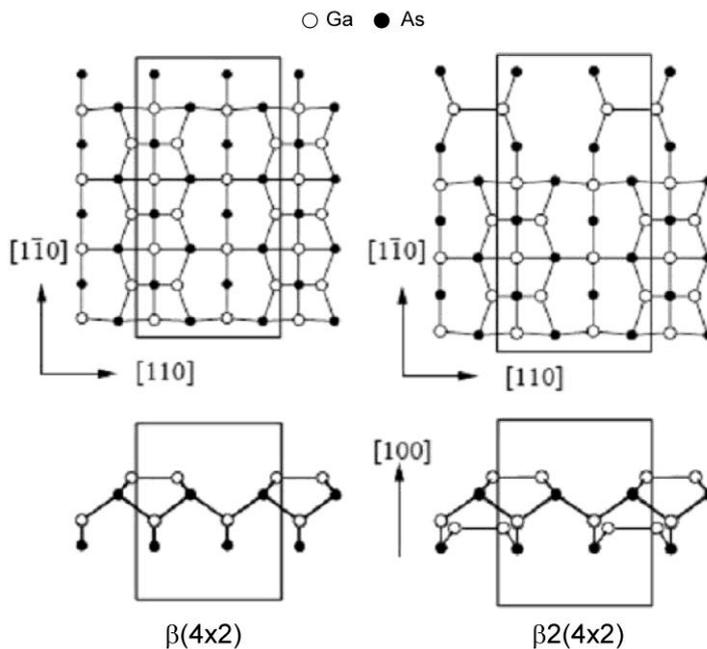


Abb. 4.6:  $\beta(4x2)$ - und  $\beta 2(4x2)$ -Rekonstruktion der GaAs(100)-Oberfläche,

Für die (4x2)-Struktur wurden zwei Modelle (Abb. 4.6) vorgeschlagen: Eine  $\beta(4x2)$  Konfiguration mit drei Ga-Dimeren pro Einheitszelle und eine  $\beta_2(4x2)$ -Rekonstruktion mit zwei Ga-Dimeren pro Einheitszelle [Xue95]. Die „Zwei-Dimer“-Struktur  $\beta_2(4x2)$  befindet sich energetisch etwas unterhalb der „Drei-Dimer“-Struktur“  $\beta(4x2)$  [Nor93], [Mol96]. Dieses Strukturmodell ist in der Abb. 4.6 zu erkennen. Nach Northrup et al. geht der energetische Unterschied zwischen beiden Oberflächen auf die elektrostatische Wechselwirkung der an der Oberfläche verteilten Ladungen zurück. Ihre Berechnungen nach der Elektronenzählregel haben ergeben, dass Elektronen von den Ga-Dimeren zu den As-Dimeren übertragen werden. Daher wurde der elektrostatische Beitrag dieser beiden Oberflächen in Form einer Coulomb-Summe berechnet. Man stellt fest, dass die  $\beta_2(2x4)$  Struktur die niedrigste Oberflächenenergie in der Ga-reichen Phase besitzt.

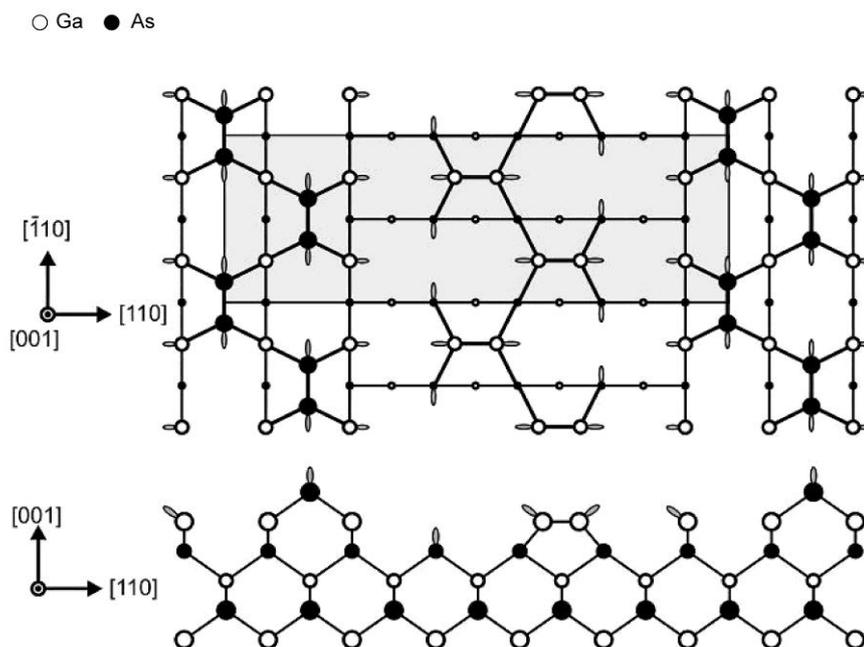


Abb. 4.7: Schematisches Strukturmodell der GaAs(001) (2x6)-Rekonstruktion nach Biegelsen et al. [Bie90]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

Für die (2x6)-Rekonstruktion ist in Abb. 4.7 ein Strukturvorschlag von Biegelsen et al. [Bie90] dargestellt. Es enthält zickzackförmigen Ketten, die aus Ga- und As-Dimeren bestehen. Die Ga-Dimere befinden sich im Bereich zwischen den Reihen und binden sich in der [110]. Dagegen sind die As-Dimere entlang der  $[\bar{1}10]$ -Richtung orientiert. In Abb. 4.8 ist ein STM-Bild der 2x6-Struktur zu sehen, auf dem die entlang der  $[\bar{1}10]$  laufenden Reihen zu erkennen sind. Der Abstand zwischen den Reihen beträgt 24 Å. Dieses deutet auf eine 6x-Periodizität hin. Weiterhin beträgt der Abstand zwischen den Strukturen innerhalb einer Reihe 8 Å [Ber00]. Da der Netzebenenabstand in [110] etwa 4 Å beträgt, kann die Anordnung dieser Struktur als eine (2x6)-Periodizität bestimmt werden.

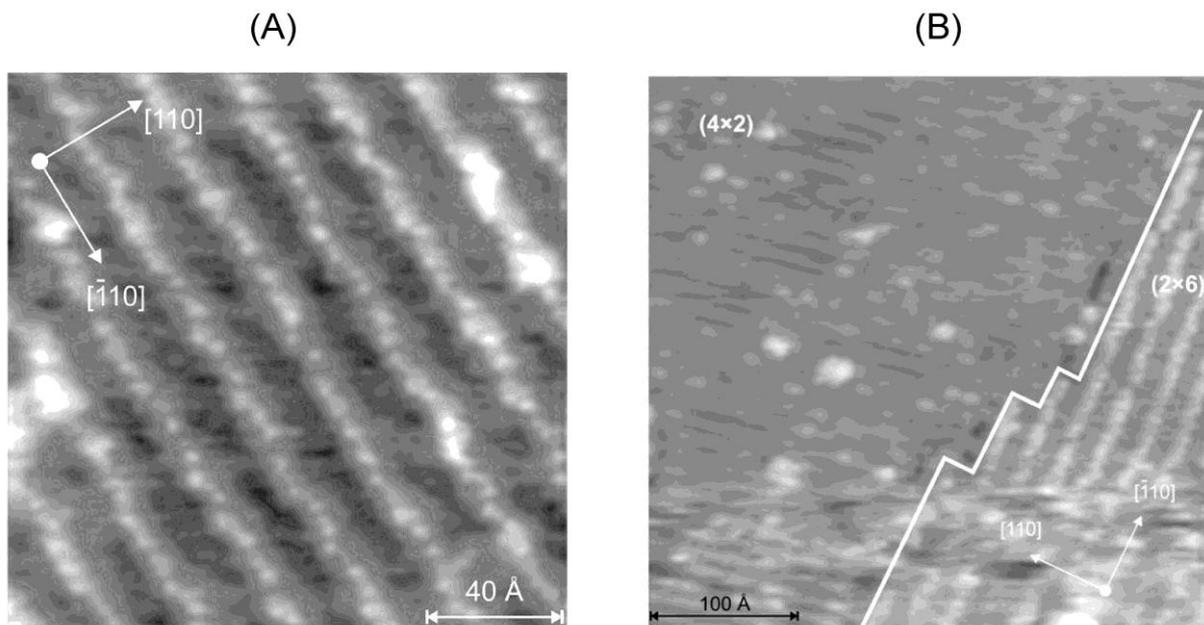


Abb. 4.8: STM-Bilder von (2x6)-und (4x2)-Rekonstruktion

Im linken oberen Teil der Abb. 4.8B sind senkrecht zu den Reihen der (2x6)-Anordnung verlaufende Reihen zu sehen. Der Abstand zwischen diesen Reihen beträgt 16 Å, was einer 4x-Periodizität entspricht. Außerdem ist eine Domänengrenze auf dem STM-Bild zu erkennen.

#### 4.1.1.4 (4x6)-Phasen

Xue et al. [Xue95] haben berichtet, dass es zwei verschiedene Arten von (4x6)-Phasen existieren. Die eine ist eine im Vergleich zur (4x2)-Phase weniger Ga-reiche (4x6)-Phase und die andere Rekonstruktion ist eine „reale (4x6)-Phase“, welche Ga-reicher ist. Die beiden (4x2) und die reale (4x6)-Phase bestehen aus einem Untergitter von zwei Ga-Dimeren und zwei Ga-Dimer-Fehlstellen an der obersten Atomlage und einem zweiten Ga-Dimer, welches auf der dritten Lage sitzt. Diese Struktur ist das Spiegelbild der As-reichen (2x4)-Phase. Der bemerkenswerte Unterschied zwischen der (4x2)- und der (4x6)-Rekonstruktion in den STM-Bildern wird mit Hilfe theoretischen Berechnungen erklärt, indem man die Ladungsübertragungsbedingungen zwischen der zweiten Lage der As-Atome und die der obersten Lage der Ga-Dimere und den Ga-Adsorbaten betrachtet.

Um die Ga-reichere (4x6)-Phase beim STM beobachten zu können, wird zuerst die (2x6)-Phase im Vakuum länger als 15 Minuten bei 400°C getempert. Abb. 4.9A stellt ein typisches STM-Bild der „realen“ (4x6)-Phase dar, die sich in der unteren rechten Ecke des Bildes befindet. In der mittleren Hälfte des Bildes ist die (2x6)-Phase zu sehen.

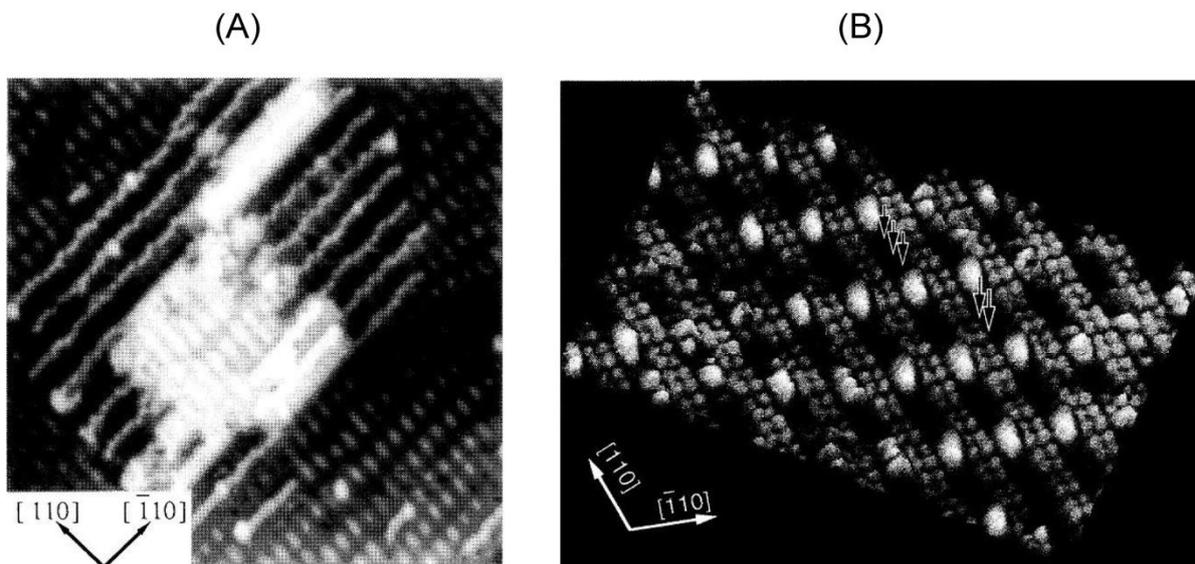


Abb. 4.9: A) Übergang von (2x6) und (4x6)Rekonstruktionen, B) (4x6)-Rekonstruktion [Xue95]

Die (4x6)-Phase ist besonders charakterisiert durch die Reihe von großen ovalen Vorsprüngen, die regelmäßig an jeder Ecke der Einheitszelle lokalisiert sind (Abb. 4.9B). Die ovalen Punkte befinden sich circa 0,1 Å höher als die Ga-Dimere und 0,9 Å niedriger als die (2x6)-As-Reihen. In die [110] Richtung laufende helle Doppelreihen werden durch die oberste Lage der Ga-Dimere gebildet (Abb. 4.9B). Die großen hellen ovalen Punkte besetzen die Mitte des Zwischenraumes der Doppelreihen.

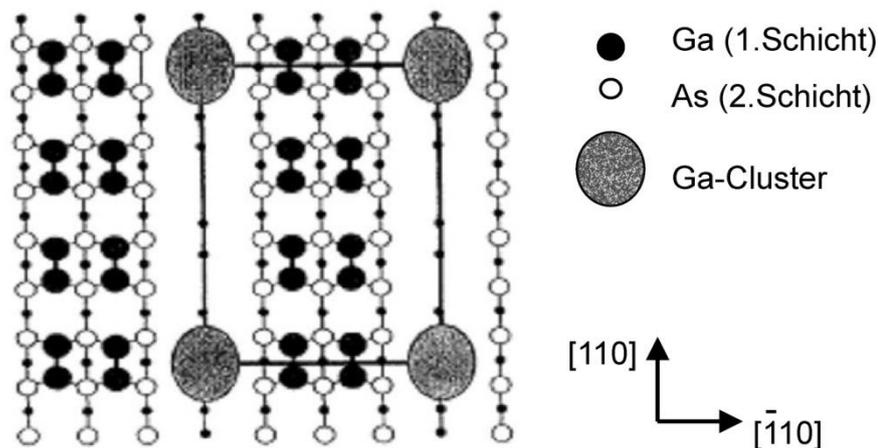


Abb.4.10: Modell für (4x6)-Rekonstruktion [Xue95]

Ein vorgeschlagenes Strukturmodell der (4x6)-rekonstruierten Oberfläche ist in Abb. 4.10 gezeigt. Bei dem Modell werden die charakteristischen großen ovalen Punkte als *Ga-Cluster* dargestellt, die die stark Ga-reiche (4x6)-Phase realisieren. Die (4x6)-Phase ist die Ga-reichere (4x2)-Phase mit zusätzlich geordnet verteilten Ga-Clustern. Die Ga-Cluster haben eine Struktur, die Ähnlichkeit mit dem As-reichen c(4x4)-Untergitter haben.

Zusammenfassend wurden einige ausgewählte Rekonstruktionen der GaAs(001)-Oberfläche vorgestellt. Diese interessante Oberfläche rekonstruiert abhängig von Präparationsmethode und -parametern auf unterschiedliche Art und Weise und zeigt von der sehr As-reichen

$c(4 \times 4)$  über die  $\beta 2(2 \times 4)$  bis hin zu der Ga-reichen  $(2 \times 6)/(4 \times 2)$  zahlreiche Oberflächenrekonstruktionen.

Die niedrige Desorptionstemperatur der As-Atome ermöglicht es, dass die Ga-reichen Strukturen durch thermische Behandlung ohne den Einsatz der „MBE“-Methode hergestellt werden können. Im Rahmen dieser Arbeit wurde zur Präparation aller Proben die Methode des zyklischen Sputterns und Heizens verwendet. Dagegen benötigt man zur Präparation der As-reichen Strukturen einen entsprechenden As-Partialdruck.

Das folgende Diagramm (Abb. 4.11) gibt einen Überblick, wie die verschiedenen Phasen in Abhängigkeit von der Substrat-Temperatur und von der Ga/As-Flussrate entstehen. Auf der linken Seite sind die As- und auf der rechten Seite die Ga-reichen Phasen dargestellt.

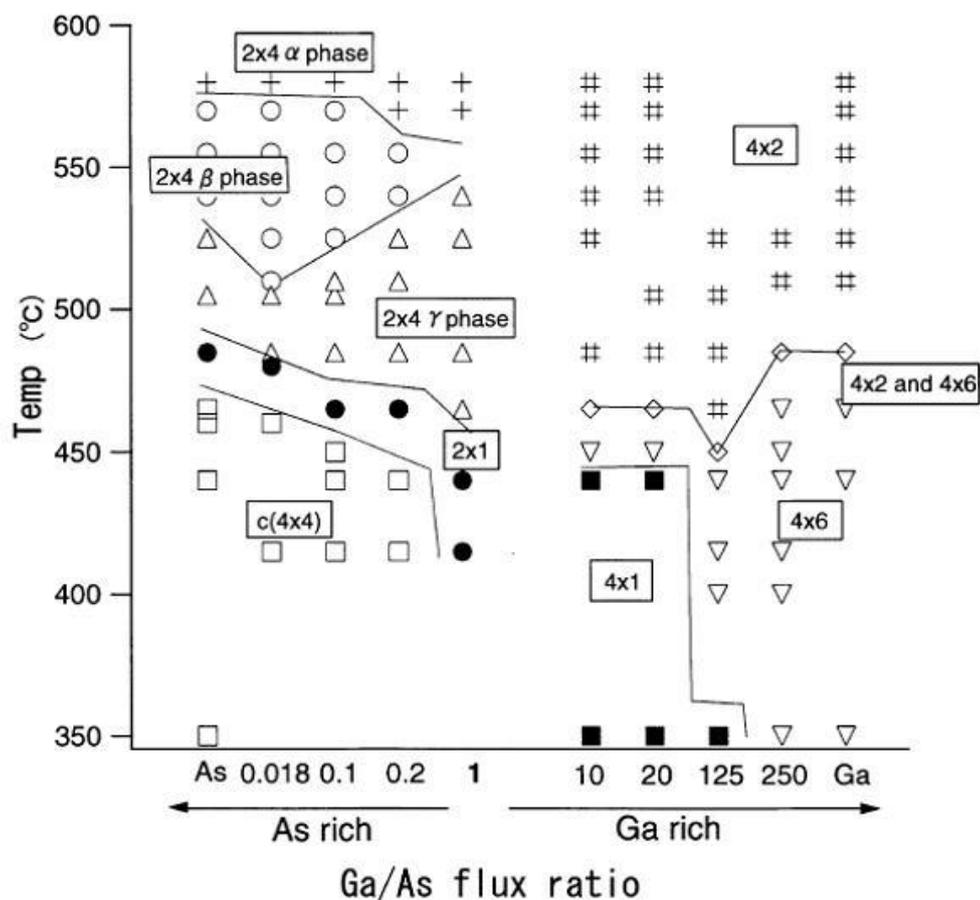


Abb. 4.11: Phasendiagramm der GaAs(001)-Rekonstruktionen [Ich01]

Diese Phasen können unter den in Abb. 4.11 gezeigten Bedingungen hergestellt werden [Ich01]. Die im Phasendiagramm aufgetragenen Rekonstruktionen wurden während des Wachstums unter verschiedenen Ga/As-Verhältnissen durch RHEED-Messungen bestimmt. Dieses Diagramm gibt einen anschaulichen Überblick über die Wachstumsbedingungen für die verschiedenen Phasen. Die Abbildung zeigt beispielsweise den Übergang von der  $\alpha$ -Phase über die  $\beta(2\times 4)$ -Phase in  $c(4\times 4)$ -Struktur, wie bereits erwähnt wurde.

## 4.2 ZnSe (001)-Substrat

Zinkselenid (ZnSe) ist ebenfalls ein binärer Halbleiterverbund, der allerdings zu der Gruppe der II-VI-Halbleiter gehört. Es kristallisiert, wie GaAs, in der Zinkblendestruktur. An der (001)-Oberfläche eines Zinkblendekristalls befinden sich *dangling bonds*, die aufgrund des Fehlens der Bindungspartner aus der obersten Lage der kovalent gebundenen Atomen herausragen. Wegen des elektrischen Feldes im Kristall, welches durch unkompenzierte Ladungen an der Oberfläche erzeugt wird, tritt ein energetisch ungünstiger Zustand auf [Pas89]. Diese Energie lässt sich durch einen Ladungstransfer und der Bildung wechselseitiger Bindungen zwischen benachbarten Oberflächenatomen absenken, wodurch eine neutrale und stabile Oberfläche gebildet wird. Die Wechselwirkung führt meistens zu einer Verschiebung der Atome aus ihrer ursprünglichen Position. Dieser Prozess führt zu einer Oberflächenrekonstruktionen und bringt eine Symmetriebrechung sowie eine Vergrößerung der Elementarzelle an der Oberfläche mit sich.

An der (001)-Oberfläche eines Zinkblendekristalls befinden sich zwei *dangling bonds* pro Atom, die aus den  $sp^3$ -Orbitalen bestehen. Dies bedeutet für den II – VI Halbleiter ZnSe, dass sich pro Zn-Atom ein ungesättigtes Orbital und pro Se-Atom drei ungesättigte Orbitale aus der Oberfläche strecken. Nach der Elektronenzählregel werden die freien Orbitale kationischer Atome entleert und die *dangling bonds* anionischer Atome gefüllt. [Pas89]

Die Rekonstruktionen der ZnSe (001)-Oberfläche lassen sich in Zn- oder Se-reiche Strukturen unterteilen. Eine Se-terminierte (001)-Oberfläche ergibt sich bei einer Übersättigung an Selen und bei gleichzeitig niedrigem Präparationstemperaturbereich. Die Desorptionsrate

von Selen erhöht sich mit zunehmender Temperatur. Dies bewirkt bei höheren Temperaturen eine Zn-terminierte Oberfläche. Im folgenden Kapitel werden die Se-reiche (2x1) und die Zn-reiche (2x2) Rekonstruktionen dargestellt.

#### 4.2.1 Die ZnSe(2x1)-Rekonstruktion

Abb. 4.11 stellt die Anordnung der Atomlagen für die (2x1) Rekonstruktion der ZnSe (001) Oberfläche dar, die bei einer Se-Stabilisierung der Oberfläche entsteht. Einer der beiden *dangling bonds* des Se-Atoms bildet ein Dimer mit einem benachbarten Se-Atom und der andere wird durch einen Ladungstransfer gefüllt. Die Oberfläche ist mit einer vollständigen Monolage von Se-Dimeren bedeckt. Sind alle *dangling bonds* abgesättigt, kommt es zur elektrischen Neutralisierung und es entsteht kein Oberflächendipol. Die (2x1)-Rekonstruktion weist eine doppelte Periodizität entlang der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung auf der Oberfläche auf. Senkrecht hierzu bleibt die einfache Periode der Gitterkonstante  $a = 5,6676 \text{ \AA}$  erhalten.

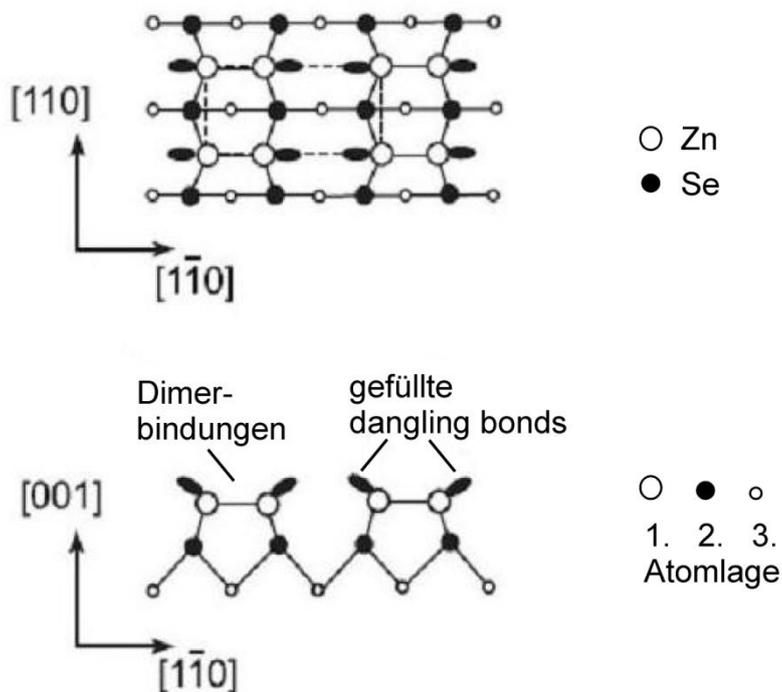


Abb. 4.12: Modell der (2x1)-Rekonstruktion der ZnSe-Oberfläche

### 4.2.2 Die $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion der ZnSe-Oberfläche

Bei der  $(2 \times 2)$ -Rekonstruktion ist die Oberfläche mit einer halben Monolage von Zn-Atomen, die nicht dimerisiert vorliegen, bedeckt (Abb. 4.13). Die Elektronen der einzelnen Zn-*dangling bonds* werden auf die *dangling bonds* der darunter liegenden Se-Atomen transferiert. Dieser Elektronentransfer bringt einen Oberflächendipol und somit einen Energiegewinn durch die Absenkung der Elektronen-Affinität mit sich [Che94]. Aufgrund der halben Bedeckung verdoppelt sich die Elementarzelle in der  $[100]$ - und der  $[010]$ -Richtung und die sogenannte  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion stellt sich ein.

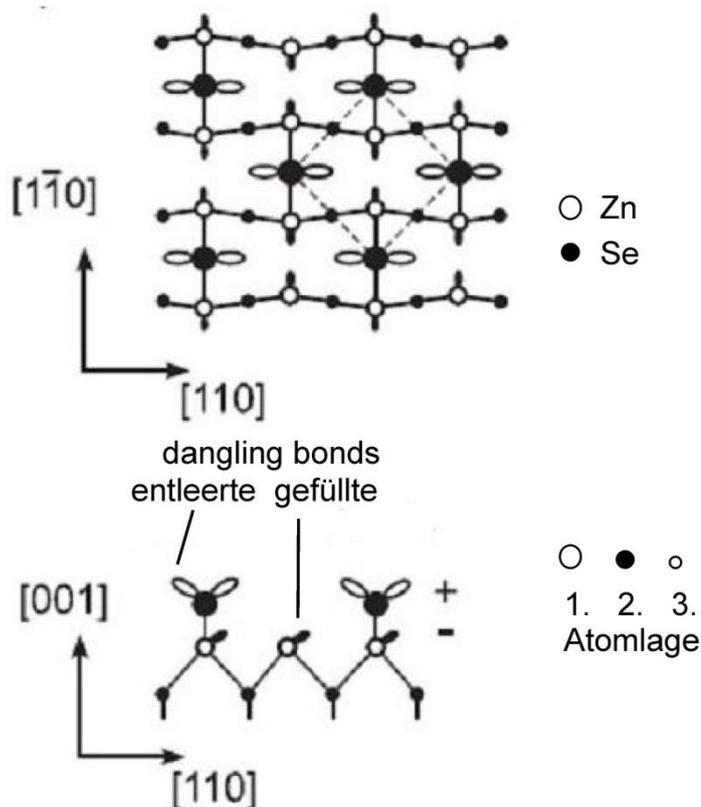


Abb. 4.13: Modell der  $(2 \times 2)$ -Rekonstruktion der ZnSe-Oberfläche

Abb. 4.14 zeigt den Zusammenhang zwischen der Elektronenaffinität (EA) und der Heiztemperatur bzw. den sich dabei entsprechend ergebenden Rekonstruktionen. Erhitzt man ein Se-terminiertes Gitter, das mit 2-3 Monolagen von überschüssigem Selen bedeckt

ist, auf eine Temperatur von 200°C, erhält man eine (1x1) Se-gesättigte Oberflächenstruktur. Die EA der ZnSe-Oberfläche nimmt mit dem Entfernen dieser Se-Abdeckungsschicht zu. Die (2x1)-Oberfläche wird bei einer Heiztemperatur von 330°C beobachtet. Diese Rekonstruktion entspricht einer vollständigen Monolage von Se-Atomen auf der obersten Schicht. Die Se-Atome bilden dabei Dimere auf der Oberfläche aus. Ab einer Heiztemperatur von 420°C erhält man eine zinkreiche c(2x2)-Struktur. Diese Rekonstruktion bleibt auch bei höheren Temperaturen relativ stabil erhalten.

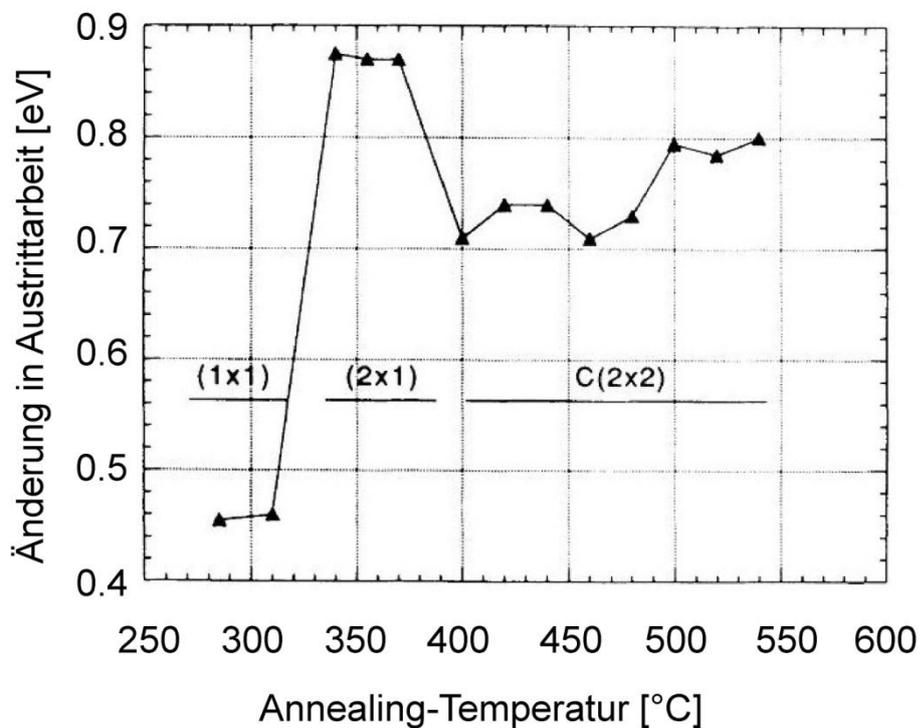


Abb. 4.14: Phasendiagramm der Rekonstruktionen der ZnSe-Oberfläche

### 4.3 Eisensilizid ( $\text{Fe}_3\text{Si}$ )

Das System  $\text{Fe}_3\text{Si}$  auf GaAs ist ein viel versprechender Kandidat für Spintronik-Anwendungen [Hon91], [Lio93], [Ion05]. Aufgrund zweier unterschiedlicher kristallographischer und magnetischer Fe-Stellen wird  $\text{Fe}_3\text{Si}$  als eine Heusler-ähnliche Legierung ( $\text{Fe}_2\text{FeSi}$ ) betrachtet [Web88]. Heusler-Legierungen mit der Legierungszusammensetzung vom Typ ( $\text{A}_2\text{BC}$ ) weisen halb-metallische Eigenschaften in ihrer *Bulk*-Phase auf, welche zu einer hohen Spinpolarisation führen.

Bei Raumtemperatur existieren drei homogene Eisensilizid-Phasen mit unterschiedlicher Stöchiometrie:  $\text{FeSi}$ ,  $\text{FeSi}_2$  und  $\text{Fe}_3\text{Si}$  (Abb. 4.15b).  $\text{Fe}_3\text{Si}$  ist die einzige gut-geordnete Phase, die von der Raumtemperatur bis zum Schmelzpunkt stabil bleibt [Han58]. Es kristallisiert in der kubischen  $\text{D0}_3$ -Struktur [Nic76], [Hin76], die aus 4 ineinander geschachtelten fcc-Gittern besteht (Abb. 4.15a). Die  $\text{D0}_3$ -Struktur überwiegt in einem ziemlich großen Bereich des Phasendiagramms unterhalb der idealen Si-Konzentration von 25% (Abb. 4.15b). Dies erfolgt durch die zufällige Besetzung der C-Seiten durch Fe und Si, die immer noch die  $\text{D0}_3$ -Symmetrie haben. Unter ca. 10% Si-Konzentration geht die  $\text{D0}_3$ -Phase in die der B2 (=CsCl)-Phase über, bei welcher die C- und B-Seiten zufällig durch Fe oder Si besetzt sind [Kub82]. Noch weiter unterhalb dieser Komposition sind alle Seiten (A, B und C) willkürlich mit Fe oder Si besetzt, was der A2 (=bcc)-Kristallstruktur entspricht (Abb. 4.15c rechts).

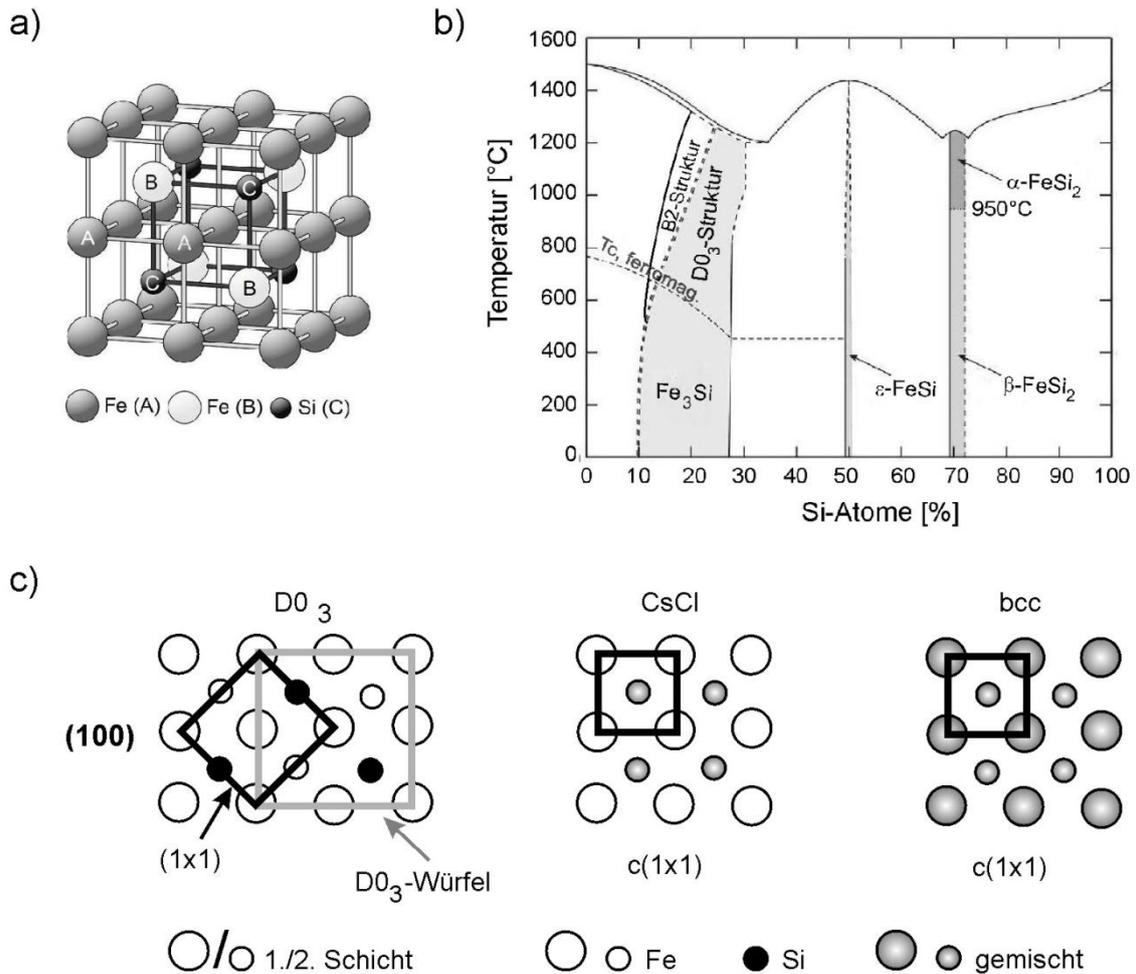


Abb. 4.15: Eisensilizid. a) Schematische Darstellung der Elementarzelle der  $D0_3$ -Gitterstruktur von  $Fe_3Si$ . A und B: Fe-Stellen, C: Position von Si (Quelle: [Sta01]). b) Phasendiagramm von Eisensiliziden (modifiziert nach [Sta01]). Die geordneten, homogenen Phasen wurden in grau dargestellt. c) atomare Strukturmodelle Modelle der einzelnen Phasen.

Die Entstehung dieser drei Phasen korreliert mit der Heiztemperatur des Substrates [Sta97 und 01]. Die reversiblen Phasenübergänge zwischen den  $D0_3$ - und CsCl-Strukturen entwickeln sich nach Tempern im Bereich von  $525^\circ C \leq T \leq 625^\circ C$  und werden ausgelöst durch eine reversible Oberflächensegregation von Silizium.

Aufgrund seiner Kristallstruktur passt sich  $\text{Fe}_3\text{Si}$  sehr gut an die Zinkblendestruktur der Halbleitersubstrat GaAs an. Die Gitterkonstante von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  beträgt  $a_{\text{Fe}_3\text{Si}} = 5,642\text{\AA}$  und die von GaAs ist  $a_{\text{GaAs}} = 5,663\text{\AA}$ . Die geringe Gitterfehlpassung zwischen  $\text{Fe}_3\text{Si}$  und GaAs ermöglicht das epitaktische Wachstum von dünnen Schichten [Her03], [Her08].  $\text{Fe}_3\text{Si}$  besitzt eine hohe Curie-Temperatur ( $567^\circ\text{C}$ ) und bleibt unter dieser Temperatur ferromagnetisch [Nak88]. Der Ferromagnetismus kann sogar in sehr dünnen  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten (1-2 ML) beobachtet werden [Lio93].

#### 4.4 Eisen

Eisen kann in drei verschiedenen Kristallstrukturen vorliegen:  $\alpha$ -Fe,  $\gamma$ -Fe und  $\varepsilon$ -Fe [Bun65]. Bei niedrigem Druck und Temperaturen unter  $1000^\circ\text{C}$  befindet sich Eisen in kubisch-raumzentrierter Kristallstruktur (bcc) und ist stark ferromagnetisch (vgl. Abb. 4.16). Die beiden anderen Phasen existieren nur unter Hochdruck- und Hochtemperaturbedingungen. Die bcc-Struktur von Eisen weist eine Gitterkonstante von  $a_{\text{Fe}} = 2.866\text{\AA}$  auf. Die Curie-Temperatur beträgt  $768^\circ\text{C}$ .

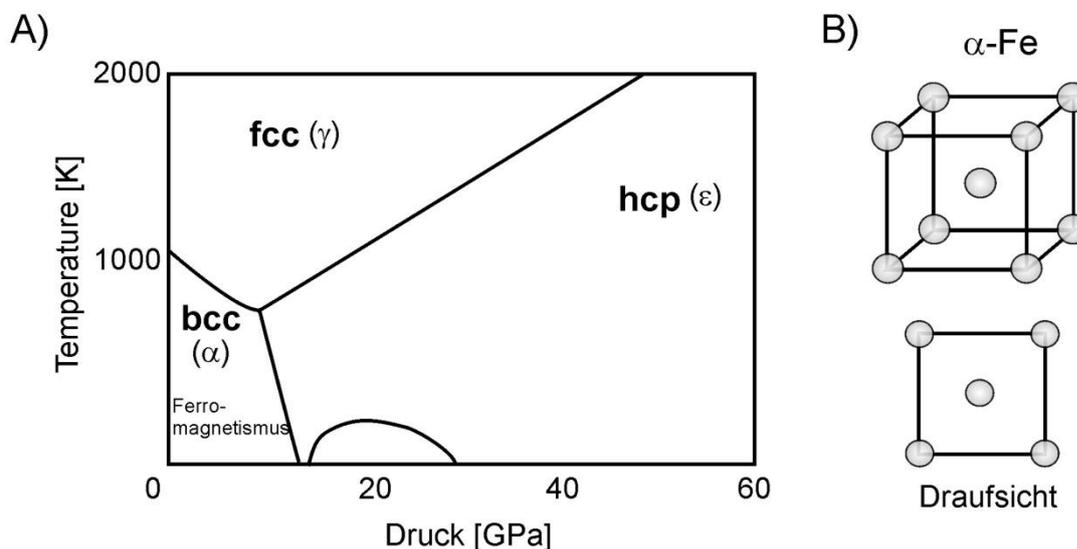


Abb. 4.16: Kristallstrukturen von Eisen. A) Das Temperatur-Druck-Phasendiagramm (modifiziert nach [Sax01]). B) bcc-Struktur von Eisen.

# 5 Ergebnisse und Auswertung

---

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der durchgeführten Adsorbti<sup>o</sup>nsexperimente beschrieben. Vor den Resultaten wird zuerst auf die Pr<sup>a</sup>paration der jeweiligen Proben eingegangen.

Im ersten Teil werden die strukturellen Eigenschaften der auf pr<sup>a</sup>pariertem GaAs(001)-Substrat aufgedampften Fe<sub>3</sub>Si-Schichten, die mittels LEED und STM untersucht wurden, dargestellt. Anschließend werden Messungen zum magnetischen Verhalten der Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001)-Probe pr<sup>a</sup>sentiert. Dazu wurde die in Kapitel 3 beschriebene Rotations-MOKE-Anordnung im UHV verwendet.

Der zweite Teil der Arbeit befasst sich mit Ergebnissen zu den strukturellen und magnetischen Untersuchungen der Fe-Schichten auf dem ZnSe(001)-Substrat.

## 5.1 Fe<sub>3</sub>Si-Schichten auf GaAs(001)

### 5.1.1 Pr<sup>a</sup>paration der reinen GaAs(001)-Oberfl<sup>a</sup>che

F<sup>u</sup>r die durchzuf<sup>u</sup>hrenden Experimente wurde ein kommerzieller einkristalliner GaAs-Wafer mit einem Durchmesser von 3“ der Firma WaferTec. verwendet. Der Wafer ist mit Silizium dotiert und einseitig poliert.

Die unpr<sup>a</sup>parierte Oberfl<sup>a</sup>che des GaAs-Kristalls zeigt mehr oder weniger willk<sup>u</sup>rl<sup>i</sup>che Eigenschaften. Aus diesem Grund sollte man durch eine geeignete Oberfl<sup>a</sup>chenpr<sup>a</sup>paration versuchen, eine definierte Rekonstruktion reproduzierbar herzustellen.

Um eine reine Kristalloberfl<sup>a</sup>che f<sup>u</sup>r die nachfolgenden Messungen zu erhalten, muss die Oberfl<sup>a</sup>che zun<sup>a</sup>chst von Fremdstoffen, wie H<sub>2</sub>O, C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>, CO<sub>x</sub> und von der so genannten „nativen“ Oxidschicht befreit werden. Dar<sup>u</sup>ber hinaus ist die Minimierung der Oberfl<sup>a</sup>chenrauigkeit erforderlich. Bei Zuf<sup>u</sup>hrung der notwendigen Aktivierungsenergie findet eine Umordnung der Atome statt. Dies f<sup>u</sup>hrt zu einer Gl<sup>a</sup>ttung der Oberfl<sup>a</sup>che, da eine glatte Oberfl<sup>a</sup>che im Vergleich zu einer rauen im allgemeinen Fall eine geringere freie Energie besitzt.

Zur Herstellung einer Probe musste zunächst ein 6x12 mm<sup>2</sup> großes Stück aus dem Wafer mit einem Diamantschneider angerissen und gebrochen werden. Danach erfolgte die mehrfache Säuberung mit 2-Propanol mit einem Reinheitsgrad von 99,99% (für die Spektroskopie). Das Substrat wird anschließend mit Spacer, Saphir-Stück und Si-Streifen, wie in Kapitel 3 beschrieben, im Probenhalter befestigt. Die Spacer werden hier zur Vermeidung einer Beeinflussung des Halbleiters durch hineindiffundierende Metallatome verwendet. Aus demselben Grund darf bei dem Herausschneiden und der Reinigung der Probe kein Metallwerkzeug benutzt werden. Für jeden Substrattyp wird die Probenherstellung mit allein dafür vorgesehenem Kunststoffwerkzeug realisiert.

Nach dem Einschleusen einer Probe in die UHV-Kammer wurde zunächst die indirekte Proben-Heizung über den Si-Streifen in Betrieb genommen. Als erster Schritt wird die GaAs-Probe in der Regel bei 300°C so lange ausgegast, bis die leichtflüchtigen Adsorbate, wie Wassermoleküle, von der Probenoberfläche bzw. vom umliegenden Metall des Probenhalters entfernt sind. Man erkennt dies daran, dass der Kammer-Druck wieder in den 10<sup>-10</sup> mbar Bereich sinkt. Da dieser Prozess etwa 12 Stunden dauert, wird er meistens über Nacht durchgeführt. Mit diesem ersten Tempervorgang vermeidet man beim noch stärkeren Heizen den Druckanstieg über 10<sup>-9</sup> mbar. Da eine vollständige Entfernung von kohlenstoffhaltigen Verunreinigungen allein durch Tempern nicht erreicht werden kann, werden in der Regel zusätzlich fünf Sputter-Tempere-Zyklen unternommen.

Beim Sputterprozess war zuerst erforderlich, dass Argon bis zu einem Druck von 10<sup>-4</sup> mbar über ein Leck-Ventil in die Kammer eingelassen wird. Die Substratoberfläche wurde für 45 min bei einer Ionenenergie von 0,5 keV mit einem Ionenstrom von etwa 3-4 µA gesputtert, wobei die Ionen unter 45° auf die Oberfläche gerichtet wurden. Außerdem wurde die Probe vor der Sputtergun so positioniert, dass der Sputterstrom seinen maximalen Wert hat, da dies gleichzeitig der richtigen Position der Probe bezüglich der Sputtergun entsprach. Nach Beendigung des Sputtervorganges wurde das Ar-Ventil geschlossen und 20 min gewartet bis das Ar-Gas komplett abgepumpt und somit ein guter Druck im 10<sup>-10</sup>mbar-Bereich wieder erreicht wurde. Beim folgenden Tempervorgang wurde die Probe auf 500°C erhitzt und für

45 min ausgeheilt. Die höhere Flüchtigkeit von As im Vergleich zu Ga bewirkt beim Heizen eine fortschreitende Anreicherung von Ga-Atomen an der Oberfläche, die durch eine Temperaturerhöhung stark beschleunigt wird. Beim Überschreiten einer Temperatur von ca. 650°C bilden sich innerhalb von wenigen Minuten Ga-Cluster, die aus mikroskopisch kleinen Tröpfchen bestehen und die Probe unbrauchbar machen.

Die Proben-Temperatur wurde mit einem Pyrometer außerhalb der Kammer gemessen. Dazu sollte zunächst eine Kalibrierungskurve von GaAs erstellt werden. Zur Kalibrierung wurde ein Ni-CrNi-Thermoelement mit der GaAs-Probe in thermischen Kontakt gebracht, wobei die Thermospannung über die Kontakte einer elektrischen Durchführung gemessen werden kann. Zur Bestimmung der Temperatur wurden die aus der Literatur bekannten Zusammenhänge zwischen Temperatur und Temperaturspannung für Ni-CrNi verwendet. Bis der gleiche Temperaturwert auf dem Pyrometer angezeigt wurde, wurde der Emissionskoeffizient der vorderen Seite der Probe positionierten Pyrometers nachgeregelt. Somit konnte die Temperatur-Emissionskurve bestimmt werden (Abb. 5.1).

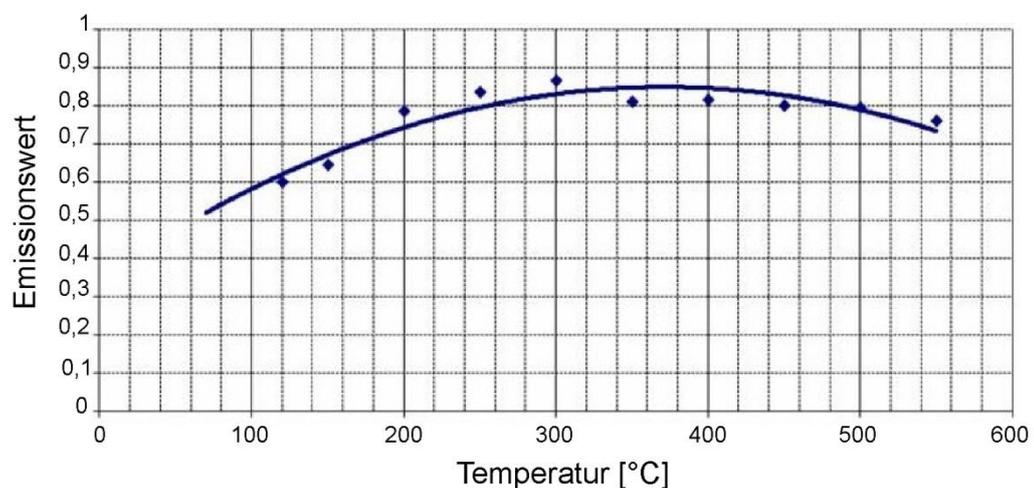


Abb. 5.1: Die Emissionskurve von GaAs. Die Emissionswerte wurden als Funktion der Temperatur aufgetragen.

Bei der Bestimmung der GaAs-Substrattemperatur wurden die Werte aus dieser Emissionskurve benutzt. Die Temperatur während des Ausheilprozesses bei niedrigen Schichtdicken von Eisensilizid wurde ebenfalls mit dieser Kurve bestimmt, da sich hier der Einfluss der deponierten Schicht vernachlässigen lässt.

### 5.1.2 Untersuchung der GaAs(001)-Substratoberfläche mittels LEED und STM

Bevor die Probe nach dem letzten Ausheilen auf dem STM-Ablageplatz abgelegt wurde, musste zwei Stunden lang gewartet werden, bis sie auf Raumtemperatur abgekühlt war, um eine thermische Drift bei der Messung zu vermeiden. Vor dem letzten Schritt der Präparation wurde die GaAs-Substratoberfläche mittels LEED untersucht, um sicher zu stellen, dass eine saubere Oberfläche in einem großen Bereich nach der Präparation vorliegt.

Ein LEED-Bild, das bei einer Primärenergie von 125 eV aufgenommen wurde, ist in Abb. 5.2 zu sehen. Das geringere Untergrundsignal und die scharfen LEED-Reflexe der Rekonstruktion deuten auf eine sehr gut geordnete Oberflächeneinheit hin. Man kann davon ausgehen, dass sich fast keine Störungen in der Gitterperiodizität der Substratoberfläche befinden und die Probe in einem großen Bereich sauber ist.

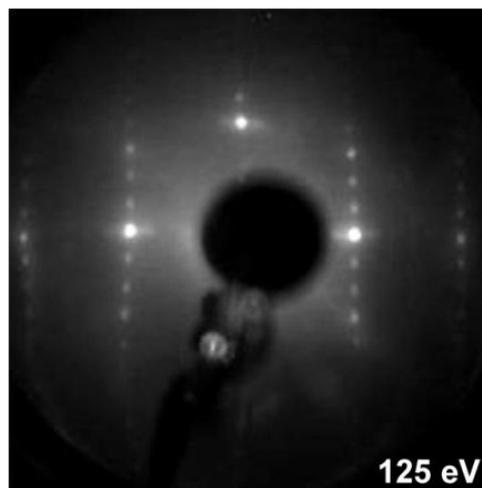


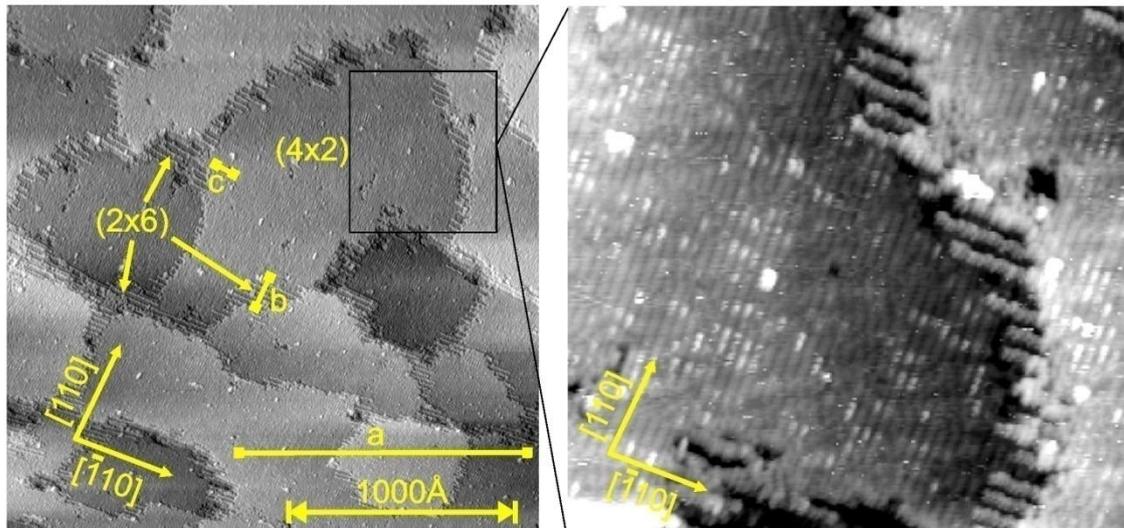
Abb. 5.2: LEED-Bild der sauberen GaAs(001)-Oberfläche nach der Präparation, gemessen bei einer Energie von 125 eV.

Nach der LEED-Messung wurde die GaAs-Substratoberfläche einer STM-Analyse unterzogen. Die Messung erfolgte bei einer Biasspannung von 2,305 V und einem Tunnelstrom von  $1,0 \times 10^{-9}$  A. Das STM-Bild der Ga-reichen reinen GaAs(001)-Oberfläche wurde bei einer Skala von  $2721,6 \text{ \AA} \times 2721,6 \text{ \AA}$ , aufgenommen (Abb. 5.3.A).

Auf dem STM-Bild ist deutlich zu erkennen, dass die Oberfläche aus glatten Terrassen besteht, deren laterale Ausdehnung bis zu mehreren hundert Nanometern beträgt. Die Stufenhöhe zwischen zwei Terrassen beträgt  $2,8 \text{ \AA}$  (vgl. Abb. 5.3.B, *Linescan a*). Dies entspricht dem Höhenunterschied zwischen der ersten und dritten atomaren Lage der Zinkblende-Struktur von GaAs. Auf den Terrassen sind Verunreinigungen erkennbar, die auf Kontaminationen und/oder Bildung von Ga-Tröpfchen beim Heizen zurückzuführen sind.

An den Stufenkanten-Bereichen sind Ga-Dimer-Reihen zu sehen, die eine (2x6)-Rekonstruktion aufweisen. Die (2x6)-Rekonstruktion ist offenbar in der Nähe von Stufenkanten energetisch bevorzugt. Die entlang  $[\bar{1}10]$  orientierten Reihen haben einen Abstand von  $24 \text{ \AA}$  zueinander, der auf eine sechsfache Periodizität der (2x6)-Rekonstruktion hindeutet. Auf dem als (4x2) markierten Bereich im STM-Bild wurde ein Abstand von etwa  $16 \text{ \AA}$  zwischen den Dimer-Reihen gemessen, welche der vierfachen Periodizität der (4x2)-Rekonstruktion entspricht (Abb. 5.3.B, *Linescan c*). Bei den gemessenen Abständen zwischen den Reihen handelt es sich um Vielfache des  $[110]$ -Netzebenen-Abstandes  $d$  des GaAs-Kristalls, der nach (4.1)  $d = a_{GaAs} / \sqrt{2} = 4 \text{ \AA}$  beträgt. Die Auflösung war nicht ausreichend, um die 2-Fach-Periodizität im Bereich (2x6) entlang  $[\bar{1}10]$  und im Bereich (4x6) entlang  $[110]$  darzustellen. Ausgehend von den Präparationsbedingungen kann man allerdings Aussagen über die 2-Fach-Periodizität treffen (siehe Abb. 4.10).

A)



B)

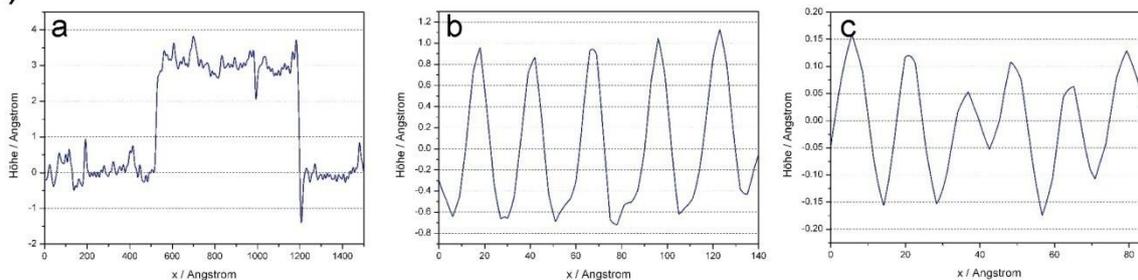


Abb. 5.3: STM-Analyse auf dem GaAs-Substrat. A) STM-Aufnahme der GaAs-Oberfläche. Die Buchstaben a, b und c auf dem Bild deuten auf die mittels *Linescan* untersuchten Bereiche hin, welche unten graphisch dargestellt sind. Der Bereich im Rechteck ist vergrößert in der rechten Abbildung dargestellt. B) *Linescan*-Profile der Terrassenhöhen bzw. atomaren Abstände der GaAs-Oberfläche entlang der Raster-Linien a, b und c (nähere Erläuterungen finden sich im Text).

### 5.1.3 Deposition von Eisensilizid

Auf der „optimal“ präparierten reinen GaAs(001)-Oberfläche erfolgte die Koevaporation von hochreinem Eisen und Silizium aus zwei unterschiedlichen Quellen. Es wurden 12 Monolagen Eisensilizid mit einer Depositionsrate von  $0,3 \text{ \AA}/\text{min}$  bei einer Substrattemperatur von  $200^\circ\text{C}$  aufgedampft. Um eine Fe/Si-Stöchiometrie von 3:1 zu erhalten, wurde der Anteil von Eisen

auf 75% der gesamten aufgedampften Materialmenge eingestellt. Hierbei findet ein kristallines Wachstum von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  in  $\text{D0}_3$ -Struktur auf dem Zinkblende-Gitter von GaAs statt, wobei das epitaktische Wachstumsverhalten  $\text{Fe}_3\text{Si}(001)\langle 110 \rangle \parallel \text{GaAs}(001)\langle 110 \rangle$  ist (siehe Abb. 5.4). Die Gitterfehlانpassung zwischen  $\text{Fe}_3\text{Si}$  und GaAs ist sehr gering und beträgt ca. 0,1% [Her08], [Kru09]. Dies ermöglicht die Präparation von epitaktischen ultradünnen  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten auf dem GaAs-Substrat. Während die Curie-Temperatur von Volumen- $\text{Fe}_3\text{Si}$  im Bereich von 800K bis 840K liegt [Nak88], [Tho09] ist  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$  nur bis etwa 748K (475°C) stabil. Im Vergleich zu reinem Eisen ist die Grenzfläche zwischen  $\text{Fe}_3\text{Si}$  und GaAs(001) thermisch stabiler [Her05].

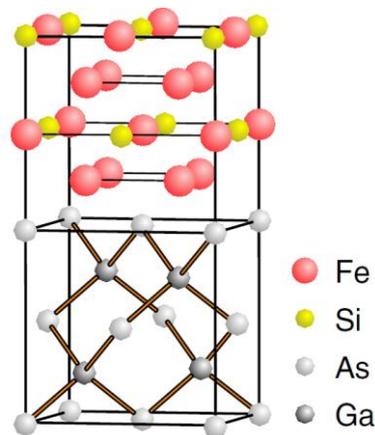


Abb. 5.4:  $\text{D0}_3$ -Gitterstruktur von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  auf  $\text{GaAs}(001)$  nach [Kag08].

Bei der Deposition von Fe wird der Materialfluss mit Hilfe der Schwingquarz-Mikrowaage bestimmt, während die Si-Menge über den Fluxmonitor des Elektronenstrahlverdampfers gemessen wird. Somit können die Dicke und die Zusammensetzung der bedampften Eisensilizid-Schicht ermittelt werden. Zur exakten Bestimmung der Zusammensetzung der Beschichtung wurde derselbe Aufdampfprozess auf einem Substrat MgO wiederholt und für diese Probe eine RBS-Messung durchgeführt. Aufgrund der leichteren Kerne des MgO-Kristalls im Vergleich zu den Eisen- und Siliziumatomen fallen die Adsorbatpeaks nicht ins

Energiekontinuum des Substrats (Abb. 3.13). Im Falle eines Substrats aus Ga und As, die beide schwerere Elemente als Fe und Si sind, fallen die Adsorbatpeaks ins Energiekontinuum des Substrats wodurch die Zusammensetzung der Adsorbatschicht nur schwierig zu bestimmen ist. Aus diesem Grund werden die Proben bei den folgenden Versuchen so eingebaut, dass eine Seite des Substrats mit einem breiteren MgO-Spacer abgedeckt wird, der als Zweitsubstrat mitbedampft wird und somit eine RBS-Messung für die derzeitige Probe ermöglicht. Die bislang mit RBS bestimmten Zusammensetzungen liegen alle in der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Phase des EisensilizidPhasendiagramms (Abb. 4.15). Die RBS-Messung für die oben genannte MgO-Probe wurde in Abb. 3.13 gezeigt. Hierzu wurde das Fe/Si Verhältnis als 3,47 bestimmt, was einem Eisen-Anteil von 77% entspricht.

Neben den RBS-Messungen wurden zur Kalibrierung des Schwingquarzes und des Fluxmonitors auch Kleinwinkel-Röntgenmessungen durchgeführt, wodurch die Schichtdicken aus der bekannten Wellenlänge der verwendeten  $\text{CuK}_\alpha$ -Strahlung bestimmt werden konnten. Setzt man die gemessene Schichtdicke des Eisens mit der beim Aufdampfen beobachteten Frequenz-Änderung des Schwingquarzes in Relation, erhält man nach der Umrechnung unter Betrachtung der Materialgitterkonstante einen Kalibrierungsfaktor mit der Einheit Monolage pro Hertz. Zur Kalibrierung des Si-Verdampfers verfolgt man statt der Frequenz-Änderung die über die Zeit integrierte Ausgangsspannung des I-V-Wandlers, der den Strom des Fluxmonitors misst. Dies geschieht mit Hilfe eines Computerprogramms (für Details siehe Kapitel 3.3.2). Die Kalibrierung erfolgt wieder nach der Schichtdickenmessung mit der Kleinwinkel-Röntgen-Methode. Das Ergebnis der Röntgenmessung ist in Abb. 3.14 im Kapitel 3 dargestellt.

### 5.1.4 STM-Untersuchungen der Eisensilizid-Schichten auf GaAs(001)

Im Folgenden werden strukturelle Untersuchungen für eine Temperserie einer 12 Monolagen dicken  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht auf GaAs(001) präsentiert. Diese erfolgten zum größten Teil mittels STM. Eine Ausnahme stellen die ex situ SEM-Messungen nach dem Tempern bei  $500^\circ\text{C}$  in Kapitel 5.1.4.3 dar.

#### 5.1.4.1 STM-Untersuchungen nach der Deposition und bei $250^\circ\text{C}$

Das erste STM-Bild nach der Deposition von Eisensilizid bei einer Substrattemperatur von  $200^\circ\text{C}$  ist in der Abbildung 5.5.A zu sehen. Das Bild wurde bei einer Größe von ( $6195\text{\AA} \times 6195\text{\AA}$ ) aufgenommen. Es zeigt eine unregelmäßige Terrassenstruktur, auf der eine diffuse Struktur erkennbar ist. Die Probe wurde anschließend bei  $250^\circ\text{C}$  für ca. eine Stunde ausgeheilt. Nach dem Ausheilen erfolgten weitere STM-Aufnahmen mit der gleichen Größenskala, die den Übergang zu lagenweisem Wachstum aufweisen (vgl. Abb. 5.5.A mit 5.5.B).

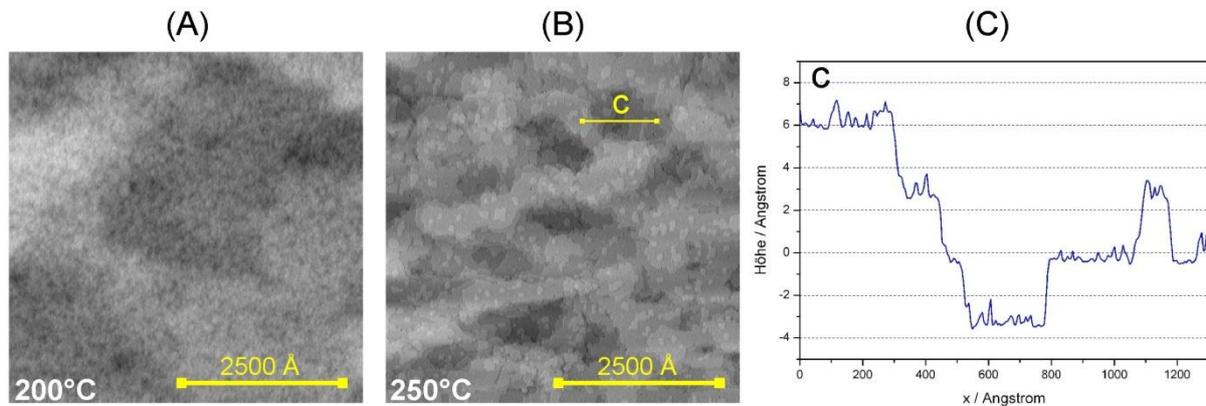


Abb. 5.5: Raster-Tunnel-Mikroskopie (STM) der Eisensilizid-Schicht auf GaAs(001). A) STM-Bild nach der Deposition von 12 Monolagen von Eisensilizid bei einer Substrattemperatur von  $200^\circ\text{C}$ . B) Aufnahme nach dem Tempern bei  $250^\circ\text{C}$ . Die gelbe Linie mit dem Buchstabe c markiert die Stelle für *Linescan*. C) Höhenprofil entlang der Raster-Linie c. Die y-Achse der *Linescan*-Kurve zeigt die Höhe der gebildeten Terrassen.

Nach dem Tempern bei 250°C sind die Terrassen auf dem STM-Bild deutlich erkennbar, deren Höhenunterschied einem ganzzahligen Vielfachen der Stufenhöhe von Fe<sub>3</sub>Si entspricht, wobei die Stufenhöhe einer Monolage 2,8 Å beträgt (vgl. 5.5C). Der *Linescan* in der Abbildung 5.5C zeigt die Terrassenhöhen an der Stelle, die auf Abb. 5.5B mit dem Buchstaben c markiert ist.

### 5.1.4.2 STM-Untersuchungen nach dem Tempern bei 300°C

Dieselbe Probe wurde weiterhin für eine Stunde bei 300°C getempert. Eine STM-Aufnahme nach dem Ausheilen wird bei einer Skala von (1207Åx1207Å) und (362Åx362Å) in der Abbildung 5.6 A-C dargestellt. Es wurde beobachtet, dass das zweite Ausheilen der Oberfläche eine beträchtliche Glättung bewirkt hat, so dass der größte Teil der Oberfläche nun aus Terrassen besteht, deren Kanten parallel zu den [110] und  $[\bar{1}10]$ -Richtungen angeordnet sind (Abb. 5.6 A und B). Die atomar glatten Terrassen haben in der obersten Lage eine Kantenlänge von bis ca. 50 Å. Aus den STM-Aufnahmen ist ersichtlich, dass es sich um nahezu lagenweises Wachstum handelt. Der Höhenunterschied zwischen den Terrassen beträgt wiederum 2,8 Å, was der Schichtdicke einer Monolage des Eisensilizid-Kristalls entspricht.

Betrachtet man dasselbe STM-Bild mit einer anderen Farbskalierung, sind die atomare Struktur und die Oberflächendefekte wie Fehlstellen, Adatome sowie mobile Defekte besser zu erkennen (Abb. 5.6C). Bei den mobilen Defekten handelt es sich um bewegliche Adatome, die zeitlich ihre Position ändern. Dabei ist die Diffusionsgeschwindigkeit der Adatome größer als die Scangeschwindigkeit, was sich in der STM-Bildern als kurze horizontale Striche bemerkbar macht.

Der durchschnittliche atomare Abstand entlang [110] und  $[\bar{1}10]$  wurde aus mehreren *Linescans* als 4,01 ( $\pm 0,16$ ) Å ermittelt. Einer der *Linescans* wurde in Abb. 5.6D repräsentativ dargestellt. Es zeigt das Profil der atomaren Abstände entlang der Raster-Linie d (vgl. Abb. 5.6C).

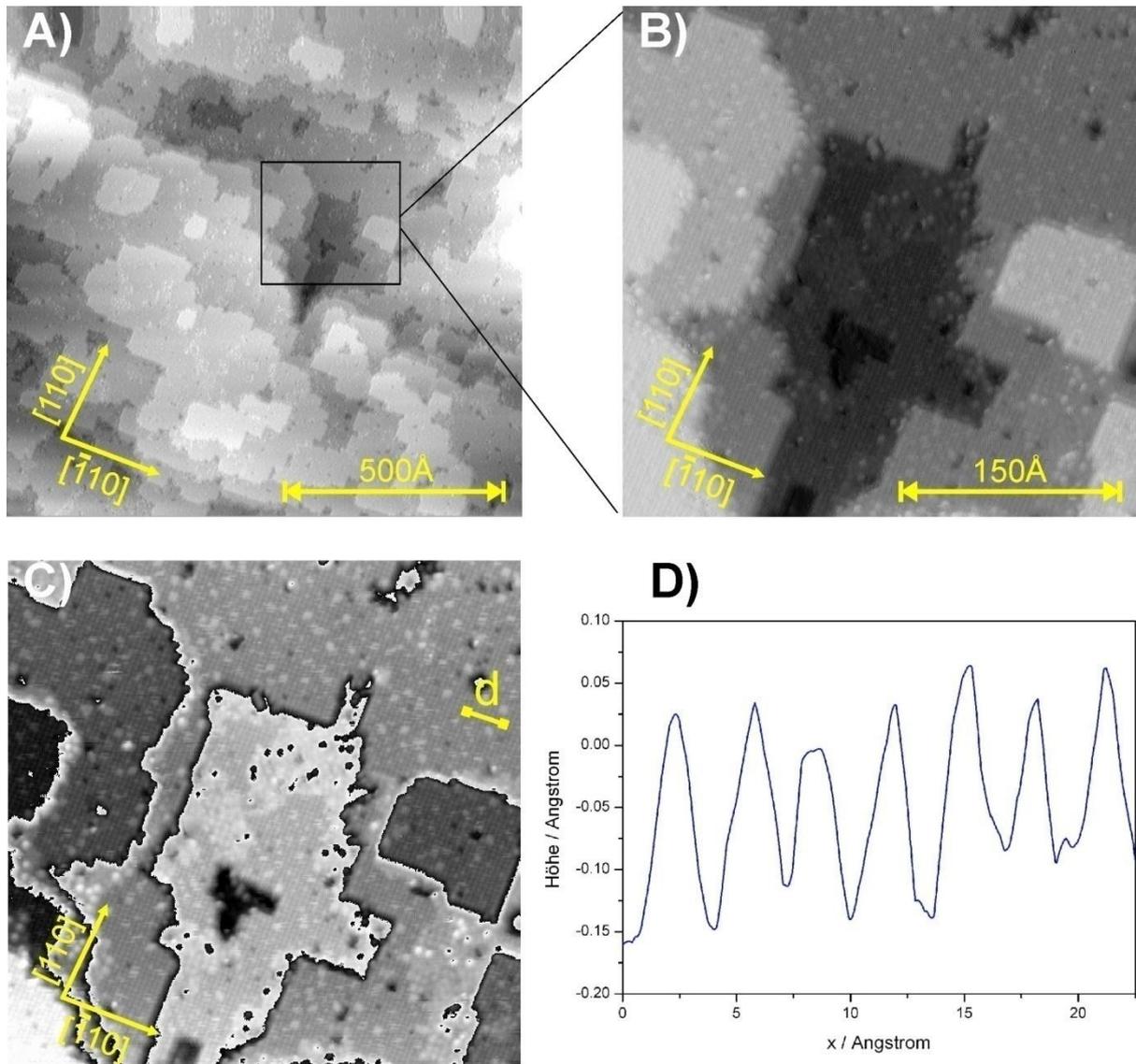


Abb. 5.6: STM-Untersuchung der Eisensilizid-Schicht auf GaAs(001): A) STM-Aufnahme nach dem Tempern bei 300°C. B) Vergrößerte Darstellung des Bereichs im Rechteck in A. C) Dasselbe Bild wie in B mit zyklischer Farbskalierung, wodurch der Kontrast auf verschiedenen Terrassen sichtbar ist. D) *Linescan*-Profile der atomaren Abstände der Eisensilizid-Oberfläche entlang der Raster-Linie d.

Bei einer Schicht, die komplett aus Eisen besteht, beträgt der laterale atomare Abstand  $2,872 \text{ \AA}$  und bei einer Lage aus reinem Si sollte die Terrassenhöhe  $1,357 \text{ \AA}$  gemessen werden. Die bei diesem Experiment gemessene Terrassenhöhe und die atomaren Abstände des Adsorbates deuten darauf hin, dass es sich hier um eine kristalline Eisensilizid-Struktur

handelt. Ein solches Topographiebild liefert keine Information über die Stöchiometrie und die chemischen Elemente der gebildeten Eisensilizid-Schicht. Anhand des durch RBS gemessenen Fe/Si-Verhältnisses von 3,47 kann man jedoch davon ausgehen, dass es sich bei dem aufgewachsenen Kristall um  $\text{Fe}_3\text{Si}$  handelt.

In der Abbildung 5.7 sind zwei unterschiedliche Gitter-Symmetrien auf dem gleichen STM-Bild abgebildet. Neben einer quadratischen Symmetrie mit einem atomaren Abstand von  $4,01 \text{ \AA}$ , wie es oben gemessen wurde, ist auch ein fcc-Gitter, welches um  $45^\circ$  zum ersten gedreht vorliegt, zu erkennen (vgl. Abb. 5.7A und B). Die Gitterkonstante des fcc-Gitters lässt sich durch  $4,01\sqrt{2} = 5,65 \text{ \AA}$  berechnen. Dieser Wert entspricht der Gitterkonstante von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  [Lio93], [Kru09].

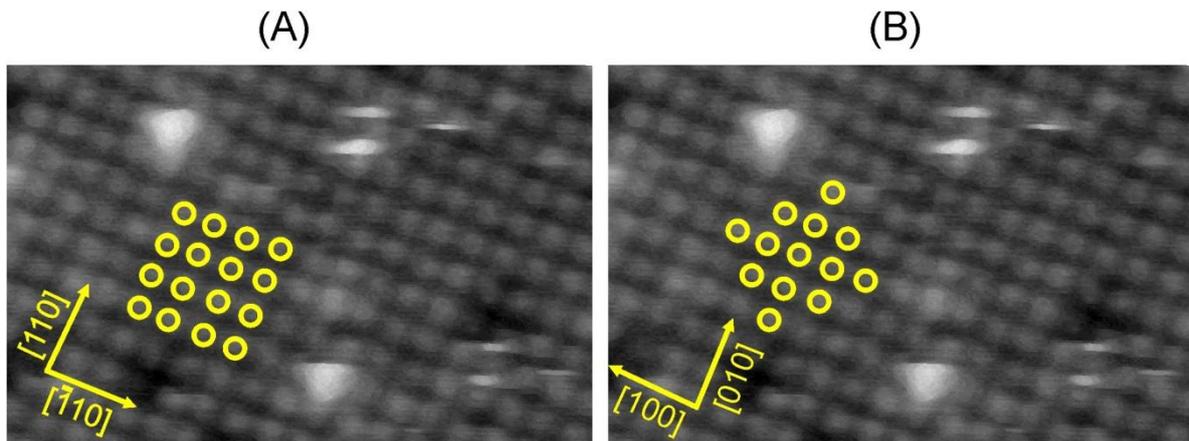


Abb. 5.7: STM-Bild von  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$ . A) Einfach-Gitter B) fcc-Gitter

In dem Fall, dass der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Kristall mit einer gemischten Schicht endet und nur eine Atomsorte mit dem STM sichtbar ist, stimmt der experimentell ermittelte Wert von  $5,65 \text{ \AA}$  für die fcc-Gitterkonstante des  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Kristalls sehr gut mit dem Literaturwert von  $5,642 \text{ \AA}$  überein [Lio93], [Kru09].

Betrachtet man das  $\text{DO}_3$ -Kristallgitter von  $\text{Fe}_3\text{Si}$ , so sieht man, dass in der [001]-Richtung eine Lage ausschließlich aus Eisen- und die andere aus Eisen- und Silizium-Atomen aufgebaut ist (vgl. Abb. 5.4). Eine ideale  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Oberfläche könnte demnach zwei mögliche Terminierungen aufweisen, entweder mit reiner Eisen- oder gemischter Fe-Si-Schicht [Bus97], [Kag08]. Es konnte experimentell gezeigt werden, dass die obere Atomschicht an der  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$ -Oberfläche sowohl Fe- als auch Si-Atomen enthält, d.h. mit einer gemischten Schicht endet. Bei der benutzten Heiz-Temperatur von  $300^\circ\text{C}$  wäre es zu erwarten, dass die ordentliche  $\text{DO}_3$ -Kristallstruktur möglichst erhalten bleibt [Sta97], [Bus97], [Jen08].

Im nächsten Schritt wurde durch Änderung der Biasspannung versucht, zwischen den Atomen der Oberfläche zu unterscheiden. Welche Atomsorte bei der STM abgebildet wird, hängt im Falle von stark ionischen Bindungen von der Polarität der angelegten Biasspannung ab. Da bei der Änderung der Polarität der Biasspannung entweder Elektronen aus der STM-Spitze in Atome der obersten Lage, die sich in unbesetzten Zuständen befinden, tunneln oder Elektronen aus besetzten Zuständen der Oberfläche die Spitze erreichen, wäre hier ein Unterschied zwischen den STM-Bildern zu erwarten, die mit einer positiven bzw. negativen Biasspannung aufgenommen wurden. Es konnte jedoch kein Unterschied in Abhängigkeit der Polarität der Biasspannung beobachtet werden. Man kann daraus schließen, dass sich keine oder wenn auch sehr schwache ionische Bindungen auf der Oberfläche befinden.

Die Abbildung 5.8 zeigt STM-Bilder desselben Areals auf der Probe, die unter zwei verschiedener Biasspannung (1.9V bzw. -1.7V) aufgenommen wurden (vgl. Abb. 5.8A und B). Die beiden Bilder wurden übereinander gelegt. Das linke Bild (Abb. 5.8A) wurde zur Hälfte vollständig transparent gemacht, um die beiden Bilder nebeneinander vergleichen zu können (Abb. 5.8C). Die mittlere Linie zeigt die Grenze zwischen den Aufnahmen. Des Weiteren wurde das obere Bild auf eine gleichmäßige Transparenz von 10 % eingestellt und in Farbe dargestellt, um die nicht überlappenden Bereiche zu verdeutlichen. Auf der Abbildung sind die nicht-überlappenden Areale in rot zu erkennen (Abb. 5.8D). Die Stellen, die nicht übereinander passen, sind möglicherweise Verunreinigungen, die eine andere elektronische Struktur besitzen.

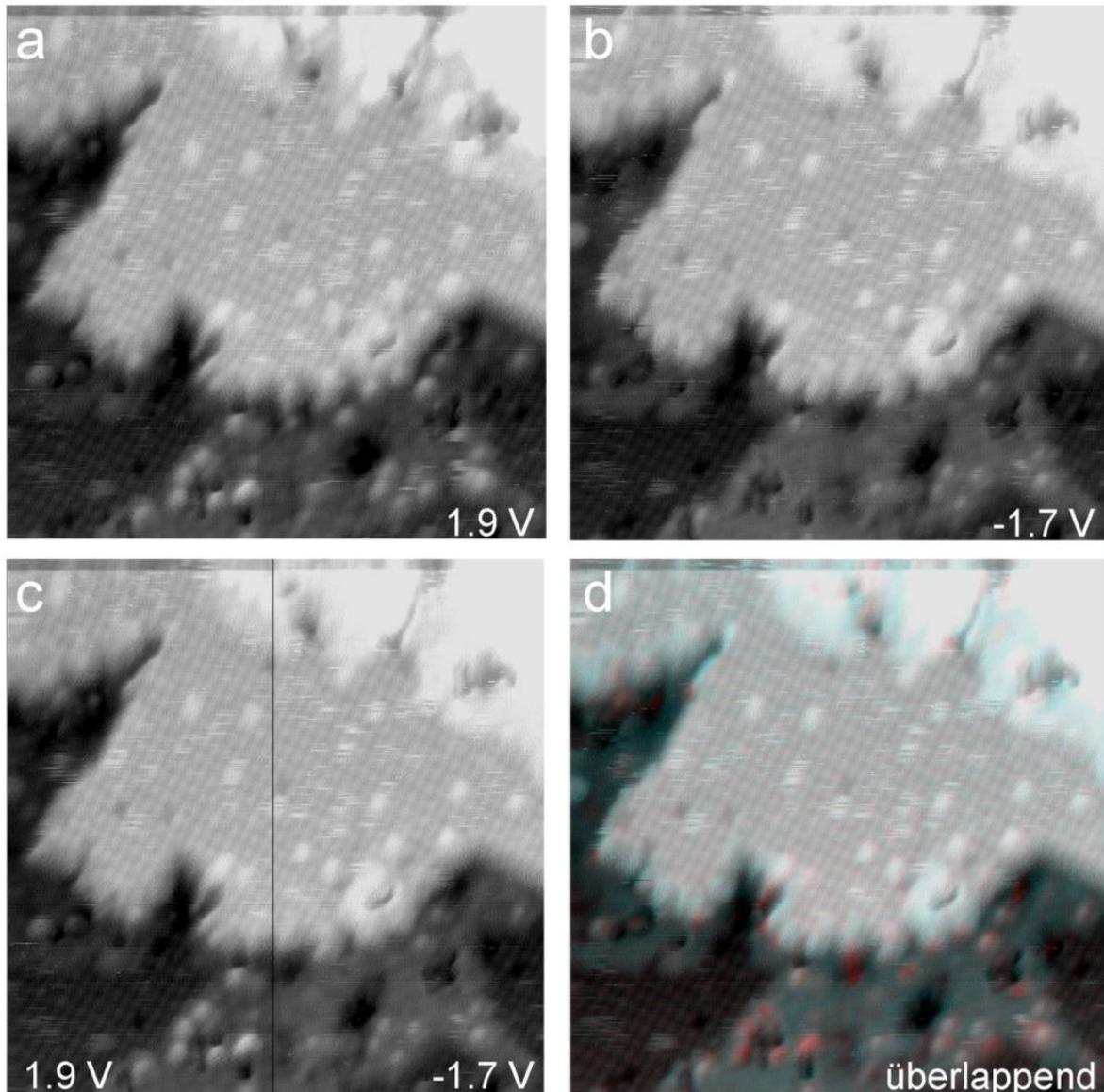


Abb. 5.8: STM-Bilder bei A) 1.9 V und B) -1.7 V Biasspannung. C) Beide STM-Bilder, dargestellt nebeneinander, indem man ein Bild bis zur Hälfte vollständig transparent gemacht wurde. D) Überlappende Darstellung der STM-Bilder. Das oberste Bild ist bei einer 10% Transparenz in Farbe dargestellt. Die nicht-überlappenden Bereiche sieht man in rot. Die Stellen, die nicht übereinander stimmen, sind wahrscheinlich Verunreinigungen, die eine andere elektronische Struktur (Anion oder Kation) besitzen.

In der Abb. 5.9 sind vier mögliche Stufenkonfigurationen einer Terrassenkante abgebildet. Die oberste gemischte Schicht endet an den Kanten entweder mit Fe oder Si. In beiden

Fällen kann die Kante der zweiten Fe-Schicht eine Stufe gegenüber der obersten Schicht bilden oder ohne eine Stufenbildung enden (vgl. Abb. 5.4). Man sieht in allen möglichen Fällen eine halbe Gitterkonstante ( $1/2a$ ) Verschiebung zwischen Atomreihen der ersten und dritten Lage (s. Abb. 5.9).

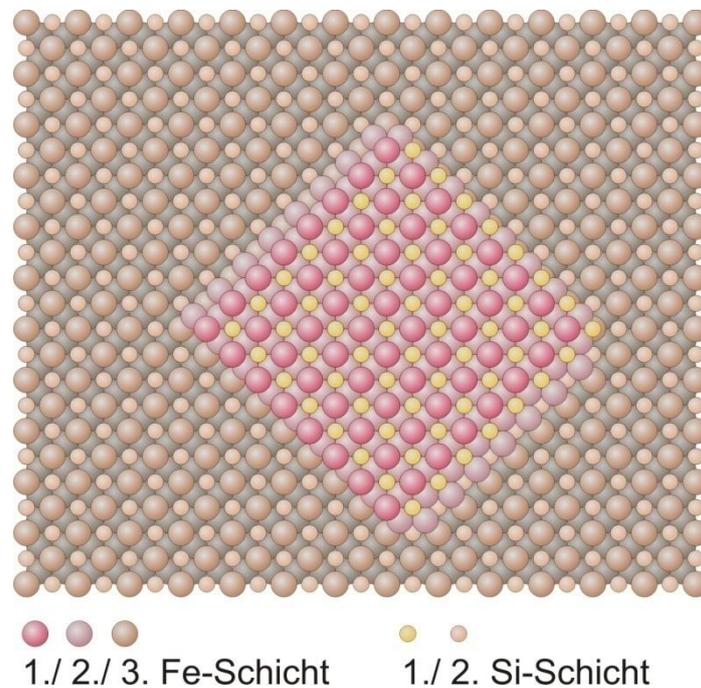


Abb. 5.9: Modell zur möglichen Stufenkonfigurationen einer Terrassenkante.

STM-Bilder wurden unter starker Vergrößerung auf mögliche Verschiebungen hin untersucht. Es wurden zuerst die Terrassen gefunden, deren Stufenhöhe einer Monolage von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  entspricht. An diesen Terrassenkantenbereichen wurde anschließend nach Verschiebungen gesucht. Man konnte jedoch nicht eindeutig eine Verschiebung von einer halben Gitterkonstante (50%), wie das Modell in der Abb. 5.9 zeigte, beobachten.

Auf den STM-Bildern sind Bereiche der Stufenkanten zu sehen, an denen die Atome eine leichte Abweichung vom normalen Verlauf der Atomreihen aufweisen (Abb. 5.10). Generell wird schon eine Tendenz zu einer halben Gitterkonstante Verschiebung zwischen den Terrassen beobachtet. Diese bleiben jedoch an den Terrassenkanten aufgrund der Streuung

nicht mehr erhalten. Einige Atome entfernt von der Kante laufen die Atomreihen wieder ordentlich, d.h. gerade auf einer Linie, wie es bei der Kristallstruktur vorgesehen ist. Daher wurden die ersten Atome, die sich in der Nähe der Kanten befinden, bei den Messungen nicht berücksichtigt.

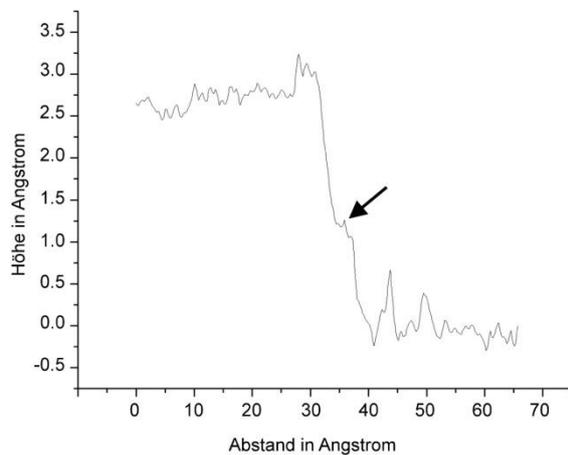
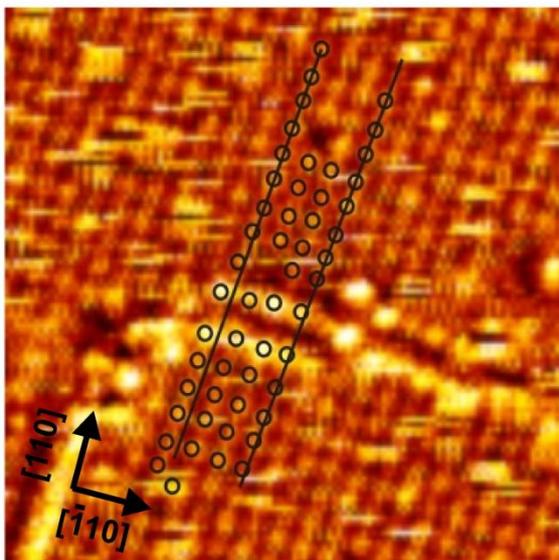
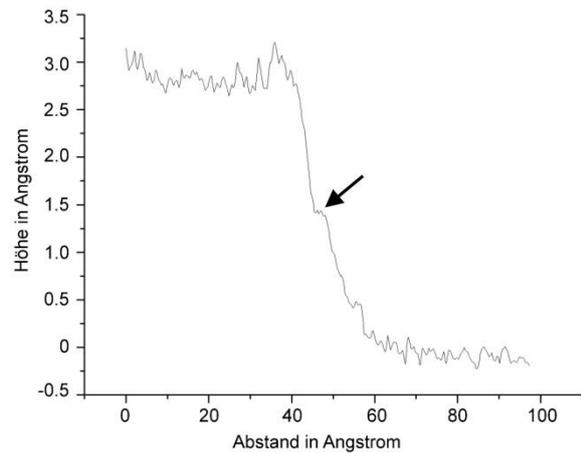
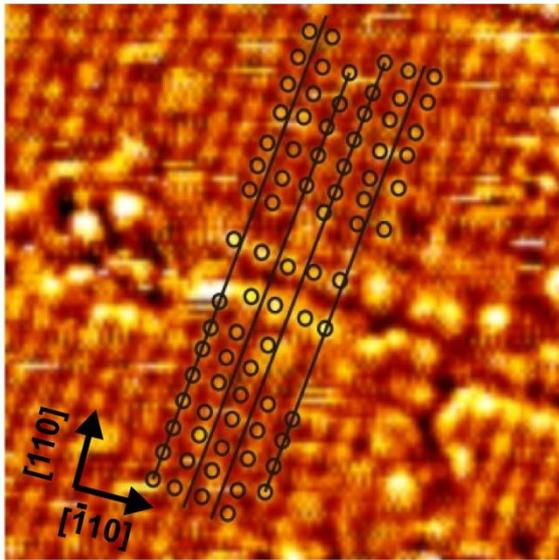


Abb. 5.10: STM-Bilder von Fe<sub>3</sub>Si auf GaAs zur Bestimmung der Verschiebung (links) und dazugehörige *Linescans* (rechts). Atome wurden als kleine Kreise dargestellt, um die Verschiebung zwischen den Terrassen in [110] zu verdeutlichen.

Es wurden auch Atomreihen, die nur eine kleine Verschiebung aufweisen, beobachtet (s. Abb. 5.10 und 5.11). Eine genauer statistische Auswertung dieser Verschiebungen erfolgt am Ende dieses Abschnitts. Zunächst sollen die *Linescans* in Abb. 5.10 diskutiert werden. Die *Linescans* zeigen bei einer Höhe einer halben Eisensilizid-Stufe ( $1/4a$ ) ein leichtes Profil (s. Abb. 5.10, Pfeile). Man kann davon ausgehen, dass die zweite Fe-Schichtkante zumindest in der  $[110]$ -Richtung eine Stufe gegenüber der obersten Schicht gebildet haben könnte.

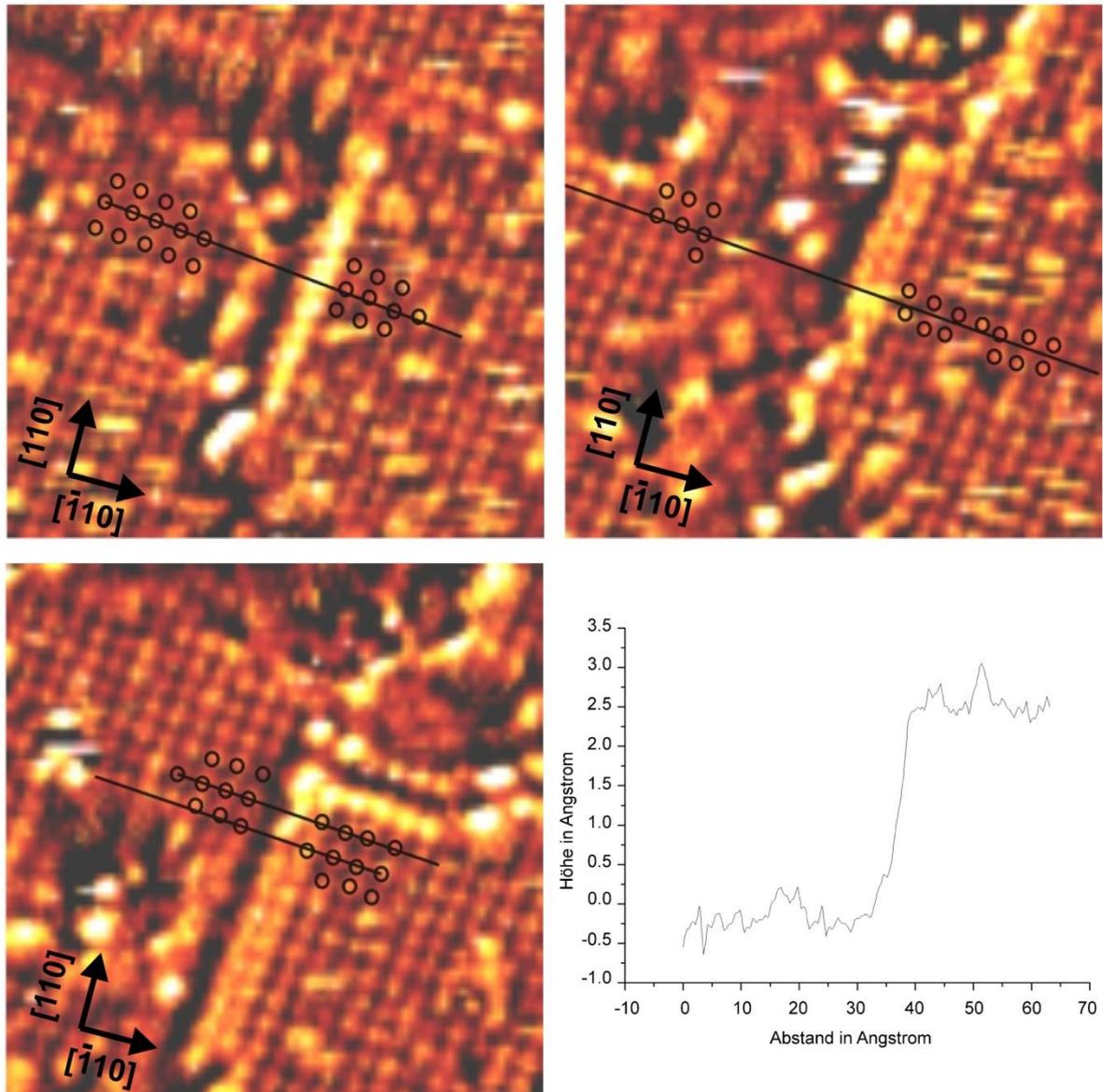


Abb. 5.11: STM-Bilder zur Darstellung der Verschiebung zwischen den Terrassen in  $[\bar{1}10]$ . Ein *Linescan* wurde beispielhaft unten rechts dargestellt.

Anhand der *Linescan*-Messungen in  $[\bar{1}10]$  wurden größere Störungen an den Kantenbereichen festgestellt. Aus diesem Grund ist es schwierig, eine ähnliche Aussage für diese Richtung zu treffen. Stellen mit wenigen Störungen, wiesen bei einer halben Stufenhöhe auch kein solches Profil auf (Abb. 5.11).

Um den Effekt der Oberflächenneigung auf die Messung der Verschiebung zwischen Atomreihen der Terrassen zu untersuchen, wurde die Neigung mit Hilfe der *Linescan*-Funktion des STM-Programms bestimmt (Abb. 5.12B).

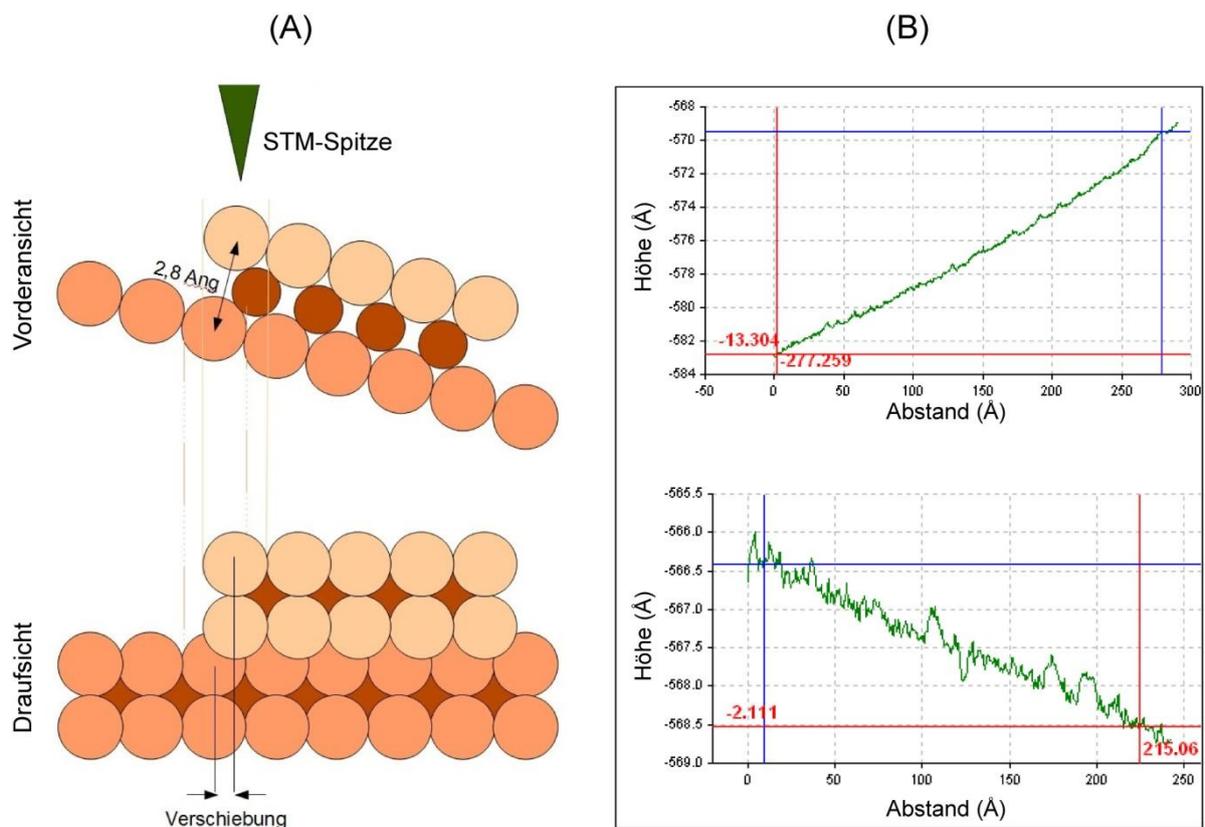


Abb. 5.12: Bestimmung der Neigung der Oberfläche. A) Modell zur Darstellung der scheinbaren Verschiebung bedingt durch die Neigung der Oberfläche. B) *Linescans* zur Messung der Oberflächenneigung in  $[110]$  und  $[\bar{1}10]$ .

Wie das Modell in der Abbildung 5.12A verdeutlicht, könnte eine große Neigung der Oberfläche eine „Schein“-Verschiebung auf dem STM-Bild zur Folge haben. Anhand der

Messungen konnte eine Neigung von  $2,75^\circ$  in  $[110]$  und von  $0,56^\circ$  in  $[\bar{1}10]$  ermittelt werden. Dies führt für eine Terrassenhöhe von  $2,8 \text{ \AA}$  zu einer Verschiebung von  $0,13 \text{ \AA}$  (3,25%) und  $0,03 \text{ \AA}$  (0,75%). Es ergibt sich daraus, dass die Neigung der Oberfläche keine signifikante Auswirkung auf die Verschiebung zwischen den Atomreihen der Terrassen hat.

Zum Schluss wurden die Verschiebungen an mehr als 10 Kanten gemessen. Jeweils ca. 10 Messungen wurden für beide Richtungen durchgeführt und die Ergebnisse unten graphisch dargestellt (Abb. 5.13).

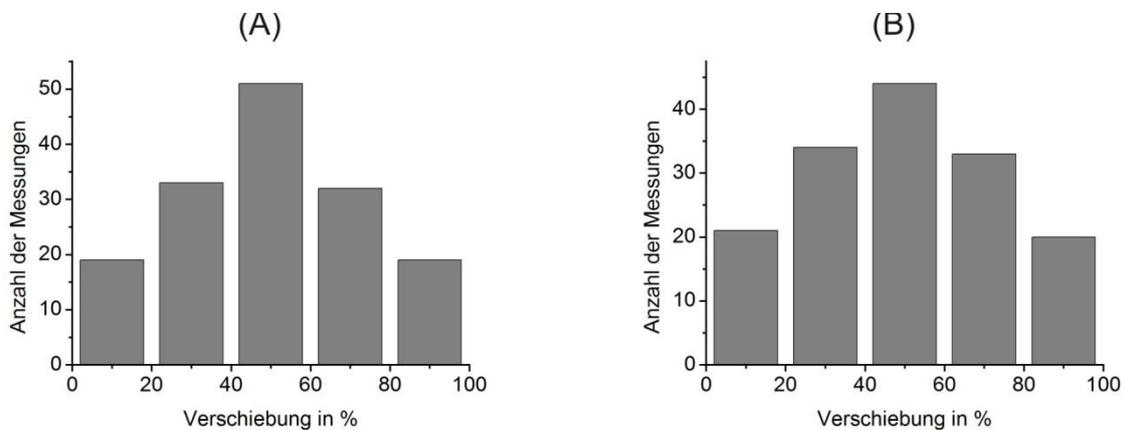


Abb. 5.13: Verteilung der Anteile der prozentualen Verschiebungen an Stufenkanten von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  A) in  $[110]$  B) in  $[\bar{1}10]$ .

### 5.1.4.3 STM nach dem Tempern bei $400^\circ\text{C}$ und $500^\circ\text{C}$

Um die strukturellen Änderungen in der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Oberfläche in Abhängigkeit der Heiztemperatur zu untersuchen, wurde die Probe für eine Stunde bei  $400^\circ\text{C}$  getempert. Die STM-Aufnahme nach diesem Tempervorgang ist der Abbildung 5.14A zu entnehmen. Das Bild wurde bei einer Skala ( $2896 \text{ \AA} \times 2896 \text{ \AA}$ ) mit einer Biasspannung von  $1,44\text{V}$  und einem Tunnelstrom von  $8.1 \times 10^{-10} \text{ A}$  aufgenommen.

Auf der Oberfläche sind die rechteckige Einschnitte mit einer Größe von bis zu 300 Å zu sehen, deren Kanten wieder in  $[110]$  und  $[\bar{1}10]$  ausgerichtet sind. Das Tempern bei 400°C hat zur Folge, dass die  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht teilweise bis zum Substrat aufgerissen wurde. Auf der Oberfläche dominieren Terrassen, deren Kanten in vielen Bereichen nicht mehr die  $[110]$ - und  $[\bar{1}10]$ -Richtungen bevorzugen und nicht mehr rechteckig aussehen. Die erhalten gebliebenen rechteckigen Terrassenkanten besitzen immer noch eine Breite von mehreren hundert Angstrom, deren durchschnittliche Terrassenhöhe 8,81Å betragen. Dies entspricht einer dreifachen Stufenhöhe von Eisensilizid.

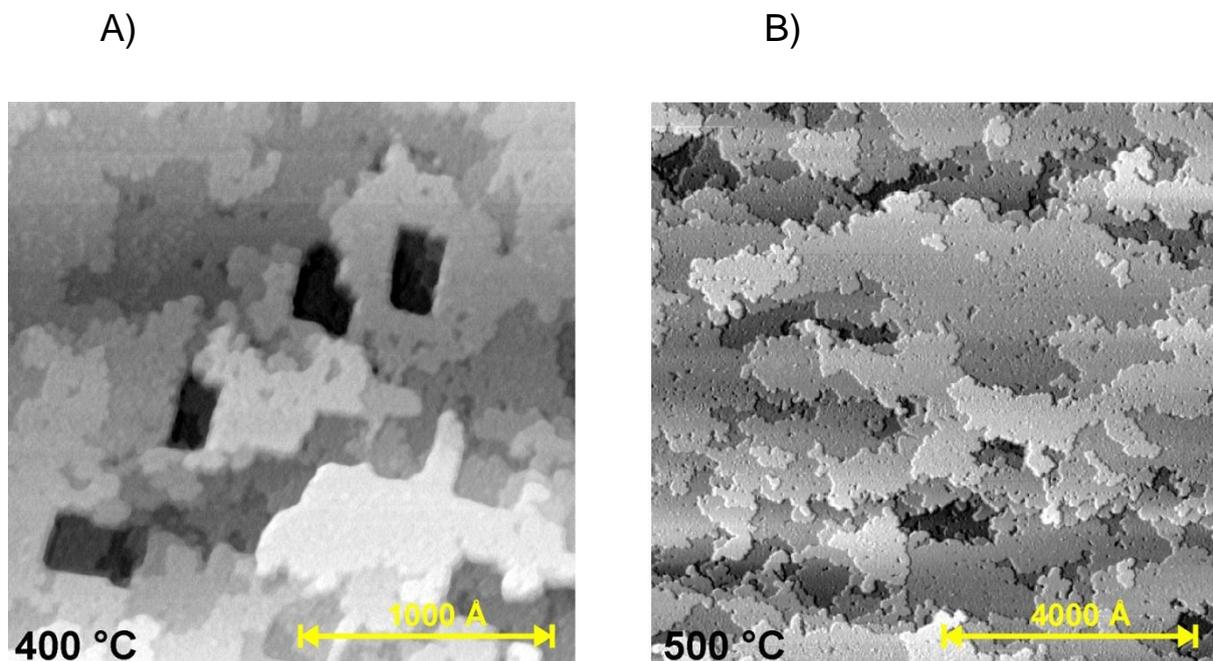


Abb. 5.14: STM-Bilder nach weiterem Tempern bei A) 400°C bei einer Skala von (2896x2896) mit einer Biasspannung von 1,44V und einem Tunnelstrom von  $8,1 \times 10^{-10}$  und B) 500°C. bei einer Größe von 8848Åx8848Å mit einer Biasspannung von 2,3V und dem Tunnelstrom von  $1,9 \times 10^{-9}$ A

Zur Beobachtung der temperaturabhängigen Änderungen der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Oberfläche wurde die Probe weiterhin bis auf 500°C geheizt und wiederum eine Stunde lang getempert. Nach dem Abkühlen der Probe wurden STM-Bilder bei einer Skala von (8848Åx8848Å) aufgenommen (Abb. 5.14B). Dazu wurden die Biasspannung auf 2,3V und der Tunnelstrom auf  $1,9 \times 10^{-9}$ A

eingestellt. Wie man der Abbildung entnehmen kann, weisen die Kanten der Terrassen bei dieser hohen Temperatur keine Vorzugsrichtung mehr auf.

Die Rauigkeit der Oberfläche hängt von der Heiz-Temperatur ab. Um diese Abhängigkeit quantitativ zu erfassen wurde die RMS-Rauigkeit auf Gebieten von circa  $500\text{\AA} \times 500\text{\AA}$  berechnet. Es ergibt sich, dass die optimale Temperatur für eine glatte Oberfläche zwischen  $250^\circ\text{C}$  und  $300^\circ\text{C}$  liegt (Abb. 5.15). Unterhalb bzw. oberhalb dieser Temperatur weist die Oberfläche eine rauere Struktur auf.

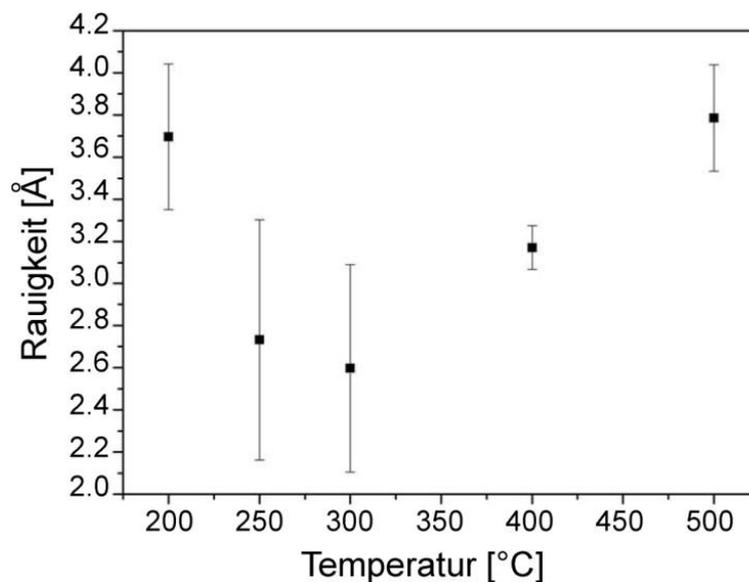


Abb. 5.15: Abhängigkeit der Oberflächenrauigkeit von der *Annealing*-Temperatur.

Nachdem die Probe über  $500^\circ\text{C}$  getempert wurde, war die Probenoberfläche sehr rau und aufgrund von Spitzeninstabilitäten war es schwierig, die STM-Auflösung über das gesamte Bild hinweg aufrechtzuerhalten. Momentaufnahmen deuteten allerdings darauf hin, dass es nun großflächigere Einschnitte gab. Aus diesem Grund wurde mit der Probe eine *ex-situ* SEM-Analyse durchgeführt (Abb. 5.16). Das SEM-Bild bestätigt, dass die  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht auch auf größerer Skala Einschnitte mit Kanten parallel zu  $[\bar{1}10]$  und  $[110]$  aufweist. Kantenlängen

betragen zwischen 20nm und 1 $\mu$ m. Auf dem Bild erkennt man zwei Sorten von Arealen, in denen jeweils eine Sorte von Inseln eingelagert ist. Die beiden Inselnarten werden durch deutlich unterschiedliche Helligkeitsstufen dargestellt, was auf unterschiedliche chemische Zusammensetzungen hindeutet. Es lässt sich vermuten, dass es sich um zwei verschiedene Legierungen mit dem Substrat handelt.

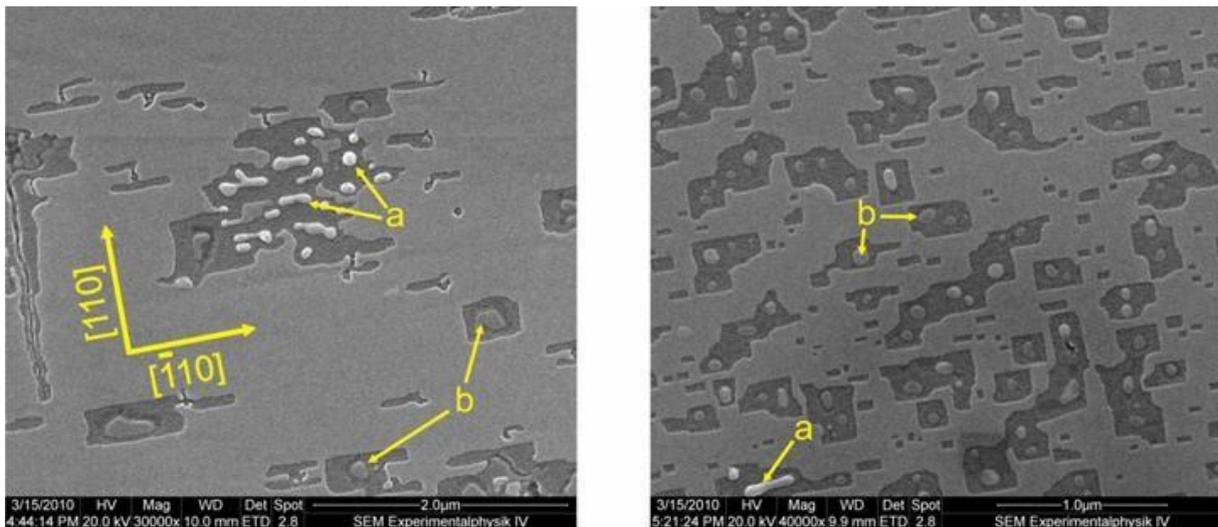


Abb. 5.16: SEM-Analyse der Fe<sub>3</sub>Si-Oberfläche bei höheren Temperaturen (nähere Erläuterungen finden sich im Text).

Erhöhung der Heiz-Temperatur über 400°C bewirkt eine starke Veränderung in der Morphologie der Fe<sub>3</sub>Si-Oberfläche [Sta01]. Es entstehen Phasentrennungen an der Oberfläche, die sogenannte Oberflächensegregation. Diese ist ein universales Phänomen in binären Legierungen und spielt eine wichtige Rolle bei vielen Materialeigenschaften [Bus97]. Es ist jedoch schwer vorauszusagen, welche Komponente bevorzugt an die Oberfläche segregiert. Mehrere Studien an Volumen-Fe<sub>3</sub>Si haben eine Si-Anreicherung an den oberen Schichten einer Fe<sub>3</sub>Si-Oberfläche berichtet [Bus97], [Sta97 und 01]. Tempern auf höheren Temperaturen hat eine 2 Monolagen dicke Deckschicht, welche eine FeSi-Komposition in CsCl-Struktur besitzt, zur Folge. Diese metastabile Phase wird durch bevorzugte Segregation

von Si in die Oberfläche stabilisiert. Die kristalline Struktur von CsCl ist der  $DO_3$ -Struktur von  $Fe_3Si$  sehr ähnlich.

Busse et al. [Bus97] haben mittels UPS (*ultraviolet photoelectron spectroscopy*) mit dem CO-gesättigten  $Fe_3Si$  und ISS (*ion scattering spectroscopy*)-Messungen sowohl Si als auch Fe mit einer Stöchiometrie von 1:1 an der thermisch äquilibrierten Oberfläche detektiert und schließen damit eine pure Eisen- oder Silizium-Terminierung der Oberfläche aus. Die LEED-Muster wiesen eine  $c(2 \times 2)$ -Überstruktur auf der obersten Schicht auf. Daraus wurde ermittelt, dass die äußere Schicht aus einer halben Monolage Si-Adatomen, die eine  $c(2 \times 2)$ -Oberflächenrekonstruktion oberhalb einer Fe-Schicht bilden. Ein schematisches Modell der von Busse et al. vorgeschlagenen Kristallstruktur und die Zusammensetzung der Oberflächen-Region im  $Fe_3Si$  (100)-Einkristall ist in Abb. 5.17 dargestellt. Man beobachtet, dass mit zunehmender Schichtdicke Si-reiche Phasen auftreten.

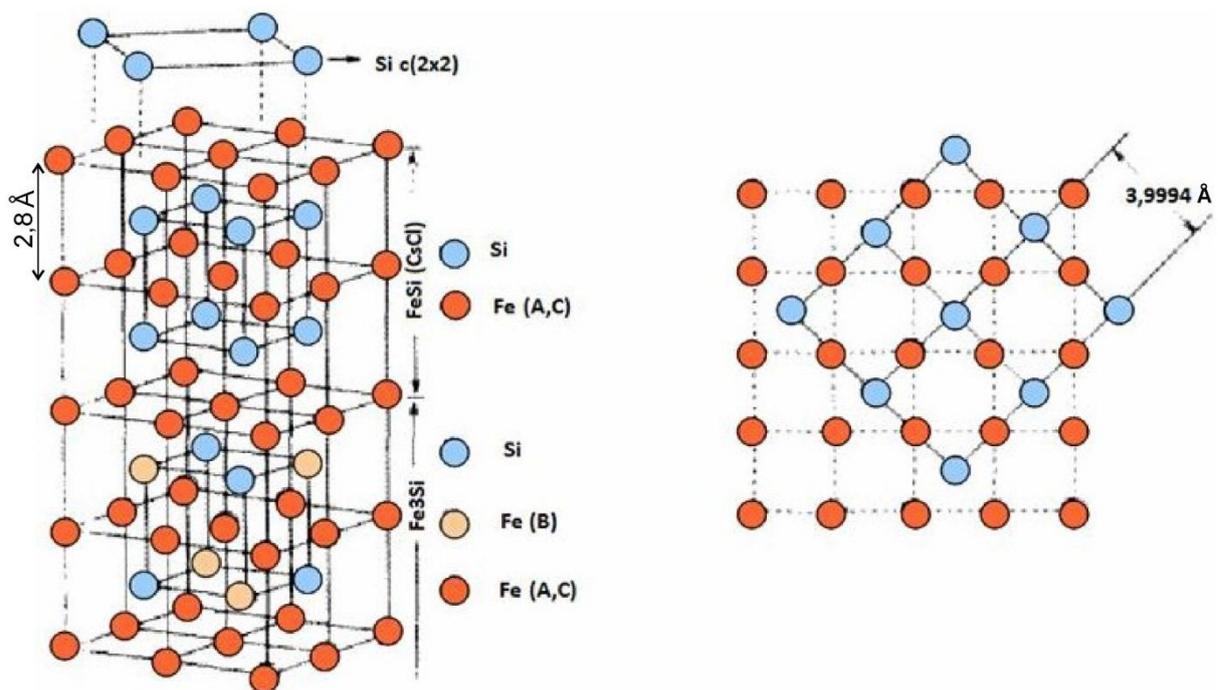


Abb. 5.17: Model zur strukturellen Anordnung an der  $Fe_3Si$ -Oberfläche (modifiziert nach [Bus97]). Eine  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion von Si-Adatomen mit einem atomaren Abstand von ca.  $4 \text{ \AA}$  ist rechts dargestellt.

In diesem Model ist auf der obersten Lage eine Überstruktur aus Si-Adatomen mit einer  $c(2 \times 2)$ -Oberflächen-Rekonstruktion gegenüber den Fe-Atomen erkennbar. Die Gitterkonstante beträgt ca. 4 Å. Dieser Wert ist identisch mit der Gitterkonstante der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Oberfläche (vgl. Abb. 5.7). Daher ist es schwer eine Aussage zu treffen, ob ein Übergang zu einer Si-Überstruktur nach dem Tempern erfolgt ist.

Als weitergehende Untersuchungen könnte man eine XPS (*X-ray photoelectron spectroscopy*)- und ISS (*ion scattering spectroscopy*)-Messungen zur Bestimmung der genaueren Zusammensetzung der Oberfläche durchführen.

### 5.1.5 LEED-Untersuchung der $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten auf GaAs(001)

Die aufgedampften  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten wurden mittels LEED analysiert. Nach der Bedeckung mit 12 Monolagen der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht und dem Ausheilen der Probe bei einer Temperatur von 250°C sind LEED-Reflexe, die der reziproken Gitterstruktur von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  entsprechen, zu sehen (Abb. 5.18b).

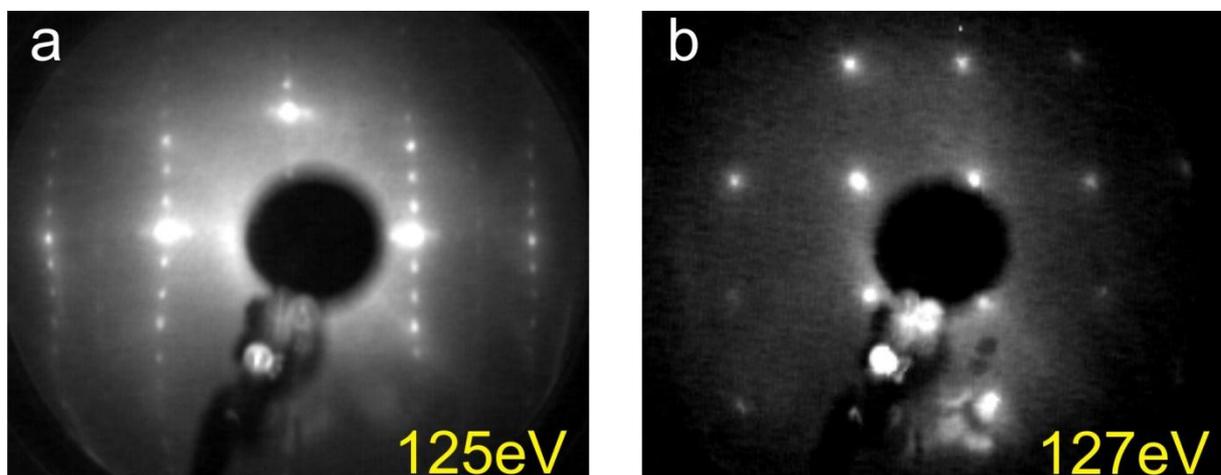


Abb. 5.18:a) LEED-Bild des reinen Substrats b) LEED-Aufnahme einer 12 Monolage  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht, die auf das GaAs-Substrat aufgebracht wurde.

Man erkennt im Vergleich mit dem LEED Bild des Substrats (Abb. 5.18a), dass die reziproken Gitter bis auf die Oberflächenrekonstruktion des Substrats übereinstimmen.

### 5.1.6 Magnetische Untersuchungen der Eisensilizid-Schicht auf GaAs(001)

Neben der Struktur wurden auch die magnetischen Eigenschaften der Eisensilizid-Schicht auf dem GaAs-Substrat untersucht. Diese sind für die technischen Anwendungen bei FM/SC-Systemen von großer Bedeutung. Zu diesem Zweck wurden Messungen mit Hilfe des magneto-optischen Kerr-Effekts (MOKE) bei Raumtemperatur durchgeführt.

Abbildung 5.19 zeigt Hysterese-Kurven dreier unterschiedlicher Richtungen einer  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$ -Probe, auf die gleiche Weise wie oben präpariert wurde und ebenfalls aus einer 12 Monolagen Eisensilizid-Schicht besteht. Die Hysterese-Kurven zeigen das ferromagnetische Verhalten der Probe mit einer geringen *in-plane*-uniaxialen Anisotropie bei Raumtemperatur. Die schwere Achse der Magnetisierung liegt parallel zu  $[110]$ . Diese lässt sich anhand ihres S-förmigen Kurvenverlaufs erkennen. Bei den leichten Achsen betragen die Koerzitivfelder ca. 5 Oe, was auf eine geordnete  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Phase hindeutet [Her04].

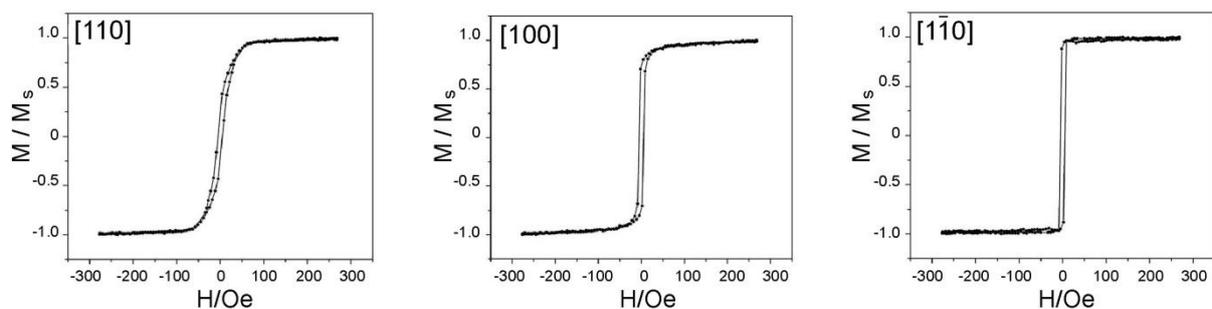


Abb. 5.19: Hysterese-Kurven der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht auf der GaAs(001)-Oberfläche. Das Schicht-Wachstum erfolgte bei  $200^\circ\text{C}$ .

Desweiteren wurden SQUID-Messungen durchgeführt. Die Ergebnisse sind der Abbildung 5.20 zu entnehmen. Aus den SQUID-Messungen wurde das magnetische Moment pro Atom

zu  $0,5 \mu_B$  ermittelt. Im Vergleich zu Literaturwerten ( $1,3 - 1,6 \mu_B$ ) ist dieser Wert relativ klein [Ion05a und 05b], [Kru09]. Mögliche Erklärung dafür könnte eine Ga- oder As-Diffusion in die unteren Lagen sein [Hsu07], [Kru09]. Um dies zu untersuchen, sollten in zukünftigen Messungen unter gleichen Bedingungen präparierte Proben mit unterschiedlichen Dicken von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  beschichtet werden. Danach kann bei SQUID-Messungen verglichen werden, ob eine Vergrößerung bei magnetischen Momenten mit zunehmender Schichtdicke beobachtet werden kann.

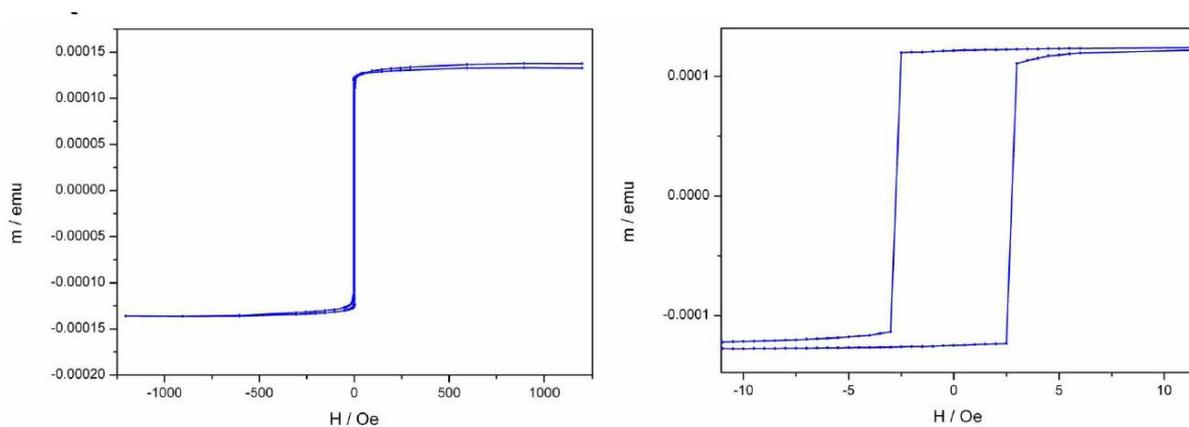


Abb. 5.20: SQUID-Messungen mit der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht auf  $\text{GaAs}(001)$ . Der diamagnetische Anteil wurde subtrahiert.

### 5.1.7 Untersuchungen von $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$ bei einer Wachstumstemperatur von $250^\circ\text{C}$

Um den Einfluss der Wachstumstemperatur auf die strukturellen und die magnetischen Eigenschaften von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  zu untersuchen, wurden Messungen nach der Deposition von 20 Monolagen  $\text{Fe}_3\text{Si}$  bei einer Substrattemperatur von  $250^\circ\text{C}$  durchgeführt. Das STM-Bild weist ein Netzwerk von Terrassen auf, während bei  $T_G=200^\circ\text{C}$  ein lagenweises Wachstum zu erkennen war (vgl. Abb. 5.5B mit Abb. 5.21A). In der Abb. 5.21B sind LEED-Reflexe, die der reziproken Gitterstruktur von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  entsprechen, zu sehen. Dazwischen kann man noch schwach die Reflexe der Oberflächenrekonstruktion des Substrats erkennen. Dies deutet darauf hin, dass das Substrat zwischen den  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Terrassen freigelegt ist.

A)

B)

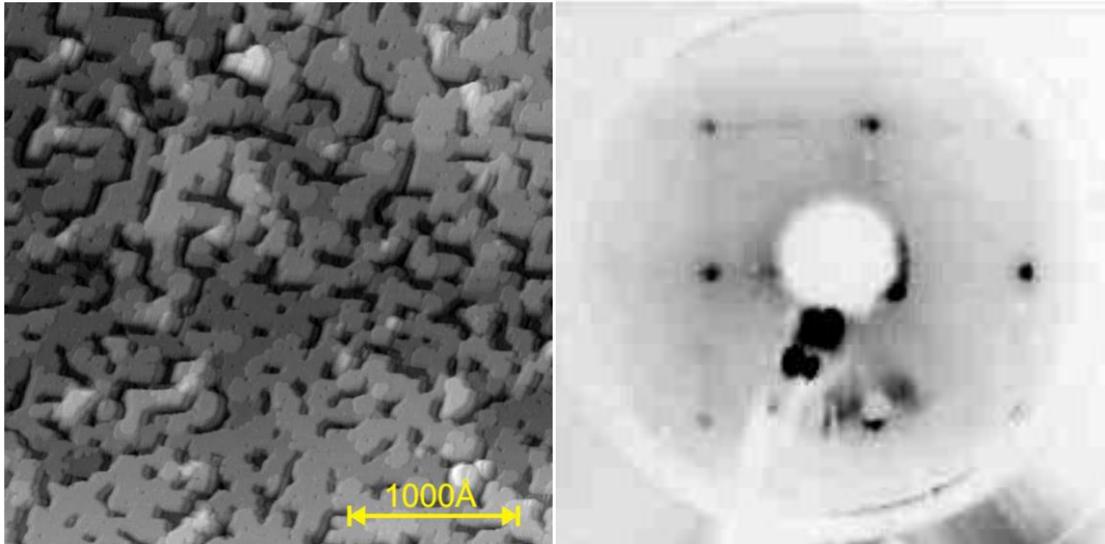


Abb. 5.21: Strukturelle Analyse von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  auf GaAs bei  $T_G = 250^\circ\text{C}$  mittels A) STM bei  $V_{\text{Bias}} = 2,2\text{V}$  und  $I = 2,2 \times 10^{-10}\text{A}$  und B) LEED-Bild bei einer Primärenergie von  $40\text{eV}$ . Zur besseren Darstellung wurde das Bild farblich invertiert.

Die Hysterese-Kurven bei einer Wachstumstemperatur von  $250^\circ\text{C}$  sind in Abbildung 5.22 zu sehen. In diesem Fall betragen die Koerzitivfelder der leichten Achsen ca.  $30\text{Oe}$ . Dies könnte auf temperaturbedingte Defekte in der Schicht zurückgeführt werden [Ion05].

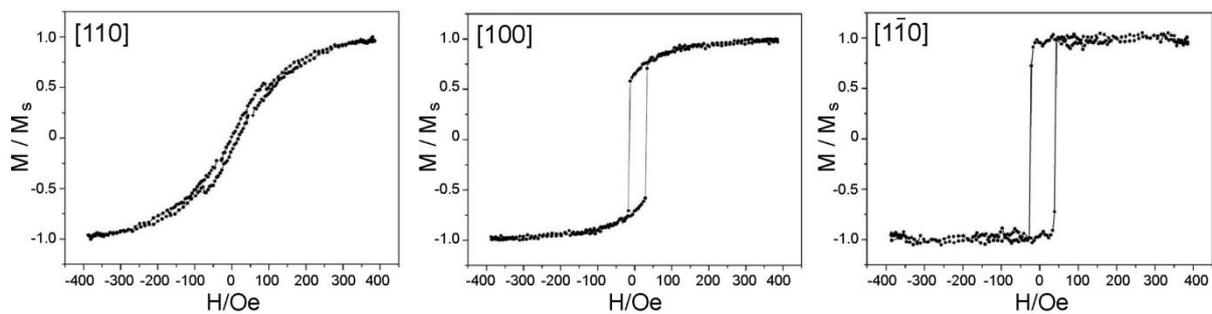


Abb. 5.22: Hysterese-Kurven der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht auf der GaAs(001)-Oberfläche bei einer Wachstumstemperatur von  $250^\circ\text{C}$ .

## 5.2 Fe-Schichten auf der ZnSe(001)-Oberfläche

### 5.2.1 Präparation des ZnSe(001)-Substrats

Die für die folgenden Experimente verwendete ZnSe-Probe wurde von der Arbeitsgruppe von Dr. Michael Hetterich am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) zur Verfügung gestellt. Sie besteht aus einem p-dotierten GaAs-Substrat, auf das in einer II-VI-MBE-Anlage eine 200nm dicke ZnSe-Schicht epitaktisch aufgewachsen wurde. Diese wurde mit Chlor dotiert und besitzt einen Dotierungsgrad von  $2,4 \times 10^{18}$  Atomen/cm<sup>3</sup> und einen spezifischen Widerstand von  $1,704 \times 10^{-2}$  Ωcm. Zum Schutz vor Oxidation wurde die Probe mit einer Deckschicht aus Selen abgeschlossen. Diese Schicht ist amorph und zeigte keinerlei Beugungsbild im RHEED.

Um mehrere Experimente durchführen zu können, wurde die  $10 \times 10$  mm<sup>2</sup> große Probe zunächst in vier Teile von je  $5 \times 5$  mm<sup>2</sup> geschnitten. Um die Deckschicht nicht zu beschädigen, wurde beim Schneiden der Probe darauf geachtet, dass die Probe auf der Schichtseite nicht zu starken Drücken oder Verscherungen ausgesetzt wurde. Es konnte jedoch nicht vermieden werden, dass die Deckschichten an den Schnittkanten teilweise zerstört wurden. Eine mögliche Oxidation der Probe an diesen Stellen störte allerdings nicht die Experimente, da diese Stellen während der Untersuchung der Probe mit den Kanten des Probenhalters abgedeckt waren.

Nach dem Schneiden wurde die Probe einige Male mit 2-Propanol abgewischt, um die Verschmutzungen zu entfernen. Sie wurde wie in Kapitel 3.11 beschrieben in den kleinen Probenhalter montiert, der speziell für diese Probengröße entwickelt wurde. Anschließend wurde die Probe im kleinen Probenhalter in den herkömmlichen Probenhalter festgeschraubt und in die Kammer eingeschleust. Da das *Capping* temperaturempfindlich ist, erfolgte das Aufheizen der Probe erst im Vakuum und die Probe blieb bis zum Ende der Messungen in der Kammer.

Zuerst wurde die Probe in der Kammer bei einer Temperatur von 120°C ausgegast. Der Emissionswert des Pyrometers wurde wieder nach der GaAs-Emissionskurve eingestellt, da die ZnSe-Schicht sehr dünn ist und fast keine Auswirkung bei der Messung hat. Um das *Capping* aus Se zu entfernen, wurde die Probe zunächst im UHV mit langsam steigender Temperatur aufgeheizt während der Prozess mit Hilfe der Massenspektroskopie beobachtet wurde. Ein Anstieg der Se-Kurve deutete auf die Desorption der obersten Se-Schicht hin.

### 5.2.2 Strukturelle Untersuchungen an der reinen ZnSe(001)-Oberfläche

Nach der Entfernung des *Cappings* wurde die Probe einer LEED-Messung unterzogen. Da die ersten LEED-Bilder keine richtige Oberflächen-Rekonstruktion zeigten, wurde die Oberfläche ein Mal 20 Minuten lang mit 0,6 keV gesputtert und bei 400 °C getempert (nach [Vos89]). Danach war im LEED-Bild eine reine  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion der ZnSe-Oberfläche, die mit einer halben Monolage Zn-Schicht endet [Che94], zu erkennen (s. Abb. 5.23). Die zentrierten LEED-Reflexe der  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion sind etwas schwächer und konnten deshalb fotografisch nur schlecht festgehalten werden.

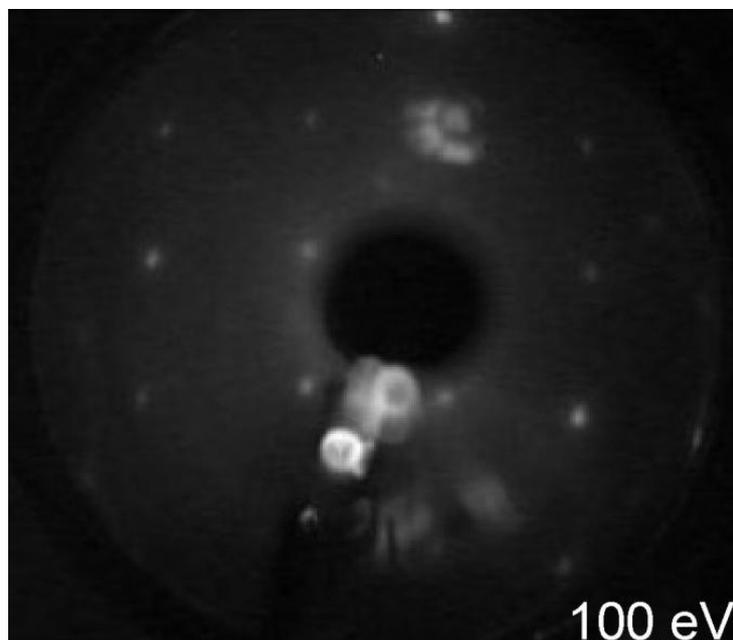


Abb. 5.23: LEED-Aufnahme der reinen ZnSe-Substratoberfläche bei einer Primärenergie von 100 eV.

Im weiteren Verlauf wurde versucht, die Probe strukturell mittels STM zu untersuchen. Es konnte jedoch keine STM-Bilder aufgenommen werden, da die Oberfläche möglicherweise aufgrund der Inhomogenität der Dotierung in den Messbereichen keine ausreichende Leitfähigkeit aufwies oder die Dotierung der Probe überhaupt nicht ausreichend war.

### 5.2.3 Deposition von Eisen auf der ZnSe(001)-Oberfläche

Die beste Wachstumsqualität von abgeschiedenen Eisen kann auf einer  $c(2 \times 2)$  Zn-reichen Oberfläche erhalten werden [Mar04]. Auf der ZnSe(001)-Oberfläche wächst Eisen in der bcc-Gitterstruktur. Dabei geschieht das Wachstum mit einer kleinen Gitterfehlانpassung von 1,1% zwischen zwei Eisen-Einheitszellen und einer von ZnSe. Noch wichtiger ist, dass die Reaktivität bei der Fe/ZnSe Heterostruktur niedriger im Vergleich zu anderen Halbleitern wie GaAs, Si oder Ge ist [Kre87].

Die Evaporation von 10 Monolagen Fe auf der präparierten reinen  $c(2 \times 2)$ -ZnSe(001)-Oberfläche erfolgte bei 170°C mit einer Aufdampftrate von 1 Å/min. Die Schichtdicke wurde wiederum mittels eines Schwingquarzes gemessen. Da die ZnSe-Schicht nicht leitfähig war, musste die elektrisch leitende Schicht einen guten elektrischen Kontakt mit den Kanten des Probenhalters bilden, damit die Probenoberfläche für eine STM-Messung geerdet wird. Da die Fe-Atome unter einem kleinen Winkel von circa 15° bezüglich der Oberflächennormalen der ZnSe-Probe aufgedampft wurden, bestand das Problem, dass sich ein Teil des Substrats in dem „Schatten“ des Probenhalters befand. Aus diesem Grund wurde die Probe während der Beschichtung 28 Minuten lang alle 7 min um 60° gedreht, um eine „geschlossene“ Eisenschicht zu erhalten, die die Kontakte des Probenhalters berührt. Bei so einer geschlossenen Schicht entsteht ein elektrischer Kontakt zwischen der Eisenschicht und den Kanten des Probenhalters.

### 5.2.4 LEED-Analyse der Fe-Schichten auf ZnSe(001)

Nach der Fe-Deposition erfolgte eine strukturelle Analyse mittels LEED. Wie man der Abbildung. 5.24A entnehmen kann, weist das LEED-Muster die Kristallstruktur des Adsorbats

auf. Es wurden zentrierte Reflexe beobachtet; diese sind in den CCD-Aufnahmen aufgrund des geringen Kontrasts jedoch nicht erkennbar. Es wurde berichtet, dass sich eine Monolage Se auf der Wachstumsfront des Eisens immer auf der Oberfläche unabhängig von der Schichtdicke befindet und diese Se-Segregation zu einer Oberflächen-Rekonstruktion aus Se-Atomen auf der Eisenschicht führt [Mar04]. Somit kann eine  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion nach der Deposition von Eisen immer noch beobachtet werden kann, obwohl die LEED-Reflexe des Substrats praktisch nach der Deposition von einer Monolage Eisen verschwinden [Ber04].

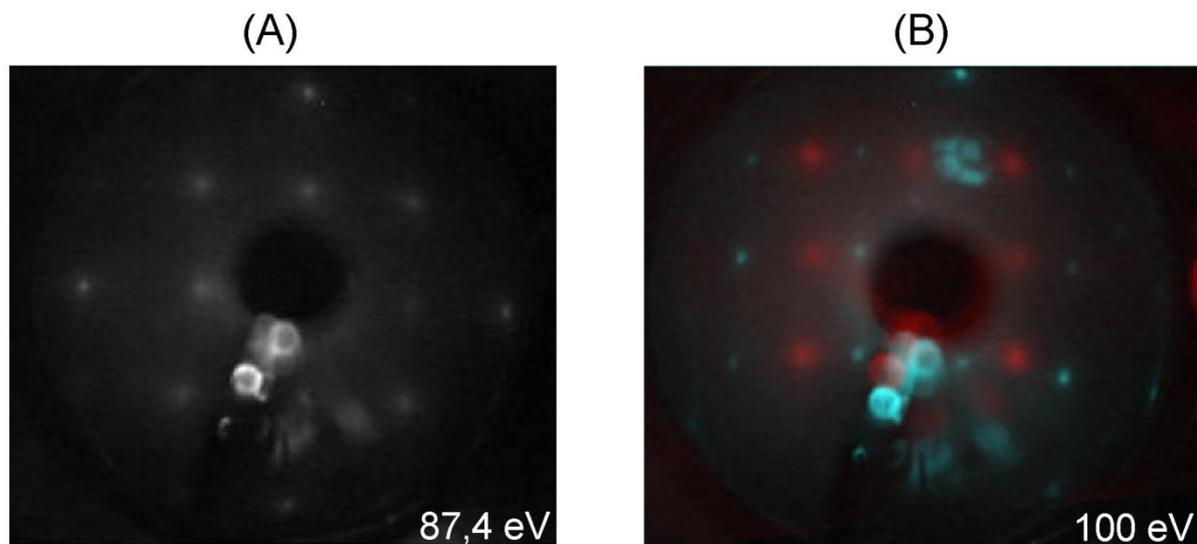


Abb. 5.24: LEED-Reflexe der Fe-Schicht auf ZnSe(001). A) Aufnahme nach der Deposition von 10ML Eisen bei 87,4 eV B) Überlappende Darstellung der LEED-Bilder der reinen ZnSe-Oberfläche (Reflexe in Cyan-Farbe) und nach der Deposition von 10 Monolagen Eisen (rote Reflexe). Beide Aufnahmen erfolgten bei 100 eV.

Die Abbildung 5.24B zeigt die LEED-Bilder der reinen ZnSe-Oberfläche aus der Abb. 5.23 und der aufgedampften Fe-Schicht (10 ML) übereinander. Da Eisen die halbe Gitterkonstante von ZnSe aufweist, sollte der Abstand der LEED-Reflexe von Eisen dem doppelten Hauptreflex-Abstand der unbedeckten ZnSe(001)-Oberfläche entsprechen. Der Vergleich der LEED-Bilder von 100 eV zeigt, dass die Strukturen vor und nach der Deposition fast die gleichen Gitterkonstanten aufweisen. Man kann davon ausgehen, dass die LEED-Reflexe von einer  $c(2 \times 2)$  Se-Überstruktur verursacht werden, was in Übereinstimmung mit der Literatur ist.

### 5.2.5 STM-Untersuchungen an Fe/ZnSe(001)

Zur Untersuchung der atomaren Oberflächenstruktur nach der Deposition von 10 ML Eisen wurden STM-Bilder bei Raumtemperatur mit dem „*constant current mode*“ aufgenommen. Betrachtet man die STM-Aufnahme in der Abbildung 5.25A, so sieht man Eisen-Cluster, die aus mehreren hunderten Atomen bestehen. Die Inseldichte und die durchschnittliche Inselgröße sind von Ort zu Ort sehr unterschiedlich. In den Abbildungen 5.25B und C sind zwei STM-Bilder auf einer Skala von  $679\text{\AA} \times 679\text{\AA}$  zu sehen. Diese Bilder sind Vergrößerungen aus verschiedenen Stellen der Abbildung 5.25A und verdeutlichen die örtlichen Unterschiede der Inseldichte.

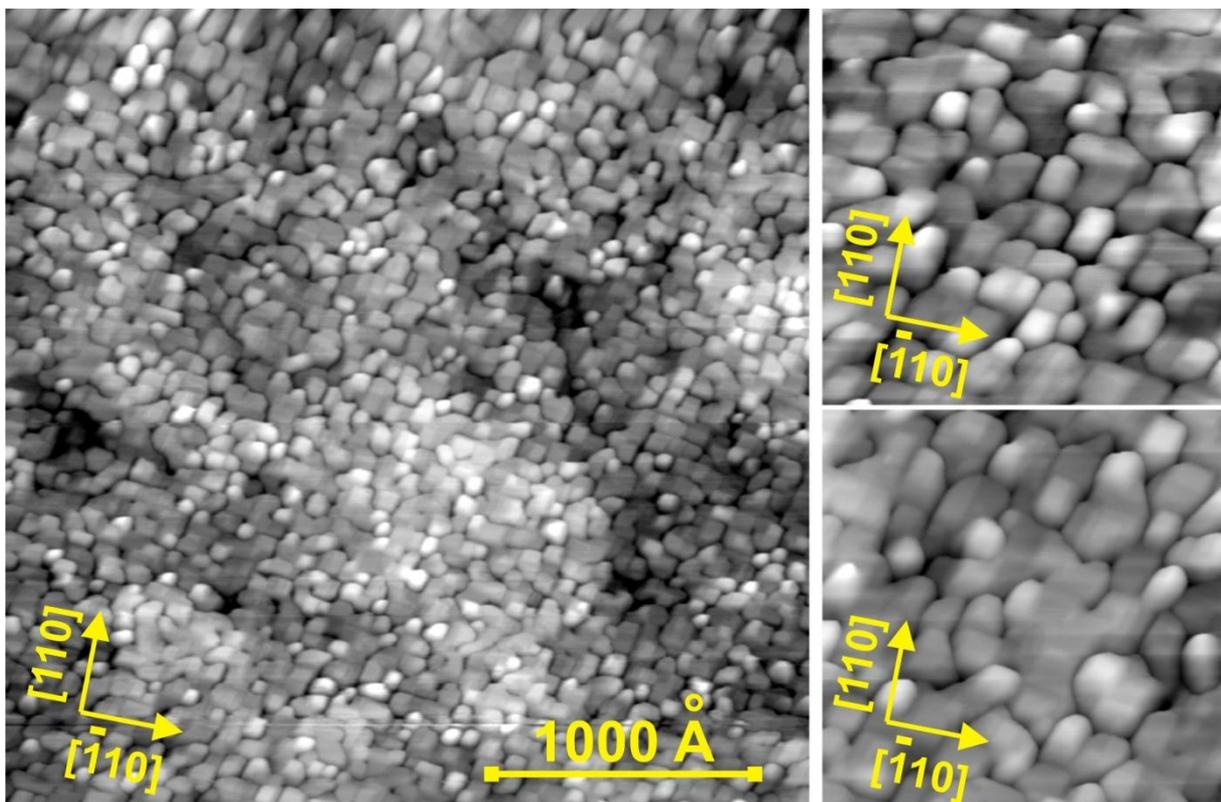


Abb. 5.25: STM-Bilder einer 10 ML dicken Eisenschicht auf ZnSe(001). A) Aufnahme bei einer Skala von  $2715\text{\AA} \times 2715\text{\AA}$ ,  $U_{\text{Bias}}=2,1\text{V}$  und  $I=2,6 \cdot 10^{-9}\text{A}$ . B) Aufnahme bei  $679\text{\AA} \times 679\text{\AA}$ ,  $U_{\text{Bias}}=2,1\text{V}$ ,  $I=2,0 \cdot 10^{-9}\text{A}$ .

Es ist bekannt, dass die Oberfläche bei einer Dicke von etwa 5ML durch längliche Inseln dominiert ist und bei zunehmender Schichtdicke koalesziert [Ber04]. In den STM-Bildern ist sowohl die bereits beginnende Koaleszens (Abb. 5.25C) als auch einige längliche Inseln, deren Kanten entlang  $[110]$  und  $[\bar{1}10]$  orientiert sind, zu erkennen (Abb. 5.25B). Die durchschnittliche Größe der länglichen Inseln beträgt  $100\text{\AA} \times 50\text{\AA}$  mit der langen Kante parallel zur  $[110]$ . Da im vorliegenden Fall die Oberfläche eine symmetrische  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion aufweist, sollte eine isotrope Koaleszenz zu beobachten sein. Der anisotrope Beitrag stammt aus den ungesättigten ungerichteten  $sp^3$ -Bindungen auf der ZnSe-Oberfläche. Da die  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion des Substrats nur aus einer halben Zn-Monolage besteht, bleiben die Se-Atome in der darunter liegenden Lage unbedeckt [Che94]. Da Fe eine Bindung mit Se gegenüber einer Bindung mit Zn bevorzugt, bewirken die in  $[110]$ -orientierten Se-Bindungen eine Fe-Koaleszenz in dieser Richtung [Gus02], [San02].

### 5.2.6 Weitere thermische Behandlung

Um die Auswirkung der thermischen Behandlung zu untersuchen, wurde die Probe zuerst bei  $200^\circ\text{C}$  für circa eine halbe Stunde getempert. Ein bei einer Skala von  $2715 \times 2715 \text{\AA}^2$  aufgenommenes STM-Bild ist in Abb. 5.26 dargestellt.

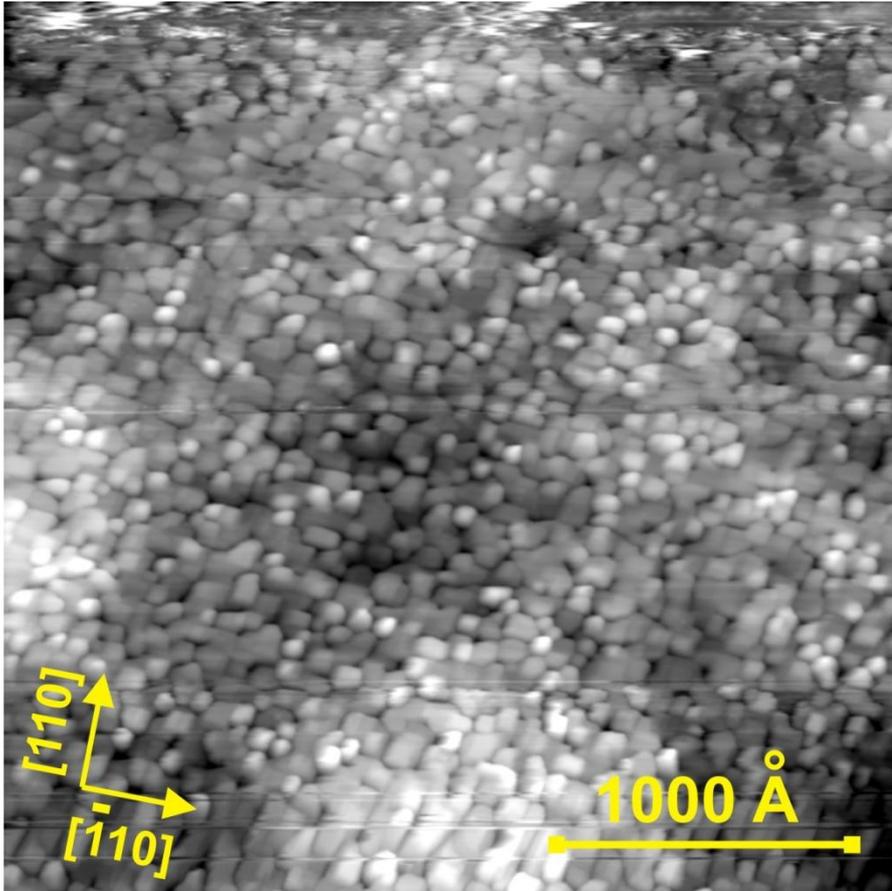


Abb. 5.26: STM-Bild nach dem Tempern von  $200^\circ\text{C}$ . Aufgenommen bei einer Skala von  $2715 \text{ \AA} \times 2715 \text{ \AA}$ .  $U_{\text{Bias}} = 5,2 \text{ V}$ ,  $I = 1,8 \cdot 10^{-9} \text{ A}$

Zum Vergleich der Oberflächenmorphologie vor und nach dem Tempern wurden STM-Scans derselben Größe aufgenommen (Abb. 5.27). Es ist leicht zu erkennen, dass die thermische Behandlung keine große Veränderung an der Dichte der Eiseninseln zur Folge hat. Das heißt, dass durch Zusammenwachsen der Inseln keine Terrassenbildung zustande gekommen ist und die Oberfläche keine Glättung erfährt.

Darüber hinaus wurde die Probe bei einer Temperatur von  $250^\circ\text{C}$  eine weitere halbe Stunde getempert. Die STM-Aufnahmen zeigen wiederum keinen Unterschied zu denen, die vor dem Tempern aufgenommen wurden (vgl. Abb. 5.25)

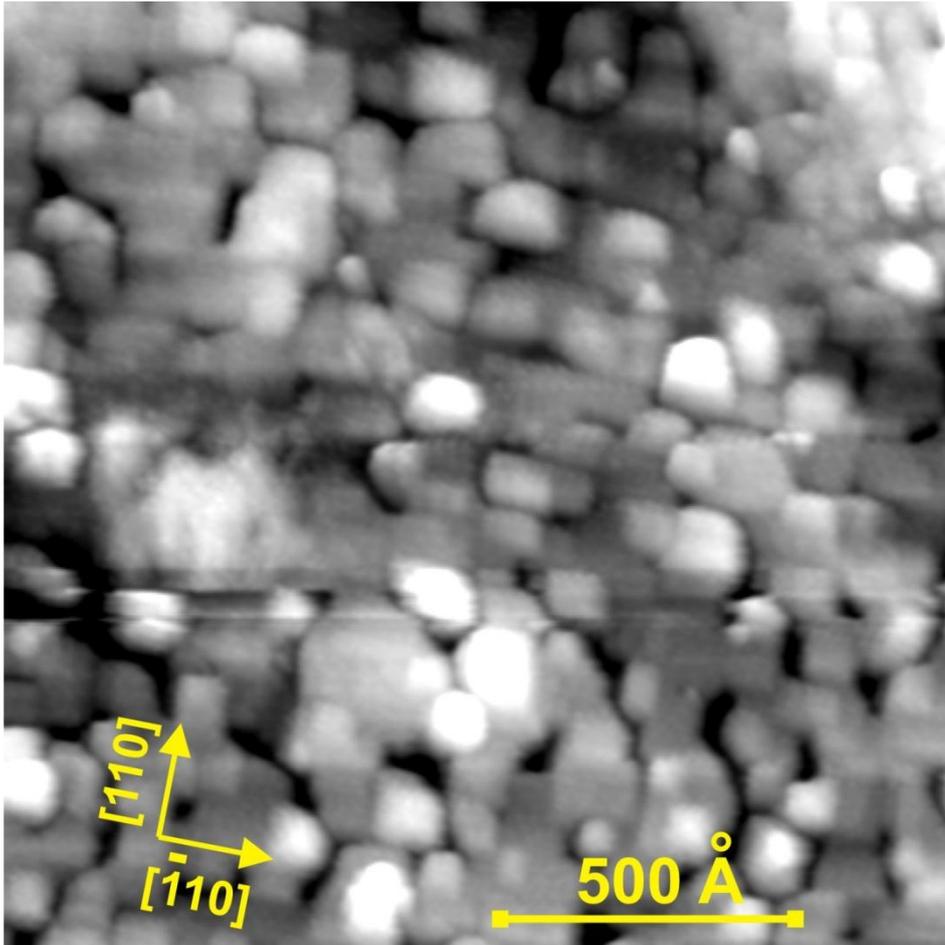


Abb. 5.27: STM-Bild nach dem Tempern bei 250°C. Aufgenommen bei einer Größenskala von  $1357,5\text{Å} \times 1357,5\text{Å}$ ,  $U_{\text{Bias}}=1,5\text{V}$  und  $I=4,8 \times 10^{-10}\text{A}$

### 5.2.7 Auflösung auf atomarer Skala

Abb. 5.28A zeigt die Schicht auf einer Skala von  $253\text{Å} \times 253\text{Å}$ , wobei durchgehend atomare Ordnung zu beobachten ist. Das STM-Bild wurde bei einer Biasspannung von 1,05V und einem Tunnelstrom von  $1,9 \times 10^{-9}\text{A}$  aufgenommen. Die Oberfläche besteht aus glatten Terrassen, deren Kanten parallel zu  $[110]$  und  $[\bar{1}10]$  angeordnet sind und eine Größe von bis zu  $100\text{Å}$  haben. Die Stufenhöhe zwischen zwei Terrassen beträgt etwa  $1,6\text{Å}$  (Abb. 5.28B). Dies entspricht im Rahmen der Messgenauigkeit dem erwartenden Wert von Eisen ( $1,43\text{Å}$ ) [Mar04]. Es liegt meistens eine einfache Stufenhöhe vor; zweifache bzw. dreifache

Stufenhöhen sind auf der Oberfläche nur sehr selten zu finden. Die oberste Lage besteht aus Se Atomen, deren Gitterperiode bei etwa  $3,62\text{\AA}$  liegt (Abb. 5.28C). Verglichen mit dem theoretischen Wert von  $4\text{\AA}$  ergibt sich eine Abweichung von etwa 9%.

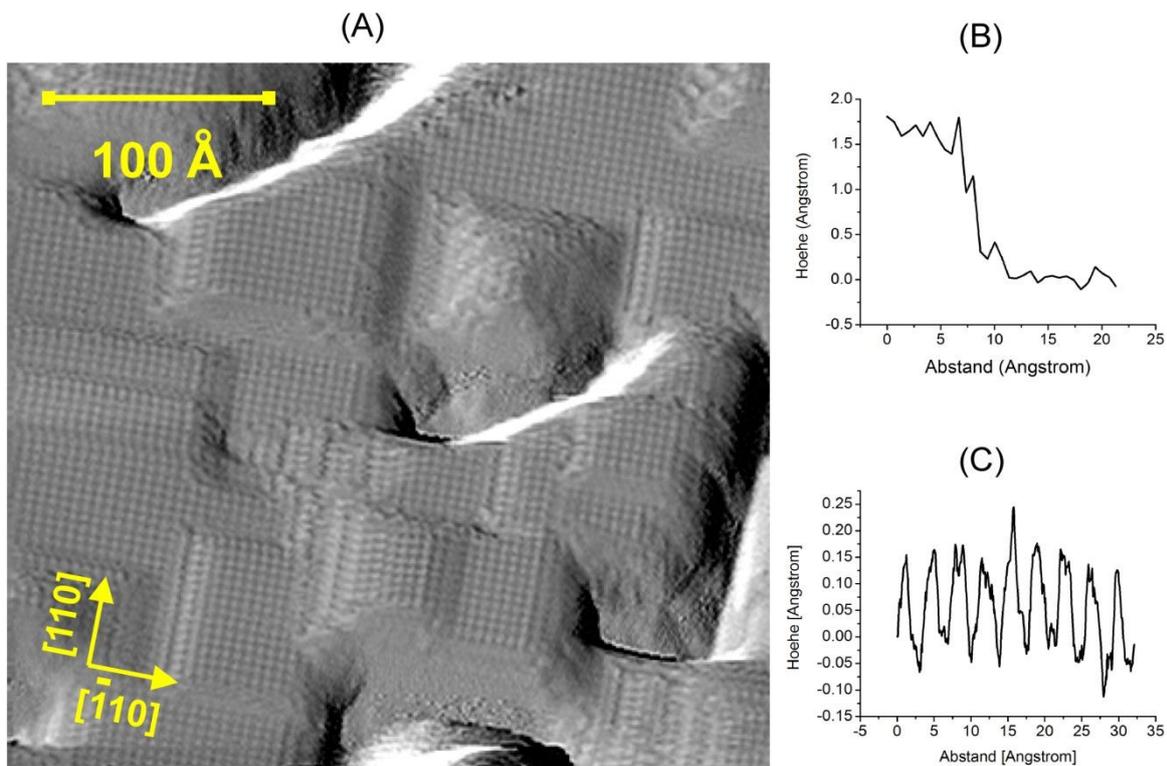


Abb. 5.28: Atomare Auflösung an Fe/ZnSe(001). Die Bildgröße beträgt  $253\text{\AA} \times 253\text{\AA}$ .

Diese Oberflächen-Gitterperiodizität ergibt sich aus den schwimmenden Se-Atomen auf der Eisenschicht [Mar02/04], [Rei00] und [Ber04], deren Struktur einer  $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion entspricht [Edd06], [Ber04]. Betrachtet man die Kristall-Symmetrie um  $45^\circ$  gedreht, so sieht man eine  $c(2 \times 2)$  flächenzentrierte Kristalloberfläche (wie in Abb. 5.7).

### 5.2.8 Magnetische Untersuchungen der Eisenschicht auf ZnSe

Die hier durchgeführten MOKE-Messungen an einer 10 Monolagen dicken Fe-Schicht auf ZnSe(001) erfolgten winklabhängig bei Raumtemperatur mittels Rotations-MOKE mit Schrittgrößen von  $30^\circ$ . Die Hysterese-Kurven in der Abbildung 5.29 zeigen, dass die Probe bei Raumtemperatur ein ferromagnetisches Verhalten aufweist. Es liegt eine uniaxiale magnetische Anisotropie vor, wobei die  $[110]$  die leichte Richtung ist. Dieses Ergebnis stimmt mit den Daten aus der Literatur überein [Gus02], [Sjö02], [Mar04].

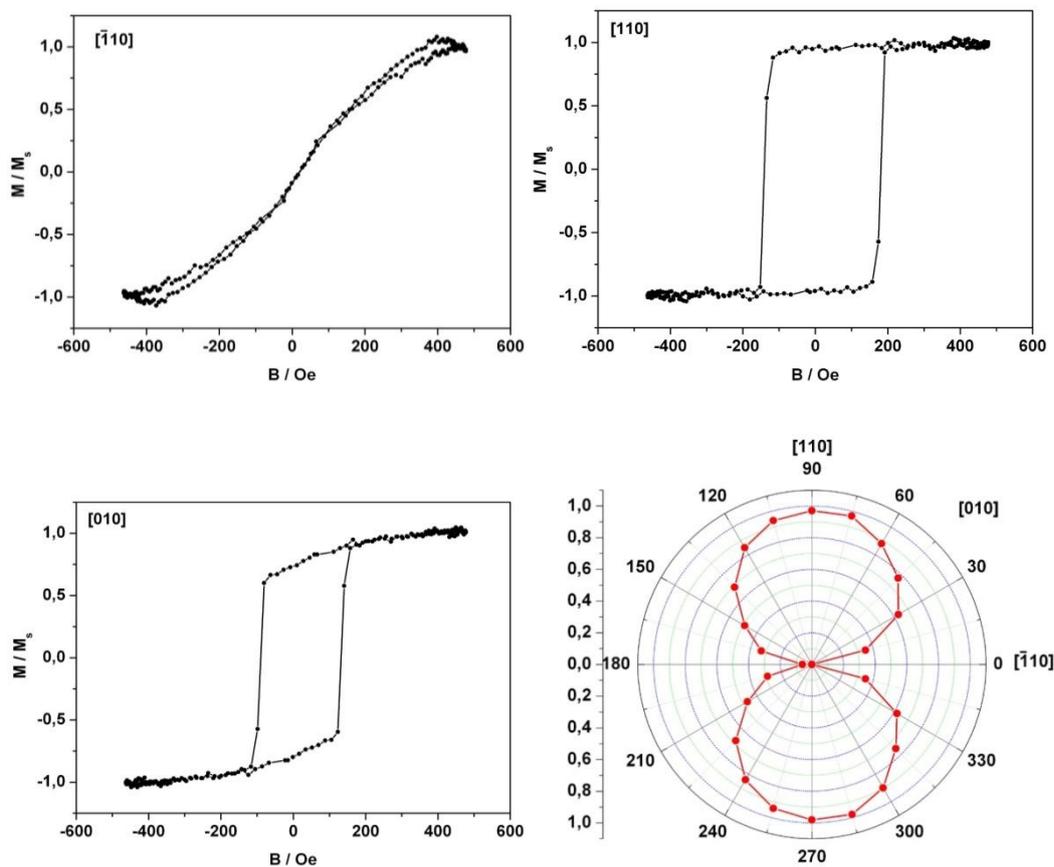


Abb. 5.29: Winkelabhängige MOKE-Messungen an Fe/ZnSe(001)

Zur Erklärung der Entstehung der uniaxialen Anisotropie bei Metall-/Halbleiter-Grenzflächen wurden einige Theorien vorgeschlagen. Zum einen wird vermutet, dass die Rekonstruktion der Halbleiter-Oberfläche über die Dimerisierung der *Dangling-Bonds* auf der Oberfläche in

der uniaxialen Anisotropie involviert ist. Diese Rekonstruktionen führen abhängig von der Terminierung zu atomischen Reihen entweder entlang  $[110]$  oder  $[1\bar{1}0]$ . Das Argument ist, dass diese Rekonstruktionen des Substrats nach dem Wachstum der ferromagnetischen Schicht erhalten bleiben. Diese verursachen eine große uniaxiale Anspannung in der magnetischen Schicht. Die Anspannungen führen ihrerseits zu einer uniaxialen Anisotropie durch den magnetoelastischen Effekt. Zum anderen ist die Entstehung der uniaxialen magnetischen Anisotropie auf die anisotropen Grenzflächen-Bindungen zwischen Fe-Atomen und ZnSe zurückzuführen. Die  $sp^3$ -ähnliche tetrahedrale Bindungen aus dem Substrat zu den Fe-Atomen an der Grenzfläche bestimmen die *in-plane* leichte Achse, d.h.  $[110]$  für eine Se-terminierte und  $[1\bar{1}0]$  für eine Zn-terminierte Grenzfläche [Con90, Sjö02, Mar04].

Die hier beobachtete leichte Achse in  $[110]$  deutet darauf hin, dass die Eisenatome in der Grenzfläche an Se-Atome gebunden sind. Eigentlich erfolgt das Eisen-Wachstum im vorliegenden Fall auf einer  $c(2 \times 2)$  Zn-terminierten Oberfläche. Jedoch ist es ziemlich unwahrscheinlich, dass die Superstruktur in der Grenzfläche erhalten bleibt. Tatsächlich bewirkt die Grenzflächenreaktivität, welche die Se-Segregation an der Wachstumsfront hervorruft, dass die  $c(2 \times 2)$  Zn-geordnete Konfiguration an der Grenzfläche verloren geht und vermutlich 1,5 Monolagen Zink aus der Substratoberfläche in die Fe-Schicht hineindiffundiert [Mar04]. Zink kann entweder Nano-Cluster bilden oder durch Eisen-Atome in der Schicht ersetzt werden. Somit entsteht eine Schicht aus Fe und Zn, die die Eisen-Schicht von dem Substrat trennt [San02].

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

---

In der vorliegenden Arbeit wurden die Materialsysteme  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$  und  $\text{Fe}/\text{ZnSe}(001)$  untersucht. Im experimentellen Fokus standen dabei die Fragen nach strukturellen und magnetischen Eigenschaften in Abhängigkeit der Wachstumsparameter. Die strukturellen Untersuchungen wurden mittels STM (*Scanning Tunneling Microscopy*) und LEED (*Low Energy Electron Diffraction*) durchgeführt. Zur Untersuchung der magnetischen Eigenschaften standen *in-situ* MOKE (*Magnetooptischer Kerr-Effekt*)- und SQUID (*Superconducting Quantum Interference Device*)-Magnetometrie zur Verfügung.

STM-Aufnahmen der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten auf präparierten GaAs-Oberflächen zeigten unmittelbar nach der Deposition bei einer Substrattemperatur von  $200^\circ\text{C}$  unregelmäßige Terrassenstrukturen. Nach dem Ausheilen der Probe bei  $250^\circ\text{C}$  wurde der Übergang zu einem nahezu lagenweisen Wachstum beziehungsweise zu Terrassenstrukturen beobachtet. Weiteres Tempern bei  $300^\circ\text{C}$  bewirkte eine erhebliche Glättung der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Oberfläche. Der Großteil der Oberfläche bestand aus Terrassen, deren Kanten parallel zur  $[110]$ - und  $[\bar{1}10]$ -Richtung angeordnet sind. Die gemessenen Terrassenhöhen ( $2,8 \text{ \AA}$ ) und die atomaren Abstände des Adsorbates ( $5,65 \text{ \AA}$ ) deuteten auf die  $\text{DO}_3$ -Struktur von  $\text{Fe}_3\text{Si}$  hin. Zudem weisen die experimentellen Erkenntnisse darauf hin, dass die Oberfläche gemischt terminiert ist.

Eine Erhöhung der *Annealing*-Temperatur auf  $400^\circ\text{C}$  und  $500^\circ\text{C}$  hat verursacht, dass die  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht teilweise bis zum Substrat aufgerissen wurde. Die Kanten der Terrassen wiesen bei  $500^\circ\text{C}$  keine Vorzugsrichtung mehr auf. Durch das Variieren der *Annealing*-Temperatur wurde festgestellt, dass die optimale Temperatur für eine glatte  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Oberfläche zwischen  $250^\circ\text{C}$  und  $300^\circ\text{C}$  liegt. Unterhalb bzw. oberhalb dieser Temperatur zeigte die Oberfläche eine rauere Struktur.

Aus magnetischen Untersuchungen der  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schicht auf  $\text{GaAs}(001)$  ergibt sich, dass die Probe bei Raumtemperatur ferromagnetisch ist und eine geringe *in-plane*-uniaxiale Anisotropie aufweist. Das magnetische Moment pro Atom wurde bislang zu  $0,5\mu_B$  ermittelt, was im Vergleich zum Literaturwert von  $1,175\mu_B$  für Volumen- $\text{Fe}_3\text{Si}$  deutlich kleiner ausfällt.

Diese Abweichung kann zum einen durch Interdiffusion an der GaAs/Fe<sub>3</sub>Si-Grenzfläche und zum anderen durch Oxidation zustande kommen.

Um zu untersuchen, welchen Einfluss die Wachstumstemperatur auf die strukturellen und die magnetischen Eigenschaften von Fe<sub>3</sub>Si-Schichten auf GaAs(001) hat, Fe<sub>3</sub>Si bei einer erhöhten Wachstumstemperatur von 250°C aufgedampft. Nach der Deposition von 20 Monolagen Fe<sub>3</sub>Si zeigten die STM-Aufnahmen Netzwerke von Terrassen. Hysterese-Kurven bei dieser Wachstumstemperatur zeigten einen erhöhten Wert für das Koerzitivfeld, was möglicherweise auf die temperaturbedingten Defekte in der Schicht zurückzuführen war.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden strukturelle und magnetische Untersuchungen an dem Materialsystem Fe/ZnSe(001) durchgeführt. LEED-Aufnahmen der reinen ZnSe-Oberfläche zeigten eine c(2x2)-Rekonstruktion der ZnSe-Oberfläche. Eine STM-Messung der reinen ZnSe-Oberfläche war aufgrund der zu geringen Leitfähigkeit nicht möglich.

Nach der Deposition von Fe zeigten die LEED-Bilder wiederum Reflexe einer c(2x2)-Rekonstruktion, die von einer Se-Überstruktur verursacht wurde. Auf den STM-Bildern waren mehrere Eisen-Cluster zu erkennen. Anschließende *Annealing*-Prozesse bei 200°C bzw. 250°C führten zu keiner großen Änderung in der Morphologie der Oberfläche. Man konnte keine Terrassenbildung sowie Glättung der Oberfläche beobachtet.

Bei atomarer Skala war die Oberfläche von Terrassen dominiert, deren scharfe Kanten entlang [110] und  $[\bar{1}10]$  ausgerichtet waren. Der Se-Überstruktur auf der Oberfläche wurde auch mit den STM-Bildern bestätigt. Die Atomare Abstand von 3,62Å deutete auf eine c(2x2)-Se-Segregation hin.

Magnetische Untersuchungen zeigten, dass die ZnSe-Probe bei einer Bedeckung von 10 Monolagen Fe-Schichten ferromagnetisches Verhalten bei Raumtemperatur aufweist. *In-situ* Rotations-MOKE-Messungen ergaben, dass eine uniaxiale Anisotropie mit der leichten Achse in [110] vorliegt.

Als weitergehende Experimente sollen  $\text{Fe}_3\text{Si}$ -Schichten unterschiedlicher Dicke auf  $\text{GaAs}(001)$  untersucht werden. Daraus ließe sich insbesondere die Schichtdickenabhängigkeit des magnetischen Moments bestimmen, woraus man wie bereits erwähnt auf magnetisch inaktive Lagen an der Grenzschicht schließen könnte.

Desweiteren kann man die gleichen Untersuchungen von  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}$  auf  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{ZnSe}$  übertragen. Dabei ist es auch von Interesse, ob eine hohe Grenzflächenperfektion wie bei  $\text{Fe}/\text{ZnSe}(001)$  auftritt.

Für technische Anwendungen ist das System  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(110)$  von größerer Bedeutung, weswegen dieses analog untersucht werden soll.  $\text{Fe}_3\text{Si}$  ließe sich aufgrund des halbmetallischen Verhaltens auch gut als Spininjektionsschicht bei sogenannten Spaltkanten-LEDs verwenden, die mittels *Cleaved Edge Overgrowth* (CEO) ebenfalls in der Arbeitsgruppe Oberflächenphysik hergestellt werden.

# Literaturverzeichnis

---

- [Bau58] Bauer I.E.: *Phenomenological theory of crystal precipitation on surfaces*, Z. Kristallogr.110, 372, 1958
- [Ben01] Bensch F.: *Der magnetische Phasenübergang und das Einsetzen des Ferromagnetismus bei dünnen Eisenschichten auf Galliumarsenid*, Dissertation, Universität Regensburg, 2001
- [Ber00] Bertoni J.M.M.: *Struktur von GaAs-Oberflächen und ihre Bedeutung für InAs-Quantenpunkte*, Dissertation, Technischen Universität Berlin, 2000
- [Ber04] Bertacco R., Riva M., Cantoni M., Ciccacci F., Portalupi M., Brambilla A., Duó L., Vavassori P., Gustavsson F., George J.M., Marangolo M., Eddrief M. and Etgens V.H.: *Electronic, magnetic, and structural properties of the Fe/ZnSe interface*, Phys. Rev. B 69, 054421, 2004
- [Bie90] Biegelsen D.K., Bringans R.D., Northrup J. E. and Swartz L.E.: *Reconstructions of GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ) surfaces observed by scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. Lett. 65, 452, 1990
- [Bou00] Bourgognon C., Tatarenko S., Cibert J., Carbonell L., Etgens V.H., Eddrief M., Gilles B., Marty A., and Samson Y.: *Chemical ordering of epitaxial FePd deposited on ZnSe and the surfactant effect of segregated Se*, Appl. Phys. Lett. 76, 1455, 2000
- [Bun65] Bundy F.P.: *Pressure-Temperature Phase Diagram of Iron to 200 kbar, 900°C*, J. Appl. Phys. 36(2), 616, 1965
- [Bus97] Busse H., Kandler J., Eltester B., Wandelt K., Castro G.R., Hinarejos J.J., Segovia P., Chrost J., Michel E.G. and Miranda R.: *Metastable iron silicide phase stabilized by surface segregation on Fe<sub>3</sub>Si (100)*, Surf. Sci. 381, 133, 1997

- [Cha94] Chadi D.J.: *Doping in ZnSe, ZnTe, MgSe, and MgTe wide-band-gap semiconductors*, Phys. Rev. Lett. 72, 534 (1994).
- [Che93] C.J.Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*, Oxford, 1. Auflage,(1993)
- [Che94] Chen W., Kahn A., Soukiassian P., Mangat P.S., Gaines J., Ponzoni C., Olego D.: *ZnSe(100) surface: Atomic configurations, composition, and surface dipole*, Phys. Rev. B 49, 10790, 1994
- [Con90] Continenza A., Massidda S., and Freeman A.J.: *Metal-semiconductor interfaces: Magnetic and electronic properties and Schottky barrier in  $Fe_n/(ZnSe)_m(001)$  superlattices*, Phys. Rev. B 42, 2904, 1990
- [Ebe99] H. Ebert and YA. Perlov: 30. IFF-Ferienkurs, Forschungszentrum Jülich 1999. Kap. C5-32 Magneto-optische Effekte (Theorie)
- [Edd06] Eddrief M., Marangolo M., Etgens V.H., Ustaze S., Sirotti F., Mulazzi M., Panaccione G., Mosca D.H., Lépine B., and Schieffer P.: *Interface bonding of a ferromagnetic/semiconductor junction: A photoemission study of Fe/ZnSe001*, Phys. Rev. B 73, 115315, 2006
- [Far90] Farrell H.H. and Palmstrøm C.J.: *Reflection high energy electron diffraction characteristic absences in GaAs(100) (2×4)-As: A tool for determining the surface stoichiometry*, J. Vac. Sci. Technol. B 8, 903, 1990
- [Fra 49] Frank F.C. and van der Merwe J.H.: *One-Dimensional Dislocations. I. Static Theory*, Royal Society of London Proceedings Series A 198, 205, 1949
- [Gus02] Gustavsson F., Nordström E., Etgens V.H., Eddrief M., Sjöstedt E., Wäppling R., and George J.M.: *Magnetic moment and anisotropy at the Fe/ZnSe(001) interface studied by conversion electron Mössbauer spectroscopy*, Phys. Rev. B 66, 024405, 2002

- [Han58] Hansen M.: *Constitution of Binary Alloys*, McGraw-Hill, New York, 1958
- [Has 94] Hashizume T., Xue Q.K., Zhou J., Ichimiya A. and Sakurai T.: *Structures of As-rich GaAs(001)-(2 x 4) Reconstructions*, Phys. Rev. Lett. 73(16): 2208, 1994
- [Hen94] Henzler, M.: *Oberflächenphysik des Festkörpers*, Teubner Studienbücher, 1994
- [Her03] Herfort J., Schönherr H.P. and Ploog K.H.: *Epitaxial growth of Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001) hybrid structures*, Appl. Phys. Lett. 83(19), 3912, 2003
- [Her04] Herfort J., Schonherr H.P., Friedland K.J. and Ploog K.H.: *Structural and magnetic properties of epitaxial Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001) hybrid structures*, J. Vac. Sci. Technol. B 22(4), 2073- 2078, 2004
- [Her05] Herfort J., Schönherr H.-P., Kawaharazuka A., Ramsteiner M., and Ploog K.H.: *Epitaxial growth of Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001) hybrid structures for spintronic application*, J. Cryst. Growth 666, 278, 2005
- [Her08] Herper H.C. and Entel P.: *Interface structure and magnetism of Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(110) multilayers: An ab-initio study*, Philosophical Magazine 88(18), 2699, 2008
- [Hin76] Hines W.A., Menotti A.H., Budnick J.I., Burch T.J., Litrenta T., Niculescu V. and Raj K.: *Magnetization studies of binary and ternary alloys based on Fe<sub>3</sub>Si*, Phys. Rev. B 13, 4060, 1976
- [Hon91] Hong M., Chen H.S., Kwo J., Kortan A.R., Mannaerts J.P., Weir B.E. and Feldman L.C.: *MBE growth and properties of Fe<sub>3</sub>(Al,Si) on GaAs(100)*, J. Cryst. Growth 111(1-4), 984, 1991
- [Hsi92] Hsieh Y.F., Hong M., Kwo J., Kortan A.R., Chen H.S., Mannaerts J.P., *GaAs and Related Compounds 1991*, in: G.B. Stringfellow (Ed.), IOP Conference Series, 120, Institute of Physics, London, p. 95, 1992

- [Hsu07] Hsu Y.L., Lee Y.J., Chang Y.H., Huang M.L., Chiu Y.N., Ho C.C., Chang P., Hsu C.H., Hong M. and Kwo J.: *Structural and magnetic properties of epitaxial Fe<sub>3</sub>Si/GaAs heterostructures*, J. Cryst. Growth 301–302, 588–591, 2007
- [Ion05] Ionescu A., Vaz C.A.F., Trypiniotis T., Gürtler C.M., García-Miquel H., Bland J.A.C., Vickers M.E., Dalgliesh R.M., Langridge S., Bugoslavsky Y., Miyoshi Y., Cohen L.F. and Ziebeck K.R.A.: *Structural, magnetic, electronic, and spin transport properties of epitaxial Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001)*, Phys. Rev. B 71, 094401, 2005
- [Ich01] Ichimiya A., Nishikawa Y., and Uchiyama M.: *Surface structures of the GaAs(001)2×4 studied by RHEED rocking curves*, Surf. Sci. 493(1-3), 232, 2001
- [Jac93] Jackson, J. D.: *Klassische Elektrodynamik*, Walter de Gruyter, 1993
- [Jen08] Jenichen B., Kaganer V.M., Braun W., Shayduk R., Tinkham B. and Herfort J.: *In situ X-ray diffraction study of epitaxial growth of ordered Fe<sub>3</sub>Si films*, J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 19, 199, 2008
- [Jon91] Jonker B.T., Prinz G.A., and Idzerda Y.U.: *Interface formation and film morphology for growth of Fe and Co on ZnSe(001)*, J. Vac. Sci. Technol. B9, 2437,1991
- [Kag08] Kaganer V.M., Jenichen B.; Shayduk R. and Braun W.: *Structure of Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001) epitaxial films from x-ray crystal truncation rods*, Phys. Rev. B 77(12), 125325, 2008
- [Kaw04] Kawaharazuka A., Ramsteiner M., Herfort J., Schönherr H.P., Kostial H. and Ploog K.H.: *Spin injection from Fe<sub>3</sub>Si into GaAs*, Appl. Phys. Lett. 85, 3492, 2004
- [Klä97] Kläsges, R., Carbone C., Eberhardt W., Pampuch C., Rader O., Kachel T., and Gudat W.: *Formation of a ferromagnetic silicide at the Fe/Si(100) interface*, Phys. Rev. B 56, 10801, 1997

- [Kne03] Knepe, M.: *Initiale Nukleation bei der Deposition von Eisen auf Silizium und In-As(001)*, Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 2003
- [Kre87] Krebs J.J., Jonker T., and Prinz G.A.: J. Appl. Phys. 61, 3744: *Magnetic properties of single-crystal Fe films grown on ZnSe epilayers by molecular-beam epitaxy*, Appl. Phys. 61, 3744 (1987)
- [Kru09] Krumme B., Weis C., Herper H.C., Stromberg F., Antoniak C., Warland A., Schuster E., Srivastava P., Walterfang M., Fauth K., Minár J., Ebert H., Entel P., Keune W., and Wende H.: *Local atomic order and element-specific magnetic moments of Fe<sub>3</sub>Si thin films on MgO(001) and GaAs(001) substrates*, Phys. Rev. B 80, 144403, 2009
- [Kub82] Kubaschewski O.: *Iron Binary Phase Diagrams*, Springer, Berlin, 1982
- [LaB01] LaBella V. P., Bullock D. W., Ding Z., Emery C., Venkatesan A., Oliver W. F., Salamo G. J., Thibado P. M. und Mortazavo M.: *Spatially resolved spin-injection probability for gallium arsenide*. Science 292, 1518, 2001
- [Lio93] Liou S.H., Malhotra S.S., Shen J.X., Hong M., Kwo J., Chen H.S. and Mannáerts J.P.: *Magnetic properties of epitaxial single crystal ultrathin Fe<sub>3</sub>Si films on GaAs (001)*, J. Appl. Phys. 73 (10), 6766, 1993
- [Mar02] Marangolo M., Gustavsson F., Eddrief M., Saintavit Ph., Etgens V.H., Cros V., Petroff F., George J.M., Bencok P., and Brookes N.B.: *Magnetism of the Fe/ZnSe(001) Interface*, Phys. Rev. Lett. 88, 217202, 2002
- [Mar04] Marangolo M., Gustavsson F., Guichar G.M., Eddrief M., Varalda J., Etgens V.H., Rivoire M., Gendron F., Magnan H., Mosca D.H., and George J.-M.: *Structural and magnetic anisotropies of Fe/ZnSe(001) thin films*, Phys. Rev. B 70, 134404, 2004

- [Mol96] Moll N., Kley A., Pehlke E. and Scheffler M.: *GaAs equilibrium crystal shape from first principles*, Phys. Rev. B 54, 8844, 1996
- [Nak88] Nakamura Y.: *Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements, Part 2*, Landolt-Börnstein New Series III/19c, Springer Verlag, Berlin, Germany, 1988
- [Nic76] Niculescu V., Raj K., Budnick J.I., Burch T.J., Hines W.A. and Menotti A.H.: *Relating structural, magnetization, and hyperfine field studies to a local environment model in  $Fe_{3-x}V_xSi$  and  $Fe_{3-x}Mn_xSi$* , Phys. Rev. B 14, 4160, 1976
- [Noh96] Noh D.Y., Hwu Y., Je J.H., Hong M. and Mannáerts J.P.: *Strain relaxation in  $Fe_3(Al,Si)/GaAs$ : An x-ray scattering study*, Appl. Phys. Lett. 68 (11), 1528, 1996
- [Nor93] Northrup J.E. and Froyen S.: *Energetics of  $GaAs(100)-(2\times 4)$  and  $-(4\times 2)$  reconstructions*, Phys. Rev. Lett. 71, 2276, 1993
- [Pas89] Pashley M.D.: *Electron counting model and its application to island structures on molecular-beam epitaxy grown  $GaAs(001)$  and  $ZnSe(001)$* , Phys. Rev. B 40, 10481, 1989
- [Rei00] Reiger E., Reinwald E., Garreau G., Ernst M., Zölfl M., Bensch F., Bauer S., Preis H. and Bayreuther G.: *Magnetic moments and anisotropies in ultrathin epitaxial Fe films on  $ZnSe(001)$* , J. Appl. Phys. 87, 5923, 2000
- [San02] Sanyal B. and Mirbt S.: *Structural and magnetic properties of  $Fe/ZnSe(001)$  interfaces*, Phys. Rev. B 65, 144435, 2002
- [Sax01] Saxena S.S. and Littlewood P.B.: *Superconductivity: Iron cast in exotic role*, Nature 412, 290, 2001

- [Sch01] Schmidt W.G., Bechstedt F., Fleischer K., Cobet C., Esser N., Richter W., Bernholc J. and Onida G.: *GaAs(001): Surface Structure and Optical Properties*, Phys. stat. sol. 188(4), 1401, 2001
- [Sjö02] Sjöstedt E., Nordström L., Gustavsson F., and Eriksson O.: *Uniaxial Magnetocrystalline Anisotropy of Metal/Semiconductor Interfaces: Fe/ZnSe(001)*, Phys. Rev. Lett. 89, 267203, 2002
- [Sta97] Starke U., Meier W., Rath C., Schardt J., Weiss W., and Heinz K.: *Phase transition and atomic structure of an Fe<sub>3</sub>Si(100) single crystal surface*, Surf. Sci. 377, 539, 1997
- [Sta01] Starke U., Schardt J., Weiss W., Meier W., Polop C., de Andres P.L. and Heinz K.: *Structural and compositional reversible phase transitions on low-index Fe<sub>3</sub>Si surfaces*, Europhys. Lett., 56 (6), 822, 2001
- [Str37] Stranski N.I. and Krastanow L.: *Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander*, Monatshefte für Chemie 71, 1, 351, 1937
- [Thi96] Thibado P.M., Kneedler E., Jonker B.T., Bennett B.R., Shanabrook B.V., and Whitman L.J.: *Nucleation and growth of Fe on GaAs(001)-(2×4) studied by scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. B 53, R10481, 1996
- [Tho09] Thomas J., Schumann J., Vinzelberg H., Arushanov E., Engelhard R., Schmidt O.G. and Gemming T.: *Epitaxial Fe<sub>3</sub>Si films on GaAs(100) substrates by means of electron beam evaporation*, Nanotechnology 20, 235604, 2009
- [Tom97] Tomiya S., Minatoya R., Tsukamoto H., Itoh S., Nakano K., Morita E., and Ishibashi A.: *Surface morphology changes in ZnSe-related II–VI epitaxial films grown by molecular beam epitaxy*, J. Appl. Phys. 82, 2938, 1997

- [Urb05] Urban, C.: *Aufbau einer UHV-MOKE-Messapparatur und Messungen von Eisenschichten auf Indiumarsenid und Galliumarsenid*, Diplomarbeit, Ruhr-Universität Bochum, 2005
- [Vol26] Volmer M. and Weber A.: *Nucleus formation in supersaturated systems*, in: Z. Physik. Chem. 119, 277, 1926
- [Vos89] Vos M., Xu F., Anderson S.G., and Weaver J.H., Cheng H.: *Photoemission studies of interface chemistry and Schottky barriers for ZnSe(100) with Ti, Co, Cu, Pd, Ag, Au, Ce, and Al*, Phys. Rev. B 39, 10744, 1989
- [Web88] Webster P. J. and Ziebeck K.R.A.: *in Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements, Part 2*, edited by H.R.J. Wijn, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 19/c, Springer, Berlin, 1988
- [Wei10] Weiss C., Krumme B., Herper H.C., Stromberg F., Antoniak C., Warland A., Entel P., Keune W. and Wende H.: *Magnetic properties of ultrathin Fe<sub>3</sub>Si films on GaAs(001)*, Journal of Physics: Conference Series, 200, 7, 072105, 2010
- [Xue95] Xue Q., Hashizume T., Zhou J.M., Sakata T., Ohno T. and Sakurai T.: *Structures of the Ga-rich 4×2 and 4×6 reconstructions of the GaAs(001) surface*, Phys. Rev. Lett. 74, 3177, 1995
- [Yam08] Yamada Y., Wakaya I., Ohuchi S., Yamamoto H., Asaoka H., Shamoto S. and Udono H.: *Surface preparation and characterization of single crystalline β-FeSi<sub>2</sub>*. Surf. Sci. 602(18), 3006, 2008
- [Yoo74] Yoon S. and Booth Y.G.: *Structural and magnetic properties of Fe<sub>3-x</sub>Mn<sub>x</sub>Si alloys*. Phys. Lett. 48A, 381, 1974

# Danksagung

---

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Ulrich Köhler für die Bereitstellung des Arbeitsplatzes, die interessante Themenstellung meiner Masterarbeit und die ständige Gesprächsbereitschaft.

Bei Herrn Prof. Dr. Kurt Westerholt bedanke ich mich für die Übernahme des Koreferates.

Den Mitgliedern der Arbeitsgruppe Oberflächenphysik, Sani Noor, Carsten Godde und Martin Kroll, möchte ich für die gute Zusammenarbeit, die freundliche Arbeitsatmosphäre und die schöne Zeit im und außerhalb des Labors danken. Besonders erwähnen möchte ich Sani Noor, der mir stets mit Rat und Tat zur Seite stand.

Weiterhin sei allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Oberflächen Physik für die angenehme Arbeitsatmosphäre und Hilfsbereitschaft gedankt, insbesondere den technischen Mitarbeitern Elisabeth Bartling und Cornelia Leschke.

Letztendlich gilt mein herzlichster Dank meiner Familie und meiner Freundin, die mich während meines Studiums unterstützt haben.