

Doctoral thesis / *Dissertation*

for the doctoral degree / *zur Erlangung des Doktorgrads*

Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

Structural analysis and magnetic properties of 3d transition-metal
oxide chains on Ir(001) and Pt(001)

*Strukturanalyse und magnetische Eigenschaften von Ketten aus
3d-Übergangsmetalloxiden auf Ir(001) und Pt(001)*



Submitted by / *Vorgelegt von*

Martin Schmitt

from / *aus*

Leinach

Würzburg, 2019

Submitted on / *Eingereicht am* 28.02.2019

Stamp / *Stempel* Graduate School

Members of thesis committee / *Mitglieder des Promotionskomitees*

Chairperson / *Vorsitz:*

1. Reviewer and Examiner / 1. *Gutachter und Prüfer:* Prof. Dr. Matthias Bode
2. Reviewer and Examiner / 2. *Gutachter und Prüfer:* Prof. Dr. Fakher Assaad
3. Examiner / 3. *Prüfer:* Prof. Dr. Roland Baumhauer

Additional Examiners / *Weitere Prüfer:*

Day of thesis defense / *Tag des Promotionskolloquiums:* 14.10.2019

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden die strukturellen und magnetischen Eigenschaften verschiedener $3d$ -Übergangsmetalloxidketten (TMO-Ketten) auf Ir(001) und Pt(001) untersucht. Diese weisen eine (3×1) Struktur mit periodisch angeordneten Ketten auf, die nur über die Sauerstoffbindung an das Substrat gekoppelt sind. Während die Struktur durch experimentelle und theoretische Untersuchungen bestätigt ist, liegen für die magnetischen Eigenschaften ausschließlich Rechnungen vor. Zur Überprüfung dieser theoretischen Vorhersagen wird die Methode der spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie (SP-STM) verwendet, die die Abbildung der magnetischen Ordnung mit atomarer Auflösung erlaubt.

Die Untersuchungen beginnen mit der Vorstellung der Ir(001) Oberfläche, die eine (5×1) Rekonstruktion aufweist. Eine Aufhebung dieser Rekonstruktion erreicht man durch das Heizen des Ir-Substrats in Sauerstoffatmosphäre unter Bildung einer (2×1) Sauerstoffrekonstruktion. Die Qualität der Oberfläche hängt dabei von der Wachstumstemperatur T und dem verwendeten Sauerstoffdruck p_{O_x} ab. Die bei $T = 550^\circ \text{C}$ und $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar hergestellte Sauerstoffrekonstruktion dient als Ausgangspunkt für die folgenden Präparationen von CoO_2 , FeO_2 und MnO_2 -Ketten. Dazu wird jeweils eine drittel Monolage (ML) des Übergangsmetalls auf die Oberfläche des Substrates gedampft und die Probe unter Sauerstoffatmosphäre ein weiteres Mal geheizt. Auf diese Weise kann die (3×1) Struktur der bekannten Ketten bestätigt und die Gruppe der TMO-Ketten um die CrO_2 -Ketten erweitert werden.

In der einschlägigen Fachliteratur wurden Vorhersagen bezüglich der magnetischen Struktur der TMO-Ketten publiziert, wonach entlang und zwischen CoO_2 -Ketten eine ferromagnetische (FM) und für FeO_2 und MnO_2 -Ketten eine antiferromagnetische (AFM-) Kopplung vorliegt. Während die Überprüfung dieser Vorhersagen mit SP-STM für CoO_2 und CrO_2 -Ketten keine Hinweise auf magnetische Strukturen liefert, liegen bei FeO_2 und MnO_2 -Ketten unterschiedliche magnetische Phasen vor. In der Tat kann mit den experimentell gefundenen Einheitszellen die AFM-Kopplung entlang beider Ketten bestätigt werden. Im Gegensatz widersprechen die Kopplungen zwischen den Ketten den Berechnungen. Bei FeO_2 -Ketten liegt eine stabile FM Ordnung vor, die zu einer magnetischen (3×2) Einheitszelle mit einer leichten Magnetisierung in Richtung der Oberflächennormalen führt (out-of-plane). Die MnO_2 -Ketten weichen ebenfalls von der berechneten magnetischen kollinearen Ordnung zwischen benachbarten Ketten ab und zeigen eine chirale Struktur. Durch die Rotation der Mn-Spins um 120° in der Probenebenen (in-plane) entsteht eine magnetische (9×2) Einheitszelle, deren Peri-

ode durch neue DFT-Rechnungen bestätigt wird. Nach diesen Berechnungen handelt es sich um eine Spinspirale, die durch die Dzyaloshinskii-Moriya (DM-) Wechselwirkung bei einem Energiegewinn von 0,3 meV pro Mn-Atom gegenüber den kollinearen FM-Zustand stabilisiert wird. Diese wird ähnlich wie bei bereits publizierten Clustern und Adatomen auf Pt(111) durch die Rudermann-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY-) Wechselwirkung vermittelt und erklärt den experimentell gefundenen einheitlichen Drehsinn der Spiralen.

Die RKKY-Wechselwirkung zeigt eine starke Abhängigkeit von der Fermi-Oberfläche des Substrats. Im folgenden Kapitel werden deshalb mit TMO-Ketten auf Pt(001) die strukturellen und magnetischen Eigenschaften auf einem weiteren Substrat analysiert, wobei zum Zeitpunkt der Arbeit nur die Existenz der CoO₂-Ketten aus der Literatur bekannt war. Vergleichbar mit Ir(001) besitzt auch Pt(001) eine rekonstruierte Oberfläche, die sich aber stabil gegenüber Oxidation zeigt. Dadurch muss die drittel ML des Übergangsmetalls direkt auf die Rekonstruktion aufgedampft werden. Das Wachstum des Übergangsmetalls ist dabei von der Temperatur des Substrats abhängig und beeinflusst das Ergebnis der nachfolgenden Oxidation. Diese erfolgt analog zum Wachstum der Ketten auf Ir(001) durch das Heizen der Probe in Sauerstoffatmosphäre und resultiert nur für das Aufdampfen des Übergangsmetalls auf kalte Pt(001) Oberflächen in Ketten mit der Periode von $3a_{\text{Pt}}$. Auf diese Weise kann nicht nur die (3×1) Struktur der CoO₂-Ketten bestätigt werden, sondern auch durch atomare Auflösung die Gruppe der TMO-Ketten um MnO₂-Ketten auf Pt(001) erweitert werden. Im Gegensatz dazu sind die nicht magnetischen Messungen im Fall von Fe nicht eindeutig. Zwar liegen auch hier Ketten im Abstand des dreifachen Pt Gittervektors vor, trotzdem ist die (3×1) Struktur nicht nachweisbar. Dies liegt an einer Korrugation mit einer Periode von $2a_{\text{Pt}}$ entlang der Ketten, was ein Hinweis auf eine Peierls Instabilität sein kann. Entsprechend dem Vorgehen für Ir(001) werden für die TMO-Ketten auf Pt(001) SP-STM Messungen durchgeführt und die Vorhersage einer AFM-Kopplung für CoO₂-Ketten überprüft. Auch hier können, wie im Fall von CoO₂-Ketten und im Widerspruch zur Vorhersage, für beide Polarisationsrichtungen der Spitze keine magnetischen Strukturen gefunden werden. Darüber hinaus verhalten sich die MnO₂-Ketten auf Pt(001) mit ihrer chiralen magnetischen Struktur ähnlich zu denen auf Ir(001). Dies bestätigt die Annahme einer indirekten DM-Wechselwirkung, wobei durch die 72° Rotation der Mn-Spins eine längere Periode der zyklidalen Spinspirale festgestellt wird. Die Erklärung dafür liegt in der Abhängigkeit der RKKY-Wechselwirkung vom Fermi-Wellenvektor des Substrats, während sich die DM-Wechselwirkung beim Übergang von Ir zu Pt nur wenig ändert.

Abstract

In this work the structural and magnetic properties of various $3d$ transition-metal oxide (TMO) chains on Ir(001) and Pt(001) are investigated. These exhibit a (3×1) structure with periodically arranged chains that are only coupled to the substrate by oxygen bonds. While the structure is confirmed by experiments and theory, the magnetic coupling is merely available by theory. To verify these theoretical predictions, the method of spin-polarized scanning tunneling microscopy (SP-STM) is used, which enables the detection of magnetic nanostructures by the high lateral resolution.

First the Ir(001) surface is introduced, which exhibits a (5×1) reconstruction. Removal of this reconstruction is achieved by heating the Ir substrate in oxygen atmosphere to form a (2×1) oxygen reconstruction. The observed surface quality depends on both, the temperature T and the oxygen pressure p_{O_x} during growth. The best result is achieved with $T = 550^\circ\text{C}$ and $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar and thus serves as the starting point for the following preparations of CoO_2 , FeO_2 and MnO_2 chains. In each case one third of the monolayer (ML) of the transition-metal is evaporated onto the substrate and the sample is heated once more under an oxygen atmosphere. After this procedure not only the (3×1) structure of the known chain system is confirmed, but also the group of TMO chains could be extended by the CrO_2 chains.

In the literature, predictions have been published regarding the magnetic structure of the TMO chains. According to these, the coupling is ferromagnetic (FM) along and between CoO_2 chains and antiferromagnetic (AFM) for FeO_2 and MnO_2 chains. While SP—STM results do not suggest a magnetic structure for CoO_2 and CrO_2 , the measurements reveal magnetic structures for FeO_2 and MnO_2 chains. Comparing the calculations with the experimentally observed magnetic order, the AFM coupling along both TMO—chains can be confirmed. Contradictory to the theoretical predictions, the interchain coupling differs. For FeO_2 chains we find stable FM coupling which lead to a magnetic (3×2) unit cell with an easy magnetization direction parallel to the surface normal (out-of-plane). The MnO_2 also deviate from the calculated collinear order between adjacent chains and show a chiral system. The in-plane rotation of the Mn spins by 120° form a magnetic (9×2) unit cell whose period is confirmed by new DFT calculations. According to these calculations, the spin spiral is stabilized by the Dzyaloshinskii—Moriya interaction (DMI) with an energy gain of 0,3 meV per Mn atom with respect to the collinear FM state. Similar to already published systems consisting of magnetic clusters and adatoms on a Pt(111) surface, the DMI is mediated by the Rudermann—Kittel—Kasuya—Yoshida (RKKY) interaction and explains the

experimentally found uniform direction of rotation of the spirals.

The RKKY interaction depends on the Fermi surface of the substrate. Based on this fact, the growth of TMO chains is investigated in the following chapter, where only the existence of CoO_2 chains is known from literature at the time of this work. Similar to $\text{Ir}(001)$, $\text{Pt}(001)$ also has a reconstructed surface that is now stable to oxidation. As a consequence, the transition-metal is evaporated directly on the reconstructed surface. Both the growth of the transition metal on the $\text{Pt}(001)$ and the topography after the following growth procedure of TMO chains depend on the substrate temperature during evaporation. This procedure follows the TMO growth on $\text{Ir}(001)$ by heating the sample in oxygen atmosphere and only results in a stripe pattern with a period of $3a_{\text{Pt}}$ for the evaporation on cold $\text{Pt}(001)$. In this way not only the (3×1) structure of the CoO_2 can be confirmed, but also the group of TMO chains is extended by MnO_2 chains through atomic resolution scans. In contrast, the non-magnetic measurements in the case of Fe are not obvious. Although there are chains with the expected period of $3a_{\text{Pt}}$, the (3×1) structure is not fully resolved along the chains due to a corrugation with a period of 2_aPt along the chains, which could be an indication of a Peierls instability. Following the procedure for $\text{Ir}(001)$ SP-STM investigations are performed to verify the prediction of an AFM coupling for CoO_2 chains. Indeed, no magnetic structures of CoO_2 chains are observed for both directions of tip polarization identical to the same chains on $\text{Ir}(001)$. In addition, the MnO_2 chains with their chiral magnetic structure on $\text{Pt}(001)$ behave similarly to those on $\text{Ir}(001)$. This confirms the assumption of an indirect DM interaction, where the 72° rotation of the Mn spins indicates a longer period of the cycloidal spin spiral. The explanation for this can be found in the dependence of the RKKY interaction on the Fermi wave vector of the substrate, while the DM interaction changes only slightly due to the transition from Ir to Pt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie	3
2.1	Das eindimensionale Rechteckpotential	3
2.2	Ansatz von Bardeen und Tersoff-Hamann Model	6
2.3	Funktionsweise des STM	8
2.4	Rastertunnelspektroskopie	10
2.5	Spinpolarisiertes STM	11
2.6	Experimenteller Aufbau	13
3	Magnetische Wechselwirkungen	17
3.1	Atomarer Magnetismus	17
3.2	Heisenberg Austausch	19
3.3	Direkter und indirekter Austausch	20
3.4	RKKY-Wechselwirkung	21
3.5	Magnetische Anisotropie	22
3.6	Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung	22
3.7	Indirekte Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung	24
3.8	Charakterisierung von magnetischen Spitzen	25
3.8.1	Präparation von magnetischen Spitzen	25
3.8.2	DL Fe/W(110)	26
4	Ketten aus Übergangsmetalloxiden auf Ir(001)	31
4.1	Aktueller Stand der Forschung	32
4.2	Ir(001) Oberfläche	35
4.3	Oxidation von Ir(001)	36
4.4	Wachstum der TMO-Ketten	41
4.4.1	CoO ₂ -Ketten	41
4.4.2	FeO ₂ -Ketten	45
4.4.3	MnO ₂ -Ketten	51
4.4.4	CrO ₂ -Ketten	65

5 Ketten aus Übergangsmetalloxiden auf Pt(001)	71
5.1 Aktueller Stand der Forschung	72
5.2 Die Pt(001)-Oberfläche	72
5.3 Wachstum der TMO-Ketten auf Pt(001)	75
5.3.1 CoO ₂ -Ketten	75
5.3.2 FeO ₂ -Ketten	79
5.3.3 MnO ₂ -Ketten	84
6 Zusammenfassung und Ausblick	95
Literatur	97
Anhang	107
Abbildungsverzeichnis	108
Tabellenverzeichnis	110
Abkürzungsverzeichnis	111
Verzeichnis eigener Publikationen	112

1 Einleitung

Die heutige Informationstechnologie verlangt nach immer kleineren und effizienteren Bauteilen. Großes Potenzial könnte hier im Übergang von rein elektronischen Bauteilen zur Spintronik liegen [1–3]. Ein Bereich dieses aktuellen Forschungsgebiets beschäftigt sich mit der Anwendung von Spintronik in Speichermedien. Dabei sind die Kontrolle und die gezielte Manipulation von magnetischen Nanostrukturen entscheidende Faktoren, die es bei der Verkleinerung magnetischer Speicher zu beachten gibt.

Außerdem erfordert das Speichern von Daten zwei verschiedene magnetische Zustände, die beide ein entartetes lokales Minimum der Energie darstellen und die Binärzahlen 0 und 1 repräsentieren [2]. Die notwendige zeitliche Stabilität zwischen Schreibe- und Auslesevorgängen kann durch die Kombination einer großen Energiebarriere zwischen den beiden Zuständen durch die magnetische Anisotropie und einer Schicht für die Entkopplung des Spins vom Substrat erreicht werden [4–6]. Dadurch soll eine Änderung des gespeicherten magnetischen Zustands durch Wechselwirkungen der Spins mit Phononen und Leitungselektronen verhindert werden.

Während in diesem Ansatz die Wechselwirkung zwischen den Spins und den metallischen Substraten unterdrückt werden soll, nutzt eine andere Methode gerade die Wechselwirkung der Spins mit den Leitungselektronen des Substrats [7, 8]. Die dadurch mittels RKKY-Wechselwirkung vermittelte magnetische Kopplung stabilisiert einen bistabilen Zustand und kommt ebenfalls für zukünftige magnetische Datenspeicher infrage. Ein Problem stellt jedoch die Herstellung der magnetischen Cluster dar, die im Moment mit Hilfe von atomarer Manipulation durch die Spitze eines Rastertunnelmikroskops (STM) zeitaufwendig ist. Eine günstigere Situation stellt das eigenständige Wachstum magnetischer Strukturen dar. Die Möglichkeiten reichen hier von magnetischen Streifen entlang von Stufenkanten der Substrate [9, 10] bis hin zu magnetischen Doppelreihen auf rekonstruierten Oberflächen [11].

Ein weiteres magnetisches 1D System stellte Ferstl *et. al.* [12–14] vor, bei dem sich bis zu 100 nm lange Ketten aus Übergangsmetalloxiden (TMO) in einen von selbst ablaufenden Wachstum bilden. Dabei konnte nicht nur eine geordnete (3×1) Struktur, sondern auch über die Dichtefunktionaltheorie (DFT) die magnetische Kopplung der Ketten berechnet werden. Danach weisen CoO_2 -Ketten eine ferromagnetische (FM) und FeO_2 sowie MnO_2 -Ketten eine antiferromagnetische (AFM) Ordnung entlang von Ketten auf. Außerdem ermöglicht die periodische Anordnung eine Berechnung der Kopplung zwischen den Ketten. Mit einem Energiegewinn von

4 meV pro Atom liegt eine FM-Kopplung für Co vor, während für Fe mit 9 meV und Mn mit 0,4 meV eine AFM-Wechselwirkung berechnet wird.

In dieser Arbeit sollen die berechneten kollinearen magnetischen Strukturen dieser TMO-Ketten mit Hilfe von SP-STM überprüft werden. Dazu folgt im ersten Kapitel zum Verständnis von STM, STS und SP-STM zunächst eine Einführung in die Theorie des Tunneleffekts. Im zweiten Kapitel werden die für diese Arbeit notwendigen magnetischen Wechselwirkungen vorgestellt und das Referenzsystem der DL Fe/W(110) für magnetische Messungen diskutiert. Danach wird im dritten Kapitel das Wachstum von CoO₂, FeO₂ und MnO₂-Ketten überprüft und mit CrO₂ ein weiteres Mitglied der TMO-Ketten auf Ir(001) vorgestellt. Zur Überprüfung der DFT-Rechnungen folgen jeweils im Anschluss an die Wachstumsstudie magnetische Messungen, die für FeO₂ und MnO₂ eine magnetische Kopplung entlang und zwischen den Ketten bestätigt.

Die magnetische Kopplung zwischen den Ketten wird dabei durch die RKKY-Wechselwirkung bestimmt. Da diese eine Abhängigkeit vom Fermivektor des Substrats besitzt, werden im Anschluss das Wachstum sowie die magnetischen Eigenschaften von CoO₂, FeO₂ und MnO₂-Ketten auf Pt(001) diskutiert. Dabei wird auch in diesem Fall für MnO₂ eine ähnliche chirale magnetische Kopplung zwischen den Ketten festgestellt, die auf der indirekten Dzyaloshinskii–Moriya (DM) Wechselwirkung zurückzuführen ist. Abschließend folgt eine Zusammenfassung der Ergebnisse.

2 Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie (**Scanning Tunneling Microscopy – STM**) zum Verständnis der im experimentellen Teil diskutierten Messungen erläutert. Nach der Behandlung des quantenmechanischen Tunnelprozesses an einer endlichen, eindimensionalen Potentialbarriere folgt anschließend mit dem Ansatz von Bardeen für das Tunneln zwischen Vielteilchenzuständen ein realistischeres Modell, das durch Tersoff-Hamann auf das STM angewendet wird. Während dieses Modell als Basis für das Verständnis des hohen Auflösungsvermögens dient und strukturelle sowie elektronische Eigenschaften hiermit beschrieben werden können, ermöglicht die Erweiterung des Systems um den Spinanteil die Analyse von magnetischen Eigenschaften der gemessenen Proben. Der letzte Abschnitt behandelt deshalb die spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie (**Spin Polarized STM – SP-STM**) und orientiert sich an der Veröffentlichung von Bode [15]. Des Weiteren ist der Leser für eine ausführliche Diskussion der in den folgenden Abschnitten dargestellten theoretischen Grundlagen auf die Bücher von Wiesendanger [16] und Chen [17] sowie auf die angegebenen Quellen verwiesen.

2.1 Das eindimensionale Rechteckpotential

Als Einstieg der theoretischen Behandlung des STM dient die eindimensionale Potentialbarriere, die als stark vereinfachtes Modell angesehen werden kann. Das Modell in Abb. 2.1 enthält dabei drei Bereiche, wobei Bereich 1 & 3 die metallische Spitze bzw. Probe darstellt. Der Bereich 2 mit einer Breite von d ist durch die Positionen $x = 0$ und $x = d$ definiert und stellt eine Energiebarriere der Höhe V_0 durch das Vakuum zwischen Probe und Spitze dar. Im klassischen Fall, Abb. 2.1(a), wird ein von links kommendes Teilchen mit einer kinetischen Energie von $E < V_0$ an der Barriere am Ort $x = 0$ durch einen elastischen Stoß reflektiert. Deshalb ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der Barriere null und erst für $E > V_0$ ist eine Transmission von Bereich 1 zu Bereich 3 möglich.

Dies ändert sich beim Übergang zur quantenmechanischen Betrachtung des Problems, das in Abb. 2.1(b) skizziert ist. Durch den Welle-Teilchen Dualismus können Elektronen mit Hilfe einer Wellenfunktion beschrieben werden und besitzen eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der Barriere und im Bereich 3. Zur Bestimmung der dazugehörigen Transmission wird zunächst

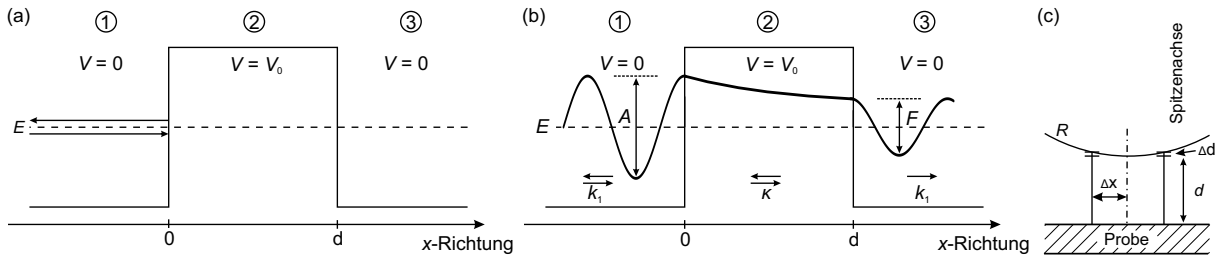


Abbildung 2.1 Die 1D Potentialbarriere. (a) Ein von links kommendes Teilchen aus Bereich 1 mit der kinetischen Energie $E < V_0$ wird an der Potentialbarriere bei $x = 0$ durch einen elastischen Stoß reflektiert. (b) Eine von links kommende Welle aus Bereich 1 der Energie $E < V_0$ wird nur zum Teil von der Potentialbarriere reflektiert. Die Welle besitzt quantenmechanisch eine mit der Breite d exponentiell abfallende Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich 3. F ist dabei der transmittierte Anteil der ursprünglichen Amplitude A . Die Energie E und der Wellenvektor k bleiben erhalten. (c) Schematische Darstellung zur Abschätzung der lateralen Auflösung einer sphärischen Spitze. Mit steigender Distanz Δx von der Spitzenachse vergrößert sich der Abstand zur Probe [18]

die eindimensionale Schrödingergleichung

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

in den Regionen $i = 1-3$ angesetzt. Für ein von links einfallendes Elektron mit der Energie $E < V_0$ ergeben sich die jeweils folgenden Lösungen

$$\psi_i(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, & 0 \leq x \leq d \\ Fe^{ikx}, & x > d \end{cases} \quad (2.1)$$

für die Teilabschnitte. Im ersten Bereich ist die Lösung eine lineare Kombination mit den Amplituden A und B sowie dem Wellenvektor

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2.2)$$

einer nach rechts laufenden und einer bei $x = 0$ reflektierten nach links laufenden Welle. Im Unterschied dazu liegt im Bereich der Potentialbarriere mit der Abklingrate

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (2.3)$$

eine lineare Kombination von zwei exponentiell abfallenden Wellenfunktionen mit den Koeffizienten C und D vor. Auch hier wird die Reflexion an der Potentialstufe bei $x = d$ durch den Parameter D berücksichtigt. Da es im dritten Bereich zu keiner weiteren Reflexion kommt, erhält man nur eine nach rechts laufende Welle, deren Betragsquadrat $T = |F|^2$ die Aufenthalts-

wahrscheinlichkeit des Elektrons im Bereich $x > d$ beschreibt. Zur Bestimmung der komplexen Koeffizienten B, C, D und F kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Amplitude der einlaufenden Welle auf $A = 1$ gesetzt werden. Unter Berücksichtigung der Kontinuitätsbedingungen an den Potentialstufen bei $x = 0$ sowie $x = d$ erhält man aus den vier Gleichungen $\psi_1(x = 0) = \psi_2(x = 0)$, $\psi_2(x = d) = \psi_3(x = d)$, $\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$ und $\frac{d\psi_2}{dx}(d) = \frac{d\psi_3}{dx}(d)$ den gesuchten Anteil des transmittierten Anteils der Wellenfunktion:

$$T = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa d) + 4k^2\kappa^2}. \quad (2.4)$$

Die Annahme einer starken Dämpfung der Wellenfunktion durch die Barriere mit $\kappa d \gg 1$, was nach Gleichung 2.3 unter der Bedingung $E \ll V_0$ erfüllt ist, führt mit

$$T \propto \exp \left[-2d \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \right] \quad (2.5)$$

zu einer exponentiellen Abhängigkeit des Transmissionsfaktors von der Breite d der Potentialbarriere. Überträgt man dieses anschauliche Modell auf das STM, stellt das Vakuum zwischen Spitze und Probe die Barriere dar. Zusätzlich kommt es mit der Transmissionswahrscheinlichkeit T für Elektronen zu einer analogen Beziehung für den Tunnelstrom mit

$$I_T \propto e^{-2\kappa d}. \quad (2.6)$$

Schon anhand der in diesem Abschnitt diskutierten eindimensionalen Tunnelbarriere wird die Eigenschaft einer hohen lateralen Auflösung unter Ausnutzung des Metall-Isolator-Metall Übergangs deutlich. Bei den typischen Abklingkonstanten im Bereich von $\kappa = 1 \text{ \AA}$ [17] führt eine Vergrößerung des Abstands um $\Delta d = 1 \text{ \AA}$ nach Gleichung 2.6 zu

$$I_T \propto e^{-2\kappa(d_0 + \Delta d)} = e^{-2} \cdot e^{-2\kappa d_0} = 0,14 \cdot I_0 \quad (2.7)$$

und damit zu einer Reduzierung des ursprünglichen Tunnelstroms I_0 um etwa eine Größenordnung. Aus dieser Sensitivität gegenüber Abstandsänderungen kann anhand einer Modellspitze mit Radius $R = 10 \text{ \AA}$ eine Abschätzung der lateralen Auflösung vorgenommen werden [18]. Aufgrund der sphärischen Krümmung der Spitze vergrößert sich in Abb. 2.1(c) der Abstand zur Probe mit größerer Distanz Δx von der Spitzenachse um $\Delta d \propto (\Delta x)^2 / 2R$. Nimmt man hier den Abfall des Stroms um eine Größenordnung als Maßstab, erhält man mit $\Delta x = 4,5 \text{ \AA}$ ein laterales Auflösungsvermögen von $2 \cdot \Delta x = 9 \text{ \AA}$ [18].

2.2 Ansatz von Bardeen und Tersoff-Hamann Model

Zwar erhält man über die Betrachtung der eindimensionalen Potentialbarriere eine erste Abschätzung für das laterale Auflösungsvermögen, dennoch ist dieses Modell nur eine starke Vereinfachung. Die Entwicklung des STM im Jahr 1982 und die ersten Messergebnisse durch Binnig und Rohrer verlangten jedoch nach einer genauen und realistischeren theoretischen Beschreibung des Tunnelprozesses [19–21]. Als Grundlage dafür diente die Betrachtung eines Metall–Isolator–Metall Übergangs durch Bardeen, die von Tersoff-Hamann auf das STM übertragen wird [22–24].

In seinen Ansatz betrachtet Bardeen zwei metallische Elektroden, die durch einen Isolator voneinander getrennt sind. Bei einem großen Abstand kann die Schrödingergleichung für die jeweiligen Elektroden separat betrachtet werden und es kommt zu den stationären Zuständen ψ_μ für Elektrode 1 (Spitze) und ψ_ν für die Elektrode 2 (Probe). Reduziert man den Abstand, gehen beide Potentiale der Elektroden in die Schrödingergleichung ein. Daraus folgt unter Verwendung der zeitabhängigen Störungstheorie erster Ordnung für schwach wechselwirkende Systeme und Fermis goldener Regel mit [18]

$$I_T \propto \sum_{\mu\nu} \underbrace{(f(E_\mu - E_F) [1 - f(E_\nu - E_F)])}_{I_{P \rightarrow S}} - \underbrace{f(E_\nu - E_F) [1 - f(E_\mu - E_F)]}_{I_{S \rightarrow P}} |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu) \quad (2.8)$$

der Ausdruck für den Tunnelstrom. Darin beschreibt $f(E) = (1 + \exp(E - E_F/k_{\text{bT}}))^{-1}$ die Aufweichung der Fermi-Funktion an der Fermikante bei $T > 0$ K, wobei E_μ (E_ν) den Eigenwert des ungestörten Zustands ψ_μ (ψ_ν) der Spitze (Probe) darstellt. Der Term $I_{P \rightarrow S}$ beschreibt das Tunneln von besetzten Zuständen ψ_μ der Probe in unbesetzte Zustände ψ_ν der Spitze. Entsprechend läuft der Tunnelprozess im Term $I_{S \rightarrow P}$ von besetzten Zuständen der Spitze in unbesetzte Zustände der Probe in umgekehrter Richtung ab. Das Tunnelmatrixelement [22, 24]

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{S} \left(\psi_\mu^* \vec{\nabla} \psi_\nu - \psi_\nu \vec{\nabla} \psi_\mu^* \right). \quad (2.9)$$

stellt hier eine Integration des Stromdichteoperators über eine Oberfläche zwischen den Elektroden dar. Die δ Funktion folgt aus der Annahme des elastischen Tunnelprozesses und stellt die Energieerhaltung unter dieser Bedingung dar.

Dieser Ansatz von Bardeen wird im Modell von Tersoff-Hamann auf das STM angewendet, um die STM-Daten von Binnig und Rohrer zu beschreiben [23, 24]. Dabei wird der Tunnelstrom durch die Annahme von niedrigen Temperaturen und geringen Tunnelspannungen U_T vereinfacht

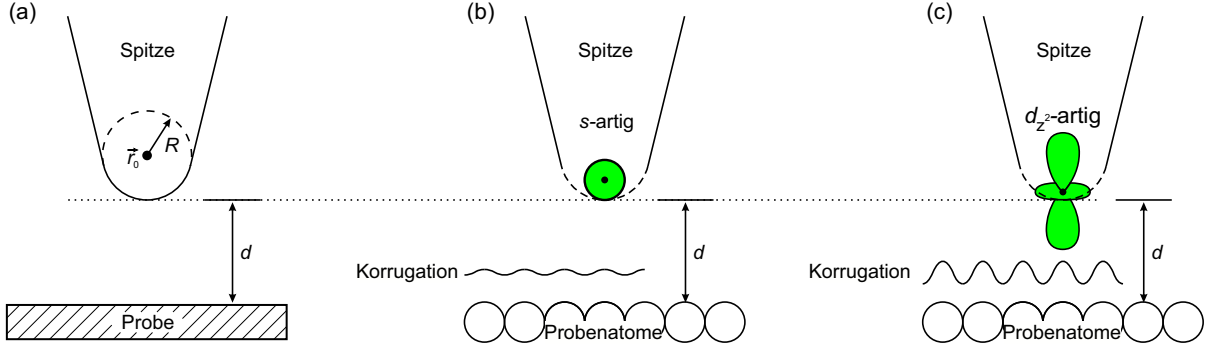


Abbildung 2.2 (a) Geometrie des Tunnelprozesses nach Tersoff und Hamann mit dem Zentrum des sphärischen Spitzenapex mit Radius R an der Position \vec{r}_0 . Der Abstand zur Probe ist d . (b) Die von Tersoff verwendeten s -artigen Zustände sind am Spitzenapex lokalisiert und führen zu einer geringen Korrugation. (c) Durch die aus dem Spitzenapex hervorstehenden d_z -artigen Zustände wird die Korrugation verstärkt. Abbildung (a) nach Ref. [23, 24] und (b),(c) in Anlehnung an Ref. [17, 25, 26].

durch

$$I_T = \frac{4\pi e^2}{\hbar} U_T \sum_{\mu\nu} |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\nu - E_F) \delta(E_\mu - E_F) \quad (2.10)$$

beschrieben [24]. Das wesentliche Problem bei der Behandlung des Tunnelprozesses liegt im Tunnelmatrixelement, was weitere Näherungen und Annahmen notwendig macht. In dem Modell von Tersoff-Hamann wird unter anderem die Spitze mit einem lokalen sphärischen Potential nach der Geometrie in Abb. 2.2(a) modelliert und die Austrittsarbeit ϕ für Spitze und Probe als identisch angenommen. Des Weiteren wird eine s -artige Wellenfunktion für den Spitzenzustand ψ_μ angenommen. Das Ergebnis für den Tunnelstrom nach diesem Modell ist [24]

$$I_T \propto U_T \phi^2 \rho_S(E_F) \frac{R^2}{\kappa^4} \exp 2\kappa R \sum_{\nu} |\psi_\nu|^2 \delta(E_\nu - E_F). \quad (2.11)$$

Der Parameter R ist der Radius des Spitzenapex, $\rho_S(E_F)$ die Zustandsdichte der Spitze am Fermi-Niveau und $\kappa = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\phi}}$ die inverse Abklinglänge der Wellenfunktion im Vakuum. Unter Berücksichtigung von

$$\sum_{\nu} |\psi_\nu|^2 \delta(E_\nu - E_F) = \rho_P(E_F) \quad (2.12)$$

ist darüber hinaus der Zusammenhang zwischen Tunnelstrom und lokaler Zustandsdichte der Probenoberfläche erkennbar [24]. Da zusätzlich $|\psi_\nu|^2 \propto e^{-2\kappa(R+d)}$ gilt, ist auch für dieses Modell die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand d zwischen Spitze und Probe zu beobachten. Damit sind im Tunnelstrom Informationen über die elektronischen und topographischen Eigenschaften der Probe enthalten, die durch das STM räumlich aufgelöst werden können. Mit Hilfe des Modells von Tersoff-Hamann konnten zunächst die ersten STM-Resultate

von Binnig auf Au(110) [27] reproduziert und eine maximale laterale Auflösung von $6 - 9 \text{ \AA}$ vorhergesagt werden [24, 25]. Allerdings konnten diese Vorhersagen wenige Jahre später durch die atomaren Auflösungen auf den dicht gepackten Metalloberflächen von Au(111) und Al(111) mit einem lateralen Auflösungsvermögen von 3 \AA übertroffen werden [28, 29]. Der Grund für das hohe Auflösungsvermögen liegt in den von Ohnishi und Tsukada sowie später von Chen nachgewiesenen Tunneln von Elektronen über stark lokalisierte d_{z^2} Zuständen der verwendeten Spitzen [25, 30]. Durch den Übergang von s -artigen zu p_z oder d_{z^2} -artigen Zustand der Spitze verändert sich das Tunnelmatrixelement $M_{\mu\nu}$ und damit die beobachtete Korrugation [17, 25]. Der Unterschied zwischen s -artigen und d_{z^2} -artigen Zustand der Spitze ist schematisch in den Abbildungen 2.2(b) & (c) für einen s -artigen Probenzustand gezeigt. Während das Signal der Korrugation für eine s -artige Wellenfunktion gering ist, kann für die d_{z^2} -artige Wellenfunktion eine erhöhte Korrugation festgestellt und damit die atomare Auflösung auf dicht gepackten Oberflächen erklärt werden [17, 25, 31].

2.3 Funktionsweise des STM

Die aus der theoretischen Behandlung des Tunneleffekts bekannte exponentielle Abstandsabhängigkeit des Tunnelstroms stellt hohe Anforderungen an die Regelung der Distanz zwischen Probe und Spitze. Das in dieser Arbeit verwendete STM verfügt deshalb über eine Scannereinheit mit einem Trägheitsantrieb zur Annäherung der Spitze an die Probe und einem Piezoröhrchen für die Regelung des Abstands sowie der lateralen Position der Spitze während der Messung. Neben der kurzen Diskussion der Abstandsregelung, die detailliert in der Masterarbeit von Krammel über den Aufbau des STM zu finden ist [32], soll die Funktionsweise des STM und die zwei verschiedenen Messmoden vorgestellt werden.

Der Trägheitsantrieb des STM dient zum Heranfahren der Spitze an die Probe und kommt auch bei dem darauffolgenden PC gesteuerten Annäherungsvorgang zum Einsatz. Die Bewegung kommt hier durch piezoelektrische Stellelemente zustande, die den hohen Anforderungen gegenüber Abstandsänderungen und lateralen Verschiebungen genügen. Beim Anlegen einer Sägezahnspannung an die Piezoaktuatoren wird der Haftgleiteffekt ausgenutzt (Stick—Slip—Methode) und ein Saphirschlitten bewegt, in dessen Zentrum sich das Piezoröhrchen mit Spitzenaufnahme befindet. Dabei folgt der Saphirschlitten zunächst den Scherbewegungen der Piezoelemente bei langsamer Änderung der Spannung. Der darauffolgenden Bewegung der Aktuatoren in ihre Ausgangsposition durch eine schnelle Spannungsänderung kann der Schlitten aufgrund seiner Trägheit nicht folgen und es kommt zu einer effektiven Bewegung des Schlittens um einen Schritt. Nach dem manuellen Heranfahren der Spitze an die Probe folgt in einem zweiten Schritt ein PC gesteuerter Mechanismus zur Herstellung eines Tunnelkontakts. Dazu wird eine Spannung an

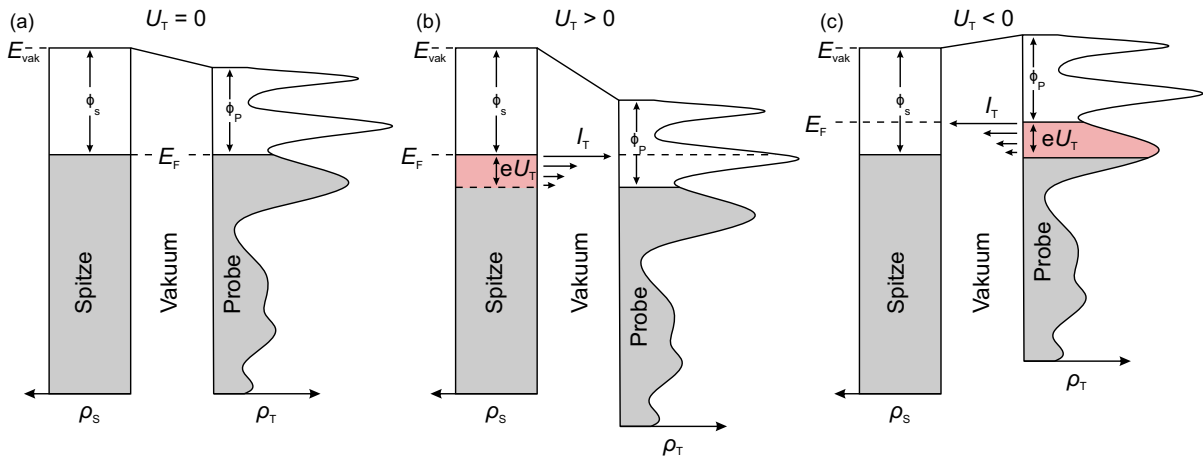


Abbildung 2.3 Der Tunnelprozess bei angelegter Tunnelspannung U_T . (a) Liegt keine Spannung an der Probe an, gleichen sich die Fermi-Niveaus der Spitze und der Probe an. Es fließt kein effektiver Strom. (b) Bei positiver Spannung $U_T > 0$ tunneln Elektronen von besetzten Spitzenzuständen in unbesetzte Probenzustände. (c) Für negative Spannungen dreht sich der Stromfluss um und Elektronen tunneln von besetzten Probenzuständen in unbesetzte Zustände der Spitze.

das Piezoröhrchen angelegt, wodurch die Spitze in Richtung Probe bewegt wird. Kommt es innerhalb der Bewegung zum Tunnelkontakt, ist der Annäherungsprozess beendet. Ist das nicht der Fall, wird die Spitze zurückgezogen und es folgt ein weiterer Schritt in Richtung der Probe mit Hilfe des Trägheitsantriebs. Dieser Prozess wird bis zur Registrierung des Tunnelkontakts wiederholt.

Während der Messung kann die Tunnelspannung U_T variiert werden. Der Einfluss der Spannung auf den Tunnelstrom ist in Abb. 2.3 zu erkennen. In der schematischen Darstellung wird die Zustandsdichte ρ_s der Spitze konstant angenommen, während die Probe eine von der Energie abhängige Zustandsdichte ρ_P aufweist. Da es sich um Metalle handelt, sind die Elektronenzustände bis zur Fermi-Energie E_F gefüllt. Ist keine Spannung angelegt, Abb. 2.3(a), gleicht sich das Fermi-Niveau in Spitze und Probe an und es fließt kein Tunnelstrom, da die Stromanteile in Gleichung 2.8 vom Betrag gleich sind.

Das ändert sich durch das Anlegen einer positiven Tunnelspannung $U_T > 0$ in Abb. 2.3(b), wo es zu einer Verschiebung des Energieniveaus der Probe relativ zu dem der Spitze um die Energie eU_T kommt. Dadurch existieren Energiezustände in der Spitze, aus denen Elektronen durch die Vakuumbarriere in unbesetzte Zustände der Probe tunneln können. Der wesentliche Teil des Tunnelstroms resultiert dabei aus Elektronen im Bereich der höchsten besetzten Zustände der Spitze, die mit den geringsten Abklingraten innerhalb der Vakuumbarriere die höchsten Tunnelwahrscheinlichkeiten aufweisen. Das Szenario bei einer negativen Tunnelspannung $U_T < 0$ ist in Abb. 2.3(c) gezeigt. In diesem Fall tunneln Elektronen von besetzten Zuständen der Probe in unbesetzte Spitzenzustände.

Der resultierende Tunnelstrom bei angelegten Spannungen wird entweder (i) als direktes Mess-

signal oder (ii) als Steuersignal für das Piezoröhrchen verwendet. Im Fall (i) handelt es sich um den Modus konstanter Höhe. Dabei wird die Oberfläche bei gleichbleibender Distanz d zwischen Spitze und Probe abgefahren und der Strom gemessen. Dies entspricht der Darstellung aus den Abbildungen 2.3(b) & (c) und ermöglicht eine räumlich aufgelöste Messung der Probenzustandsdichte. Ein großer Nachteil dieser Methode ist allerdings die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand d . Zum einen ist dieser Abstand mit wenigen Ångstrom gering und es besteht die Gefahr eines ungewollten Zusammenstoßens der Spitze mit der Probe an Stufenkanten. Zum anderen kann thermischer Drift zu einer Veränderung des Abstands und damit des Tunnelstroms führen.

Bei (ii) spricht man vom Modus konstanten Stroms, bei dem das gemessene Stromsignal kontinuierlich mit einem eingestellten Soll-Stromwert verglichen wird. Weicht der gemessene Strom ab, sorgt eine Regelschleife zwischen Stromsignal und Piezoelektronik für eine Veränderung des Abstands d zwischen Spitze und Probe, bis der Sollwert erreicht wird. Gegenüber dem Modus der konstanten Höhe wird dadurch ein Zusammenstoß von der Spitze mit der Probe während des Messvorgangs vermieden. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ausschließlich im Modus des konstanten Stroms gemessen.

2.4 Rastertunnelspektroskopie

Neben der Aufnahme von Topographien im Modus konstanten Stroms bietet die Rastertunnelspektroskopie (**Scanning Tunneling Spectroscopy** – STS) eine Möglichkeit zur Untersuchung von elektronischen Eigenschaften der Proben. Hierzu wird der Regelkreis ausgeschaltet und die differentielle Leitfähigkeit dI_T/dU_T gemessen. Aus der Beziehung in Gleichung 2.11 folgt für kleine Spannungen und niedrige Temperaturen mit[18]

$$\frac{dI_T}{dU_T} \propto |M|^2 \rho_S(E_F) \rho_P(E_F) \quad (2.13)$$

ein direkter Zusammenhang zwischen differentieller Leitfähigkeit und den Zustandsdichten von Spitze und Probe.

Die differentielle Leitfähigkeit lässt sich über die Strom–Spannungskennlinie $I_T(U_T)$ durch eine numerische Auswertung erzeugen. Da dies jedoch zu einem schlechten Signal–Rausch Verhältnis führt, wird die differentielle Leitfähigkeit üblicherweise über die Lock-In Technik aufgezeichnet. Dabei wird die Tunnelspannung U_T mit einer Modulationsspannung der Form $U_m \cdot \sin(\omega_m t)$ überlagert. Bei Betrachtung des Tersoff-Hamann Modells nach Gleichung 2.11 und der Annahme einer konstanten Zustandsdichte der Spitze erhält man daraus für den betrachteten Energiebereich

eU_T die Beziehung [33]

$$I_T \propto \int_0^{eU_0 + eU_m \sin(\omega_m t)} \rho_S(E) dE \quad (2.14)$$

für den Tunnelstrom. Durch Verwendung der Taylor-Entwicklung folgt damit der Ausdruck

$$I_T \propto \underbrace{\int_0^{eU_0} \rho_S(E) dE}_{\propto I_T(U_0)} + \underbrace{\rho_S(eU_0)}_{\propto dI_T/dU_T} eU_m \sin(\omega_m t) + h.O., \quad (2.15)$$

wobei der erste Term proportional zu den ungestörten Tunnelstrom $I_T(U_0)$ ist. Der zweite Term ist eine Modulation des Tunnelstroms und zeigt zusätzlich eine direkte Proportionalität zur differentiellen Leitfähigkeit dI_T/dU_T .

Durch den Lock-In wird der Tunnelstrom I_T verstärkt und mit einem Referenzsignal $\sin(\omega_m t + \phi)$ multipliziert. Alle Rauschsignale, deren Frequenzen nicht zum Referenzsignal passen, werden somit herausgefiltert [33]. Bei gleicher Phase von Referenz und Modulation des Tunnelstroms wird das dI/dU Signal hingegen verstärkt. Somit ist die Lock-In-Technik der Aufnahme einer Strom-Spannungskennlinie mit anschließender numerischer Ableitung deutlich überlegen.

Ein weiterer Vorteil der Lock-In-Technik ist die Möglichkeit einer gleichzeitigen Aufnahme von Topographie und der räumlich aufgelösten differentiellen Leitfähigkeit $dI_T/dU_T(\vec{r}_T, U_T)$ bei der angelegten Tunnelspannung U_T . Dazu wird die angelegte Tunnelspannung während des Abrasterns der Probe ebenfalls mit der Modulationsspannung überlagert und über den Lock-In das dI_T/dU_T ausgelesen. Dabei ist eine Frequenz der Modulationsspannung oberhalb der des Stromregelkreises einzuhalten. Deshalb wird für alle dI_T/dU_T Messungen in dieser Arbeit eine Frequenz von $f = \frac{2\pi}{\omega_m} = 5777$ Hz verwendet. Die Modulationsamplituden richten sich nach der angelegten Tunnelspannung und liegen bei $U_m = 1 - 10$ mV.

2.5 Spinpolarisiertes STM

Eine Erweiterung des STM stellt das spinpolarisierte STM (SP-STM) dar und wird ausführlich in einer Veröffentlichung von Bode diskutiert [34], die als Orientierung für diesen Abschnitt dient. Während beim STM die Spitzen aufgrund stark lokalisierter Zustände meist aus W, Pt oder Ir bestehen [25], wird bei SP-STM eine magnetische Spitze verwendet. Diese kann entweder aus einem magnetischen Material bestehen oder durch das Aufbringen eines magnetischen Films auf die Spitze erzeugt werden (siehe Kap. 3.8).

Zur einfachen Veranschaulichung der SP-STM dienen die schematischen Darstellungen in den Abbildungen 2.4(a) & (b). In diesem Modell nach Stoner werden die Zustandsdichten von Probe ρ_P und Spitze ρ_S in jeweils ein Spin-down (\downarrow , rot) und ein Spin-up Band (\uparrow , grün) aufgespalten,

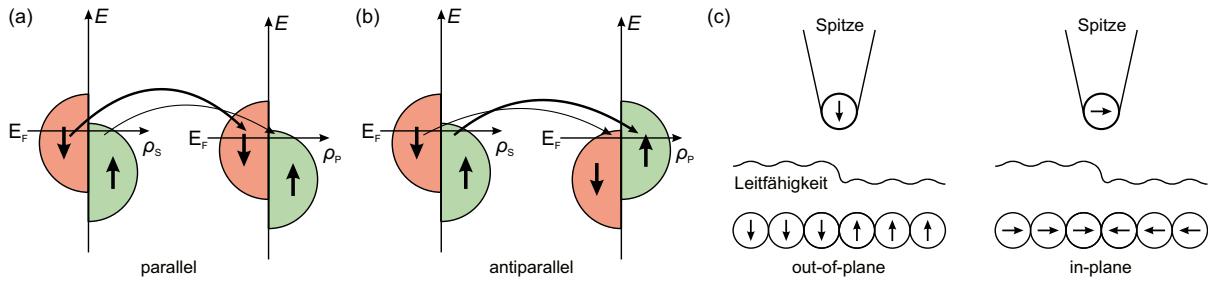


Abbildung 2.4 Schematische Darstellung zur SP-STM nach dem Stoner-Modell. Spitze und Probe können eine parallele **(a)** und eine antiparallele **(b)** Ausrichtung der Magnetisierung besitzen. Bleibt der Spin erhalten, können nur Spin-down (up) Elektronen von besetzten Zuständen der Spitze in unbesetzte Spin-down (up) Zustände der Probe tunneln. Spin-down Zustände sind rot, Spin-up Zustände grün gekennzeichnet. **(c)** Veränderung des Stromsignals in Abhängigkeit von der Orientierung der Spins in Spitze und Probe. In Anlehnung an Ref. [18] & [34].

die aufgrund der vorliegenden Magnetisierung energetisch verschoben sind. Die Annahme des elastischen Tunnelns bei niedrigen Tunnelspannungen lässt keine Änderung der Spins von Elektronen zu, wodurch das Tunneln von Elektronen nur zwischen gleichartigen Bändern erlaubt ist. Als Resultat existieren zwei unabhängige Komponenten des Tunnelstroms, wobei nur das Tunneln von besetzten Spin-down (Spin-up) Zuständen der Spitze in unbesetzte Spin-down (Spin-up) Zustände der Probe erlaubt ist. Dadurch gilt für die differentielle Leitfähigkeit nach Gleichung 2.13 [34]

$$\frac{dI}{dU} \propto \rho_S^\uparrow(E_F) \rho_P^\uparrow(E_F) + \rho_S^\downarrow(E_F) \rho_P^\downarrow(E_F) . \quad (2.16)$$

Daraus ergeben sich Unterschiede zwischen einer parallelen und einer antiparallelen Ausrichtung der Magnetisierung von Probe und Spitze, die in Abb. 2.4 veranschaulicht sind. Bei einer parallelen Ausrichtung in (a) ist die Anzahl der Zustände an der Fermi-Energie der Spitze für die \downarrow -Orientierung groß und für die \uparrow -Ausrichtung niedrig. Da die Probe eine parallele Magnetisierungsrichtung aufweist, sind ebenfalls viele \downarrow -Zustände zum Tunneln vorhanden, weshalb eine entsprechend große Leitfähigkeit registriert werden kann.

Dies ändert sich bei einer antiparallelen Magnetisierung von Spitze und Probe in Abb. 2.4(b). Während die Verteilung der Zustände in der Spitze sich gegenüber (a) nicht unterscheidet, verändert sich das Verhältnis der Zustände am Fermi-Niveau E_F der Probe. Hier stehen nur noch wenige \downarrow -Zustände und dafür viele \uparrow -Zustände zur Verfügung. Damit weist diese Situation viele (wenige) \downarrow -Zustände (\uparrow -) der Spitze auf, aus denen Elektronen in wenige (viele) \downarrow -Zustände (\uparrow -) der Probe tunneln können.

Somit ist der Tunnelstrom durch den magnetischen Tunnelwiderstand (TMR-Effekt) für eine antiparallele Ausrichtung der Magnetisierung von Spitze und Probe geringer. Diese Situation ist schematisch in Abb. 2.4(c) für eine senkrecht zur Probenoberfläche (out-of-plane) und eine in der Probenebenen (in-plane) polarisierten Spitze dargestellt. Durch den TMR-Effekt ist die

Leitfähigkeit für eine parallele Ausrichtung in beiden Fällen höher und ermöglicht so eine Identifikation magnetischer Domänen in dI_T/dU_T -Karten.

Eine genauere theoretische Beschreibung anhand des Formalismus von Tersoff und dem Modell von Tersoff-Hermann liefert eine Erweiterung der Wellenfunktionen für Probe und Spitze um den Spinanteil [18]. Das Ergebnis

$$I(\vec{r}_T, U, \Theta) = I_0(\vec{r}_T, U) + I_{SP}(\vec{r}_T, U, \Theta) \propto \rho_S \rho_P(\vec{r}_T, U) + \vec{m}_S \vec{m}_P(\vec{r}_T, U) \quad (2.17)$$

enthält einen spingemittelten Stromanteil I_0 und einen spinpolarisierten Anteil I_{SP} [18, 34]. Dabei ist I_0 die Lösung des nicht magnetischen Falls nach dem Tersoff-Hamann Modell mit der nicht spinpolarisierten lokalen Zustandsdichte (LDOS) ρ_S der Spitze und die nach der Energie integrierte Ladungsdichte der Probe ρ_P . Die zweite Komponente I_{SP} hängt hingegen von den Vektoren der Spinpolarisierung \vec{m}_S der Spitze und \vec{m}_P der Probe ab. Durch das Skalarprodukt besitzt die Gleichung eine $\cos(\Theta)$ Abhängigkeit des Stroms, wobei sich der Winkel Θ zwischen den Spinquantisierungsachsen von Probe und Spitze befindet.

Eine solche Winkelabhängigkeit wurde experimentell zuerst durch Jullière 1975 gezeigt [35]. Trotzdem dauerte es nach der Entwicklung des STM bis 1990, ehe Wiesendanger diesen Effekt für das STM nutzen konnte, um mit einer magnetischen CrO_2 -Spitze den theoretisch berechneten Antiferromagnetismus von Cr nachzuweisen [36, 37]. Weitere wichtige Schritte bei der Entwicklung von SP-STM waren zum einen die Anwendung der Lock-In-Technik zur Trennung der topographischen, elektronischen und magnetischen Signale und zum anderen die Reduzierung des Streufelds der Spitze durch die Verwendung dünner magnetischer Filme am Spitzenapex [38–40].

Diese Entwicklungen waren die Grundlage einer Technik, die heute Untersuchung von AFM-Strukturen, Spinspiralen bis hin zu Skyrmionen durch die Kombination von hoher lateraler und magnetischer Auflösung ermöglicht [40–45]. Aufgrund dieser Attribute wird die Methode der SP-STM in dieser Arbeit zur Untersuchung der magnetischen Eigenschaften von Ketten aus $3d$ -Übergangsmetalloxiden (**T**ransition-**M**etall-**O**xide — TMO) verwendet.

2.6 Experimenteller Aufbau

Um eine saubere Präparation zu gewährleisten und Verunreinigungen der Proben zu vermeiden, werden alle Messungen innerhalb des Ultrahochvakuumsystems (UHV-System) aus Abb. 2.5 durchgeführt. Von den drei durch Ventile getrennten Kammern ist die Schleuse die kleinste am System und wird zum schnellen Einbringen von neuen Kristallen, Proben und Spitzen verwendet. Die über ein Ventil erreichbare Präparationskammer hat einen Basisdruck von $p \leq 3 \times 10^{-11}$ mbar

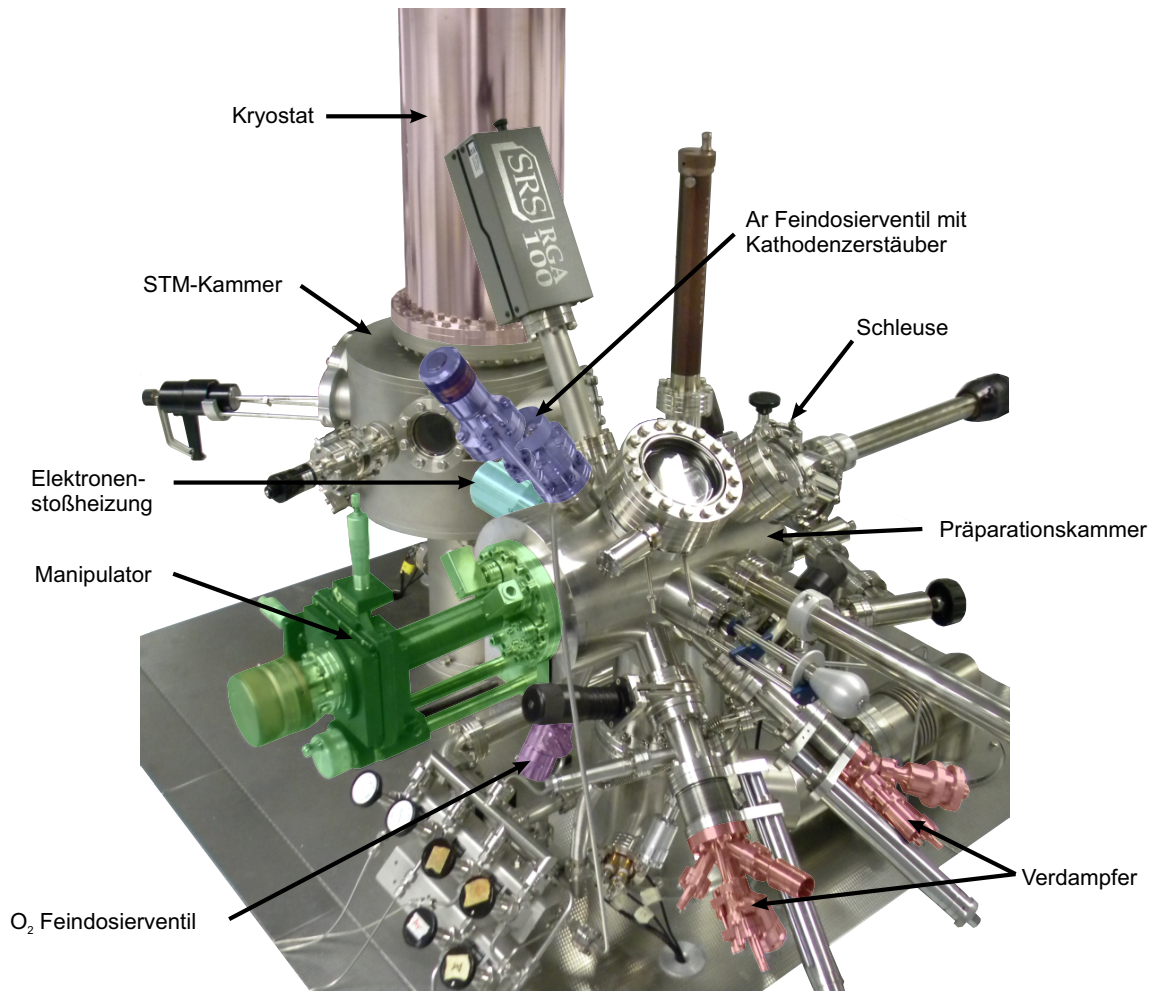


Abbildung 2.5 Foto des UHV-Systems mit einer Schleuse zum Einbringen von Proben. In der Präparationskammer werden die Substrate durch Kathodenzerstäubung und Heizen auf der Elektronenstoßheizung gereinigt. Zum Herstellen der TMO-Ketten dienen das O₂-Feindosierventil und die Verdampfer. Messungen finden in der STM-Kammer statt. Die Proben­temperatur liegt durch die Kühlung mit flüssigem Helium bei $T \approx 5,5$ K.

und beinhaltet mehrere Möglichkeiten zur Probenreinigung. Einerseits können die Proben durch Kathodenzerstäubung, also den Beschuss der Probe mit hochenergetischen Ar⁺-Ionen, gereinigt werden. Andererseits kann die Probe auf den Manipulator bis zu $T \approx 500$ °C oder auf einer Elektronenstoßheizung bis zu $T \approx 2000$ °C geheizt werden. Die Temperaturen während der Präparation der in dieser Arbeit verwendeten Substrate Pt(001), Ir(001) und W(110) werden mit Hilfe eines Infrarot-Pyrometers bestimmt.

Durch die Diffusion von Kohlenstoff an die Kristalloberfläche kann es während des Heizens zu einer Verunreinigung der Oberfläche kommen. Um diese zu entfernen und eine Substratoberfläche hoher Qualität zu präparieren, werden die Kristalle unter Sauerstofffluss geheizt [14, 46, 47]. Dazu wird über ein Feindosierventil und ein damit verbundenes Röhrchen mit einem Innendurchmesser von ungefähr 2 mm der molekulare Sauerstoff in die Kammer geleitet. Da

das Röhrechen etwa 2 cm oberhalb der Elektronenstoßheizung endet, kann der partielle Sauerstoffdruck um den Faktor 10-100 über den angegebene Wert der Druckmesssonde liegen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sei für den weiteren Verlauf der Arbeit darauf hingewiesen, dass es sich bei den Sauerstoffdrücken p_{O_x} stets um den Wert der Druckmesssonde handelt.

Zum Bedampfen der Substrate, aber auch zur Herstellung magnetischer Spitzen, verfügt die Präparationskammer über drei Verdampfer, von denen einer in der Abbildung nicht zu sehen ist. Die Verdampfermaterialien liegen im Fall von Co und Fe in Form eines Stabes vor und befindet sich für Cr und Mn innerhalb eines Tiegels. Der Cr- und der Fe-Verdampfer dienen dabei sowohl zur Präparation von magnetischen Spitzen als auch zur Herstellung der TMO-Ketten. Da beim dritten Verdampfer die Möglichkeit eines schnellen Austauschs des Verdampfermaterials besteht, wird dieser für Mn und Co verwendet.

Nach der Präparation werden die Proben über eine Transferstange in die Analysechamber transferiert. Hier können die Proben entweder kurzzeitig in einer Garage bei einem Basisdruck von $p \leq 3 \times 10^{-11}$ mbar gelagert oder im STM gemessen werden. Der Messplatz des STM befindet sich innerhalb eines Kryostaten, der aus einem äußeren Tank für flüssigen Stickstoff und einen inneren Behälter für flüssiges Helium besteht, wodurch eine Messtemperatur von $T \approx 5,5$ K erreicht wird. Die Schwingungsdämpfung, die aufgrund der Sensitivität auf Abstandsänderungen erforderlich ist, wird durch die Lagerung des STM und Kryostaten auf drei Dämpfungsfüßen erreicht. Mit dieser Vorrichtung hat das STM ein Rauschen von weniger als 2 pm.

3 Magnetische Wechselwirkungen

In diesem Kapitel soll ein Überblick über magnetische Wechselwirkungen in Festkörpern gegeben werden, die zum Verständnis der experimentellen Ergebnisse notwendig sind. Dazu wird als Grundlage zunächst der atomare Magnetismus betrachtet und im Anschluss die Beiträge zum magnetischen Austausch im Festkörper diskutiert. Der zweite Teil des Kapitels beschäftigt sich mit den magnetischen Eigenschaften der Doppellage Fe/W(110), die bei der Analyse der TMO-Ketten als Referenzsystem dient. Neben den angegebenen Quellen orientiert sich dieses Kapitel auch an dem Buch von Gross zur Festkörperphysik [48] und der Referenz [49].

3.1 Atomarer Magnetismus

Obwohl die meisten Materialien im Festkörper keinen Magnetismus aufzeigen, ist dies bei der Betrachtung von Atomen grundlegend verschieden. Um zu verstehen, was sich beim Übergang von Atom zu Festkörper verändert, werden in diesen Abschnitt zunächst die Grundlagen des atomaren Magnetismus auf Basis der Referenzen [49] & [48] diskutiert. Dazu wird der Hamiltonoperator

$$H_H = \underbrace{\sum_i \frac{1}{2m} \left(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i) \right)^2}_{\text{kin. Energie}} + \underbrace{\sum_i \frac{-Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{Coulomb-Energie } V(\vec{r})} - \underbrace{\sum_i \vec{m}_i \vec{B}}_{\text{Zeeman-Term}} \quad (3.1)$$

für ein Atom mit Z Elektronen, der Elementarladung e und der Masse m betrachtet [49]. Das Atom befindet sich dabei in einem homogenen Magnetfeld \vec{B} entlang der z -Achse mit dem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{1}{2}(\vec{r} \times \vec{B})$ [49]. Unter Verwendung von $H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{r})$ und dem magnetischen Moment $\vec{m}_i = -2\mu_B \vec{s}_i$ erhält man daraus

$$H = H_0 + \mu_B \vec{B} \sum_i (\vec{l}_i + 2\vec{s}_i) + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \quad (3.2)$$

mit dem Eigenwert des Grundzustands [49]

$$E_0 = E_0 + \underbrace{\mu_B \vec{B} \langle 0 | (\vec{L} + 2\vec{S}) | 0 \rangle}_{\text{Paramagnetismus}} + \underbrace{\frac{e^2 B^2}{8mc^2} \langle 0 | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | 0 \rangle}_{\text{Diamagnetismus}}. \quad (3.3)$$

Dabei ist $\vec{l}_i = \frac{1}{\hbar} (\vec{r}_i \times \vec{p}_i)$ der Bahndrehimpuls eines Elektrons und führt mit $\mathbf{L} = \sum_i \vec{l}_i$ zum Gesamt-Bahndrehimpuls, während $\mathbf{S} = \sum_i \vec{s}_i$ dem Gesamtspin des Grundzustands beschreibt. Der paramagnetische Term mit dem magnetischen Moment $\vec{M}_0 = -\mu_B \langle 0 | (\vec{L} + 2\vec{S}) | 0 \rangle$ ist der größte Magnetfeldterm, wohingegen der diamagnetische Beitrag nur dann eine Rolle spielt, wenn das magnetische Moment eines Atoms verschwindet ($\mathbf{L} = \mathbf{S} = 0$) [49].

Durch die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen kommt es zu einer starken Kopplung sowohl zwischen den einzelnen Spins s_i wie auch zwischen den einzelnen Bahndrehimpulsen l_i der Elektronen. Aus diesem Grund müssen die Operatoren des Gesamtbahndrehimpulses \mathbf{L} und des Gesamtspins \mathbf{S} betrachtet werden, die zu einem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ führen [48]. Die entsprechenden Eigenwerte dieser Operatoren sind durch die Spinquantenzahl M_S , der Quantenzahl des Bahndrehimpulses M_L und des Gesamtdrehimpulses M_J charakterisiert. Betrachtet man nur Terme bis zur ersten Ordnung in \vec{B} erhält man die Eigenwerte $E = E^{(0)} + \mu_B B (M_L + 2M_S)$ des Systems, die ohne Magnetfeld durch verschiedene Kombinationen der unabhängigen Quantenzahlen $(2S + 1)(2L + 1)$ -fach entartet sind [49]. Durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung wird diese Entartung teilweise aufgehoben, da zunächst Bahndrehimpuls und Spin von einzelnen Elektronen miteinander wechselwirken [48].

Die Besetzung der Zustände kann über die drei Hundschen Regeln bestimmt werden. Danach wird (I) der Gesamtspin S maximiert. Diese Regel beruht auf dem Pauli-Prinzip, bei dem zwei Elektronen nicht den gleichen Zustand besetzen dürfen. Deshalb muss die Wellenfunktion, bestehend aus Orts- und Spinanteil antisymmetrisch sein. Ist die Ortsfunktion antisymmetrisch, richten sich die Spins parallel aus und man bekommt ein Triplet-Zustand mit $S = 1$. Die zweite Möglichkeit ist eine antisymmetrische Spinfunktion, bei der durch antiparallele Stellung der Spins $S = 0$ folgt und man ein Singulett-Zustand bekommt. Dabei ist die Energie des Triplet-Zustands geringer, da die Coulomb-Abstoßung der Elektronen durch die Lokalisierung an verschiedenen Plätzen minimiert wird. Damit liegt eine ferromagnetische Austauschwechselwirkung auf atomarer Ebene vor [48, 49].

Auch Regel (II) beruht auf der Minimierung der Coulomb-Abstoßung durch eine gleichmäßige Verteilung der Ladung in den Atomshalen und fordert eine Maximierung des Gesamtbahndrehimpulses L , soweit dies mit dem Pauli-Prinzip vereinbar ist. Während bei einer halb gefüllten Schale damit der Spin maximal wird, ist der Bahndrehimpuls $L = 0$. Regel (III) betrifft den Gesamtdrehimpuls J und resultiert aus einer Optimierung der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Mit den Spin-Bahn-Kopplungsterm $H_{SB} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ folgt mit einem $\lambda > 0$ für weniger als halb gefüllte Schalen eine antiparallele Stellung mit den Gesamtdrehimpuls $J = |L - S|$. Oberhalb einer halb gefüllten Schale wird die Kopplungsstärke λ negativ und die Gesamtenergie wird bei Parallelstellung von Spin und Bahndrehimpuls minimiert mit $J = L + S$ [48, 49].

Zusammengefasst lässt sich für den atomaren Magnetismus ein ferromagnetischer Austausch

feststellen, der für alle Atome mit nicht komplett besetzten Schalen auftritt. Dennoch gibt es nur wenige Festkörper, die ein permanentes magnetisches Moment aufweisen. Dies liegt zum einen am Einfluss des Kristallfeldes auf die Elektronen und zum anderen an der Delokalisierung der Elektronen durch den Überlapp der Wellenfunktionen von Nachbaratomen. Dadurch gehen die definierten Energieniveaus der Atome verloren und es kommt zur Ausbildung von Bändern, in denen das Bahnmoment keine große Rolle spielt [49].

3.2 Heisenberg Austausch

Beim Übergang zum Festkörper kommt es im Hamilton-Operator zu weiteren Termen, die durch das Wechselwirkungspotential

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_i(\mathbf{r}_1) + V_i(\mathbf{r}_2) + V_{ee}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.4)$$

zwischen Atomen beschrieben werden [48]. Dazu zählt neben der Coulomb-Abstoßung V_{ee} der Elektronen auch das attraktive Potential V_i , das die Anziehung der Elektronen von dem jeweils anderen Atomkern beschreibt. Wie zuvor diskutiert, wird die Eigenfunktion durch eine Spin- und Ortsfunktion beschrieben und ist nach dem Pauli-Prinzip antisymmetrisch. Der entsprechende Triplett-Zustand (Singulett-) hat eine antisymmetrische (symmetrische) Ortsfunktion und eine symmetrische (antisymmetrische) Spinfunktion. Der Energieunterschied zwischen Singulett- und Triplett-Zustand kann näherungsweise über den Heitler-London-Ansatz berechnet werden [48]:

$$\psi^{s,t} = c [\Phi_A(\mathbf{r}_1) \cdot \Phi_B(\mathbf{r}_2) \pm \Phi_A(\mathbf{r}_2) \cdot \Phi_B(\mathbf{r}_1)] . \quad (3.5)$$

Das Pluszeichen gehört zu dem Singulett und das Minuszeichen zum Triplett Zustand. Dabei sind Φ_A und Φ_B die atomaren Wellenfunktionen und c eine Normierungskonstante. Ist die Wechselwirkungsenergie $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ symmetrisch unter Vertauschung der Elektronen, erhält man unter Vernachlässigung der kinetischen Energie die Austauschkonstante

$$J_A = E^s - E^t \simeq 4c^2 \int \Phi_A^*(\mathbf{r}_1) \Phi_B^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Phi_A(\mathbf{r}_1) \Phi_B(\mathbf{r}_2) dV_1 dV_2 , \quad (3.6)$$

die über die Energiedifferenz $E^S - E^T$ der potentiellen Energie definiert ist [48]. Für $J_A > 0$ erhält man eine Absenkung der Energie für den kollinearen ferromagnetischen Fall. Bei $J_A < 0$ kommt es dagegen für eine AFM-Anordnung der Spinmomente zur Absenkung der Energie E_H . Das Vorzeichen von J_A wird dabei vom Verhältnis zwischen Energiekosten durch die Coulomb-Abstoßung und dem Energiegewinn durch das attraktive Potential zwischen Elektronen und

Atomkernen bestimmt.

Da die Ortsfunktion mit der Spinfunktion durch das Pauli-Prinzip eindeutig miteinander verbunden ist, kann der Modellhamiltonian

$$H = \frac{1}{4} (E^s + 3E^t) - (E^s - E^t) \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 = \frac{1}{4} (E^s + 3E^t) - J_A \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \quad (3.7)$$

eingeführt werden, der nur im Spinraum wirkt [48, 49]. Die Eigenwerte des Operators $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ sind $-\frac{3}{4}$ für den Singulett-Zustand und $\frac{1}{4}$ für den Triplett-Zustand. Setzt man diese Eigenwerte in den ersten Teil der Gleichung ein, erhält man die jeweiligen Energiewerte E^s für den Singulett und E^t für den Triplett Zustand. Daraus erhält man durch den Übergang zu beliebigen Spin-Operatoren S_i und S_j aus dem zweiten Teil der Gleichung den Energiebeitrag des Heisenberg Modells [45, 48, 50]:

$$E_H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (3.8)$$

Da sich die Austauschintegrale für nächste und weiter entfernte Nachbarn j in Stärke und Vorzeichen unterscheiden können, kann es durch die Minimierung der Energie zur Abweichung von einer kollinearen Ausrichtung kommen [50, 51]. Auf diese Weise können Spinspiralen entstehen, deren Drehrichtung aufgrund der Isotropie der Heisenberg Wechselwirkung entartet ist. Allerdings ist in vielen Systemen der Austausch ab den übernächsten Nachbaratomen schwach und es kann zu einer Betrachtung des dominanten Anteils nächster Nachbarn $E_H = -J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ übergegangen werden.

3.3 Direkter und indirekter Austausch

Bei der Austauschwechselwirkung kann zwischen verschiedenen Arten unterschieden werden, die sich in ihrer Reichweite und in der Kopplung unterscheiden. Dazu gehört die Unterscheidung in direkten und indirekten Austausch. Der direkte Austausch resultiert aus einem direkten Überlapp der Wellenfunktionen zweier magnetischer Atome, wie in Abb. 3.1(a) skizziert ist [49]. Ob die magnetischen Momente FM oder AFM koppeln, hängt dabei von der Symmetrie der beteiligten Orbitale und den Abstand der Atome ab [49].

Neben dieser Kopplung mit kurzer Reichweite gibt es den Superaustausch, bei dem die Austauschwechselwirkung zwischen Atomen indirekt über ein gemeinsam gebundenes Atom abläuft. Ein Beispiel für den Superaustausch ist in Abb. 3.1(b) für zwei Mn^{2+} -Ionen gezeigt, die über ein Sauerstoffion O^{2-} miteinander koppeln [48]. In dem gezeigten Fall der 180° -Kopplung ist das bindende p -Orbital des Sauerstoffs komplett besetzt. Dies bedeutet nach dem Pauli-Prinzip eine

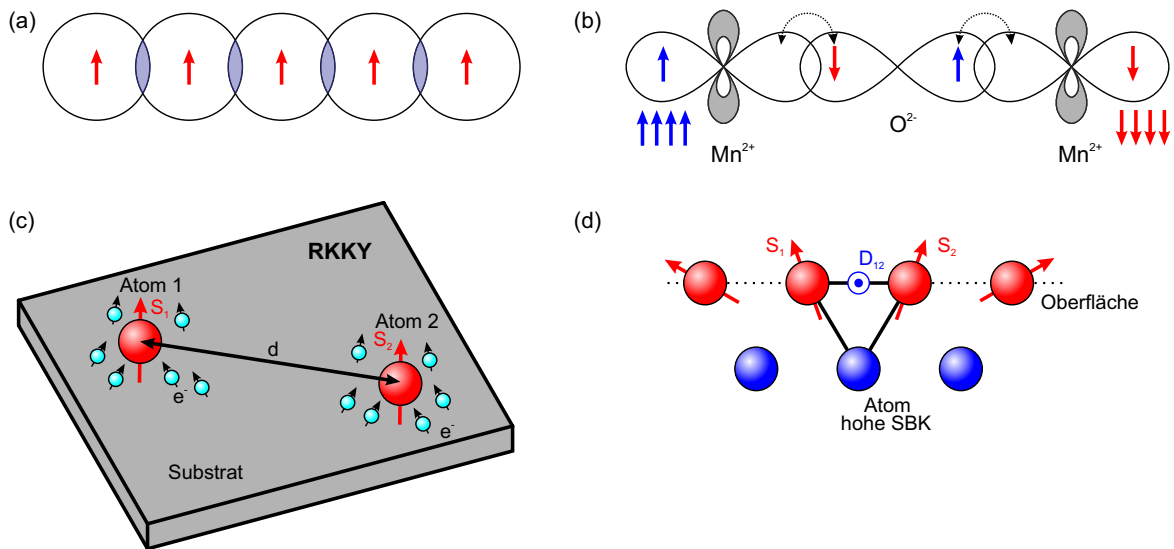


Abbildung 3.1 Arten der magnetischen Wechselwirkung im Festkörper. (a) Direkter Austausch mit Überlapp der Orbitale führt zur magnetischen Kopplung. (b) Superaustausch zwischen zwei Mn^{2+} -Ionen über ein p -Orbital des Sauerstoffs führt zur AFM-Kopplung bei einer 180° -Bindung. (c) Indirekte Austauschwechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten S_1 und S_2 . Die Kopplung wird durch Leitungselektronen vermittelt und oszilliert in Abhängigkeit vom Abstand d zwischen AFM und FM. (d) Bei der DM-Wechselwirkung kommt es durch die Wechselwirkung zweier magnetischer Momente mit einem Atom hoher Spin-Bahn-Wechselwirkung zu einer Drehung der Spins zueinander. Die Drehachse ist durch den DM-Vektor D_{12} gegeben. In Anlehnung an die Referenzen [48] & [52].

AFM-Ausrichtung der Elektronenspins in diesem p -Orbital. Des Weiteren können die Elektronen in die überlappenden d -Orbitale der Mn-Ionen transferiert werden. Da Mn eine halb gefüllte Schale besitzt und nach der ersten Hundschen Regel alle fünf d -Elektronen denselben Spin besitzen, sind diese AFM zum transferierten Elektron ausgerichtet. Daraus folgt für die Kopplung der magnetischen Momente der Mn-Atome über das Sauerstoff p -Orbital ebenfalls eine AFM-Anordnung. Somit können unter Beachtung der Hundschen Regeln, des Pauli-Prinzips und der Geometrie der Bindung Vorhersagen über die Kopplung von Übergangsmetalloxiden gemacht werden [48, 49].

3.4 RKKY-Wechselwirkung

Während der Superaustausch zu einer Kopplung von magnetischen Momenten über ein Zwischenion führt, wird die Kopplung bei der indirekten RKKY-Wechselwirkung (**R**uderman-**K**ittel-**K**asuya-**Y**osida) über Leitungselektronen vermittelt [53, 54]. Eine Skizze zu dieser Wechselwirkung mit zwei lokalisierten magnetischen Momenten ist in Abb. 3.1(c) gezeigt [49]. In direkter Nähe zu dem magnetischen Moment kommt es zur Ausrichtung der Spins von Leitungselektronen. Die durch diese polarisierten Elektronen vermittelte Austauschwechselwirkung zeigt in Abhängigkeit vom Abstand d der Atome ein oszillatorisches Verhalten und verändert sich in Stärke und Richtung. Der Fermi-Wellenvektor k_F des Substrats bestimmt dabei die Periode

der Oszillation zwischen FM und AFM-Ausrichtung und ist auf die Friedeloszillation zurückzuführen [48, 49]. Insgesamt erhält man für die Austauschkonstante dieser Kopplung mit langer Reichweite [7, 48]

$$J_A \propto \sin(2k_F d). \quad (3.9)$$

3.5 Magnetische Anisotropie

Die besprochenen Austauschwechselwirkungen sind isotrop und führen durch die Kopplung magnetischer Moment zu einer spontanen Magnetisierung. Eine Ausrichtung der Magnetisierung in eine bevorzugte Richtung kommt durch den zusätzlichen Beitrag der magnetischen Anisotropie zur Gesamtenergie zustande. Hierbei kann zwischen Formanisotropie und magnetokristalliner Anisotropie unterschieden werden. Die Formanisotropie wird durch die makroskopische Form des magnetischen Körpers hervorgerufen und hat ihre Ursache in der Dipolwechselwirkung [48, 49]. Die magnetokristalline Anisotropie ist hingegen eine intrinsische Materialeigenschaft und folgt aus der endlichen Spin-Bahn-Wechselwirkung $H_{SB} = \lambda \mathbf{L} \mathbf{S}$ [48]. Diese führt zu einer Kopplung des Spinnorments \mathbf{S} an den Bahnmoment \mathbf{L} und zu einem Energiegewinn bei paralleler Ausrichtung. Da das Kristallfeld die Bahnmomente beeinflusst und diese sich häufig entlang einer kristallographischen Richtung ausrichten, ist auch das Spinnorment über den Bahndrehimpuls in diese Richtung orientiert [48, 50]. Der Energiebeitrag der magnetischen Anisotropie kann durch

$$E_A = \sum_i K_i \sin^2 \phi_i \quad (3.10)$$

ausgedrückt werden [51]. Dabei ist K_i die Anisotropiekonstante und ϕ_i der Winkel zwischen den magnetischen Moment des Atoms und der leichten Magnetisierungsrichtung an der Position i .

3.6 Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung

Einen weiteren Beitrag zur Gesamtenergie erhält man durch die antisymmetrische Dzyaloshinskii-Moriya (DM-) Wechselwirkung [55, 56]. Sie ist eine relativistische Korrektur des Superaustausches und skaliert mit der Spin-Bahn-Kopplungskonstante λ [57]. Während sich diese Wechselwirkung im Kristall durch die Inversionssymmetrie aufhebt, liegt an Oberflächen eine Brechung dieser Symmetrie vor und die DM-Wechselwirkung liefert einen Beitrag zum magnetischen Austausch. Eine schematische Darstellung der DM-Wechselwirkung an einer Oberfläche ist in Abb. 3.1(d) gezeigt [52]. Dabei bilden die roten Atome die Oberfläche, deren Spins über die

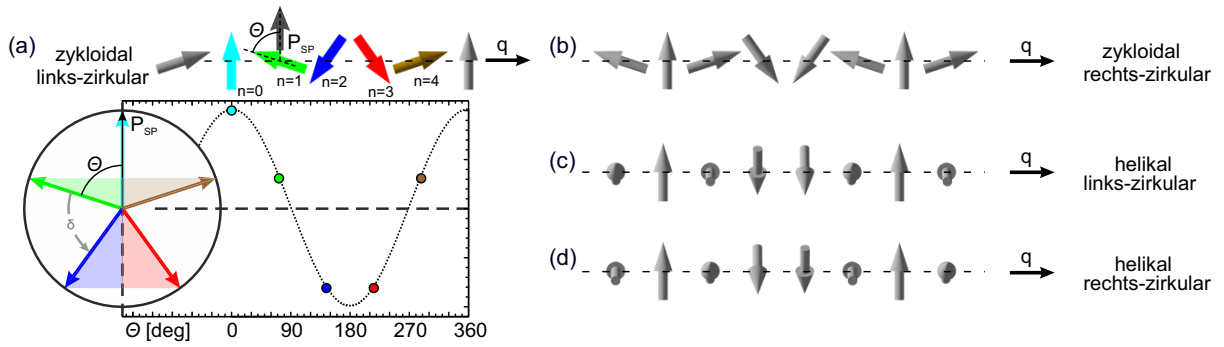


Abbildung 3.2 Unterscheidung von Spinspiralen und Zeigerdiagramm der SP-STM Messung. **(a)** Zyklonale linksdrehende Spinspirale in Richtung des Wellenvektors q . Die farbigen Spins können in ein Zeigerdiagramm übertragen werden, wobei δ der Drehwinkel zwischen benachbarten Spins ist. Durch die Projektion (schraffiert) der Spinvektoren auf die Polarisation P_{SP} der Spitze (schwarzer Pfeil) ergibt sich der SP-STM Kontrast. Die Werte liegen dabei auf einer Kosinuskurve. **(b)** Zyklonale Spinspirale mit rechts-zirkularem Drehsinn. Bei helikalen Spinspiralen drehen die Spins senkrecht zum Wellenvektor q entweder mit nach links **(c)** oder nach rechts **(d)** gerichteter Drehrichtung.

blauen Atome des Substrats koppeln. Ist die Spin-Bahn-Kopplung (SBK) dieser Atome groß, kann es durch das Kreuzprodukt im Energiebeitrag

$$E_{DM} = \sum_{i,j} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j). \quad (3.11)$$

zu einem Energiegewinn durch eine Verdrehung zwischen den Spinvektoren S_1 und S_2 kommen. Die Drehachse entspricht dabei dem DM-Vektor D_{12} und steht im gezeigten Beispiel senkrecht zu dem Dreieck, das durch die an der Wechselwirkung beteiligten drei Atome gebildet wird. Im Allgemeinen kann die Richtung des DM-Vektors über die Symmetrie des Systems nach den Regeln von Moriya bestimmt werden [56], wohingegen sich die Verdrehung zwischen zwei benachbarten Spins durch das Verhältnis von symmetrischen zum antisymmetrischen Austausch ergibt.

Eine Folge der DM-Wechselwirkung sind gerichtete Spinspiralen mit einheitlichem Drehsinn (Chiralität). Grundsätzlich kann hier zwischen zyklonalen und helikalen Spiralen unterschieden werden, die in Abb. 3.2 gezeigt sind. Bei den zyklonalen Spiralen in (a) & (b) dreht der Spin entlang des Wellenvektors q , während bei helikalen Spinspiralen in (c) & (d) der Spin in einer Ebene senkrecht dazu rotiert. Ohne die DM-Wechselwirkung gibt es für beide Fälle eine Entartung von links- und rechtsdrehenden Spinspiralen, die durch den DM-Vektor aufgehoben wird. Somit ist für Systeme mit DM-Wechselwirkung von einem einheitlichen Drehsinn der Spinspiralen auszugehen, der mit SP-STM nachgewiesen werden kann. Der gemessene magnetische Kontrast lässt sich leicht durch eine Darstellung im Zeigerdiagramm verstehen, das in Abb. 3.2(a) dargestellt ist. Dabei werden die farbigen Spins einer kompletten 360° Drehung in einen Einheitskreis übertragen. Dadurch entstehen bei einer homogenen Spinspirale mit einem Drehwinkel δ zwischen

benachbarten Spins gleiche Kreissegmente. Geht man von einer senkrechten Polarisierung P_{SP} der Spitze aus (schwarzer Pfeil), so ergibt sich in den gezeigten Fall $\Theta = n \cdot \frac{\delta}{360^\circ}$ für den Winkel zwischen Polarisierung der Spitze und Spin n . Die Projektion der Spins (farbige Schraffur) auf die Spitzenpolarisation führt aufgrund des TMR-Effekts zu unterschiedlichen Beiträgen zum spinpolarisierten Tunnelstrom. Dieser ist im dargestellten Fall für die hellblaue Ausrichtung parallel zur Spitzenpolarisation maximal, während für die grüne und braune Richtung ein geringerer Anteil vorliegt. Bei der blauen und roten Orientierung des Spins ist die Projektion antiparallel und führt zu einer Verringerung des Tunnelstroms. Entsprechend ergeben sich nach Gleichung 2.17 für SP-STM Anteile zum spinpolarisierten Tunnelstrom, die auf einer Kosinuskurve liegen. Auf Basis der beschriebenen Analyse konnten mit SP-STM unter anderem zyklonale Spinspiralen der Monolagen Mangan auf W(110) und W(001) festgestellt werden [42, 51].

Einen weiteren Einfluss auf die Spinspirale kann auch die Anisotropie haben. Ist deren Einfluss nicht zu vernachlässigen, kann es durch Spinkomponenten in die leichte Magnetisierungsrichtung zu einer Absenkung der Energie kommen. Eine entsprechende Verkippung der Spins in die leichte Magnetisierungsrichtung führt zur Ausbildung von inhomogenen Spiralen [45, 58].

3.7 Indirekte Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung

Während bei der DM-Wechselwirkung die Kopplung der Spins über ein benachbartes Atom mit starker Spin-Bahn-Kopplung vermittelt wird, koppeln die magnetischen Momente bei der indirekten DM-Wechselwirkung durch die RKKY-Wechselwirkung [7, 59, 60]. Auch hier wechselwirken die Leitungselektronen mit den lokalisierten Spins S_1 und S_2 , was zu einer Absenkung der Grundzustandsenergie führt. Das Wechselwirkungspotential des Elektronengases mit einem nicht magnetischen Atom am Ort $R = 0$ kann durch

$$V = -\Gamma\delta(\vec{r} - \vec{R}_1)\vec{s} \cdot \vec{S}_1 - \Gamma\delta(\vec{r} - \vec{R}_2)\vec{s} \cdot \vec{S}_2 + \lambda\vec{l} \cdot \vec{s} \quad (3.12)$$

ausgedrückt werden, wobei durch die ersten beiden Terme der Austausch zwischen Spin des Leitungselektrons und Spin des Atoms beschrieben wird und der letzte Term die Spin-Bahn Wechselwirkung berücksichtigt [60]. Dabei beschreibt Γ den Austauschterm und \vec{s} den Spin des Elektrons. Mithilfe dieses Potentials kann gezeigt werden, dass der DM-Vektor ähnlich der Austauschkonstanten J_A bei der RKKY-Wechselwirkung oszilliert [60]:

$$D \propto \sin(k_F[R_1 + R_2 + d]) . \quad (3.13)$$

R_1 und R_2 sind dabei die jeweiligen Abstände der magnetischen Atome vom Streuzentrum der Spin-Bahn-Kopplung [7, 60]. Somit hängt auch die indirekte DM-Wechselwirkung vom Fermivektor k_F und dem Abstand d zwischen den magnetischen Atomen ab, wobei sich die Frequenz der Oszillation für $R_A + R_B + d \neq 2d$ von der indirekten Austauschwechselwirkung unterscheidet. Zusammengefasst erhält man für ein magnetisches System unter Berücksichtigung der drei Terme für Heisenberg Austausch E_H , magnetischer Anisotropie E_K und DM-Wechselwirkung E_{DM} die Gesamtenergie

$$E_G = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{i,j} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) + \sum_i K_i \sin^2 \phi_i. \quad (3.14)$$

Die Betrachtung dieser Gesamtenergie reicht in vielen magnetischen Systemen aus, um die experimentell beobachteten magnetischen Strukturen zu erklären. Dennoch kann nicht grundsätzlich ein signifikanter Einfluss von Energiebeiträgen höherer Ordnung ausgeschlossen werden [44, 61].

3.8 Charakterisierung von magnetischen Spitzen

Nach der Diskussion der magnetischen Wechselwirkungen soll es in diesen Abschnitt um die Herstellung und die Charakterisierung magnetischer Spitzen für SP-STM gehen. Dazu wird erst die Präparation der Spitzen geschildert, bevor die Referenzprobe Fe/W(110) anhand von Messungen diskutiert wird.

3.8.1 Präparation von magnetischen Spitzen

Als Ausgangspunkt für die Präparation magnetischer Spitzen dienen W-Spitzen, die auch für nicht magnetische Messungen angefertigt werden. Diese werden *ex situ* in Natronlauge (2mol NaOH) unter Verwendung eines polykristallinen Wolframdrahts mit einem Durchmesser von $d_W = 0,375$ mm im Rahmen eines chemischen Ätzzvorgangs hergestellt [62]. Anschließend wird die Spitze mit Hilfe eines Spitzentransporters über die Schleuse in das UHV-System eingebracht und in der Präparationskammer auf der Elektronenstoßheizung bei einer Leistung von 60 W für 50 s geheizt. Durch diesen Prozess werden mögliche elektrisch isolierende Sauerstoffrückstände und Verunreinigungen beseitigt sowie die Voraussetzungen für die folgende Beschichtung mit einem magnetischen Film aus Cr oder Fe geschaffen. Im Anschluss folgt ein abschließender Heizprozess der beschichteten Spitze auf eine Temperatur von $T = 200 - 300^\circ \text{C}$, was zu einem homogenen magnetischen Film der Fe- oder Cr-Beschichtung führt.

Die Polarisation der Spitze hängt dabei vor allem vom magnetischen Material und der Schichtdicke ab [63]. Spitzen mit einer hohen Fe-Beschichtung sind in der Regel sensitiv zur in-plane Richtung, während bei geringer Bedeckung von wenigen ML eine Polarisierung entlang der Spit-

zenachse zu beobachten ist. Auch Cr-Spitzen sind bis zu einer Schichtdicke von 25-45 ML out-of-plane, zeigen aber für höhere Bedeckungen eine in-plane Polarisierung auf [63, 64]. Der wesentliche Unterschied zwischen Cr und Fe beschichteten Spitzen zeigt sich vor allem im Streufeld. Geht man von der bekannten AFM-Anordnung benachbarter Lagen für die Cr-Schicht aus [65], besitzt die Cr/W-Spitze ein geringes Streufeld. Anders verhalten sich Fe/W-Spitzen. Die Eisenschicht ordnet FM und weist damit ein erhöhtes Streufeld auf, das mit der Probenmagnetisierung wechselwirken kann [66].

Da für beide Materialien eine in-plane oder eine out-of-plane Spinpolarisierung der Spitze auftreten kann, muss vor der Messung unbekannter magnetischer Systeme die Polarisierung überprüft werden. Zur Charakterisierung magnetischer Spitzen wird in dieser Arbeit die mittels SP-STM und STS sehr gut untersuchte Doppellage (DL) Eisen auf W(110) verwendet [34, 39, 63, 66–71]. Aufgrund der chiralen magnetischen Struktur mit in-plane Domänenwänden und out-of-plane Domänen ermöglicht die DL die Identifikation der Spitzenpolarisierung in einer Messung und dient deshalb in dieser Arbeit als Referenzprobe.

3.8.2 DL Fe/W(110)

Eisen wächst auf W(110) bei Wachstumstemperaturen von $T = 200 - 400^\circ \text{C}$ von den Stufenkanten aus in Richtung der unteren Terrasse [39, 67, 72]. Bis zu einer Bedeckung von 1,3 ML ist das Wachstum des Films pseudomorph [73, 74], während bei höherer Bedeckung die Relaxation der Eisenschicht startet. Dadurch reduziert der Fe-Film die Gitterfehlanpassung von 9,4% zwischen Fe und W(110), was zu Versetzungslinien entlang der [001] Richtung führt. Diese sind auch bei einer Bedeckung von 1,8 ML in der Topographie in Abb. 3.3(a) zu sehen. Abgesehen von diesen Liniendefekten erscheint die DL atomar glatt mit nur wenigen Punktdefekten. Im Gegensatz dazu ist die Monolage (ML) rau und reich an Defekten. Durch das beschriebene Wachstum wechseln sich Streifen der DL mit Regionen der ML ab, wobei die Übergänge gleichzeitig eine darunterliegende Stufenkante des W(110) Substrats anzeigen (gestrichelte Linie).

Während auf der ersten Monolage eine in-plane Magnetisierung beobachtet werden kann, zeichnet sich die DL durch eine inhomogen zykloidalen Spinspirale in die [001] Richtung aus [72, 75, 76]. Im Vergleich zu anderen Systemen handelt es sich bei Fe/W(110) nicht um eine durch die DM-Wechselwirkung stabilisierte Spinspirale [42, 51, 76]. Vielmehr wird der kollineare Zustand durch die Dipol-Wechselwirkung destabilisiert und nur der Drehsinn durch die DM-Wechselwirkung bestimmt. Der Vorteil dieser Referenzprobe liegt vor allem in dem gleichzeitigen Vorliegen von magnetischen in-plane und out-of-plane Komponenten der DL Fe/W(110), was eine Charakterisierung der Polarisationsrichtung der Spitze vereinfacht.

Die dI/dU -Karte in Abb. 3.3(b) ist simultan zur Topographie (a) mit einer magnetischen Cr/W-Spitze aufgenommen. Aufgrund der geringen differentiellen Leitfähigkeit der ML bei $U = 600 \text{ mV}$

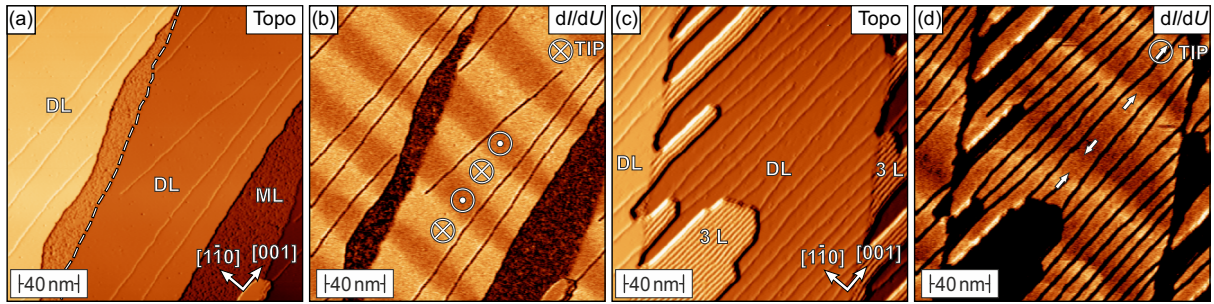


Abbildung 3.3 Magnetische Analyse der DL Fe/W(110). (a) Topographie und (b) dI/dU -Karte für eine Fe-Bedeckung von 1,8 ML gemessen mit einer out-of-plane Cr/W-Spitze. Die Variation des dI/dU -Signals auf der DL Fe zeigt zwei verschiedene out-of-plane Domänen. Der Kreis mit Kreuz (Punkt) gibt die Orientierung des Spinvektors in die (aus der) Probe an. (c) Topographie und (d) dI/dU -Karte gemessen mit einer in-plane Fe/W-Spitze. Die Pfeilrichtung zeigt die in-plane Orientierung der dunklen und hellen Domänenwände an. Scanparameter: $U = 600$ mV, $I = 1,5$ nA.

hebt sich diese in der differentiellen Leitfähigkeit durch den dunklen Kontrast deutlich von der DL ab. Auf der DL können zwei Kontrastniveaus identifiziert werden, die nach Formel 2.17 den entgegengesetzt magnetisierten out-of-plane Domänen zugeordnet werden können [39, 40, 72, 75]. Unter Annahme einer out-of-plane Orientierung der Spitze in Abb. 3.3(b) erhält man aufgrund des TMR-Effekts (vgl. Kapitel 2.5) für eine parallele Ausrichtung der Spinrichtung von Spitze und Probe ein erhöhtes dI/dU -Signal, wohingegen dieses für einen höheren Tunnelwiderstand bei antiparalleler Ausrichtung geringer ausfällt. Somit ergibt sich aus der beschriebenen Situation eine Abfolge von hellen und dunklen Regionen auf der DL Fe/W(110) mit einer 180° Drehung der Fe-Spins an den dazwischen liegenden Domänenwänden.

Diese Néel-artigen Domänenwände auf den Streifen der DL sind senkrecht zu den Versetzungslinien in die $[1\bar{1}0]$ Richtung orientiert und besitzen eine Breite von ungefähr 6 nm [39, 67]. Der Abstand der Domänenwände von 23 nm in die $[001]$ Richtung entspricht den in der Literatur beobachteten Größenbereich der Domänen von 20 – 40 nm [67]. Des Weiteren weisen die Domänen beim Vergleich benachbarter Terrassen eine AFM-Ordnung auf, die durch einen Energiegewinn des Systems durch die Reduzierung des Streufelds erklärt wird [67].

Bei Bedeckungen oberhalb von 2 ML bilden sich Inseln mit höherer Bedeckung, auf denen durch Relaxation für 3 Lagen eindimensionale und ab vier Lagen zweidimensionale Moiré-Strukturen zu beobachten sind [74, 77, 78]. Die Fe-Bedeckung auf W(110) in Abb. 3.3(c) beträgt 2,2 ML und zeigt neben DL auch Inseln der dritten Lage. Diese erscheinen in der zur Topographie gehörenden dI/dU -Karte in Abb. 3.3(d) als dunkle Regionen und besitzen gegenüber der DL eine geringere Leitfähigkeit bei $U = 600$ mV. Da die Messung mit einer in-plane sensitiven Spitze gemessen ist, unterscheidet sich der Kontrast auf DL Fe/W(110) grundlegend von dem einer out-of-plane Spitze. Für die in-plane Spitze liegen drei Kontrastniveaus auf der DL vor, was wiederum durch die Orientierung der Spitzenpolarisation relativ zur Probenmagnetisierung erklärt werden kann. Die Atome innerhalb der out-of-plane Domänen weisen geringe in-plane Komponenten auf und

somit besteht das Signal hauptsächlich aus dem spingemittelten Stromanteil der Gleichung 2.17. Innerhalb der Néel-artigen Domänenwände ändert sich der Winkel Θ zwischen Spinrichtung der Spitze und der Probe durch die kontinuierliche Drehung der Fe-Spins. Insgesamt dreht sich die Orientierung der Spins um 180° von out-of-plane zu in-plane und weiter in die entgegengesetzte out-of-plane Richtung.

Aufgrund der zyklidalen Struktur der Spinspirale wechseln sich Domänenwände mit einer in-plane Komponente des Spins in die $[001]$ und die entgegengesetzt $[00\bar{1}]$ Richtung ab. Nimmt man die in Abb. 3.3(d) gezeigte in-plane Komponente der Spitze an, folgt daraus nach Formel 2.17 ein erhöhtes dI/dU -Signal für die parallele und ein reduziertes Signal für die antiparallele Ausrichtung der Polarisierung zwischen Probe und Spitze. Als Resultat erhält man alternierend helle und dunkle Streifen senkrecht zu den Versetzungslinien in die $[1\bar{1}0]$ Richtung.

Eine zusätzliche Kontrolle der magnetischen Struktur liefern Messungen bei einer Tunnelspannung von $U = 50$ meV. Bei dieser Spannung sind an den Positionen der Domänenwände dunkle Linien in der dI/dU -Karte zu sehen, wie aus dem Vergleich der magnetischen Messung bei $U = 600$ meV und der Messung des gleichen Bereichs bei $U = 50$ meV in Abbildung 3.4(a) hervorgeht. Dieser Kontrast beruht auf der Abhängigkeit der Zustandsdichte von der Magnetisierungsrichtung (TAMR-Effekt) und kann auch für nicht magnetische Spitzen beobachtet werden [79, 80]. Der Grund hierfür liegt an der Magnetisierung von Domänenwänden, die sich von der leichten out-of-plane Richtung der Fe DL unterscheidet und dadurch zu einer Hybridisierung der d_{z^2} und d_{xy+xz} Zustände führt [69]. Entsprechend kommt es bei einer Energie von ungefähr $U = 70$ meV zur Öffnung einer Hybridisierungslücke und als Folge daraus zu einer Änderung der differentiellen Leitfähigkeit. Somit kann mit Hilfe von Messungen bei $U \approx 70$ meV der magnetische Kontrast und das Vorliegen von Domänenwänden auf der DL Fe/W(110) zusätzlich überprüft werden.

Spektroskopie Im Verlauf dieser Arbeit wird die Spektroskopie auf der DL Fe/W(110) zur Überprüfung von Spitzenänderungen herangezogen. Dabei wird die Spitze zunächst in einer Vormessung auf ihre Polarisierung getestet und Spektren in Domänen unterschiedlicher differentieller Leitfähigkeit aufgenommen. Danach werden mit der charakterisierten Spitze auf den $3d$ TMO-Ketten magnetische Messungen vorgenommen. Da sich die Spitze im Verlauf der Messungen ändern kann und somit ein fehlender magnetischer Kontrast auf den TMO-Ketten durch eine Spitzenänderung nicht auszuschließen ist, muss eine erneute Überprüfung auf der DL Fe/W(110) durch eine Kontrollmessung erfolgen. Dabei werden die Spektren der Vormessung und der Kontrollmessung auf den unterschiedlichen Domänen verglichen. Aus Kapitel 2 ist bekannt, dass kleine Änderungen an der Spitze zu einer signifikanten Änderung des Tunnelstroms führen. Deshalb kann bei identischen Spektren davon ausgegangen werden, dass die Spitze sich während dem

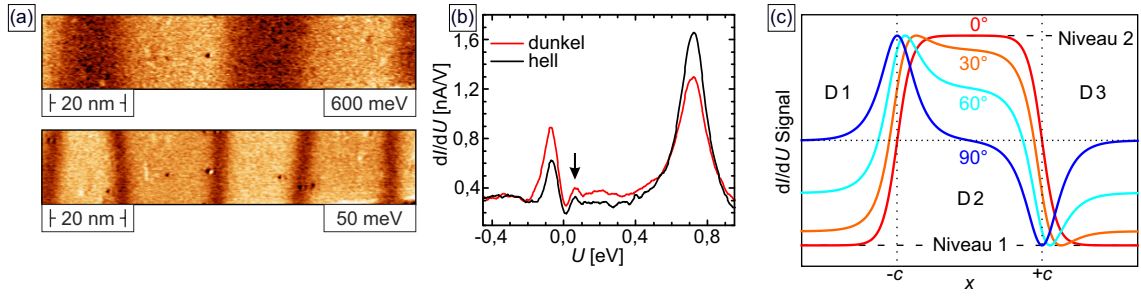


Abbildung 3.4 Charakterisierung magnetischer Spitzen. **(a)** dI/dU -Karten bei $U = 600$ meV oben und $U = 50$ meV unten. Neben einer Kontrastumkehr innerhalb der Domänen sind bei 50 meV die Domänenwände als dunkle Linien zu sehen. **(b)** Charakteristische Spektroskopie der DL Fe/W(110) aufgenommen mit einer Cr/W-Spitze auf zwei benachbarten Domänen. Der Signalunterschied in der differentiellen Leitfähigkeit resultiert aus der entgegengesetzten Magnetisierung. **(c)** Veränderung des dI/dU -Signals der Fe DL in Abhängigkeit des Winkels Θ nach Gleichung 3.16 und Ref. [70]. Für eine out-of-plane Spitze $\Theta = 0^\circ$ sind zwei Kontrastniveaus zu sehen. Bei einer in-plane Polarisierung $\Theta = 90^\circ$ ist kein Kontrastunterschied zwischen den Domänen D1 bis D3 zu sehen. Dafür ist an der Position der Domänenwand $-c$ ($+c$) ein hoher (niedriger) Kontrast zu erkennen.

magnetischen Messungen nicht geändert hat.

Charakteristische Spektren einer DL Fe/W(110) sind in Abb. 3.4(b) für zwei entgegengesetzt magnetisierte Domänen gezeigt, die mit einer out-of-plane polarisierten Cr/W-Spitze aufgenommen sind. Dazu wurde die Spitze jeweils einmal über einer dunklen (rote Kurve) und einer hellen Region (schwarze Kurve) in der dI/dU -Karte positioniert. Während die Karte der differentiellen Leitfähigkeit eine orts aufgelöste Messung der lokalen Zustandsdichte bei entsprechender Tunnelspannung darstellt, erhält man mit der Spektroskopie zusätzlich eine energetisch aufgelöste Messung. Entsprechend kann der Kontrastunterschied der dI/dU -Karte aus dem oberen Teil der Abb. 3.4(a) durch den Signalunterschied der beiden Kurven im Bereich um $U = 700$ meV erklärt werden. Dabei kann die rote (schwarze) Kurve der dunklen (hellen) Region zugeordnet werden. Der zweite ausgeprägte Zustand der DL Fe/W(110) befindet sich im Bereich von besetzten Zuständen bei $U = -70$ mV. Hier zeigt die rote Kurve ein höheres Signal, wodurch eine Umkehr des Kontrasts bezüglich des Signals bei $U = 600$ meV zu erwarten ist.

Während beide Zustände nach Ref. [69] den d_{z^2} Zuständen des Eisens zugeordnet werden können, befindet sich bei der Energie von ungefähr $U = 70$ meV ein weiteres kleines Signalmaximum (schwarzer Pfeil). Dieses Maximum ist charakteristisch für die out-of-plane Domänen der DL. An den Positionen der Domänenwände verschwindet dieses kleine Maximum durch die Öffnung einer Hybridisierungslücke und führt zu den diskutierten dunklen Linien im unteren Teil von Abb. 3.4(a).

Domänenwände Um die Spitze weiter zu charakterisieren und eine genauere Aussage über die Richtung des Polarisationsvektors der Spitze treffen zu können, kann die Domänenwand gefittet werden. Dazu verwenden Kubetzka *et al.* [70] für die Beschreibung der Winkeländerung

an den Positionen $\pm c$ von zwei Domänenwänden der Breite w die Formel

$$\phi_{360}(x) = \sum_{+,-} \arcsin \left(\tanh \left(\frac{x \pm c}{w/2} \right) \right). \quad (3.15)$$

Des Weiteren ist aus dem Kapitel 2.5 die Kosinus-Abhängigkeit des spinpolarisierten Tunnelstroms vom Winkel zwischen Polarisierungsrichtung der Spitze und der Probe bekannt. Daraus lässt sich der Signalverlauf der differentiellen Leitfähigkeit durch die Beziehung

$$y = y_0 + a \cos(\phi_{360}(x) + \Theta) \quad (3.16)$$

beschreiben [70]. Dabei stellt y_0 einen Versatz und a eine Skalierung des dI/dU -Signals dar. Zusätzlich beschreibt der Winkel Θ die Abweichung der Spitzenmagnetisierung von einer vollständigen out-of-plane Polarisierung.

Mit Hilfe dieser Gleichung kann somit zusätzlich zu der Polarisierungsrichtung auch die Stärke der Verkippung gegenüber einer vollständigen out-of-plane Magnetisierung der Spitze angegeben werden. Die entsprechenden Profilverläufe für $\Theta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ & 90° sind in Abb. 3.4(c) gezeigt. Bei $\Theta = 0^\circ$ ist die Spitzenmagnetisierung parallel oder antiparallel zu den Spinmomenten der Fe-Atome in den Domänen D 1 bis D 3. Aus diesem Grund gibt es zwei Kontrastniveaus in der differentiellen Leitfähigkeit, wobei der Übergang an den Domänenwänden der Breite w an den Positionen $\pm c$ stattfindet. Dies entspricht der Situation aus Abb. 3.3(b) mit hellen und dunklen Regionen. Bei Verkippung der Spitzenmagnetisierung verringert sich der Kontrastunterschied zwischen den Domänen und ein zusätzliches Signal im Bereich der Domänengrenzen tritt auf. Dieses ist der in-plane Komponente der Spitze zuzuschreiben. Da sich zusätzlich die Spinorientierung in benachbarten Domänenwänden unterscheidet, ist der Anteil zum dI/dU -Signal an der Position $-c$ positiv und bei $+c$ negativ. Bei einem vollständigen in-plane Signal $\Theta = 90^\circ$ ist der Kontrastunterschied zwischen den Domänen verschwunden und man erhält ein maximales Signal bei $-c$ und ein minimales Signal an der Stelle $+c$. Dies führt in der dI/dU -Karte aus Abb. 3.3(d) zu den alternierenden hellen und dunklen Streifen.

4 Ketten aus Übergangsmetalloxiden auf Ir(001)

Mit Hilfe der charakterisierten Spitzen ist es möglich, unbekannte magnetische Nanostrukturen zu untersuchen. Beginnend mit schmalen Streifen von Submonolagen Fe auf W(110) und Cu(111) Oberflächen wurden die untersuchten Nanobjekte im Laufe der Zeit kleiner bis hin zu eindimensionalen Ketten und Clustern mit wenigen Atomen [7, 10, 11, 75, 81]. Dabei erregen vor allem die magnetischen Eigenschaften besonderes Interesse, da sich diese vom Festkörper und Film unterscheiden und für Datenspeicherung interessant sind [3, 5, 8, 9].

Für die Realisierung eindimensionaler Ketten gibt es im Wesentlichen zwei Varianten. Die Erste beruht auf der atomaren Manipulation von Atomen auf der Oberfläche [4, 5]. Hier werden mit Hilfe der STM-Spitze einzelne Atome auf dem Substrat zu einer Kette zusammengeschoben und im Anschluss die magnetischen Eigenschaften untersucht. Der Vorteil solcher Ketten ist die gezielte Anfertigung bestimmter Kettenlängen, Paritäten und die Wahl zwischen hcp- und fcc-Adsorptionsplatz, der Einfluss auf die magnetischen Eigenschaften des Atoms haben kann [5, 7]. Des Weiteren sind mit dieser Methode neben Ketten andere Strukturen sowie die Anordnungen von Atomen in Clustern möglich [7, 8]. Allerdings ist diese Art der Präparation zeitintensiv und ist auf die Fläche beschränkt, die mit den Piezoaktuatoren erreichbar ist.

Eine andere Methode bedient sich passender Substrate, die aufgrund ihres Fehlschnitts eine regelmäßige Stufenstruktur aufweisen [9, 81]. Nach dem Aufdampfen von 3d-Übergangsmetallen wachsen entlang dieser Stufen schmale Streifen bis hin zu eindimensionalen Ketten aus dem Übergangsmetall. Mit dieser Variante können schnell eindimensionale Systeme erzeugt werden, deren Dichte jedoch von der Anzahl der Stufenkanten abhängt. Weitere Nachteile dieser Methode sind die unregelmäßigen Abstände und die Lage der Ketten an den Stufenkanten, die die Untersuchung einer Kopplung zwischen Ketten verhindern. Zudem ist die Länge der Ketten von der Struktur der Stufenkanten abhängig. Zeigt diese einen atomaren Versatz, wird auch die Kette an dieser Stelle unterbrochen und verhindert damit die Ausbildung von langen eindimensionalen Systemen.

Eine weitere Variante des automatischen Wachstums stellt die Präparation von 3d TMO-Ketten auf Ir(001) und Pt(001) dar. Durch das Verfahren von Ferstl *et al.* [12–14] werden lange eindimensionale Ketten mit hoher Dichte erzeugt, die nur über die benachbarten Sauerstoffatome an das Substrat gebunden sind. Ein Vorteil dieser Systeme ist die periodische Anordnung der Ketten, die eine Untersuchung der magnetischen Kopplung zwischen Ketten ermöglicht.

Die magnetische Analyse der TMO-Ketten aus Co, Fe, Mn und Cr ist das Ziel dieser Arbeit. Dazu wird in diesem Kapitel zuerst der Stand der aktuellen Forschung rekapituliert. Im Folgenden wird das Ir(001) Substrat und die Präparation der (2×1) Rekonstruktion von Sauerstoff diskutiert, die als Grundlage für das Wachstum der TMO-Ketten dient. Im Anschluss wird sowohl die publizierte (3×1) Struktur überprüft als auch die magnetischen Eigenschaften der Ketten durch SP-STM analysiert. Im Kapitel 5 wird dann für das Pt(001) Substrat in ähnlicher Weise verfahren.

4.1 Aktueller Stand der Forschung

In dieser Arbeit werden als Substrate die Übergangsmetalle Iridium (Ir) und Platin (Pt) verwendet. Beide kristallisieren in der fcc-Struktur, wobei Platin ein Hüllenelektron pro Atom in der $5d$ -Schale mehr besitzt als Iridium. Im Gegensatz zu den isoelektrischen $4d$ -Metallen Rh, Pd und Ag besitzen die (001) Oberflächen von Ir und Pt, wie auch Au eine hexagonale Oberflächenrekonstruktion [82]. Der Grund hierfür liegt in einer Absenkung der Oberflächenenergie durch den Abbau der Verspannung in der obersten Lage. Diese wird durch eine Verarmung der anti-bindenden d -Zustände verursacht und führt zu einem Anstieg der Bindungsstärke zwischen den Oberflächenatomen [82]. Der Energiegewinn durch eine höhere Atomdichte einer Rekonstruktion ist dabei für die (001) Oberflächen von Ir, Pt und Au größer als der Energieverlust durch die größeren Bindungslängen zwischen Oberflächenatomen mit Atomen des Substrats [82].

Im Fall von Ir(001) entsteht eine (5×1) Rekonstruktion durch hexagonal angeordnete Oberflächenatome auf dem quadratischen Gitter der (001) Oberfläche, wie aus experimentellen [83–85] und theoretischen [82, 86] Untersuchungen bekannt ist. Während das Wachstum von Übergangsmetallen auf (111) Oberflächen gut durchzuführen ist und interessante magnetische Ordnungsphänomene zu beobachten sind [44, 87–89], ist ein direktes Wachstum qualitativ hochwertiger magnetischer Schichten auf der Ir(001) Oberfläche aufgrund der Rekonstruktion schwierig [90, 91].

Eine Aufhebung der (5×1) Oberflächenrekonstruktion auf Ir(001) kann durch die Adsorption von Sauerstoff erreicht werden [12, 83]. Dabei wird dieser an Brückenpositionen zwischen zwei Iridiumatomen adsorbiert [85], wie es in Abb. 4.1(a) in der Draufsicht und in Abb. 4.1(b) in der Seitenansicht zu sehen ist. Dadurch entsteht eine (2×1) Struktur, wobei jedem Ir-Atom an der Oberfläche genau ein Sauerstoffatom zugeordnet werden kann. Durch den adsorbierten Sauerstoff werden zudem die zwei zwischen den Sauerstoff befindlichen Ir-Reihen relativ zueinander verschoben (schwarze Pfeile) und die Bindungslänge zwischen den Ir-Atomen verringert. Dies ist vergleichbar mit der hexagonalen Oberflächenschicht der (5×1) Rekonstruktion, bei der es dadurch zu einer Absenkung der Oberflächenenergie kommt. Die kürzere Bindungslänge zwi-

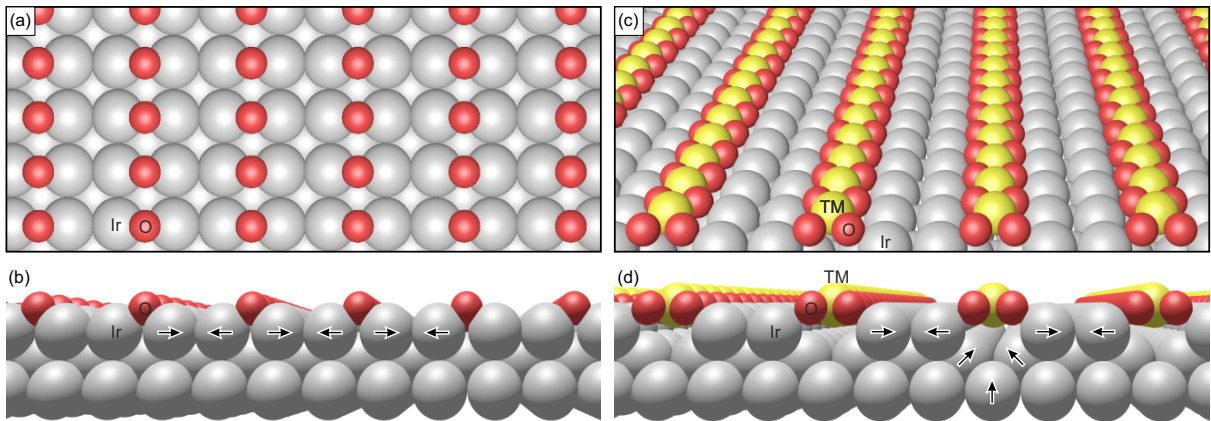


Abbildung 4.1 Schematische Darstellung der (2×1) Rekonstruktion in der Draufsicht (a) und Seitenansicht (b). Die Sauerstoffatome befinden sich in Brückenpositionen. Bei der (3×1) Struktur (c) der TMO-Ketten liegen die Atome des Übergangsmetalls oberhalb einer fehlenden Atomreihe des Substrats (d). Schwarze Pfeile geben die Verschiebung der Atome bezüglich eines relaxierten Gitters an. Die Darstellung (a) ist an Ref. [85] und (b) an Ref. [12] angelehnt.

schen Ir-Atomen könnte somit ein Grund für die Adsorption von Sauerstoff an den skizzierten Brückenplätzen sein [85].

Um die (2×1) Sauerstoffrekonstruktion zu präparieren, können zwei Methoden angewendet werden [92]. In der ersten Variante wird mittels Sauerstoff und Wasserstoff eine metastabile (1×1) Ir-Oberfläche erzeugt und die hexagonale Oberflächenschicht aufgehoben [92–96]. Setzt man diese Oberfläche molekularem Sauerstoff aus, erhält man die beschriebene Rekonstruktion [85, 92, 95]. Ebenfalls möglich ist ein Abkühlen des rekonstruierten Ir-Kristalls in Sauerstoffatmosphäre, wie es Lerch *et al.* [93] und Ferstl *et al.* [13] beschrieben haben. Der wesentliche Unterschied zur ersten Methode besteht darin, dass die Aufhebung der Rekonstruktion und die Ausbildung der (2×1) Sauerstoffphase simultan stattfindet. Somit muss $1/5$ der in der hexagonalen Oberflächenschicht enthaltenen Ir-Atome während der Bildung der (2×1) Rekonstruktion unverteilt werden.

Die lange bekannte Sauerstoffrekonstruktion nutzte Ferstl *et al.* [12, 13] vor Kurzem als Ausgangspunkt für die Präparation von periodischen, eindimensionalen TMO-Ketten. Dazu wird zunächst eine drittel Monolage eines Übergangsmetalls (TM) auf die oxidierte Ir(001) Oberfläche aufgedampft. Durch das Heizen dieser Probe auf eine Temperatur von $T = (700 - 800)^\circ\text{C}$ in einer Sauerstoffatmosphäre und dem folgenden langsamen Abkühlen entstehen äquidistante Ketten mit einer Länge von über hundert Nanometer. Eine schematische Darstellung solcher TMO-Ketten ist in den Abbildungen 4.1(c) & (d) gezeigt. Die Ketten verlaufen entlang der Richtung nächster Nachbarn des Ir-Substrats und treten aus Gründen der Kristallsymmetrie in die $[110]$ und die 90° verdrehte $[\bar{1}\bar{1}0]$ Richtung auf. Die strukturelle Einheitszelle ist eine (3×1) Struktur mit einem atomaren Abstand a_{Ir} zwischen Kettenatomen und einer periodischen Distanz von $3a_{\text{Ir}}$ zwischen benachbarten Ketten. Jedes Atom des Übergangsmetalls (gelb) ist über

Kopplung	MnO ₂	FeO ₂	CoO ₂	NiO ₂
innerhalb Kette	AFM	AFM	FM	NM
zwischen Ketten	AFM	AFM	FM	NM

Tabelle 4.1 Übersicht über die magnetische Kopplung der verschiedenen TMO-Ketten nach DFT-Berechnungen von Ferstl *et al.* [12].

vier Sauerstoffatome (rot) mit dem Ir-Substrat verbunden. Des Weiteren sind die Kettenatome gegenüber den Ir-Atomen um eine halbe Gitterkonstante verschoben und liegen oberhalb einer fehlenden Reihe des Ir-Substrats. Auch diese Konstellation führt, genauso wie die (2×1) Phase der Sauerstoffrekonstruktion, zu einer Verschiebung der Ir-Reihen zueinander. Damit steigt die Atomdichte im Bereich der Ir-Doppelreihen an und kommt der stabilen hexagonalen Oberfläche näher [85]. Zusätzlich stehen die Übergangsmetalle durch die entstandene Bindung mit dem Sauerstoff aus der Oberflächenebenen heraus. Dies fällt für Ni mit $1,10 \text{ \AA}$ und Mn mit $1,08 \text{ \AA}$ am größten und für Co mit $0,92 \text{ \AA}$ und Fe mit $0,69 \text{ \AA}$ geringer aus [12].

Durch den Vergleich der oxidierten Ir(001) Oberfläche mit der (3×1) Struktur in Abb. 4.1 können zwei wesentliche Punkte über den Wachstumsvorgang festgehalten werden. Erstens ist das Heizen unter Sauerstoffatmosphäre aufgrund der Desorption von Sauerstoff bei den verwendeten Temperaturen und des um $1/3$ höheren Sauerstoffgehalts der TMO-Ketten notwendig [95]. Zweitens werden Reihen des Ir-Substrats durch das Übergangsmetall ersetzt und somit findet ein Umverteilungsprozess von Ir-Atomen statt. Bei hohen Temperaturen ist die Mobilität der Ir-Atome höher und sie rekombinieren an den Stufenkanten des Substrats. Zu niedrige Temperaturen während des Heizvorgangs im Sauerstoff führen hingegen zu rechteckigen Inseln auf den Terrassen [12].

Während die Struktur für die TMO-Ketten durch Ferstl *et al.* [12, 13] mittels niederenergetische Elektronenbeugung (LEED) und STM experimentell sowie theoretisch mittels Dichtefunktionalrechnungen (DFT) bestimmt wurde, existieren für die magnetischen Strukturen nur DFT-Rechnungen. Die Ergebnisse für die einzelnen Übergangsmetalle sind in der Tabelle 4.1 zusammengefasst [12, 13]. Demnach besitzen NiO₂-Ketten aufgrund der starken $pd\sigma$ -Bindung zwischen Sauerstoff und Nickel kein magnetisches Moment, wohingegen der FM-Zustand für CoO₂-Ketten energetisch um 25 meV günstiger als ein AFM ist. Auch die Kopplung benachbarter CoO₂-Ketten ist nach den Berechnungen FM, wobei der Energiegewinn bei 4 meV pro Co-Atom liegt. Für den Fall von Fe und Mn ist der AFM-Fall günstiger. Entlang der Ketten liegt der Energiegewinn für FeO₂ bei 44 meV und für MnO₂ bei 27 meV [12]. Die Kopplung zwischen benachbarten Ketten ist zwar ebenso AFM, fällt aber mit einem Energiegewinn von 9 meV für Fe und $0,4 \text{ meV}$ für Mn schwächer aus [12, 13]. Für die SP-STM Messungen sind demnach große magnetische Domänen für CoO₂-Ketten denkbar, während im Fall von FeO₂ und MnO₂ eine magnetische (6×2) Struktur zu erwarten ist.

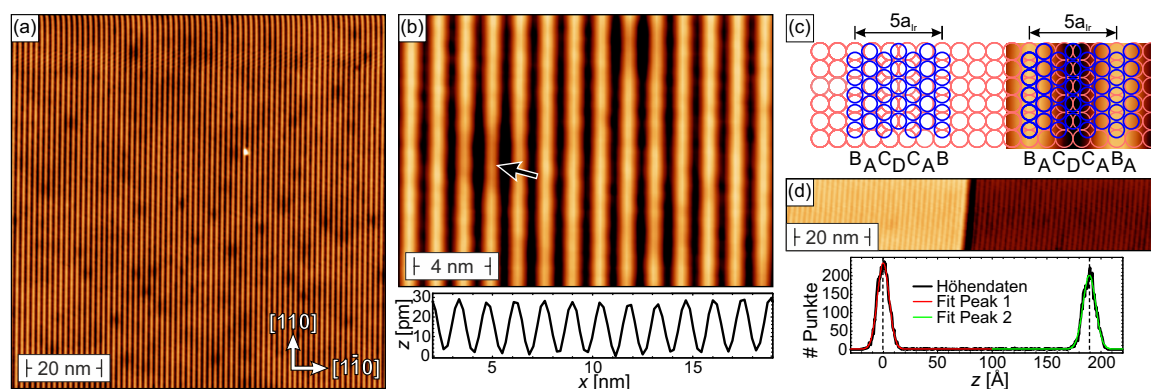


Abbildung 4.2 (a) Übersichtsaufnahme der sauberen Ir(001) Oberfläche. Die Streifen der (5×1) Rekonstruktion verlaufen in die $[110]$ Richtung. (b) Höher aufgelöste Aufnahme der Rekonstruktion mit Linienprofil im unteren Teil. Der Pfeil zeigt auf einen der dunkel erscheinenden Defekte, die auch in (a) zu sehen sind. (c) Schematische Darstellung der Ir (5×1) Rekonstruktion nach Ref. [84] mit der hexagonalen Oberflächenschicht (blaue Kreise) und dem quadratischen (001) Gitter (rot) von Ir(001). (d) Topographie an einer Stufenkante mit der dazugehörigen Höhenverteilung der Messpunkte. Durch den Abstand der zwei Peaks wird die Stufenhöhe berechnet. Scanparameter: (a),(b), $U = -1$ V, $I = 100$ pA; (d), $U = 1$ V, $I = 300$ pA.

4.2 Ir(001) Oberfläche

Das Wachstum der TMO-Ketten in hoher Qualität und die Untersuchung der magnetischen Struktur setzt eine saubere Oberfläche mit wenigen Defekten voraus. Dazu muss der Kristall im Vorfeld gereinigt und die Oberfläche mit dem STM kontrolliert werden. Die Präparation erfolgt in der Präparationskammer mittels mehreren Zyklen der Kathodenzerstäubung (Sputtern) mit Ar^+ -Ionen bei einer Energie von 1 keV und einen Sputterstrom von $I_{\text{SP}} \approx 2 \mu\text{A}$. Im Anschluss wird der Kristall für eine Dauer von drei Minuten auf der Elektronenstoßheizung auf $T = 1200^\circ\text{C}$ geheizt. Um mögliche Verunreinigungen mit Kohlenstoff zu verhindern, werden die Heizvorgänge für die ersten Zyklen unter Sauerstoffatmosphäre durchgeführt.

Eine Übersichtsaufnahme der reinen Ir(001) Oberfläche ist in Abb. 4.2(a) gezeigt. Die periodischen Streifen der (5×1) Rekonstruktion verlaufen in der beobachteten Domäne in die $[110]$ Richtung und können aufgrund der Kristallsymmetrie in anderen Domänen auch in die $[1\bar{1}0]$ Richtung verlaufen. Eine höhere Auflösung der Struktur ist in Abb. 4.2(b) dargestellt, aus der sich über das dazugehörige Linienprofil eine Periode von $p_{5 \times 1} = (1,40 \pm 0,05)$ nm bestimmen lässt. Über die Gitterkonstante $a_{\text{Ir}} = 271$ pm [97] berechnet sich der zu erwartende Wert für die Rekonstruktion zu $5 \times a_{\text{Ir}} = 1,36$ nm und stimmt mit dem gemessenen Wert in Rahmen der Messgenauigkeit gut überein.

Die Qualität der Oberfläche ist mit nur einem hell erscheinenden Defekt auf der (100×100) nm² großen Übersichtsaufnahme als gut zu beurteilen. Allerdings weist die Topographie ungefähr 110 runde Vertiefungen auf, die Durchmesser von bis zu 2,5 nm besitzen. Einer dieser Defekte ist in der höheren Auflösung in Abb. 4.2(b) mit einem schwarzen Pfeil markiert. Da die Streifen der Re-

konstruktion nicht unterbrochen sind, liegen diese Defekte in tiefer liegenden Kristallschichten. Dabei kommt es zu einer Änderung der lokalen Zustandsdichte im Bereich des Defekts und damit nach Kapitel 2 auch zu einer Veränderung des Tunnelstroms. Diese typischen Verunreinigungen treten für alle Messungen an Ir(001) auf und können auch durch wiederholte Reinigungszyklen nicht entfernt werden.

In Abb. 4.2(c) ist eine schematische Darstellung der (5×1) Rekonstruktion gezeigt [84]. Die roten Kreise stellen dabei die Ir-Atome des quadratischen Gitters der (001) Oberfläche dar, das von dem dichter gepackten hexagonalen Gitter (blaue Kreise) überlagert wird. Dadurch befinden sich die Atome der Reihen A bis D in unterschiedlichen Adsorptionsplätzen. Während in Reihe B die Brückenposition vorliegt, verschiebt sich die Position der Oberflächenatome in Reihe A nahezu auf eine darunter liegende Ir-Reihe. Auch die Atome der Reihe D sitzen in Brückenposition, wobei im Unterschied zur Reihe B die Nachbaratome der Atomreihen C sich in einer Muldenposition des (001) Gitters befinden. Durch die verschiedenen Adsorptionsplätze entsteht eine Aufwölbung der Oberfläche an der Position der Atomreihen A, da hier die oberen Atome direkt auf denen des (001) Gitters liegen. Als Resultat wären in der Topographie Doppelstreifen entlang der Atomreihen A zu erwarten, die durch die Reihe B getrennt sind. Allerdings führt eine schlechtere Auflösung durch die Spitze zu der Beobachtung eines einzelnen Streifens, wobei die niedriger liegende Reihe B nicht aufgelöst wird. Entsprechend ist ein niedriger Kontrast in den Übersichtsaufnahmen entlang von Atomreihen C und D zu erwarten, da die Atome in Muldenpositionen tiefer in das Substrat einsinken können [86].

Zur weiteren Charakterisierung der Oberfläche ist in Abb. 4.2(d) eine Aufnahme über eine Stufenkante mit dazugehöriger Höhenverteilung gezeigt. Aus den Höhendaten der Messpunkte ergeben sich zwei Peaks, die den zwei Terrassen zugeordnet werden können. Beide werden mit einer Gaußfunktion gefittet und die Position des Maximums bestimmt. Der Abstand der Peaks von $h = (189 \pm 9)$ pm entspricht dem zu erwartenden Wert von $h_{\text{Lit}} = 192$ pm [97]. Aufgrund einer Abweichung in lateraler sowie in vertikaler Richtung von weniger als 3% bestätigt die Messung nicht nur eine gute Qualität der Oberfläche, sondern auch die richtige Kalibrierung des Scanners.

4.3 Oxidation von Ir(001)

Der zweite Schritt der Präparation befasst sich mit der Oxidation der Ir(001) Oberfläche. Wie bereits im Kapitel 4.1 angesprochen, gibt es zwei Möglichkeiten eine (2×1) Sauerstoffrekonstruktion als Basis für die TMO-Ketten herzustellen. Aufgrund des Mangels an einer zweiten Gasdurchführung für Wasserstoff ist die Präparation einer (1×1) Ir-Oberfläche in unserem UHV-System nicht möglich. Die oxidierte Ir-Oberfläche wird deshalb mittels Heizen der rekonstruierten Oberfläche in einer Sauerstoffatmosphäre hergestellt. Dabei müssen die optimalen

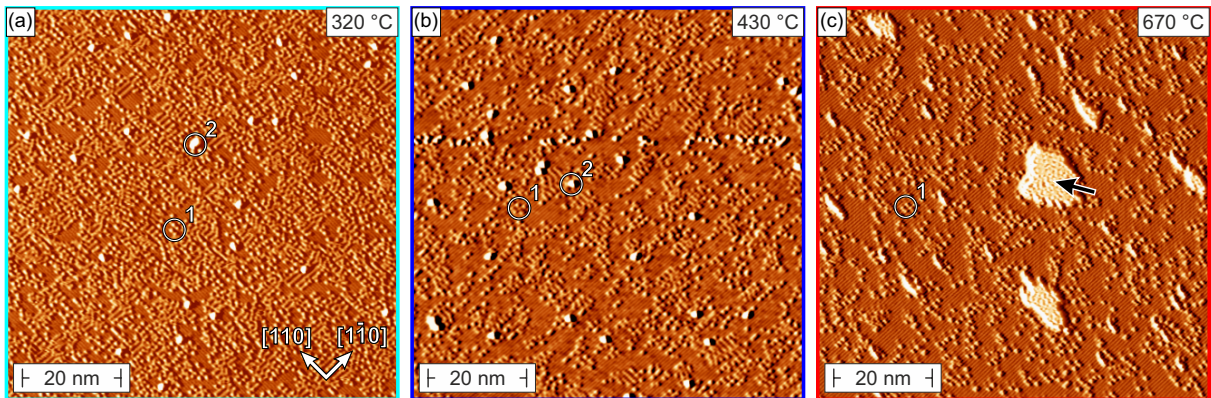


Abbildung 4.3 Abhängigkeit der Oberflächenqualität der (2×1) Sauerstoffrekonstruktion von der Heiztemperatur bei einem Sauerstoffdruck von $p_{O_x} = 1 \times 10^{-7}$ mbar: (a) $T = 320$ °C, (b) $T = 430$ °C und (c) $T = 670$ °C. Mit steigender Temperatur nehmen die punktförmigen Defekte 1 ab. Der schwarze Pfeil markiert eine Insel, die sich bei höheren Temperaturen bilden. Scanparameter: (a),(b), $U = 1$ V, $I = 300$ pA; (c), $U = -1$ V, $I = 100$ pA.

Parameter für die Temperatur, den Sauerstoffdruck und den Abkühlvorgang gefunden werden. Als Standardprozedur wird eine Dauer von 3 min für das Heizen unter stetigen Sauerstofffluss verwendet. Anschließend wird innerhalb von einer Minute die Heizleistung abgestellt, was zu einem langsamen Abkühlen der Probe unter Sauerstoffatmosphäre führt.

Zu Beginn soll der Einfluss der Temperatur während des Heizvorgangs untersucht werden. Der Sauerstoffdruck wird dazu auf $p_{O_x} = 1 \times 10^{-7}$ mbar am Gaseinlassventil der Präparationskammer eingestellt. Die Ergebnisse der Messungen sind in Abb. 4.3 gezeigt. Bei einer Temperatur von $T = 320$ °C, Abb. 4.3(a), weist die Oberfläche eine hohe Dichte von Defekten der Art 1 mit einer Höhe von 15 pm auf. Die Position der Defekte befindet sich zwischen der Streifenstruktur der (2×1) Rekonstruktion. Dieselben Defekte sind bei einer Temperatur von $T = 430$ °C in Abb. 4.3(b) und $T = 670$ °C in Abb. 4.3(c) zu sehen. Die Dichte nimmt mit zunehmender Temperatur ab, während die Größe der Domänen mit (2×1) Rekonstruktion zunimmt.

Die heller erscheinenden Defekte 2 mit einer mittleren Korrugation von 140 pm befinden sich ebenfalls zwischen den Streifen der (2×1) Struktur. Im Gegensatz zu den Defekten 1 scheint hier die Temperatur keinen Einfluss auf die Häufigkeit zu haben. Bei $T = 670$ °C in Abb. 4.3(c) entstehen zusätzlich zu den erwähnten Defekten 1 und 2 Inseln, die eine labyrinthartige Struktur besitzen (schwarzer Pfeil). Möglicherweise handelt es sich hierbei um eine Iridiumoxidphase. Für die spätere Präparation von TMO-Ketten sind diese Inseln zu vermeiden, da diese die Bildung der (3×1) Struktur verhindern. Um das Zusammenspiel zwischen Temperatur und Sauerstoffdruck zu verstehen und die beschriebenen Defekte genauer zu analysieren, dienen die zwei Messreihen in Abb. 4.4 für $T = 430$ °C (a)-(c) und $T = 670$ °C (d)-(f). Der Ausgangsdruck $p_{O_x} = 1 \times 10^{-7}$ mbar ist für beide Messreihen gleich. In Abb. 4.4(a) und (d) sind Detailansichten aus den Messungen in Abb. 4.3 (b) bzw. (c) zu sehen. Entsprechend sind in beiden die Defekte

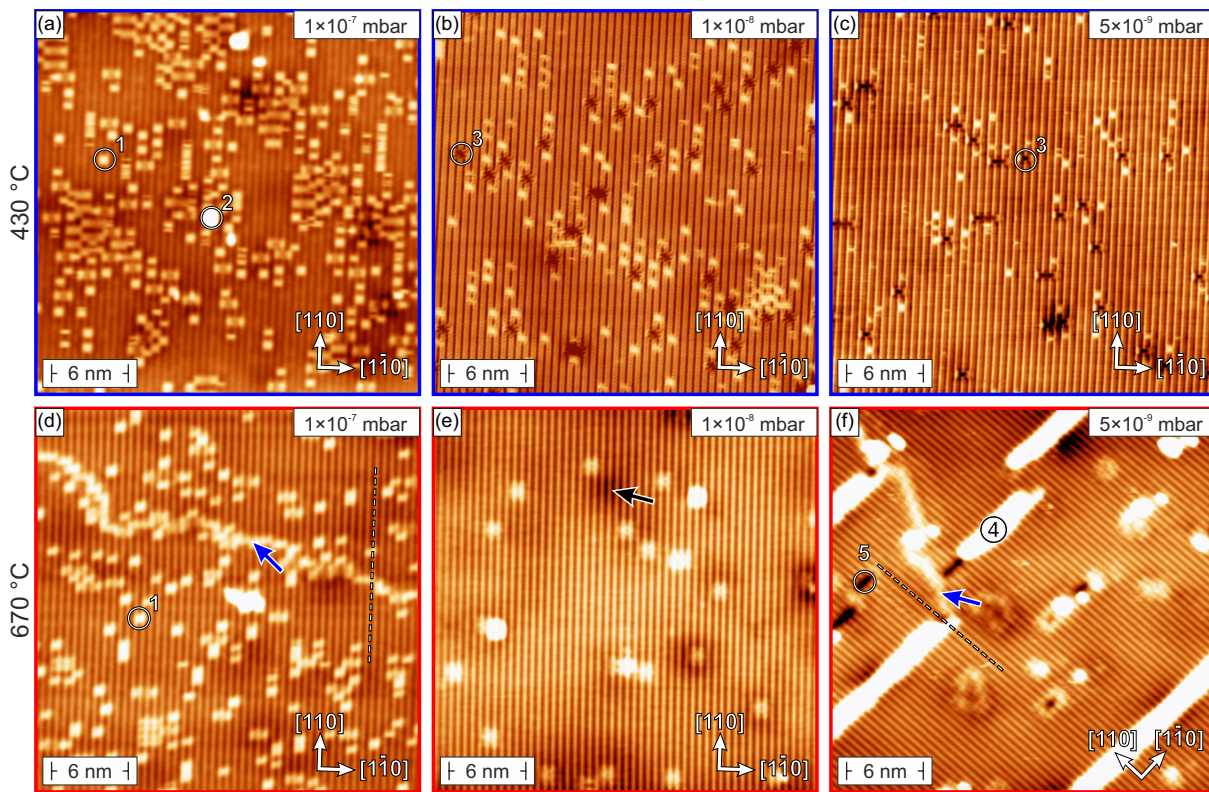


Abbildung 4.4 Auswirkung des Sauerstoffdrucks auf die Qualität der (2×1) Rekonstruktion für die Temperaturen $T = 430^\circ\text{C}$ (a)-(c) und $T = 670^\circ\text{C}$ (d)-(f). Der Sauerstoffdruck ist in (a),(d) $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-7}$ mbar, in (b),(e) $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar und in (c),(f) $p_{\text{O}_x} = 5 \times 10^{-9}$ mbar. Die blauen Pfeile zeigen auf Domänengrenzen und die gestrichelten Linien verdeutlichen den Versatz der (2×1) Streifen. Scanparameter: (a), $U = 1\text{V}$, $I = 1\text{nA}$; (d), $U = 500\text{meV}$, $I = 100\text{pA}$; sonst $U = 1\text{V}$, $I = 300\text{pA}$.

1 und 2 zu sehen, wobei die Defektdichte für die Messung bei $T = 670^\circ\text{C}$ geringer ist. Zusätzlich fällt in (d) eine Ansammlung der Defekte an einer Domänengrenze auf (Pfeil). In beiden Domänen ist die (2×1) Phase in die $[110]$ Richtung orientiert und besitzt eine typische Periode von (548 ± 40) pm. Der Unterschied zwischen der unteren und der oberen Domäne liegt in einer Verschiebung der Streifen um eine Gitterkonstante a_{Ir} in die $[1\bar{1}0]$ Richtung. Deutlich wird dies entlang der gestrichelten Linie, die in der oberen Domäne auf einem und in der unteren zwischen zwei Streifen verläuft.

Eine Reduktion des Sauerstoffdrucks auf $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar führt bei beiden Temperaturen zu einer reduzierten Anzahl der hauptsächlich vorkommenden Defekte 1, wie in den Abbildungen 4.4(b) & (e) zu sehen ist. Ein Unterschied besteht aber in den zusätzlich auftretenden Defekten 3 für $T = 430^\circ\text{C}$, die als schwarze Löcher die Streifenverläufe unterbrechen. Während bei einer weiteren Verringerung des Sauerstoffdrucks auf $p_{\text{O}_x} = 5 \times 10^{-9}$ mbar die Oberflächenqualität bei geringen Temperaturen in Abb. 4.4(c) sich wenig ändert, ist für $T = 670^\circ\text{C}$ in Abb. 4.4(f) ein deutlicher Unterschied zu sehen. So sind die dicken hellen Linien 4 senkrecht zu der Streifenrichtung der (2×1) Rekonstruktion mit einer Korrugation von 55 pm die auffälligsten Defekte.

Hinzu kommen schmale schwarze Linien als Defekt 5, die den Verlauf der Streifenstruktur unterbrechen. Zusätzlich kann auch hier eine Verschiebung der Streifen an einer Domänengrenze (blauer Pfeil) festgestellt werden.

Zusammengefasst werden fünf verschiedene Defekte identifiziert, die zusätzlich zu dem von der Präparation der Ir(001) Oberfläche bekannten typischen dunklen Defekt auftreten (vgl. schwarze Pfeile in Abb. 4.2(b) und Abb. 4.4(e)). Defekt 1 tritt vorwiegend bei der Kombination von hohen Sauerstoffdrücken und niedrigen Temperaturen auf. Die Verringerung des Sauerstoffdrucks führt zu einer Absenkung der Dichte dieser Defekte für beide Messreihen. Eine mögliche Erklärung sind Ir-Atome, die auf der Oberfläche zurückbleiben und zwischen den Sauerstoffatomen liegen. Wie im Kapitel 4.1 beschrieben, wird die hexagonale Oberflächenschicht durch das Heizen unter Bildung der (2×1) Struktur aufgehoben. Dabei müssen 20% der Ir-Atome der hexagonalen Oberflächenschicht umverteilt werden. Dies erfordert eine ausreichende hohe Mobilität der Atome auf der Oberfläche, die für höhere Temperaturen ansteigt. Da die Defektdichte aber auch vom Sauerstoffdruck abhängt, könnten diese Defekte auch mit überschüssigem Sauerstoff zusammenhängen. Defekt 2 tritt mit einer geringeren Wahrscheinlichkeit auf. Auch diese Defekte könnten durch Ir-Atome hervorgerufen werden, die zuerst Cluster und nach Ferstl *et al.* [12, 13] bei zu niedrigen Temperaturen auch Inseln ausbilden.

Defekt 3 erscheint im Gegensatz dazu als Vertiefung in der Topographie. Da diese Defekte bei gleichem Sauerstoffdruck und höherer Temperatur in Abb. 4.4(e) nicht auftreten, ist eine Verbindung dieser Defekte zu Sauerstoff unwahrscheinlich. Vielmehr kann davon ausgegangen werden, dass es sich hier um eine Ir-Fehlstelle handelt. Diese Fehlstellen können während der Umverteilung der Oberflächenatome bei der Bildung der (2×1) Sauerstoffrekonstruktion entstanden sein. Eine mögliche Rekombination der Fehlstellen könnte durch eine reduzierte Mobilität der verbleibenden Ir-Atome auf der (2×1) Rekonstruktion bei $T = 430^\circ\text{C}$ verursacht sein. Deshalb verändert sich auch die Anzahl der Defekte 3 beim geringsten Sauerstoffdruck und derselben Temperatur nicht. Dies ist neben der Abwesenheit der Defekte 3 bei $T = 670^\circ\text{C}$ ein weiterer Hinweis, dass es sich hier nicht um Fehlstellen von Sauerstoff handelt.

Bei genauerer Betrachtung der Abb. 4.4(c) fällt auf, dass die Defekte 3 eine Tendenz zur Ausbildung eines Liniendefektes senkrecht zu den Streifen der (2×1) Rekonstruktion besitzen. Auch Defekt 5 ist ein Liniendefekt senkrecht zu den Streifen. Deshalb wird dieser Liniendefekt einer fehlenden Reihe von Ir-Atomen zugeordnet. Die auffälligste Änderung der Topographie ist aber mit Defekt 4 verbunden. Dieser tritt bei hohen Temperaturen und gleichzeitig geringen Sauerstoffdruck auf und ist ebenfalls senkrecht zu den Streifen orientiert. Aufgrund der erhöhten Desorption bei hohen Temperaturen reicht die Abkühlphase in Sauerstoff nicht mehr aus, um die komplette Oberfläche zu oxidieren. Als Folge entstehen bei Sauerstoffarmut Bereiche, in denen wieder die rekonstruierte (5×1) Phase unter Einbau von zusätzlichen Ir-Atomen vorliegt [12,

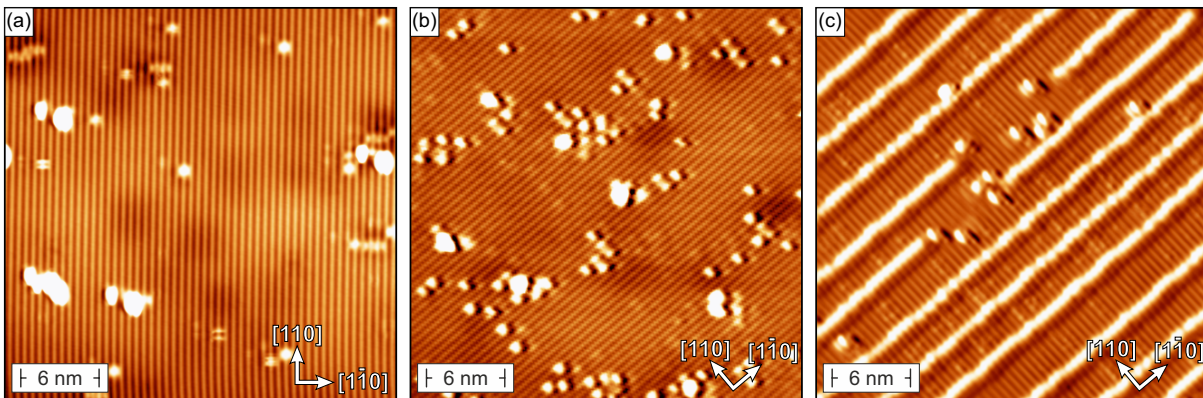


Abbildung 4.5 Einfluss der Abkühlphase auf die (2×1) Rekonstruktion nach standardmäßigem Heizen im Sauerstoff für 3 min und langsamer Reduzierung der Temperatur innerhalb von 1 min (a). (b) Topographie nach schnellen Abkühlen im Sauerstofffluss. (c) Rekonstruktion nach 3 min Heizen im Sauerstoff und schnellen Abkühlen ohne Sauerstoff. Die Temperatur während des Heizvorgangs ist $T = 550^\circ\text{C}$ und der Sauerstoffdruck $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar. Scanparameter: $U = 1$ V, $I = 300$ pA.

13]. Aus diesem Grund wird Defekt 4 nicht oxidierten Bereichen zugeordnet.

Abschließend soll die zuvor verwendete Standardprozedur überprüft werden. Diese besteht aus einer Heizphase des Ir(001) Substrats unter Sauerstoffatmosphäre für die Dauer von 3 min und endet mit dem Abkühlen der Probe durch die langsame Reduktion der Heizleistung. Nach einer Minute werden Heizleistung und Sauerstofffluss komplett abgestellt. Um den Einfluss des Abschaltvorgangs auf die Qualität der (2×1) Rekonstruktion zu untersuchen, wird in den folgenden Messungen eine Temperatur von $T = 550^\circ\text{C}$ und ein Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar verwendet. Der Vergleich zwischen Standardpräparation in Abb. 4.5(a), dem schnellen Abkühlen der Probe unter Sauerstoffatmosphäre in Abb. 4.5(b) und dem schnellen Abkühlen ohne Sauerstoff in Abb. 4.5(c) zeigt deutliche Unterschiede. Die übliche Präparation liefert wenige Defekte 1 und große Domänen der (2×1) Phase. Eine Reduktion der höher erscheinenden Defekte 2 wird auch durch ein schnelles Abkühlen der Probe in (b) nicht erreicht und eine Zunahme der Defekte 1 ist deutlich zu erkennen. Während die (2×1) Struktur hier noch große Domänen ausbildet, ist die Oberfläche bei unverzüglichem Abstellen der Sauerstoffzufuhr mit Liniendefekten 5 überzogen. Diese sind nahezu äquidistant mit einer Periode von $(3,59 \pm 0,05)$ nm. Zwischen diesen Streifen ist die (2×1) Struktur der oxidierten Ir(001) Oberfläche zu sehen.

Die Beobachtungen zeigen, dass die Temperatur von $T = 550^\circ\text{C}$ hoch genug ist, um die Mobilität der überschüssigen Ir-Atome zu gewährleisten. Bei gleichzeitigem Abschalten von Heizleistung und Sauerstoff ist die Temperatur noch zu hoch und Sauerstoff desorbiert von der Oberfläche. Dadurch entstehen aufgrund von Sauerstoffmangel die diskutierten Defekte 5. Deshalb ist es notwendig, den Kristall in Sauerstoffatmosphäre abkühlen zu lassen. Aufgrund der zunehmenden Dichte der Defekte 1 für ein schnelles Abkühlen der Probe ist zudem ein langsames Abkühlen des Kristalls vom Vorteil. Für den weiteren Verlauf ergibt sich daraus eine Heizphase von drei

Minuten bei $T = 550^\circ\text{C}$ unter einer Sauerstoffatmosphäre von $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar mit einer langsamen Abkühlphase von einer Minute in Sauerstoff.

4.4 Wachstum der TMO-Ketten

Die zuvor untersuchte (2×1) Phase stellt eine oxidierte Ir(001) Oberfläche dar und besitzt $2/3$ des für TMO-Ketten nötigen Sauerstoffs. Für die Präparation der Ketten wird durch einen Elektronenstoßverdampfer jeweils eine Drittel Monolage des $3d$ -Übergangsmetalls auf die oxidierte Oberfläche verdampft. Unter anschließendem Heizen der bedampften (2×1) Phase in Sauerstoffatmosphäre entsteht die in Kapitel 4.1 diskutierte (3×1) Struktur der TMO-Ketten. Im Folgenden werden die $3d$ -Metalle Co, Fe, Mn und Cr verdampft und die Struktur mit den vorhanden STM-Daten von Ferstl *et al.* [12, 13] verglichen. Mittels SP-STM wird zusätzlich die magnetische Struktur experimentell untersucht.

4.4.1 CoO₂-Ketten

Wie von der Untersuchung der (2×1) Phase bekannt ist, hängt die Qualität der Topographie von der Temperatur und dem Sauerstoffdruck ab. Dieselben Beobachtungen gelten im weiteren auch für die (3×1) Struktur, wobei hier der zusätzliche Faktor der richtigen Dosierung des Übergangsmetalls hinzukommt.

Das erste untersuchte $3d$ -Übergangsmetall ist Co. Für die Präparation wird zunächst auf die oxidierte Ir-Oberfläche Co aufgedampft und bei einer Heiztemperatur von $T \approx 450^\circ\text{C}$ und einem Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar für 3 min geheizt. In Abb. 4.6(a) ist eine Übersichtsaufnahme bei leichter Überdosierung von Co zu sehen. Die Oberfläche zeigt eine labyrinthartige Struktur, die durch Vertiefungen auf Terrassen entsteht. Beide Ebenen weisen die periodischen Streifen der (3×1) TMO-Struktur in die $[1\bar{1}0]$ und die $[110]$ Richtungen auf. Darüber hinaus sind zwei weitere Regionen zu erkennen, die sich in der Oberflächenstruktur unterscheiden. Während die eine rau und ungeordnet ist (nr), zeigt Abb. 4.6(b) eine geordnete, leiterartige Phase, bei der die „Holme“ entlang der $[110]$ und die „Sprossen“ in die $[1\bar{1}0]$ Richtung weisen. Der Abstand zwischen benachbarten Sprossen beträgt $a = (560 \pm 55)$ pm. Dies entspricht näherungsweise der doppelten Ir-Gitterkonstante. Die Distanz zwischen Holmen ist $b/2 = (2,41 \pm 0,2)$ nm und entspricht in etwa neun Gitterkonstanten von Ir. Des Weiteren sind auf jeder Sprosse zwei Maxima zu erkennen.

Über ähnliche CoO Strukturen wird ebenfalls in Veröffentlichung über CoO-Schichten auf Ir(001) berichtet [98–100]. Danach entstehen die Streifen durch die Anordnung von Kobalt- und Sauerstoffatomen bezüglich der darunterliegenden Ir(001) Oberfläche. Während in dunklen Bereichen der Abstand der Co-Atome und der auf Ir-Atomen lokalisierten Sauerstoffatome sich nur ge-

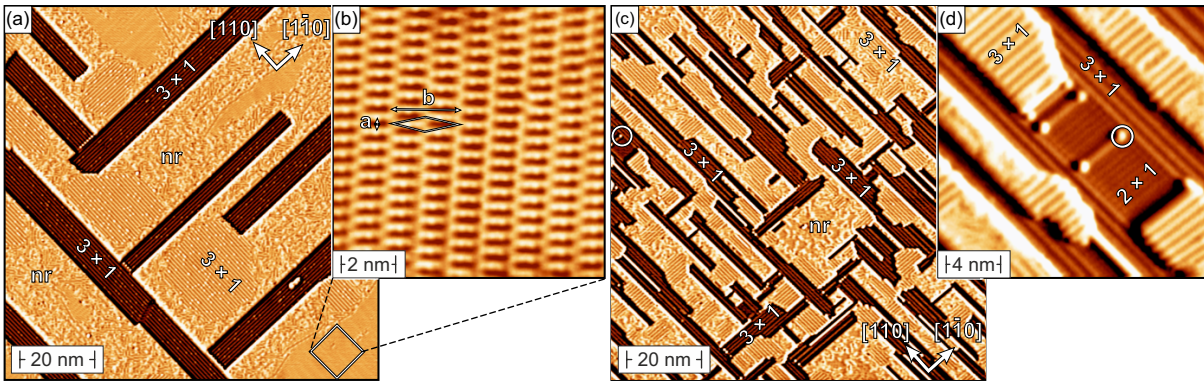


Abbildung 4.6 Einfluss der Co-Dosierung auf die beobachtete Struktur. Für eine Überdosierung erscheinen neben der (3×1) Phase Flächen von CoO in (a). (b) Die Rekonstruktion der CoO-Schicht in größerer Auflösung. (c) Bei Unterdosierung verbleiben Regionen der (2×1) Struktur auf der Oberfläche zurück. Der mit einem Kreis markierte Defekt in (c) entspricht dem in der höheren Auflösung (d). Temperatur während des Wachstums $T \approx 450^\circ\text{C}$. Scanparameter: (b), $U = 100\text{ mV}$, $I = 1\text{ nA}$; sonst $U = 1\text{ V}$, $I = 300\text{ pA}$.

ring unterscheidet, liegen die Sauerstoffatome in hellen Bereichen auf Brückenpositionen und sind weiter von der Probe entfernt (Sprossen). Somit kann für die leiterartige Struktur von einer CoO-Schicht ausgegangen werden, die sich allerdings mit ihrer Einheitszelle von der CoO $c(10 \times 2)$ Phase aus der Literatur unterscheidet [98–100].

Die leiterartige CoO-Struktur besitzt gegenüber der (3×1) TMO-Struktur eine höhere Dichte an Co-Atomen. Deshalb wird in den folgenden Präparationen die Aufdampfzeit von Co reduziert, während alle anderen Parameter beibehalten werden. Das Ergebnis ist in Abb. 4.6(c) zu sehen und zeigt wie in (a) eine labyrinthartige Struktur mit zwei unterschiedlichen Ebenen. Die (3×1) Phase zeigt identisch zu vorher beide Orientierungsrichtungen, sowohl auf der niedrigen als auch auf der oberen Ebenen. Des Weiteren sind auch für diese Präparation nicht rekonstruierte Regionen (nr) zu beobachten. Im Unterschied zu der Überdosierung gibt es keine Hinweise auf eine CoO-Phase und bei genauerer Betrachtung erkennt man ein geringes Co-Defizit der Probe. So koexistieren auf dieser Probe die (2×1) Sauerstoffrekonstruktion und die (3×1) TMO-Struktur, wie aus der Detailaufnahme in Abb. 4.6(d) zu erkennen ist.

Während die (2×1) Phase ein Indikator von Co-Defizit darstellt und die CoO-Schicht eine Überdosierung anzeigt, bleibt die labyrinthartige Struktur mit kleinen Domänen der (3×1) Struktur für verschiedene Mengen an Co gleich. Eine für magnetische Messungen günstigere Oberfläche mit flachen Terrassen und großen Domänen kann nach Ref. [12] durch eine höhere Heiztemperatur erreicht werden. In der Tat zeigt die Probe aus Abb. 4.7(a) nach der Oxidation bei $T \approx 600^\circ\text{C}$ gegenüber der diskutierten Oberfläche bei $T \approx 450^\circ\text{C}$ große Terrassen und isolierte rechteckige Inseln. Die höhere Temperatur führt dabei zu einer gesteigerten Mobilität der Ir-Atome, die beim Wachstum durch die Co-Atome ersetzt werden. Die überschüssigen Ir-Atome rekombinieren an Stufenkanten des Substrats oder bilden Inseln aus [12]. Wie zuvor wächst die

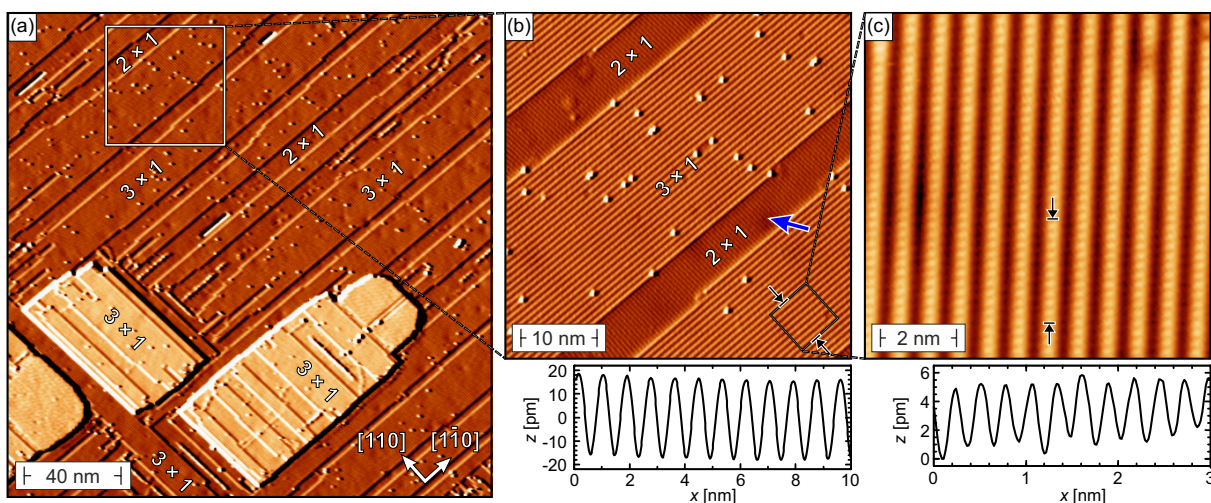


Abbildung 4.7 Einfluss der Heiztemperatur auf das Wachstums der Ketten. (a) Bei einer höheren Temperatur von $T \approx 600^\circ\text{C}$ sind nur noch wenige nicht rekonstruierte Flächen zu sehen. Die (3×1) Phase findet man sowohl auf den Inseln und auf den flachen Terrassen. (b) Die Domänen sind durch (2×1) Flächen voneinander getrennt. Das Linienprofil zeigt den Ausschnitt zwischen den zwei schwarzen Pfeilen. (c) zeigt die (3×1) Phase in atomarer Auflösung. Entlang der Reihen wird durch das Linienprofil zwischen den schwarzen Pfeilen der Atomabstand bestimmt. Scanparameter: (a),(b), $U = 1\text{ V}$, $I = 300\text{ pA}$; (c), $U = 50\text{ mV}$, $I = 1\text{ nA}$.

(3×1) Phase sowohl auf den Inseln als auch auf der Terrasse.

Durch ein vorhandenes Co-Defizit der Probe sind die (3×1) Domänen in Abb.4.7(b) durch die (2×1) Struktur voneinander getrennt und die Streifen der verschiedenen Strukturen zueinander senkrecht orientiert. Diese Konstellation ermöglicht ein einfaches Ersetzen von Ir-Atomen durch Co-Atomen an vorhanden Enden von Ketten. Des Weiteren müssten bei paralleler Anordnung immer zwei Sauerstoffketten gleichzeitig durch TMO-Ketten ersetzt werden, damit beide Strukturen kommensurabel bleiben. Die hellen punktförmigen Defekte befinden sich dabei überwiegend auf der (3×1) Struktur und sind direkt auf einer Kette lokalisiert. Zusätzlich sind auch auf dieser Oberfläche die typischen Defekte des Ir(001) Kristalls zu erkennen (Pfeil).

Eine Auswertung des Streifenabstands über das Linienprofil zwischen den beiden schwarzen Pfeilen in Abb. 4.7(b) bestätigt mit (828 ± 30) pm den Abstand der Streifen von $3a_{\text{Ir}}$. Zur weiteren Strukturanalyse dient die atomare Auflösung in Abb.4.7(c). Der Abstand der Atome entlang der Reihen wird aus dem Linienprofil zu (278 ± 10) pm bestimmt und ist in perfekter Übereinstimmung mit dem Ir-Gittervektor. Die zusätzlichen Kontrastunterschiede stammen von den typischen Defekten der Ir(001) Oberfläche und konnten im weiteren Verlauf für keine der TMO-Ketten verhindert werden. Abgesehen davon sind das Wachstumsverhalten der CoO_2 -Ketten und die strukturellen Daten mit den Messdaten von Ferstl *et al.* [12, 13] vergleichbar. In den folgenden magnetischen Messungen soll die DFT-Rechnung zur magnetischen Struktur der CoO_2 -Ketten überprüft werden. Nach den Berechnungen handelt es sich dabei um eine FM-Kopplung entlang und zwischen benachbarten Reihen. Um dies zu überprüfen, wird wie in Kapitel 3.8 beschrieben

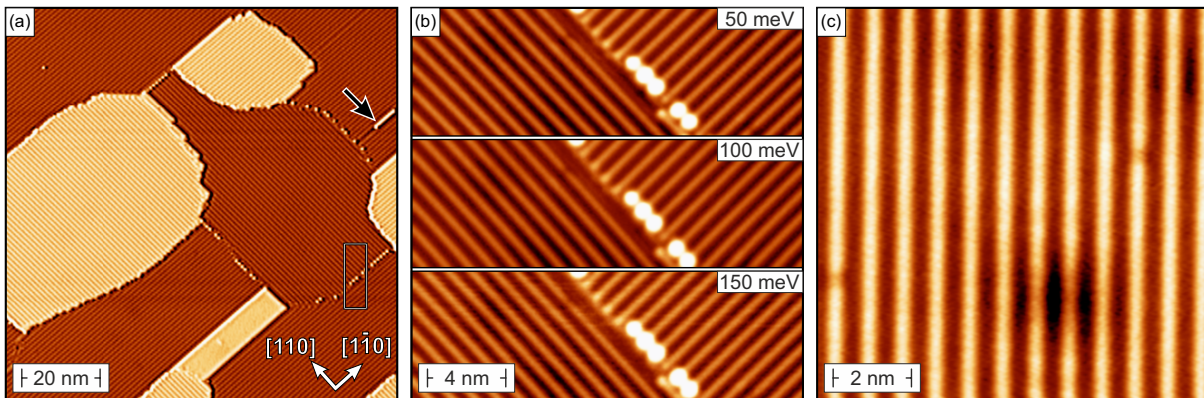


Abbildung 4.8 Magnetische Messung auf den (3×1) CoO_2 -Ketten. (a) Übersichtsaufnahme mit einer senkrecht zur Probe polarisierten Cr bedampften Spitze. (b) Aufnahmen mit dieser Spitze an der in (a) markierten Domänengrenze zeigt bei verschiedenen Spannungen keinen magnetischen Kontrast. (c) Detailaufnahme mit einer in der Probenebenen polarisierten Cr beschichteten Spitze. Auch hier konnte kein magnetischer Kontrast festgestellt werden. Der schwarze Pfeil markiert eine strukturelle Domänengrenze, die durch einen Phasenunterschied der Streifen in den Domänen entsteht. Scanparameter: (a), $U = 1$ V, $I = 300$ pA; (b), $I = 1$ nA; (c), $U = 10$ mV, $I = 1$ nA.

die Spitze mit Cr bedampft und auf der DL Fe/W(110) charakterisiert.

Die Messungen mit einer senkrecht zur Probenoberfläche polarisierten Spitze sind in Abb. 4.8(a) und (b) zu sehen. Die Übersichtsaufnahme (a) zeigt wie vorher eine flache Terrasse mit Inseln. Bei dieser Präparation ist nahezu die komplette Oberfläche mit der (3×1) Phase bedeckt, was für eine optimale Co-Dosierung spricht. Im Vergleich zu der Präparation aus Abb. 4.7 ist auch die Defektdichte deutlich niedriger. Dies führt zu der Annahme, dass die hell erscheinenden Defekte nicht mit der Heiztemperatur oder dem Sauerstoffdruck korrelieren. Deshalb werden diese heller erscheinenden Defekte auf den Linien Co-Fehlstellen in der Kette zugeordnet.

Zwar könnten des Weiteren auch die Inseln durch höheres Heizen vermieden werden, dies würde aber auch gleichzeitig große Domänen mit identischer Streifenorientierung mit sich ziehen. Für eine ferromagnetisch geordnete Probe sind strukturelle Domänengrenzen allerdings von Vorteil, da sich hier eine in-plane Magnetisierung der Probenoberfläche leichter identifizieren lässt. Dies beruht auf der Annahme, dass die Richtung der atomaren Spins aufgrund der magnetokristallinen Anisotropie an die Orientierung der Ketten gekoppelt ist. Für alle TMO-Ketten gibt es dabei zwei unterschiedliche strukturelle Domänengrenzen. Bei der Ersten weisen die benachbarten Domänen eine Phasenverschiebung auf, stimmen jedoch in der Orientierung der Ketten überein (schwarzer Pfeil). Bei der zweiten Art handelt es sich um eine Grenze zwischen zwei Domänen mit senkrechter Streifenorientierung.

Für die CoO_2 -Ketten sind unabhängig von der gewählten Tunnelspannung in den mit einer senkrecht polarisierten Cr/W-Spitze gemessenen und in Abb. 4.8(b) präsentierten Daten keine magnetischen Kontraste zu erkennen. Auch besteht kein Kontrastunterschied zwischen den Streifen verschiedener Domänen, wodurch ein Unterschied in der Ausrichtung der Co-Spins in

der out-of-plane Komponente ausgeschlossen wird. Andernfalls wäre nach Formel 2.17 ein verändertes Stromsignal und somit eine Änderung der Höhe zu erwarten. Des Weiteren zeigt auch die Aufnahme des dI/dU -Signals keine Hinweise auf einen spinabhängigen Anteil zum Tunnelstrom. Beim Versuch der großflächigen Aufnahme der differentiellen Leitfähigkeit über viele Domänen (nicht gezeigt) konnten ebenfalls keine Unterschiede zwischen den Domänen mit einer out-of-plane polarisierten Spitze beobachtet werden.

Die Daten mit einer Cr/W-Spitze aus Abb. 4.8(c) weisen bei einer Polarisation der Spitze in der Probenebene ebenfalls keinen magnetischen Kontrast der Ketten auf. Auch für großflächige, spannungsabhängige Aufnahmen von dI/dU -Karten mit in-plane polarisierten Fe/W-Spitzen gibt es, trotz struktureller Domänen mit unterschiedlicher Kettenorientierung, keine Hinweise auf die Existenz magnetischer Domänen. Damit wird für beide Polarisationsrichtungen keine magnetische Struktur aufgelöst und kein Unterschied in der differentiellen Leitfähigkeit festgestellt. Deshalb liegen auf Grundlage der hier gezeigten Messungen keine Hinweise für eine magnetische Struktur für CoO_2 -Ketten vor. Dies ist im Widerspruch zu den DFT-Berechnungen aus Ref. [12, 13], die eine FM-Ordnung der Ketten vorhersagen. Um große kollineare magnetische Domänen vollständig auszuschließen, wären deshalb andere Messmethoden (z.B. zirkular magnetischer Röntgendiffraktion – XMCD, oder spinpolarisierte niederenergetische Elektronenmikroskopie – SPLEEM) zur Überprüfung denkbar, die eine größere Oberfläche abdecken können.

4.4.2 FeO_2 -Ketten

Für die CoO_2 -Ketten konnte die mit DFT-Rechnungen vorhergesagte FM-Kopplung nicht bestätigt werden [12, 13]. Im Folgenden soll für FeO_2 -Ketten überprüft werden, ob auch hier Abweichungen zwischen Theorie und Experiment vorliegen. Dazu wird — ähnlich zur im vorigen Abschnitt erläuterten Vorgehensweise — ebenfalls eine drittel ML Fe auf die (2×1) Sauerstoffrekonstruktion aufgedampft. Der anschließende Wachstumsprozess der (3×1) Phase wird bei einer Heiztemperatur von $T \approx 700^\circ\text{C}$ und einem Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_2} = 1 \times 10^{-7}$ mbar durchgeführt.

Das Ergebnis der Präparation ist in der Abb. 4.9 gezeigt. In der Übersichtsaufnahme (a) sind zwei Terrassen zu sehen, die durch eine Stufenkante voneinander getrennt sind. Auf beiden Terrassen befindet sich die (3×1) Struktur der FeO_2 -Ketten, die in Abb. 4.9(b) in höherer Auflösung dargestellt ist. Dabei verlaufen die Streifen auf der höheren Terrasse in die $[110]$ und auf der unteren in die dazu senkrechte $[\bar{1}\bar{1}0]$ Richtung. Im Gegensatz zu den zuvor diskutierten CoO_2 -Ketten existieren auf dieser Oberfläche keine Inseln und die Heiztemperatur während des Wachstums war offensichtlich hoch genug, um die Mobilität der verdrängten Ir-Atome zu gewährleisten. Trotzdem kann auf der Probe eine Vielzahl von Defekten festgestellt werden, die sich auf den Ketten befinden und damit mit den Defekten auf den CoO_2 -Ketten vergleichbar

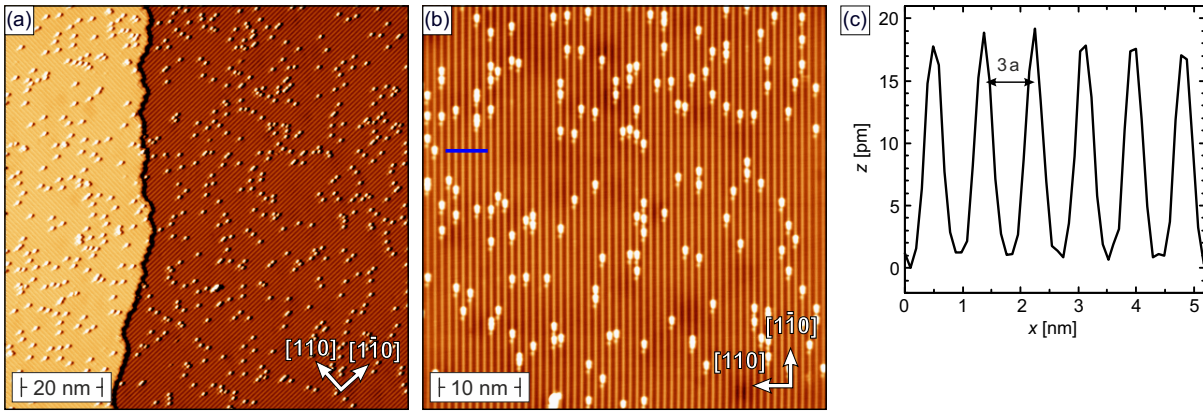


Abbildung 4.9 Nicht magnetische Messungen der FeO_2 -Ketten. **(a)** Übersichtsaufnahmen der in zwei Richtungen orientierten (3×1) Phase und **(b)** Detailaufnahme auf einer Domäne. Die Periode der Struktur wird über das Linienprofil **(c)** entlang des in **(b)** blau markierten Streifens bestimmt. Scanparameter: $U = -1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$.

sind. Die zusätzliche Asymmetrie der Defekte entlang der Ketten ist hingegen ein Spitzenartefakt.

Zur Kontrolle der (3×1) Struktur dient das Linienprofil in Abb. 4.9(c) entlang der blauen Linie in (b). Die ermittelte Periode von $(855 \pm 50) \text{ pm}$ passt gut zu dem erwarteten Wert von $3a_{\text{Ir}} = 814 \text{ pm}$. Eine weitere wichtige Messung vor den magnetischen Untersuchungen ist die atomare Auflösung der Ketten, um einerseits die (3×1) Phase zu bestätigen und andererseits später strukturelle und magnetische Beiträge zum Signal sicher trennen zu können. Die Messung mit einer nicht magnetischen W-Spitze ist in Abb. 4.10(a) zu sehen. Während auf den Ketten die atomare Auflösung wie bei Ferstl [12, 13] vorliegt, können die zwei mittleren Ir-Reihen nicht atomar aufgelöst werden. Zur weiteren Analyse sind in Abb. 4.10(c) Linienprofile zwischen den schwarzen Pfeilen für drei benachbarte Reihen dargestellt (schwarze Profile). Die Distanz zwischen den Atomen ist $(278 \pm 10) \text{ pm}$ und stimmt mit dem Gittervektor von Ir(001) überein. Des Weiteren ist die Korrugation auf den drei Streifen mit $(3, 6 \dots 4, 7) \text{ pm}$ nahezu gleich. Die etwas höhere Korrugation der einen gegenüber der anderen zwei Ketten kann möglicherweise dem Einfluss des darunter liegenden Defekts zugeordnet werden.

Um die magnetische Struktur zu untersuchen, wird analog zu vorher eine magnetische Cr/W-Spitze präpariert. Abbildung 4.10(b) zeigt eine Detailaufnahme der FeO_2 -Ketten mit einer solchen Spitze. Bei dem direkten Vergleich der Abstände entlang der Ketten in (a) und (b) ist eine Verdopplung der Distanz für die magnetische Messung erkennbar. Dies lässt sich auch durch eine Gegenüberstellung der bunten mit den schwarzen Linienprofilen in Abb. 4.10(c) feststellen. Hier fällt nur jedes zweite Maximum der nicht magnetischen mit einem Maximum der magnetischen Kurven zusammen. Die magnetische Korrugation ist dabei für alle drei Profile zwischen den entsprechenden bunten Pfeilen mit $z \approx 5,5 \text{ pm}$ identisch und gibt keinen Hinweis auf einen Unterschied zwischen den Ketten. Zusätzlich befinden sich alle Maxima der magnetischen Profile

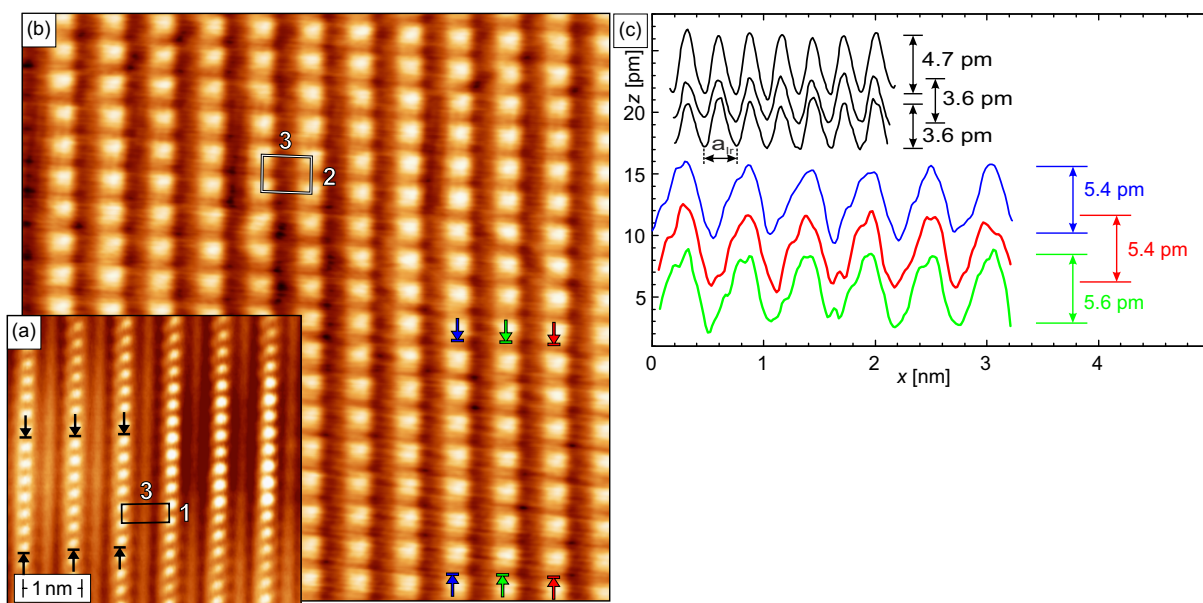


Abbildung 4.10 Atomare Auflösung der FeO₂-Ketten. **(a)** Nicht magnetische Messung mit der aufgelösten strukturellen Einheitszelle. **(b)** Mit einer magnetischen Cr/W-Spitze liegt eine (3 × 2) Phase vor. **(c)** Linienprofile von drei benachbarten Reihen mit einer nicht magnetischen Spitze (schwarz) und einer magnetischen Spitze (bunt). Die magnetischen Profile weisen eine Verdopplung der Periode auf. Scanparameter: (a), $U = -10$ mV, $I = 20$ nA; (b), $U = 50$ mV, $I = 5$ nA.

an derselben x -Position. Dies entspricht einer FM-Anordnung der Spins benachbarter Ketten. Durch den Abstand zwischen den Ketten von $3a_{\text{Ir}}$ folgt die in (a) skizzierte rechteckige magnetische (3 × 2) Einheitszelle.

Um das magnetische Modell der (3 × 2) Phase genau zu bestimmen, soll die leichte Magnetisierungsrichtung bestimmt werden. Dies wird durch in-plane und out-of-plane polarisierte Spitzen überprüft. Dazu wird vor den Messungen die Spitze auf der DL Fe/W(110) charakterisiert. In den Abbildungen 4.11(a) & (b) ist dazu die Topographie und das dI/dU -Signal der DL Fe/W(110) gezeigt. Neben der aus Kapitel 3.8 diskutierten DL sind auch Inseln mit einem Moiré-Muster der vierten Lage (4L) Fe zu erkennen, die aufgrund einer geringeren Zustandsdichte bei $U = 700$ meV — ähnlich wie die ML — in den dI/dU -Karten dunkel erscheinen. Im Gegensatz dazu ist auf der Doppellage eine Abfolge von hellen und dunklen Regionen zu erkennen und kann einer magnetischen out-of-plane Spitze zugeordnet werden [34, 67, 69–71, 76].

Die Domänengrenze zwischen hellen und dunklen Bereichen gibt dabei nach Formel 3.16 Aufschluss über den Winkel Θ zwischen Polarisationsrichtung der Spitze und der Oberflächennormalen. Das Linienprofil in Abb. 4.11(c) zeigt den Verlauf des dI/dU -Signals über zwei Domänengrenzen. Aus den Fit erhält man eine Verdrehung der Spitzenmagnetisierung um $\Theta = 20^\circ$ gegenüber der Oberflächennormalen der Probe. Direkt nach der Charakterisierung werden die magnetischen Messungen auf der FeO₂-Struktur durchgeführt. Die Messung mit der charakterisierten out-of-plane Spitze ist in Abb. 4.11(d) gezeigt. Dabei kann wie in Abb. 4.10(b) die

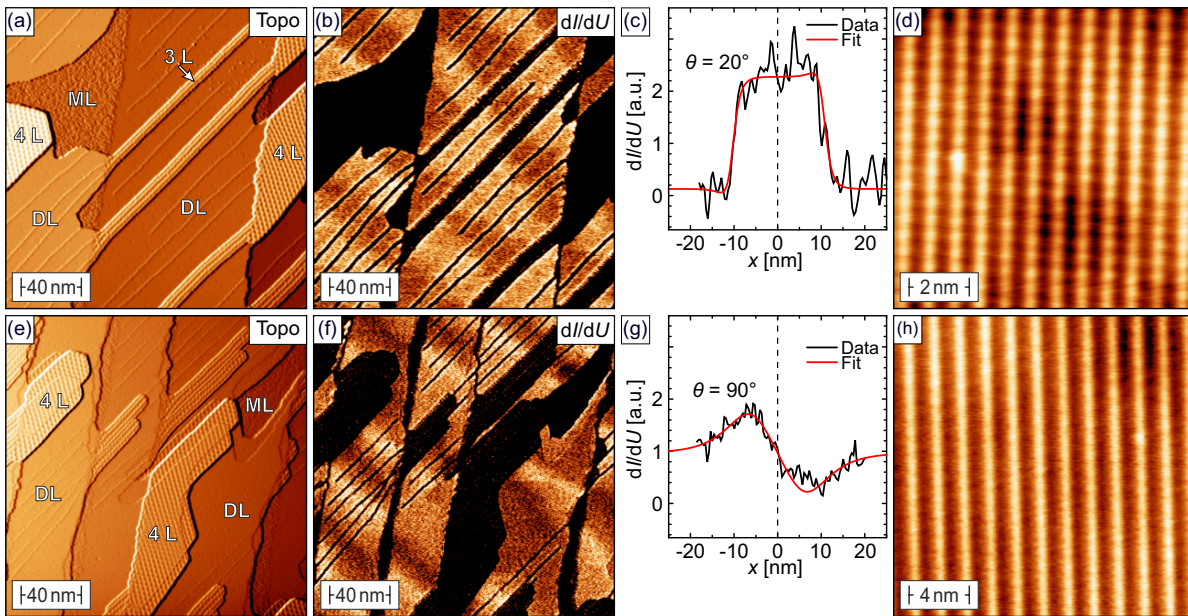


Abbildung 4.11 Bestimmung der weichen Magnetisierungsrichtung für FeO_2 -Ketten. (a) Topographie und (b) dI/dU Signale der Doppellage Fe auf W(001). Der Fit (c) über die Domänengrenze zeigt eine um 20° zur Oberflächennormalen verdrehte Spitzenpolarisation. Mit dieser Spitze konnte der magnetische Kontrast in (d) beobachtet werden. (e) Topographie und (f) dI/dU Signale der Doppellage Fe auf W(001) gemessen mit einer in-plane polarisierten Spitze. (g) Fit der Domänenwand zeigt eine Spitzenmagnetisierung in der Probenebenen an. Mit dieser Spitze ist in (h) kein magnetischer Kontrast erkennbar. Scanparameter: (a),(b), (e),(f), $U = 600 \text{ mV}$, $I = 1,5 \text{ nA}$; (d), $U = 10 \text{ mV}$, $I = 8 \text{ nA}$; (h), $U = 50 \text{ mV}$, $I = 3 \text{ nA}$.

magnetische (3×2) Einheitszelle beobachtet werden.

Als Kontrolle wird die in Abb. 4.11(e) & (f) charakterisierte in-plane magnetisierte Spitze verwendet. Die Topographie (e) zeigt wieder eine Fe-Bedeckung von etwas mehr als zwei Monolagen. Dadurch entstehen neben großen Flächen der Fe-DL auch lange Inseln der vierten ML, wobei die Stufenkanten aufgrund eines Spitzenartefakts doppelt erscheinen. Das dI/dU -Signal weist gegenüber (b) drei verschiedene Kontraste auf der DL auf. Die hellen und dunklen Streifen sind durch einen mittleren Kontrast voneinander getrennt, ein deutliches qualitatives Zeichen für eine in-plane polarisierte Spitze. Ein Linienprofil über zwei benachbarte Domänengrenzen mit entgegengesetzt orientierten in-plane Komponenten ist in Abb. 4.11(g) dargestellt. Der Fit des Signalverlaufs nach Formel 3.16 weist auf eine nahezu perfekte in-plane orientierte Spitze mit $\theta = 90^\circ$ hin. Nach dem Wechsel zu den FeO_2 -Ketten ist in Abb. 4.11(h) jedoch kein magnetischer Kontrast mit dieser Spitze erkennbar.

Auf Basis der Ergebnisse meiner SP-STM Messungen wird für FeO_2 -Ketten das magnetische Modell aus Abb. 4.12(a) vorgeschlagen. In den magnetischen Messungen mit einer out-of-plane Spitze konnte eine Verdopplung der Distanz entlang der Ketten festgestellt werden. Dies kann durch eine AFM-Anordnung von Spins senkrecht zur Probenebenen erklärt werden. Dadurch wird der Kontrast für jedes zweite Atom der Kette durch die Abhängigkeit des Tunnelstroms

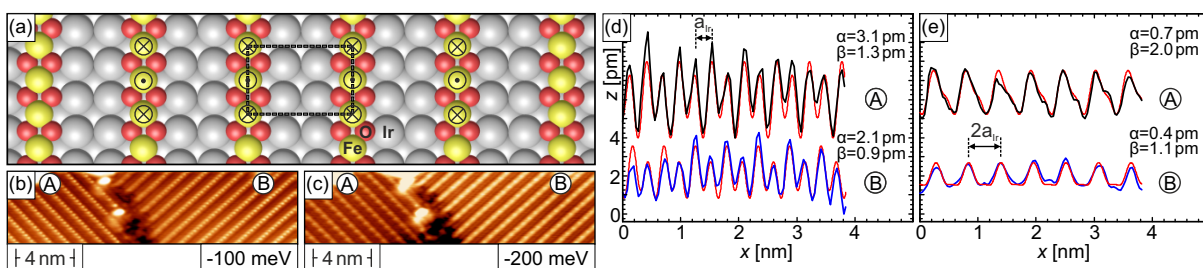


Abbildung 4.12 Überprüfung des magnetischen Modells für FeO_2 -Ketten an einer strukturellen Domänengrenze. (a) Magnetisches Modell der FeO_2 -Ketten mit einer magnetischen (3×2) Phase. Die leichte Achse liegt senkrecht zur Probenoberfläche, wobei eine AFM-Ordnung entlang der Reihen vorliegt. Aufnahmen an einer Domänengrenze bei $U = -100$ mV (b) und $U = -200$ mV (c) zeigen unterschiedliche Profile entlang der Ketten für Domäne A in (d) bzw. B in (e). Der Parameter α gehört zum atomaren Anteil der Korrugation und Parameter β zum magnetischen. Scanparameter: $I = 5$ nA.

von der Magnetisierungsrichtung nach Gleichung 2.17 verstärkt. Entsprechend ist die Korrugation der Atome mit entgegengesetztem Spin schwächer. Des Weiteren besitzen die Linienprofile in Abb. 4.10(c) die gleiche Phase, weshalb von einer FM-Kopplung zwischen benachbarten Ketten ausgegangen wird. Zusätzlich kann mit einer in-plane Spitze kein magnetischer Kontrast aufgelöst werden und damit eine Verkippung der Spins ausgeschlossen werden. Als Ergebnis einer AFM-Ordnung entlang und einer FM-Kopplung zwischen benachbarten Ketten beobachtet man eine (3×2) magnetische Einheitszelle.

Um dieses Modell zusätzlich zu überprüfen, wird an einer strukturellen Domänengrenze mit 90° zueinander orientierten Streifen gemessen. Dabei wird bei einer Spannung von $U = -100$ meV, Abb. 4.12(b), und $U = -200$ meV, Abb. 4.12(c), mit derselben Spitze gemessen. Handelt es sich bei der beobachteten (3×2) Struktur um einen reinen out-of-plane Kontrast nach dem Modell in Abb. 4.12(a), sollte für eine ideal scharfe Spitze der Kontrast in beiden Domänen gleich sein. Im Gegensatz dazu kann eine in-plane Komponente durch eine Kopplung des Spins an die Orientierung der Ketten zu verschiedenen Korrugationen innerhalb der beiden Domänen führen. Dies wäre durch eine Spitze mit entsprechender in-plane Komponente nachweisbar.

Tatsächlich sind sowohl in den Topographien der Abbildungen 4.12(b) & (c) als auch in den entsprechenden Linienprofilen der Abbildungen 4.12(d) & (e) Unterschiede zu erkennen. Zum einen liegt in Domäne A eine höhere Korrugation als in Domäne B vor, was für beide Spannungswerte anhand der Linienprofile entlang von Ketten zu erkennen ist. Zum anderen ist ein deutlicher Unterschied in der Periode zwischen den Messungen bei $U = -100$ meV in (b) und $U = -200$ meV in (c) festzustellen. Während aus dem Linienprofil für $U = -100$ meV in (d) kurze Distanzen von (282 ± 15) pm bestimmt werden, ist für $U = -200$ meV eine Verdopplung auf (565 ± 30) pm zu registrieren. Dies weist darauf hin, dass bei niedriger Spannung die strukturelle (3×1) Phase atomar aufgelöst ist, wohingegen bei höheren Spannungen die atomare Korrugation verschwindet und der magnetische Anteil dominant ist. Eine Modulation des z -Signals ist allerdings schon

bei genauerer Betrachtung der Linienprofile in (d) zu sehen. Auch hier liegt für jedes zweite Atom ein höheres Signal vor, was ein Hinweis auf den spinabhängigen Anteil des Tunnelstroms ist.

Während der Signalunterschied bei verschiedenen Spannungen auf das Verhältnis zwischen strukturellem und magnetischem Signal zurückzuführen ist, kann eine in-plane Komponente der magnetischen Struktur angesichts der gemessenen Korrugationen auf den Domänen A und B nicht ausgeschlossen werden. Um die Ursache des Unterschieds zu analysieren, werden die Linienprofile mit der Funktion

$$z = z_0 + \alpha \cdot \sin [2\pi(x - x_a)/w] + \beta \cdot \sin [2\pi(x - x_b)/2w] \quad (4.1)$$

quantitativ ausgewertet. Dabei ist der Summand mit α der atomare und der Summand mit β der magnetische Anteil zum Signal. Der Parameter w beschreibt den atomaren Abstand. Zudem wird über das Argument der Sinusfunktion die doppelte Periode des magnetischen Signals berücksichtigt.

Das Ergebnis aus der Näherung der Messkurven ist in den Abbildungen 4.12(d) & (c) durch die roten Kurven veranschaulicht. Bei $U = -100$ meV bekommt man für die atomaren Anteile in Domäne A $\alpha = 3,1$ pm sowie $\alpha = 2,1$ pm für Domäne B. Das Verhältnis der strukturellen Werte ist danach $\frac{\alpha_A}{\alpha_B} \approx 1,48$. Für den magnetischen Anteil resultieren $\beta = 1,3$ pm für Domäne A und $\beta = 0,9$ pm für Domäne B und damit ein Verhältnis von $\frac{\beta_A}{\beta_B} \approx 1,44$. Damit liegen die strukturellen und magnetischen Verhältnisse für eine Spannung von $U = -100$ meV im selben Bereich. Auch die Näherung der Linienprofile in Abb. 4.12(e) für $U = -200$ meV führt mit einem Verhältnis $\frac{\alpha_A}{\alpha_B} \approx 1,75$ für den strukturellen und $\frac{\beta_A}{\beta_B} \approx 1,82$ für den magnetischen Anteil ebenfalls zu ähnlichen Werten. Ein Vergleich der Verhältnisse bei verschiedenen Spannungen ist hingegen nicht möglich, da sich die Bedingungen für den Tunnelprozess durch die Veränderung der Parameter unterscheiden. Somit ist der wahrscheinlichste Grund für die unterschiedlichen Korrugation der beiden Domänen in diesem Fall eine asymmetrische Spitze. Aufgrund der Spitzenform wird in der vorliegenden Messung die Korrugation entlang der Ketten in Domäne A besser abgebildet als in Domäne B. Dieses Beispiel zeigt zudem, dass die Identifikation einer in-plane Komponente auch an Domänengrenzen schwierig ist und eine genaue Analyse von magnetischem und strukturellem Signal notwendig ist.

Zusammenfassend weist auch die Messung an der Domänengrenze nicht auf eine in-plane Komponente der Fe-Spins hin. Das magnetische Modell der FeO₂-Ketten ist demnach eine AFM-Kopplung entlang und eine FM-Kopplung zwischen den Reihen. Die leichte Magnetisierungsrichtung ist die out-of-plane Richtung. Damit wird die AFM-Kopplung entlang der Reihen nach den DFT-Rechnungen von Ferstl *et al.* [12] bestätigt, während die Wechselwirkung zwischen den

Ketten entgegen den Vorhersagen FM ist. Zudem ist die FM-Kopplung zwischen Ketten stark genug, um zu einer spontanen, großflächigen und stabilen magnetischen Ordnung zu führen. Eine mögliche Erklärung kann die indirekte Austauschwechselwirkung sein, die durch die RKKY-Wechselwirkung vermittelt wird. Nach Kapitel 3.4 zeigt diese eine von Abstand abhängige kollineare AFM oder FM Ausrichtung der Momente. Nimmt man die RKKY-Wechselwirkung als Grund für die langreichweitige Ordnung an, führt eine Distanz von $3a_{\text{Ir}}$ im Fall der FeO_2 -Ketten zu einer FM-Anordnung der Spins. Die Kopplung selbst wird durch die Leitungselektronen des Ir-Substrats vermittelt. Eine zusätzliche Komponente aufgrund einer indirekten DM-Wechselwirkung, wie sie für zwei Fe-Atome auf Pt(111) in Ref. [7] beschrieben wird, kann jedoch nicht festgestellt werden. Der Grund hierfür kann aber auch ein für den Abstand $3a_{\text{Ir}}$ geringer Beitrag der indirekte DM-Wechselwirkung sein, während die indirekte Austauschwechselwirkung groß ist (vgl. Kapitel 3.4).

4.4.3 MnO_2 -Ketten

Zur Präparation der MnO_2 -Ketten wird Mn aufgedampft und bei einer Temperatur von $T = 750^\circ\text{C}$ in einer Sauerstoffatmosphäre von $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar geheizt. Die zugehörige Topographie in Abb. 4.13(a) ähnelt der von CoO_2 -Ketten aus Abb. 4.8(a) und zeigt neben der großen und flachen Terrasse Inseln mit rechteckiger Form. Der Grund für die Bildung der Inseln ist die zu niedrige Heiztemperatur, die im Fall von Mn etwas höher liegt als für die $3d$ -Übergangsmetalle Co und Fe. Wie bereits im Fall von Co und Fe erwähnt, ist das Inselwachstum und die damit verbundene Ausbildung von zueinander senkrecht orientierten Domänen für magnetische Messungen vom Vorteil. Während die Inseln in der Topographie eine einheitliche Orientierung der Streifen in die $[110]$ Richtung aufzeigen, sind auf der Terrasse sieben unabhängige Domänen zu erkennen. Dabei sind diese durch unterschiedliche Domänengrenzen voneinander getrennt. Einerseits entstehen Domänengrenzen beim Aufeinandertreffen zueinander senkrecht verlaufender Streifen in die $[110]$ und $[\bar{1}10]$ Richtungen (linker schwarzer Pfeil). Zum anderen existieren Domänengrenzen, die durch eine inkommensurable Phasenverschiebung der Streifen um einen Ir-Gittervektor zustande kommen (rechter schwarzer Pfeil).

Die großflächig als gering zu bewertende Defektdichte kann über eine höhere Auflösung einer (3×1) Domäne in Abb. 4.13(b) quantitativ zu unter 0,35% bestimmt werden (bezogen auf die Anzahl von Kettenatomen). Die 36 Defekte verteilen sich auf 24 helle Defekte, 9 Doppelpunkte, zwei punktförmigen Löcher und einen Liniendefekt. Dabei sind alle Defekte auf den Streifen lokalisiert. Wie zuvor werden die hellen Defekte sowie die Doppelpunkte Ir-Atomen zugeordnet, die Fehlstellen in den Ketten ausfüllen. Für die Löcher sind Fehlstellen von Mn-Atomen in der Kette die wahrscheinlichste Ursache. Die Kontrastunterschiede im Hintergrund sind analog zu vorher den typischen Defekten des Ir-Kristalls zuzuordnen.

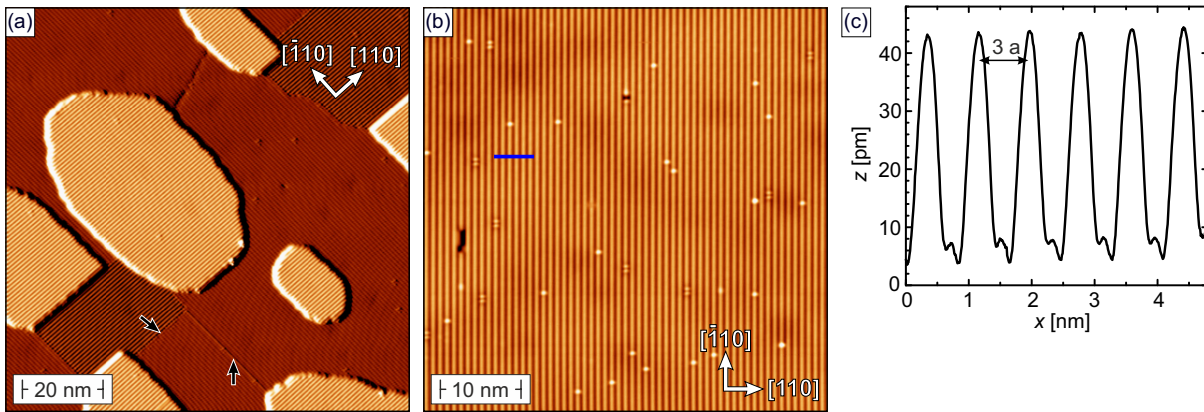


Abbildung 4.13 (a) Nicht magnetische Übersichtsaufnahme der MnO₂-Ketten. Neben den flachen Terrassen sind auch die eine Monolage hohen Inseln mit den (3×1) Streifen in $[110]$ und $[\bar{1}10]$ Richtung bedeckt. (b) Höher aufgelöstes STM-Bild der Ketten. (c) Linienprofil entlang der blauen Linie in (b). Schwarze Pfeile in (a) zeigen auf Domänengrenzen. Scanparameter: $U = 1$ V, $I = 300$ pA.

Durch die Analyse des Streifenabstands entlang des Linienprofils in Abb. 4.13(c) wird die Periode der Streifen überprüft. Der bestimmte Abstand von (840 ± 50) pm liegt im Rahmen des dreifachen Ir-Gittervektors. Zur vollständigen und sicheren Identifikation der Struktur dient die atomare Auflösung der Ketten in Abb. 4.14(a), die eine schwarze Box zur Visualisierung der strukturellen (3×1) Einheitszelle beinhaltet. Während zwischen den Streifen nur ein schwacher punktförmiger Kontrast an der Position der Ir-Doppelreihe (weißer Pfeil) zu sehen ist, sind die Atome entlang der Kette deutlich zu sehen. Die Atome auf der Kette sind dabei zu dem punktförmigen Kontrast zwischen den Ketten um einen halben Gittervektor verschoben. Deshalb könnten die Punkte schwacher Korrugation ein Hinweis auf eine etwas erhöhte Zustandsdichte aufgrund der im Abschnitt 4.1 diskutierten Paarung benachbarter Ir-Atome zwischen den MnO₂-Ketten sein. Der Abstand der Mn-Atome kann über die drei Linienprofile zwischen den schwarzen Pfeilen zu (287 ± 20) pm bestimmt werden und liegt im Bereich des Ir-Gittervektors. Die atomare Korrugation kann ebenfalls aus Abb. 4.14(a) abgelesen werden und liegt für alle drei Linien im Bereich von $(1,9 \pm 0,1)$ pm. Insgesamt ist damit die strukturelle STM-Analyse mit den Daten von Ferstl *et al.* vergleichbar [12, 13].

Im Folgenden soll die Vorhersage einer AFM-Kopplung entlang und zwischen Ketten mittels SP-STM kontrolliert werden. Für dieses Modell wird eine magnetische (6×2) Struktur erwartet [12, 13]. Die mit einer magnetischen Cr/W-Spitze generierten, hochaufgelösten Daten sind in Abb. 4.14(b) dargestellt. Beim Vergleich von nicht magnetischer und magnetischer Messung fallen zwei Punkte auf. Zum einen tritt eine Verdopplung der Distanz zwischen den aufgelösten Atomen entlang der Ketten auf. Ähnlich zu den FeO₂-Ketten kann man hier von einer AFM-Kopplung entlang der Reihen ausgehen. Zum anderen ist der Kontrast der verschiedenen MnO₂-Reihen nicht konstant und stellt auch einen wesentlichen Unterschied zu den zuvor diskutierten FeO₂-Ketten dar. Bei Betrachtung der magnetischen Daten in (b) fällt auf, dass es drei

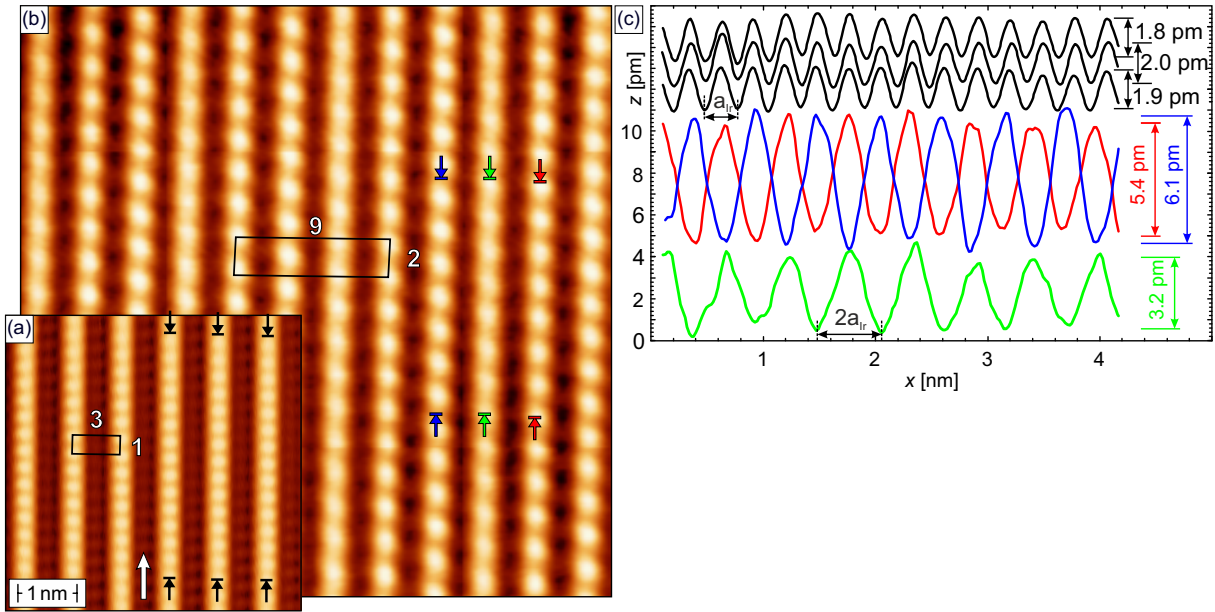


Abbildung 4.14 Atomar aufgelöste Bilder der MnO_2 -Ketten. (a) Die strukturelle (3×1) Einheitszelle wird mit einer nicht magnetischen Spitze beobachtet. (b) Mit einer Cr beschichteten W-Spitze ist eine magnetische (9×2) Struktur zu erkennen. (c) Linienprofile entlang der Streifen für eine nicht magnetische Spitze (schwarz) und der magnetischen Spitze (bunt). Die magnetischen Kurvenverläufe unterscheiden sich in Periode, Phase und Amplitude von den nicht magnetischen Daten. Der weiße Pfeil zeigt auf den punktförmigen Kontrast zwischen den Ketten. Scanparameter: (a), $U = -500 \text{ mV}$, $I = 3 \text{ nA}$; (b), $U = 100 \text{ mV}$, $I = 300 \text{ pA}$.

verschiedene Kontraste auf den Ketten gibt. Eine trägt dabei einen schwachen und zwei einen stärkeren Kontrast. Weiterhin ist festzustellen, dass es im periodischen Abstand Ketten gibt, deren maximales magnetisches Signal um einen Gittervektor entlang der Reihe verschoben ist. Eine bessere Übersicht über die Situation bieten die in Abb. 4.14(c) dargestellten Linienprofile. Wie zuvor handelt es sich bei den bunten Linienprofilen um benachbarte Ketten zwischen den entsprechend gefärbten Pfeilen aus Abb. 4.14(b). Die beschriebene Verdopplung des Atomabstands auf die Distanz $2a_{\text{Ir}}$ ist beim Vergleich mit den strukturellen Daten (schwarz) leicht zu sehen. Wie bereits von dem FeO_2 -Ketten bekannt, ist dies ein charakteristisches Zeichen für AFM-Ordnung entlang der Ketten. Dies ist konsistent mit der theoretisch vorhergesagten AFM Mn–Mn Kopplung [12, 13]. Des Weiteren ist in den farbigen Linienprofilen die systematische Variation der Korrugation zu sehen. Der geringste Wert ist entlang der grünen Kette mit $3,2 \text{ pm}$ zu beobachten. Zusätzlich ist die mittlere Korrugation auf der roten Kette mit $5,4 \text{ pm}$ in Phase mit der grünen Kette. Im Gegensatz dazu ist die blaue Kette mit der höchsten Korrugation von $6,1 \text{ pm}$ um π phasenverschoben zu den anderen beiden Ketten, so dass überall dort wo das blaue Profil ein Maximum (Minimum) aufweist, die grüne und die rote Kurve ein Minimum (Maximum) besitzt.

Die Kontrastunterschiede sowie die Phasenbeziehung der Ketten können mittels einer AFM-Kopplung entlang und einer chiralen Kopplung von 120° zwischen benachbarten MnO_2 -Ketten

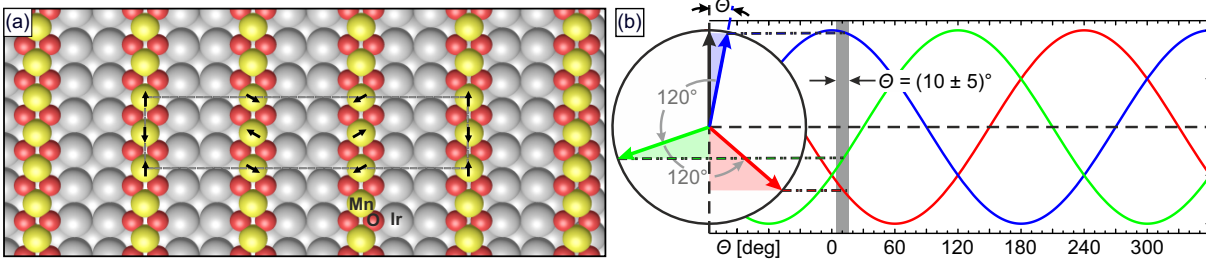


Abbildung 4.15 Schematische Darstellung der chiralen magnetischen (9×2) Struktur für den Fall einer vollständigen in-plane Magnetisierung der MnO_2 -Ketten (a) und Sketch des erwarteten SP-STM Signals nach diesem Modell (b). Durch eine Rotation der Spitze um $\Theta = 10^\circ$ kann der Kontrastunterschied aus Abb. 4.14(c) gut dargestellt werden.

verstanden werden. Dieses Modell führt zu einer magnetischen (9×2) Phase, wie sie im Experiment beobachtet wird. Hier gibt es mehrere mögliche Varianten der Orientierung der Mn-Spins. Diese reichen von einer vollständigen in-plane bis zu einer Spirale mit maximaler out-of-plane Komponente auf einer der drei Ketten. In jedem möglichen Fall ist dabei eine in-plane Komponente für eine 120° Spinspirale vorhanden.

In Abb. 4.15(a) ist das Modell für eine vollständige in-plane Spinspirale gezeigt. Die magnetische (9×2) Einheitszelle ist durch das schwarze Rechteck veranschaulicht. Entlang der Ketten wird die AFM Mn–Mn Kopplung durch entgegengesetzte Spins (schwarze Pfeile) Rechnung getragen und eine Periode von $2a_{\text{Ir}}$ entsteht. Folgt man der Orientierung der Spins senkrecht zu den Ketten von rechts nach links, dreht sich jeweils um 120° gegen den Uhrzeigersinn, was eine identische Spinausrichtung jeder dritten Kette zur Folge hat. Um den Kontrastunterschied und die Phasenbeziehung der Ketten zu verstehen, muss die Kosinusbeziehung des Tunnelstroms in SP-STM Experimenten nach Formel 2.17 betrachtet werden. Daraus erhält man für die Korruvation Δz_{SP} mit einem Winkel Θ zwischen Magnetisierung der Probe P_S und der Spitze P_T die Beziehung

$$\Delta z_{\text{SP}} \propto P_T \cdot P_S \cdot \cos \theta. \quad (4.2)$$

Zur Veranschaulichung der Situation für die drei Ketten in der magnetischen Einheitszelle dient das in Kapitel 3.6 vorgestellte Zeigerdiagramm und verschobene Kosinuskurven in Abb. 4.15(b). Im Kreis ist ein senkrechter schwarzer Pfeil für die Spitzenmagnetisierung eingezeichnet. Zusätzlich symbolisieren die drei farbigen Pfeile die um 120° zueinander verdrehten Magnetisierungsrichtungen der drei Ketten aus Abb. 4.15(a). Offensichtlich hat die blaue Kette in diesem Fall durch den geringsten Winkel Θ nach der obigen Formel die größte magnetische Korruvation. Folgt man dem Zeigerdiagramm 120° gegen den Uhrzeigersinn, wird an der Position des grünen Pfeils die niedrigste magnetische Korruvation festgestellt. Eine weitere Drehung hat wiederum eine mittlere Korruvation (roter Pfeil) zur Folge. Auch die Phasenbeziehung von π kann am

Zeigerdiagramm leicht erklärt werden. Es ist durch die nahezu kollineare Ausrichtung zwischen Spitzenmagnetisierung und der blauen Magnetisierungsrichtung der MnO_2 -Ketten unvermeidbar, dass die Projektionen des grünen und roten Pfeils (farbige Schraffur) in die entgegengesetzte Richtung orientiert sind. Auch bei Änderung des Winkels Θ ändert sich an dieser Tatsache nichts. Dies ist anhand des rechten Teils mit drei um 120° verschobenen Kosinuskurven leicht nachzuvollziehen. Der Kosinus mit dem größten Betrag besitzt immer ein entgegengesetztes Vorzeichen. Zusammengefasst folgt aus den fundamentalen Prinzipien der SP-STM, dass die um π verschobene MnO_2 -Kette die stärkste Korrugation aufweist. Außerdem führen schon kleine Winkel Θ dazu, dass es eine Kette mit niedriger Korrugation gibt, da die Magnetisierung auf dieser nahezu orthogonal zur Spitzenmagnetisierung ist und dies nach Gleichung 4.2 zu einer geringen Korrugation führt. Trägt man die Verhältnisse der gemessenen magnetischen Korrugation aus Abb. 4.14(c) in das Diagramm ein, befindet man sich im Bereich des eingezeichneten grauen Balkens. Darüber kann eine Rotation der Spitze um den Winkel $\Theta = (10 \pm 5)^\circ$ gegenüber der blauen, nahezu kollinearen Kette bestimmt werden.

Zur Kontrolle des beschriebenen Modells wird eine in-plane Fe/W-Spitze präpariert, um anschließend Messungen an einer strukturellen Domänengrenze durchzuführen. Nach dem Modell sind bei senkrechter Streifenorientierung entsprechend sechs unterschiedliche Kontraste zu erwarten. Die Spitze wird auf der DL Fe/W(110) charakterisiert, wie in Abb. 4.16 zu sehen ist. Die Messungen der Topographie und der differentiellen Leitfähigkeit vor (a) & (b) und nach der Messung (c) & (d) auf MnO_2 -Ketten zeigen helle und dunkle Streifen auf der Fe DL an Positionen von Domänenwänden. Wie auch schon bei der Charakterisierung der Spitzen für FeO_2 -Ketten übersteigt die Fe-Bedeckung 2 ML, woraus erneut lange Inseln der dritten Lage resultieren. Obwohl die differentielle Leitfähigkeit Aufschluss über die Magnetisierung der Spitze gibt, kann aus einem einfachen Vergleich der Vormessung mit der Kontrollmessung ein Spitzenwechsel während dem Messungen nicht vollständig ausgeschlossen werden. Dies bedeutet wiederum, dass ein magnetisches Signal auf den MnO_2 -Ketten unter Umständen nicht sicher zugeordnet werden kann. Um ein Spitzenwechsel auszuschließen, werden deshalb sowohl während der Vormessung als auch während der Kontrollmessung Spektren aufgenommen. Diese sind für beide Messungen in Abb. 4.16(e) zusammengefasst.

Dabei stellen die roten dI/dU -Kurven die Spektren der Vormessung dar und sind an den Positionen der roten Punkte in Abb. 4.16(b) für entgegengesetzt orientierte magnetische Domänenwände aufgenommen. Die beiden roten Kurven zeigen den nach Kapitel 3.8 zu erwartenden Signalunterschied bei $U = 700$ meV, der für den Kontrastunterschied in der dI/dU -Karte verantwortlich ist und aus dem TMR-Effekt resultiert. Entsprechend besitzen auch die blauen Spektren der Kontrollmessung an den Positionen der blauen Punkte in Abb. 4.16(d) einen Signalunterschied bei $U = 700$ meV. Beim Vergleich der Spektren für Vor- und Kontrollmessung sind nur

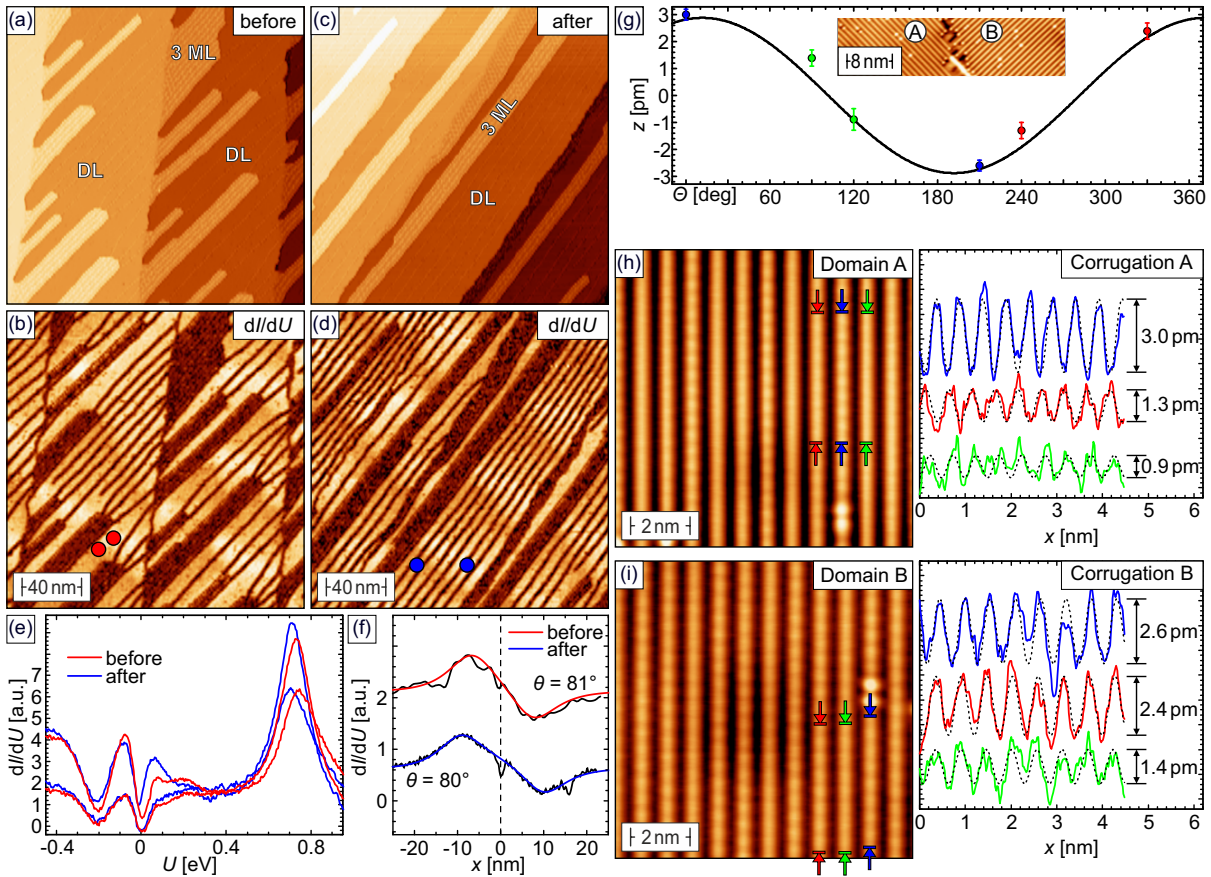


Abbildung 4.16 Überprüfung des magnetischen Modells für MnO_2 -Ketten an einer Domänengrenze. Topographie und differentielle Leitfähigkeit dI/dU vor (a),(b) und nach (c),(d) Messungen an der $\text{MnO}_2/\text{Ir}(001)$ Probe mit einer Fe/W-Spitze auf der DL Fe/W(110). In beiden Fällen liegt ein in-plane Kontrast der Spitze vor. (e) Die Spektren auf den magnetischen Domänen sind vorher und nachher nahezu identisch und schließen eine ungewollte Spitzenänderung aus. (f) Linienprofile über Domänenwände in (b) und (d). Der Fit zeigt eine um 10° aus der Probenebenen herausstehende Spitzenpolarisation. (g) Darstellung der in (h) für Domäne A und in (i) für Domäne B gemessene Korrugation auf der $\text{MnO}_2/\text{Ir}(001)$ Probe mit der charakterisierten Spitze. Die schwarze Kurve in (g) stellt den zu erwartenden Verlauf eines Kosinus dar. Scanparameter: (a)-(d), $U = 700$ mV, $I = 1,5$ nA, $U_{\text{mod}} = 10$ mV; (h),(i), $U = 1$ V, $I = 3$ nA.

geringe Unterschiede zu erkennen, die auch aufgrund von Defekten auf der DL Fe/W(110) verursacht sein können. Im Wesentlichen sind die Verläufe der Kurven für gleiche magnetische Domänen identisch und eine Änderung der Spitze während der Messung kann ausgeschlossen werden. Im Falle einer Veränderung wären hingegen größere Abweichungen zwischen den Spektren auf Grundlage von Kapitel 2 zu erwarten.

Die zusätzliche Analyse der Linienprofile über die magnetischen Domänenwände in Abb. 4.16(f) gibt Auskunft über eine Verkippung der Spitzenpolarisation bezüglich der Probenebenen. Aus dem Fit nach Formel 3.16 ergibt sich ein Winkel $\Theta \approx 80^\circ$ vor und nach der Messung. Da dieser Winkel bezüglich der Oberflächennormalen gemessen wird, steht der Polarisationsvektor um 10° aus der Probenebenen heraus.

Zur Überprüfung des Modells für die MnO_2 -Ketten dienen die Messungen an einer strukturellen Domänengrenze in den Abbildungen 4.16(g)–(i). In dem kleinen zentrierten Ausschnitt in Abb. 4.16(g) ist die Domänengrenze mit zueinander senkrecht verlaufenden Ketten zu sehen. Geht man aufgrund der Anisotropie von einer Vorzugsrichtung der Spinquantisierungssachse bezüglich der Orientierung der MnO_2 -Ketten aus, erhält man für 90° gedrehte Domäne einen zusätzlichen Satz von drei verschiedenen Korrugationen. Die Abb. 4.16(h) zeigt die magnetische Messung auf der Domäne A. Sowohl in der Topographie als auch in den dazugehörigen Linienprofilen zwischen den farbigen Pfeilen sind drei Kontrastpegel zu erkennen. Wie aus dem Modell zu erwarten, ist die blaue Kurve mit höchster Korrugation von $3,0 \text{ pm}$ um die Phase π verschoben. Des Weiteren gibt es eine Kette mit mittlerer und geringer Korrugation. Dies entspricht dem Bild, das wir aus der Diskussion des Zeigerdiagramms für kleine Winkel Θ kennen.

Im Vergleich zu Domäne A sind in Abb. 4.16(i) die Kontrastverhältnisse für Domäne B deutlich verändert. Der Grund dafür ist eine effektive Rotation der Probenmagnetisierung um 90° . Dies führt zu einer Kette mit sehr schwacher Korrugation aufgrund einer nahezu orthogonalen Ausrichtung bezüglich der Spitzenmagnetisierung. Des Weiteren hat dies aber auch zwei Ketten mit annähernd gleichem Kontrast zur Folge. In Abb. 4.16(g) sind die Werte für die Korrugation beider Domänen gegen den Winkel Θ aufgetragen. Dabei wird die größte Korrugation von 3 pm aus Domäne A als 0° Ausgangswinkel gesetzt. Der zweite Punkt bei 90° stammt aus Domäne B. Aufgrund des Winkels von 90° gegenüber dem maximalen Ausschlag muss es sich dabei um die geringste Korrugation von Domäne B handeln. In diesem Schema und unter Berücksichtigung der Phasenbeziehung in beiden Domänen wird jeder Korrugation ein Winkel zugeordnet. Näherungsweise folgen diese Punkte dem Kosinusverlauf (schwarze Kurve), der aus dem Prinzip der SP-STM und der Gleichung 5.1 folgt. Die gute Übereinstimmung deutet deshalb auf eine Kopplung zwischen Ketten hin, die mit einer azimuthalen 120° in-plane Rotation der Spinorientierung zu erklären ist.

Nichtsdestotrotz kann zusätzlich eine leichte Verkipfung gegenüber der Oberflächenebenen vorliegen. Deshalb dienen die Messungen mit einer out-of-plane polarisierten Spitze in Abb. 4.17 als Kontrolle für eine mögliche out-of-plane Komponente des Spinvektors von Mn. Dabei wird die Magnetisierung der Cr/W-Spitze vor und nach der Messung auf den MnO_2 -Ketten auf der DL Fe/W(110) charakterisiert. Bei einer ausreichend hohen Proben temperatur wächst die DL Fe bei einer Bedeckung von unter 2 ML an der Stufenkante an. Dies ist in Topographien der Vor- und Kontrollmessungen in den Abbildungen 4.17(a) & (b) für eine Bedeckung von 1,3 ML zu sehen. Anhand der dI/dU -Signale in dem unteren Teil der Abbildungen ist ein heller und mittlerer Kontrast auf der DL Fe zu sehen. Dies bedeutet, dass die DL auf den unterschiedlichen Terrassen eine entgegengesetzte out-of-plane Komponente aufweist. Dies ist eine typische Beobachtung für Streifen der Fe DL auf schmalen Terrassen, die aus einem großen Fehlschnitt

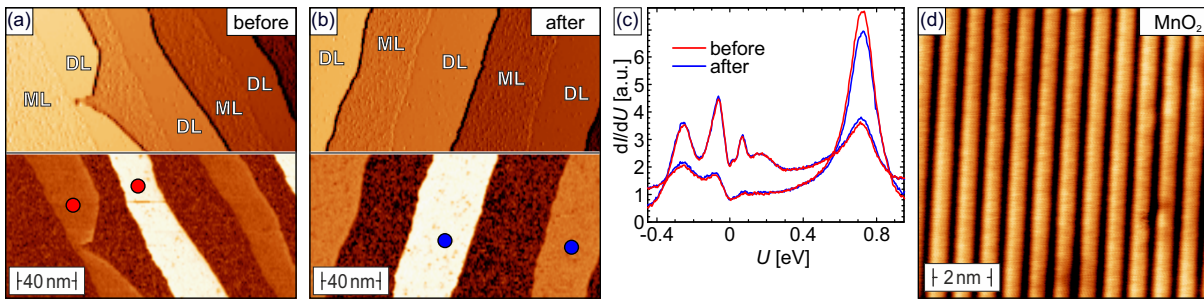


Abbildung 4.17 Messung der MnO_2 -Ketten mit einer senkrecht zur Probenoberfläche polarisierten Spitze. Topographie (oben) und dI/dU -Signal (unten) der DL Fe/W(110) vor **(a)** und nach **(b)** der Messung der MnO_2 -Ketten. **(c)** Die Spektroskopiekurven vorher (rot) und nachher (blau) sind identisch. **(d)** Die Messung mit einer out-of-plane polarisierten Spitze zeigt keinen magnetischen Kontrast. Scanparameter: (a), (b), $U = 700$ mV, $I = 1,5$ nA, $U_{mod} = 10$ mV; (d), $U = 100$ mV, $I = 1$ nA.

des W-Substrats zur idealen (110) entstehen. Die antiparallele Ausrichtung von benachbarten Fe DL Streifen beruht dabei auf die vom Streufeld vermittelte dipolare Wechselwirkung [39, 68, 72]. Eine Domänengrenze, die ein Wechsel des Kontrastes der DL auf einer Terrasse bedeuten würde, ist in beiden Bildern hingegen nicht zu sehen.

Zum Ausschluss einer Spitzenänderung während der Messungen mit der hier verwendeten out-of-plane Spitze werden auch in diesen Fall Spektren für die Vor- und die Kontrollmessung aufgenommen. Die Position ist auch hier durch die farbigen Punkte in den Abbildungen 4.17(a) & (b) gekennzeichnet. Neben den zu erwartenden Signalunterschied von Domänen mit entgegengesetzter Magnetisierung können auch für die out-of-plane Spitze nur unwesentliche Unterschiede zwischen den dI/dU -Kurven der Vor- und Kontrollmessung festgestellt werden. Damit ist davon auszugehen, dass die Messung auf den MnO_2 -Ketten in Abb. 4.17(d) mit einer out-of-plane Spitze aufgenommen ist. Während hier die Streifenstruktur der Ketten zu beobachten ist, kann nur ein geringer magnetischer Kontrast von weniger als 1,5 pm festgestellt werden. Dieser kann aber auch durch eine leichte in-plane Komponente der Spitze verursacht sein. Zusammenfassend wird damit eine in-plane Spinspirale mit einer Drehung von 120° zwischen MnO_2 -Ketten festgestellt, wobei auch eine kleine out-of-plane Komponente der Spins möglich ist. Die Rotation der Spins hat unterschiedliche magnetische Kontraste und feste Phasenbeziehung zwischen den Ketten zur Folge und führt unter Berücksichtigung der AFM-Ordnung entlang der Ketten zu einer magnetischen (9×2) Einheitszelle.

Betrachtet man das entsprechende Modell der in-plane Spinspirale (vgl. Abb. 4.15(a)), sind mit einem rechts-zirkularen und links-zirkularen Drehsinn zwei Zustände der Spinspiralen möglich. Insgesamt existieren vier mögliche Kontrastabfolgen für die Kombination von Drehrichtung der Spirale mit dem Winkel Θ zwischen Magnetisierung der Spitze und der Kette mit höchster Korugation. Diese sind schematisch anhand des bekannten Zeigerdiagramms in Abb. 4.18 zusammengefasst. Im Fall der links-zirkularen Spinspirale, Abb. 4.18(a), können zwei Kontrastabfolgen

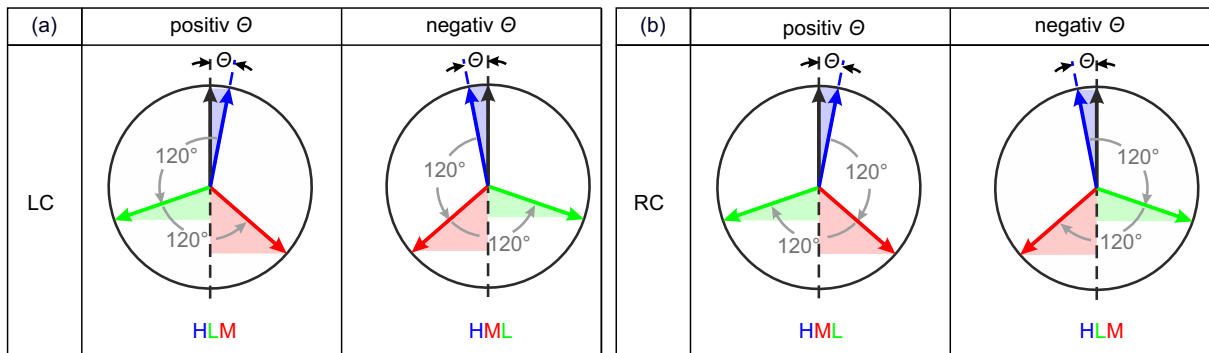


Abbildung 4.18 Darstellung der vier möglichen Kontraste für die 120° MnO_2 -Spinspiralen. (a) Nach links laufende Spinspirale. Eine Änderung des Winkels Θ zwischen Spitzenpolarisation (schwarz) und Probenpolarisation (blau) von positiv auf negativ ändert den Kontrast der Streifen von HLM auf HML. (b) Für eine rechtsgerichtete Spinspirale ist die Kontrastabfolge HML für positive und HLM für negative Θ .

am Zeigerdiagramm abgelesen werden. Bei positivem Winkel Θ ist die Abfolge hoch (H), leicht (L) und mittel (M). Bei negativem Winkel erhält man hingegen HML. Für die rechts-zirkuläre Spinspirale in Abb. 4.18(b) ergeben sich die Abfolgen HML für positive und HLM für negative Winkel.

Wie aus dem Kapitel 3 bekannt ist, können Spinspiralen durch die DM-Wechselwirkung stabilisiert werden. Sollte diese auch im vorliegenden Fall von Bedeutung sein, ist eine einheitliche Drehrichtung aufgrund der Anisotropie dieser Wechselwirkung zu erwarten. Will man dies für die MnO_2 -Ketten nachweisen, darf sich die Spitzenmagnetisierung aufgrund der Abhängigkeit der Kontrastabfolge vom Winkel Θ nicht ändern. Außerdem ist eine Messung von strukturell gleich orientierten Domänen aufgrund der Vergleichbarkeit vom Vorteil, da sich sonst die Beziehung für Θ ändert. Unter Beachtung beider Punkte soll im Folgenden eine einheitliche Drehrichtung der Spiralen nachgewiesen werden. Allerdings ist eine direkte Zuordnung von links- und rechts-zirkulären Spinspiralen am verwendeten STM nicht möglich. Für eine solche Beurteilung wäre ein System notwendig, dass eine kontrollierte Veränderung der in-plane Magnetisierung der Spitze durch ein externes Magnetfeld zulässt (vgl. Ref. [76]).

Die Messungen zur Bestimmung des Drehsinns sind in Abb. 4.19 gezeigt. Die Übersichtsaufnahme oben links weist auf den Terrassen die (3×1) Streifenstruktur auf. Die Inseln auf der obersten Terrasse besitzen die übliche Form und zeigen aufgrund einer etwas zu niedrigen Heiztemperatur während des Wachstums der MnO_2 -Ketten wenige nicht rekonstruierte Region (nr) auf. Des Weiteren sind die Domänengrenzen durch leichte Linien auf der Terrasse zu erkennen (schwarzer Pfeil). Die Positionen der Detailaufnahmen 1-8 sind in der Topographie als Rechtecke mit entsprechender Nummerierung markiert. Die gewählten Domänen sind durch Domänengrenzen oder nicht rekonstruierte Regionen voneinander getrennt und damit unabhängig. Sowohl die Richtung des Scans, wie auch die Streifenorientierung ist in jeder Detaildarstellung

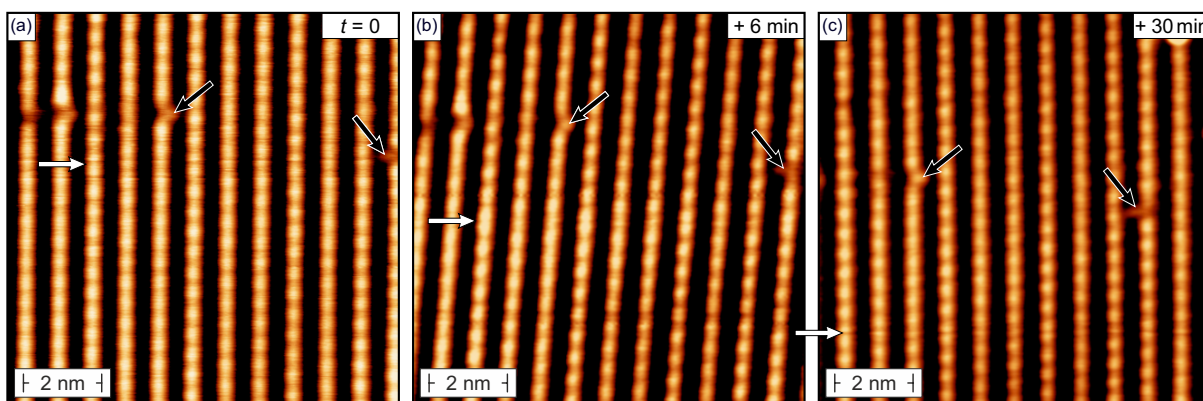


Abbildung 4.20 Beobachtung einer magnetischen Domänenwand innerhalb einer strukturellen Domäne der Ketten mit einer Cr/W-Spitze. (a) Strukturelle Defekte (schwarze Pfeile) und eine magnetische Domänenwand über alle Ketten (weißer Pfeil) ist zu beobachten. Diese führt zu einer Störung des AFM Kontrast entlang der Ketten. Bei (b) & (c) bewegt sich die Domänenwand gleichförmig entlang aller Ketten. Scanparameter: (a) $U = 500$ mV, $I = 1$ nA; (b),(c) $U = 100$ mV, $I = 1$ nA.

rung unwahrscheinlich und alle fünf Bereiche besitzen den gleichen Drehsinn. Beim Übergang von Messbereich 5 zu 6 ändern sich hingegen die Verhältnisse der Korrugationen. Aufgrund dieser Tatsache ist davon auszugehen, dass sich zwischen beiden Messungen die Spitzenmagnetisierung und damit der Winkel Θ verändert hat. Trotzdem hat sich an der Abfolge LMH gegenüber Detail 5 nichts geändert. Dafür gibt es zwei mögliche Szenarien. Im ersten Fall ist die Drehrichtung der Spinspirale im Bereich 6 von der in 1-5 verschieden. Die gleichartige Abfolge von LMH wäre in diesem Szenario der Änderung der Spitzenmagnetisierung geschuldet. Im zweiten Fall ändert sich hingegen nur der Winkel Θ . Dabei ist eine Orientierung der Spitzenmagnetisierung in einem Winkelbereich mit gleicher und veränderter Kontrastabfolge für den zweiten Fall gleich wahrscheinlich.

Eine solche Spitzenänderung ist auch im Bereich 7 in der Mitte des Bildes (weiße Linie) zu registrieren. An dieser Stelle ist ein Sprung in den Linienprofilen zu sehen. Während sich das z -Signal dadurch ändert, bleibt die Kontrastabfolge davon unbeeinflusst. Dies bedeutet eine nur geringe Änderung des Winkels Θ um weniger als 30° . Bei einer größeren Änderung des Winkels wäre hingegen ein Wechsel der Kontrastabfolge und eine Verschiebung der höchsten Korrugation auf eine andere Kette zu beobachten (vgl. Abb. 4.15(b)). Insgesamt ist die Kontrastabfolge in allen acht unabhängigen Domänen trotz Spitzenwechsel einheitlich LMH. Eine solche Beobachtung wäre bei der Koexistenz von zwei Drehrichtung nur in 2% der Fälle zu beobachten. Damit ist von einer einheitlichen Drehrichtung der MnO_2 -Ketten auszugehen, die für die Beteiligung der DM-Wechselwirkung in diesem System spricht.

Eine weitere Beobachtung auf den MnO_2 -Ketten ist eine magnetische Domänenwand innerhalb einer strukturellen Domäne in Abb. 4.20. Zunächst ist in allen Bildern die magnetische (9×2) Einheitszelle zu sehen, wobei die schwarzen Pfeile für jedes Bild auf dieselben Defekte inner-

halb einer Kette zeigen. Aufgrund der Lage könnte es sich bei diesen um eine Verschiebung von Mn-Atomen senkrecht zur Kette in einen anderen Adsorptionsplatz handeln. Die Position der Defekte ist stabil und ändert sich über die Messzeit t nicht. Bei genauer Betrachtung der magnetischen Struktur in Abb. 4.20(a) ist eine Domänenwand durch eine Störung der AFM-Ordnung auf der Höhe des weißen Pfeils festzustellen. Dies ist gut an einer hohen Korrugation von benachbarten Atomen der Kette mit höchster Korrugation zu erkennen. Daraus folgt aus dem Prinzip der SP-STM eine parallele Komponente des Spins für beide Atome. Beobachtet man den Bereich über einen längeren Zeitraum, ist eine laterale Verschiebung dieser Domänenwand entlang der MnO_2 -Ketten zu beobachten. In Abb. 4.20(b) hat sich die Domänenwand nach $t = 6$ min um $(1, 2 \pm 0, 1)$ nm nach unten bewegt. Dies entspricht in etwa $4a_{\text{Ir}}$ und die Position bezüglich der AFM-Ordnung ist identisch. Dass heißt, der Kontrast auf beiden Seiten der Domänenwand ändert sich zwischen den Abbildungen 4.20(a) und (b) nicht.

Nach einer Zeit von $t = 30$ min hat sich die Domänenwand um weitere $(1, 4 \pm 0, 1)$ nm nach unten fortbewegt (siehe Abb. 4.20(c)). Dies entspricht in etwa $5a_{\text{Ir}}$ und hat aufgrund der Inkommensurabilität mit der AFM-Ordnung entlang der Ketten eine magnetische Kontrastumkehr zur Folge. Diese ist am besten beim Vergleich der oberen Domäne in den Abbildungen 4.20(b) & (c) im Bereich der Defekte zu sehen. Die Bewegung der Domänenwand kann damit zum Umschalten einer magnetischen Domäne führen und stellt die Möglichkeit dar, zwischen zwei Zuständen zu schalten. Unter welchen Umständen sich die Domänenwand bildet und wie sie verschoben werden kann, müssen zukünftige Untersuchungen zeigen. So ist auch in der vorliegenden Messung nicht auszuschließen, dass die Verschiebung von der Spitze induziert ist.

Zusammenfassend ist damit die Vorhersage des theoretischen Modells der AFM-Kopplung entlang der Streifen bestätigt [12, 13]. Die AFM-Kopplung zwischen benachbarten Streifen konnte wie zuvor für die FeO_2 -Ketten allerdings nicht bestätigt werden. Um weitere Einblicke über die Ursache der beobachteten chiralen magnetischen Struktur zu gewinnen, werden nicht-kollineare DFT-Rechnungen mit Hilfe des FLEUR-Codes von G. Bihlmayer und S. Blügel vorgestellt [101, 102]. Als Grundlage der Berechnungen dient ein sieben Atomlagen dicker Film mit der in Ref. [12] beschriebenen (3×2) Einheitszelle unter Verwendung der LDA-Näherung (Local Density Approximation) [103] kombiniert mit Hubbard U Korrekturen [104] für die Mn d -Zustände. Das Hubbard $U = 2,7$ eV und die Kopplungskonstante $J = 1,2$ eV ergeben den Wert $U - J = 1,5$ eV aus Ref. [12].

In Übereinstimmung mit den Berechnungen von Ferstl *et al.* [12, 13] und den hier vorgestellten experimentellen Messdaten ist die bevorzugte Kopplung entlang der Ketten AFM. Im Gegensatz dazu unterscheiden sich die neuen Berechnungen mit einer leichten FM-Kopplung von $1,7$ meV von der in Ref. [12] gefunden AFM-Kopplung mit einem Energiegewinn von $0,4$ meV pro Mn-Atom. Beide Energiewerte bedeuten eine nur schwache Kopplung zwischen den MnO_2 -

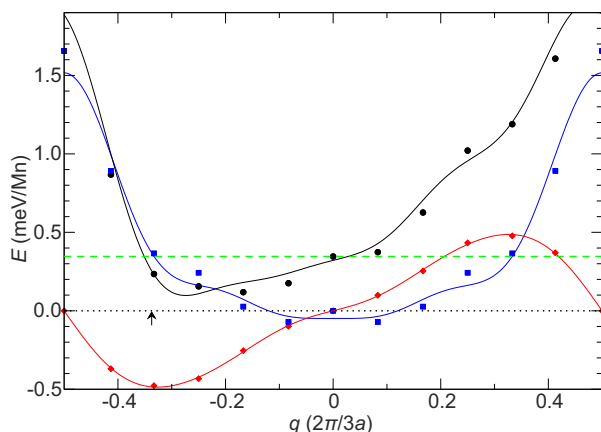


Abbildung 4.21 Theoretische DFT-Berechnungen der totalen Energie für MnO₂-Ketten auf Ir(001). Die Spinrichtung rotiert von Kette zu Kette um den Winkel $3a_{\text{Ir}}q$. Die Spins formen eine zyklodale Spinspirale, die sich senkrecht zu den Ketten ausbreitet. Die Rotationsachse liegt parallel zur Kettenorientierung. Die Anteile zur Gesamtenergie (schwarz) sind die symmetrische Austauschwechselwirkung (blaue Quadrate), die DM-Wechselwirkung (rote Quadrate) und die Magnetokristalline Anisotropie (grün gestrichelt). Die durchgezogenen Linien stellen entsprechende Näherung der Energieanteile dar. Die Daten sind von Bihlmayer und Blügel zur Verfügung gestellt [102].

Ketten, sodass insbesondere bei hohen Temperaturen keine ausgedehnte magnetische Ordnung zu erwarten wäre. Zudem könnten andere Terme der magnetischen Wechselwirkung wie die DM-Wechselwirkung im selben Energiebereich liegen und somit die magnetische Ordnung beeinflussen. Deshalb wurden Berechnungen von Spinspiralen mit dem Wellenvektor q durchgeführt. Dem FM-Zustand wird dazu der Wellenvektor $q = 0$ und dem AFM-Zustand $q = 0,5$ in Einheiten von $2\pi/3a_{\text{Ir}}$ zugeordnet.

Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Abb. 4.21 zu sehen. Die mit blauen Quadraten dargestellten Punkte sind Daten für die symmetrische Austauschwechselwirkung. Diese zeigen kein ausgeprägtes Minimum und einen flachen Dispersionsverlauf um $q = 0$ des FM-Zustands. Der zweite Anteil kommt aus der DM-Wechselwirkung und ist in Rot gezeigt. Wie für die anisotrope DM-Wechselwirkung zu erwarten, ist der Beitrag zur Gesamtenergie von der Richtung des Wellenvektors q abhängig. Daraus erhält man einen maximalen Energiegewinn pro Mn-Atom von fast 0,5 meV für den Wellenvektor $q = -1/3$. Aufgrund der gewählten Skalierung für q entspricht das einer Drehung des Spins um 2π nach einer Distanz von $9a_{\text{Ir}}$. Der dritte Anteil zur Gesamtenergie ist die magnetokristalline Anisotropieenergie, die als grüne gestrichelte Linie bei einer Energie von ungefähr 0,35 meV liegt. Die Summe der drei Energieanteile ist als schwarze Kurve genähert. Diese zeigt im Bereich von $q = -1/3$ ein Minimum mit einer Absenkung der totalen Energie um 0,3 meV gegenüber den FM-Zustand. Zusätzlich erklärt die Existenz von nur einem Minimum die einheitliche Drehrichtung der Spinspirale. Das theoretische Modell unter Einbeziehung der DM-Wechselwirkung kann damit die experimentellen Messungen zur Periode und dem Drehsinn bestätigen.

Im Widerspruch zur Messung handelt es sich in den Berechnungen allerdings um eine zyklodale Spinspirale. Diese erhält man unter Berücksichtigung der Regeln von Moriya und der $(\bar{1}10)$ Spiegelebenen senkrecht zu den MnO₂-Ketten [56]. Während für die Messung ein senkrecht zur Probenebene orientierter DM-Vektor erwartet wird, ist dieser für die zyklodale Spinspirale in

der Probenebene parallel zu den Ketten orientiert. Als Folge wäre für diese Spirale neben den beobachteten in-plane Kontrast auch ein out-of-plane Kontrast zu erwarten. Die SP-STM Messungen zeigen aber bestenfalls eine geringe out-of-plane Komponente an. Wenn der einheitliche Drehsinn der beobachteten in-plane Spirale durch die DM-Wechselwirkung verursacht ist, muss deshalb ein Anteil des DM-Vektors senkrecht zur Probenebenen vorliegen. Diese Bedingung kann nur unter Brechung der Spiegelsymmetrie stattfinden. Ein Hinweis dafür könnte die leichte Asymmetrie der strukturellen Daten in Abb. 4.14 (a) sein, die zur Brechung der Spiegelsymmetrie führen.

Zusammengefasst handelt es sich bei den MnO_2 -Ketten um ein System mit magnetischer (9×2) Einheitszelle. Entlang der Ketten kommt es aufgrund der Austauschwechselwirkung zu einer AFM-Anordnung der Spins. Die Wechselwirkung zwischen den Ketten wird durch die indirekte RKKY-Wechselwirkung hervorgerufen. Dabei resultiert aus den drei Energieanteilen der Austauschwechselwirkung, der DM-Wechselwirkung und der Anisotropie ein nicht kollinearer Zustand mit einem Energiegewinn von 0,3 meV gegenüber einer kollinearen FM-Anordnung der Spins. Die Periode der Spinspirale von $9a_{\text{Ir}}$ stimmt mit den experimentellen Beobachtungen überein und führt zu einem Drehwinkel von 120° zwischen benachbarten Ketten. Zusätzlich liegt ein einheitlicher Drehsinn der Spiralen vor, der einer indirekten DM-Wechselwirkung zugeordnet wird.

Eine ähnliche Beobachtung für indirekt gekoppelte Systeme machte Khajetoorians *et al.* für die magnetische Wechselwirkung zweier Fe-Atome auf der Pt(111) Oberfläche [7]. Sie konnten zeigen, dass aufgrund des Zusammenspiels von indirekter Austauschwechselwirkung und indirekter DM-Wechselwirkung die relative Orientierung der atomaren Momente vom Abstand der Atome abhängt. Auch in entsprechenden Fe-Clustern aus drei Atomen konnte eine starke induzierte Polarisierung von bis zu hundert Pt-Atomen in direkter Umgebung der Cluster beobachtet werden [8]. Darüber hinaus liegt bei einem Abstand von 277 pm zwischen Fe-Atomen in dreieckiger Anordnung eine Verdrehung der Spins um bis zu $\Theta \approx 17^\circ$ vor. Auch hier spielt die durch RKKY-Wechselwirkung vermittelte DM-Wechselwirkung neben der Anisotropie und der Austauschkopplung eine wichtige Rolle [8].

Das System der $3d$ TMO-Ketten kann als Erweiterung des Cluster-Modells angenommen werden und zeigt eine durch die RKKY-Wechselwirkung vermittelte indirekte DM-Wechselwirkung zwischen eindimensionalen Systemen. Dabei besitzen TMO-Ketten im Gegensatz zu Clustern den Vorteil, dass sie sich im Wachstumsprozess selbstständig anordnen und nicht durch atomare Manipulation erzeugt werden müssen. Dafür sind die Cluster durch die Wahl von Adsorptionsplatz und Abstand der Atome in der Flexibilität dem starren System der periodischen Ketten überlegen. Ob die Möglichkeit der Manipulation des magnetischen Zustands der MnO_2 -Ketten durch den Einbau von Domänenwänden gegeben ist, müssen zukünftige Untersuchungen zeigen.

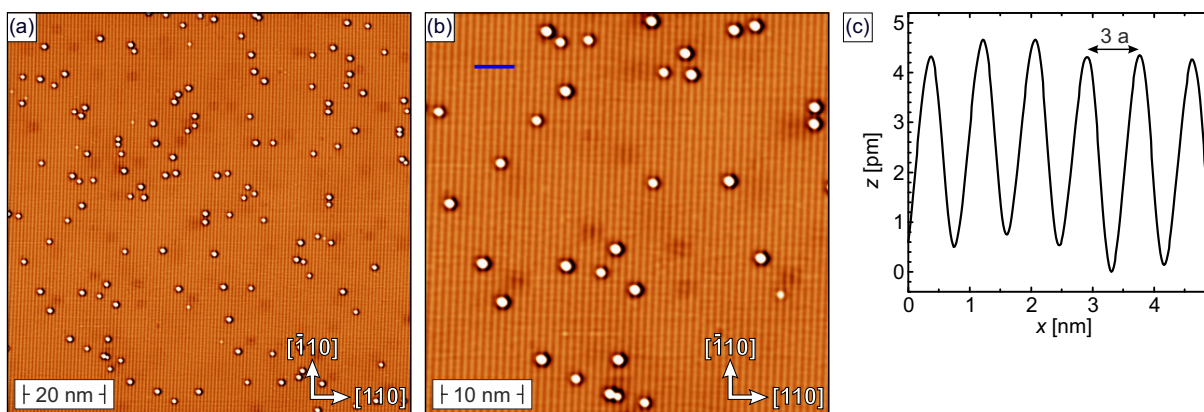


Abbildung 4.22 (a) Nicht magnetische Übersichtsaufnahme der CrO_2 -Struktur. Streifen in die $[\bar{1}10]$ Richtung sind zu erkennen. (b) Höhere Auflösung der Streifenstruktur. (c) Das Linienprofil über die Streifen zeigt eine Periode von $3a_{\text{Ir}}$. Scanparameter: $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$.

4.4.4 CrO_2 -Ketten

Für die drei untersuchten Systeme konnten zwei magnetische Nanostrukturen nachgewiesen werden. Verfolgt man die Periode der $3d$ -Übergangsmetalle von Co über Fe zu Mn, ist für die TMO-Ketten eine nicht magnetische, eine kollineare und eine chirale magnetische Ordnung festzuhalten. Im Folgenden soll die Gruppe der TMO-Ketten um die Untersuchung von Cr als Nachbarelement von Mn im Periodensystem erweitert werden. Im Gegensatz zu den bisherigen Systemen war das Wachstum von CrO_2 nicht bekannt, so dass auch keine Strukturanalysen und Berechnungen zur magnetischen Kopplung vorlagen.

Zur Präparation der CrO_2 -Ketten wird die gleiche Präparation wie für die zuvor diskutierten TMO-Ketten angewendet. Die Übersichtsaufnahme mit einer nicht magnetischen W-Spitze in Abb. 4.22(a) zeigt das Ergebnis nach dem Heizen auf $T \approx 800^\circ\text{C}$ bei einer Sauerstoffatmosphäre von $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8} \text{ mbar}$. Neben den Streifen in die $[\bar{1}10]$ Richtung sind die typischen Defekte von Ir(001) gut zu sehen. Die zusätzlichen 145 punktförmigen Defekte erscheinen 10...100 pm hoch und sind ähnlich zu den Defekten der bekannten TMO-Ketten auf den Streifen lokalisiert. Am Besten ist dies in der höheren Auflösung aus Abb. 4.22(b) zu erkennen. Das Linienprofil in Abb. 4.22(c) entlang der blauen Linie zeigt mit $(846 \pm 40) \text{ pm}$ eine periodische Anordnung der Streifen. Dieser Wert ist vergleichbar mit dem Abstand von MnO_2 -Ketten und ist neben der Position der Defekte ein Hinweis für eine Ausbildung der (3×1) Kettenstruktur.

Um diese Vermutung weiter zu verifizieren, werden zunächst spannungsabhängige Messungen im Bereich von $U = 1 \text{ V}$ bis $U = -500 \text{ meV}$ durchgeführt. Die Topographien für fünf verschiedene Spannungswerte in den Abbildungen 4.23(a)–(e) sind an derselben Stelle aufgenommen, wie an den Defekten zu sehen ist. Der schwarze Pfeil auf dem hellen Defekt dient als Markierung für einen der Streifen in die $[\bar{1}10]$ Richtung, der bei einer Spannung von 1 V in Abb. 4.23(a) die höchste Korrugation besitzt (A-Streifen). Diese kann anhand des Linienprofils entlang der blau-

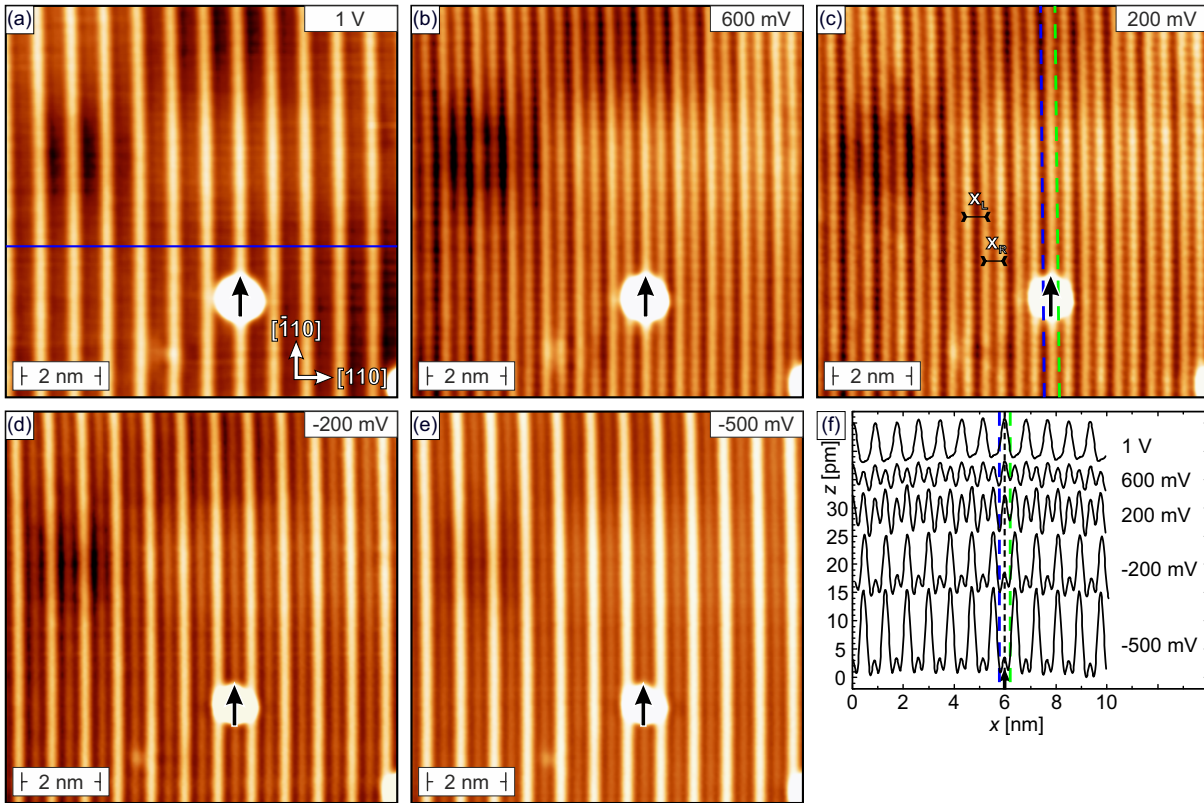


Abbildung 4.23 Spannungsabhängige Messungen auf der Streifenstruktur von CrO₂ mit einer W-Spitze. Bei der Verringerung der Tunnelspannung von (a) 1 V über (b) 600 mV nach (c) 200 mV werden zusätzliche Streifen sichtbar. Bei negativen Spannungen von (d) -200 mV und (e) -500 mV sind die zusätzlichen Streifen dominant. (f) Linienprofile über die Streifenstrukturen in (a)–(e). Der schwarze Pfeil markiert die Position des dominanten Streifens bei 1 V. Farblich gestrichelte Linien verlaufen in den Tälern. x_L und x_R sind die Abstände von linken bzw. rechten B-Streifen zu den dazwischenliegenden A-Streifen. Scanparameter: (a) $I = 2$ nA; (b),(e), $I = 1,5$ nA; (c),(d), $I = 500$ pA.

en Linie in Abb. 4.23(f) zu $(6,6 \pm 0,5)$ pm bestimmt werden. Eine Veränderung der Spannung auf $U = 600$ mV verändert die Topographie deutlich. Die zusätzlich auftretenden Streifen besitzen eine um $(0,8 \pm 0,1)$ pm geringere Korrugation (B-Streifen). Des Weiteren ist beim Vergleich der Linienprofile von $U = 1$ V und $U = 600$ mV die maximale Korrugation der A-Streifen auf $(4,3 \pm 0,5)$ pm zurückgegangen.

Bei weiterer Verringerung der Spannung auf $U = 200$ mV dreht sich der Kontrast der Streifen zueinander um, was vor allem im Linienprofil zu sehen ist. Die B-Streifen zeigen hier eine ansteigende Korrugation und erreichen mit $(7,8 \pm 0,5)$ pm einen um $(1,3 \pm 0,3)$ pm höheren Wert als die mit dem Pfeil markierten A-Streifen. Zusätzlich ist für diese Spannung eine leichte atomare Modulation in Richtung beider Streifen zu erkennen. Für die negativen Spannungen $U = -200$ mV und $U = -500$ mV in den Abbildungen 4.23(d) & (e) ist die Kontrastumkehr aufgrund der ansteigenden Korrugation der B-Streifen noch deutlicher. Für $U = -500$ mV kann aus dem Linienprofil eine Korrugation von (15 ± 1) pm für die B-Streifen und $(2,6 \pm 0,3)$ pm für die bei $U > 200$ mV dominanten A-Streifen bestimmt werden.

Zusammenfassend erscheinen in STM-Bildern des Systems CrO/Ir(001) zwei verschiedenen Typen von Streifen. Typ A ist für positive Spannungen $U > 200$ mV dominant und Typ B für Spannungen $U \leq 200$ mV. Der Abstand zwischen Streifen desselben Typs ist mit (850 ± 50) pm im Bereich des für TMO-Ketten zu erwartenden dreifachen Gittervektors von Ir(001). Für die Analyse der Distanz zwischen Streifen unterschiedlichen Typs wird der Abstand von A-Streifen zu linken und rechten benachbarten B-Streifen gemessen. Die Ergebnisse von $x_L = (438 \pm 11)$ pm für den linken und $x_R = (412 \pm 10)$ pm für den rechten Abstand zeigen, dass die A-Streifen die Strecke von $3a_{\text{Pt}}$ nicht halbieren. Des Weiteren führt dies zu der Beobachtung einer Doppelstreifenstruktur in den Abbildungen 4.23(b)–(d). Diese resultiert aus der Existenz von tiefen Tälern links (blau gestrichelt) und weniger tiefen Tälern rechts von Typ A-Streifen (grün gestrichelt). Hierfür sind zwei Gründe denkbar. Zum einen kann die Überlagerung vom elektronischen und topographischen Signal bei geringerem Abstand der Ketten zu einem höheren Gesamtsignal führen und dadurch den Unterschied zwischen den Tälern erklären. Zum anderen ist aus den Untersuchungen der FeO₂/Ir(001) Probe bekannt, dass die Spitzengeometrie bei der Analyse der Messdaten zu beachten ist. Dabei kann es zu einer besseren Auflösung von breiteren gegenüber schmälere Tälern kommen. Da sich weiterhin die Positionen der Maxima (Minima) in den Linienprofilen nicht ändern, kann auch eine strukturelle Verzerrung der Struktur nicht ausgeschlossen werden. Um Aussagen über den Ursprung der Streifen machen zu können, wird das Strukturmodell nach den Berechnungen von Ferstl betrachtet [12]. Daraus ist bekannt, dass die Übergangsmetalle unterschiedliche Abstände zum Ir-Substrat aufweisen und deshalb ein unterschiedliches topographisches Signal für die verschiedenen TMO-Ketten zu erwarten ist. Während dieser Anteil für Mn mit 108 pm groß ausfällt, ist dieser beispielsweise für Co mit 92 pm und Fe mit 69 pm geringer [12]. Tatsächlich ist derselbe Trend auch in den Messungen für Mn (39 pm), Co (34 pm) und Fe (18 pm) zu erkennen, bei denen keine Kontrastumkehr beim Wechsel der Tunnelspannung beobachtet wird und damit eine eindeutige Zuordnung der Streifen zu den TMO-Ketten möglich ist.

Für die Messungen an CrO₂-Ketten in Abb. 4.23 ist die Situation durch die Beobachtung von zwei Streifentypen anders. Dies könnte an einem im Vergleich zu den anderen TMO-Ketten kleinen topographischen Beitrag und einen höheren elektronischen Beitrag zum Messsignal liegen. Um das elektronische vom strukturellen Signal zu trennen, werden die Linienprofile in Abb. 4.23(f) analysiert. Dafür wird erneut die Korrugation der beiden Streifentypen verglichen. Während diese für B-Streifen bei 1 V kaum vorhanden ist und für $U = -500$ mV auf (15 ± 1) pm ansteigt, ändert sich die Korrugation im gesamten Spannungsbereich für A-Streifen von $(6,6 \pm 0,5)$ pm auf $(2,6 \pm 0,3)$ pm wesentlich weniger. Da topographische Beiträge unabhängig von der konkreten Tunnelspannung sind, elektronische Beiträge aber einen starken Einfluss aufweisen, werden die bei $U > 200$ mV dominanten A-Streifen den herausstehenden CrO₂-Ketten zugeordnet. B-

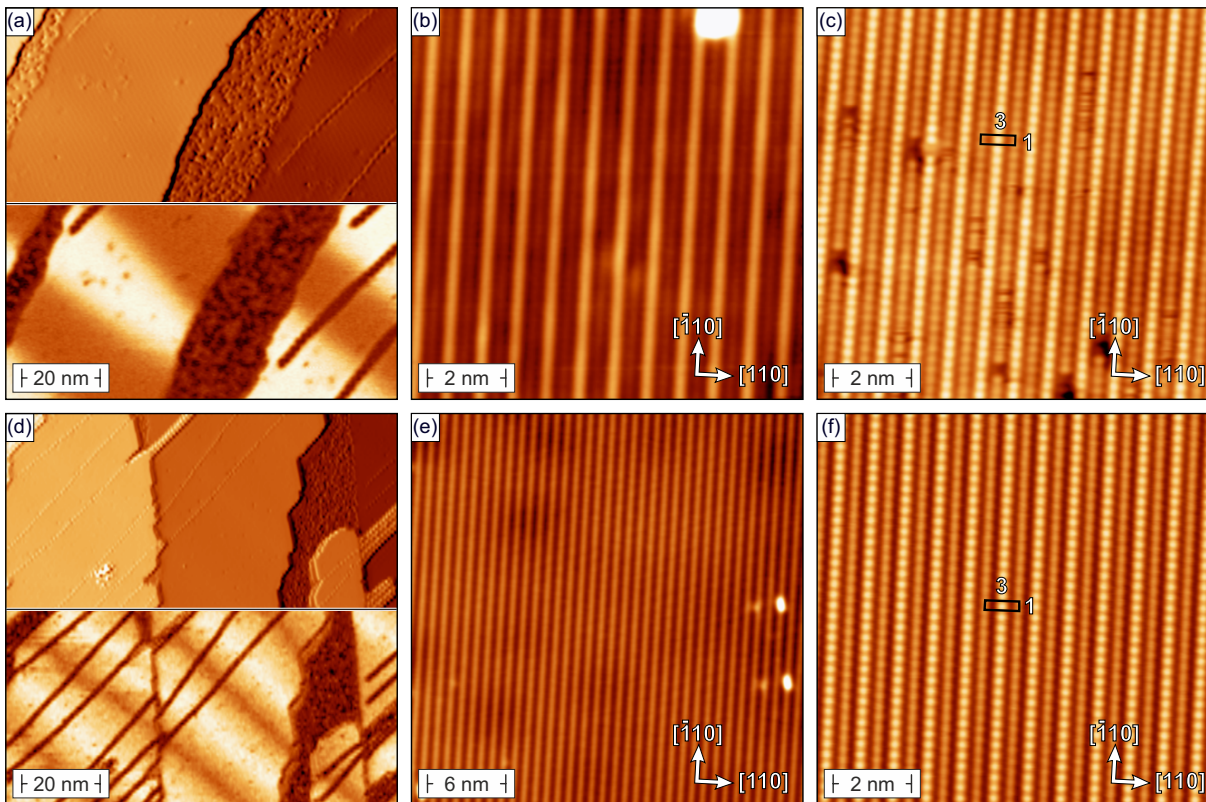


Abbildung 4.24 Magnetische Messungen an der CrO_2 Streifenstruktur. (a) Topographie (oben) und differentielle Leitfähigkeit (unten) auf der DL Fe/W(110) mit einer out-of-plane Cr/W-Spitze. (b) Die Streifenstruktur zeigt keine magnetische Phase. (c) Atomare Auflösung der Ketten liefert keinen Hinweis auf magnetische Nanostruktur. (d) Topographie und differentielle Leitfähigkeit der DL Fe/W(110) mit einer in-plane polarisierten Fe/W-Spitze. (e) Streifenstruktur der CrO_2 -Ketten zeigt keinen magnetischen Kontrast für eine in-plane Spitze. (f) Atomare Auflösung mit struktureller (3×1) gibt ebenfalls keinen Hinweis auf magnetische Strukturen. Scanparameter: (a),(d), $U = 700 \text{ mV}$, $I = 1 \text{ nA}$, $U_{\text{mod}} = 10 \text{ mV}$; (b), $U = 100 \text{ mV}$, $I = 300 \text{ pA}$; (c), $U = 50 \text{ mV}$, $I = 10 \text{ nA}$; (e), $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$; (f), $U = 50 \text{ mV}$, $I = 3 \text{ nA}$.

Streifen entsprechen demnach den zwei Ir-Reihen zwischen den Ketten. Diese haben unter dieser Annahme im Bereich der besetzten Zustände eine höhere lokale Zustandsdichte, die als Anstieg in der Korrugation zu registrieren ist. Einen zusätzlichen Anhaltspunkt liefert die Position der beobachteten Defekte, die sich bei den bekannten Systemen auf den TMO-Ketten befinden. Folgen auch die CrO_2 -Ketten dieser Systematik, sind auch in diesem Fall die A-Streifen der TMO-Kette zuzuordnen.

Aufgrund der Streifenstruktur und der leichten atomaren Korrugation entlang der Streifen in Abb. 4.23(c) wird von einer (3×1) Struktur der CrO_2 -Ketten nach dem Modell von Ferstl ausgegangen [12]. Aus diesem Grund wurden auch für dieses System magnetische Messungen durchgeführt, wofür zunächst eine Cr/W-Spitze präpariert und in Abb. 4.24(a) auf der DL Fe/W(110) charakterisiert wird. Wie in der Topographie zu sehen ist, liegt die Bedeckung bei 1,85 ML und auf der DL ist der alternierende hell-dunkel Kontrast einer out-of-plane polarisierten Spitze im dI/dU -Signal zu erkennen. Mit dieser Spitze ist in Abb. 4.24(b) kein magnetischer Kontrast auf

den B-Streifen bei einer Spannung von $U = 100$ mV zu sehen, was für die Ir-Doppelreihen auch nicht zu erwarten ist.

In Abb. 4.24(c) sind beide Ketten für $U = 50$ mV atomar aufgelöst. Auch hier ist davon auszugehen, dass die CrO₂-Ketten den geringeren Kontrast aufweisen. Somit liegen auch die sichtbaren Defekte auf den Ketten und nicht in den Ir-Doppelreihen des Substrats. Entsprechend handelt es sich bei den Streifen mit niedriger Korrugation um die Auflösung der Cr-Atome mit einem Abstand von (262 ± 20) pm. Die Punkte auf den Streifen hoher Korrugation sind gegenüber den Cr-Atomen um einen halben Gittervektor verschoben. Nach dem bekannten Model der (3×1) Struktur für TMO-Ketten werden diese Punkte Ir-Paaren zwischen den Ketten zugewiesen. Diese verringern aufgrund der in Abb. 4.1(b) skizzierten Situation ihre Bindungslänge, was zu einer Erhöhung der lokalen Zustandsdichte in diesem Bereich führen könnte und die Beobachtung erklärt. Trotz der aufgelösten CrO₂-Ketten ist keine zusätzliche magnetische Korrugation auf der atomar aufgelösten Struktur zu erkennen. Sowohl die Messung für $U = 100$ mV in Abb. 4.24(b) sowie die atomare Auflösung in Abb. 4.24(c) zeigen damit für beide Streifentypen keinen magnetischen Kontrast. Deshalb wird eine AFM-Kopplung entlang der Ketten vergleichbar mit FeO₂ und MnO₂ für die CrO₂-Ketten ausgeschlossen. Außerdem kann eine chirale Struktur mit einer out-of-plane Komponenten durch die vergleichbare Korrugation identischer Streifen ausgeschlossen werden.

Im nächsten Schritt sollen die CrO₂-Ketten mit Hilfe einer in-plane Spitze untersucht werden. Dazu wird die präparierte Fe/W-Spitze in Abb. 4.24(d) auf der DL Fe/W(110) charakterisiert. In der Topographie sind für eine Bedeckung von 1,95 ML schmale Inseln der dritten ML auf der sonst großflächigen DL zu sehen. Das dI/dU -Signal zeigt auf der DL die für eine in-plane Polarisierung der Spitze typischen drei Kontrastlevel mit hellen und dunklen Streifen senkrecht zu den Versetzungslinien. Abbildung 4.24(e) zeigt einen größeren Ausschnitt der CrO₂-Ketten bei $U = 1$ V, der mit der charakterisierten in-plane Spitze aufgenommen ist. Dabei werden die Streifen aufgrund der Position der Defekte den CrO₂-Ketten zugeordnet, die aber keinerlei magnetische Korrugation bei dieser Spannung zeigen. Um dieses Resultat weiter zu festigen, ist in Abb. 4.24(f) die atomare Auflösung mit einer in-plane Spitze gezeigt. Wie für die out-of-plane Spitze ist bei einem Spannungswert von $U = 50$ mV der Streifen mit geringer Korrugation der CrO₂-Kette zuzuordnen, während die hellen Punkte vermutlich durch das Ir-Paar verursacht werden. Eine magnetische Korrugation ist allerdings auch für diese Messung nicht zu identifizieren. Damit ergeben sich für die magnetischen Messungen mit einer in-plane und einer out-of-plane Spitze für CrO₂-Ketten keine Hinweise auf magnetische Nanostrukturen. Dies schließt aber keinesfalls großflächige FM Domänen aus.

Zusammenfassend kann das Wachstum der CrO₂-Ketten auf Ir(001) durch die Streifenstruktur und die atomare Auflösung nachgewiesen werden. Im Vergleich zu den Systemen der bekannten

TMO-Ketten ist eine genaue Identifizierung aufgrund der Sensitivität auf Spannungsänderungen schwierig. Eine Zuordnung der zwei Streifentypen zu den CrO_2 -Ketten und den Ir-Paaren ist durch die Systematik von Defekten und der Analyse des topographischen Signals möglich. Die Untersuchungen mittels SP-STM zeigen keinen magnetischen Kontrast für beide, in-plane und out-of-plane polarisierte Spitzen. Dadurch können für die Datenspeicherung interessante magnetische Nanostrukturen für CrO_2 -Ketten nicht nachgewiesen werden, wobei eine großflächiger Magnetismus nicht ausgeschlossen ist.

5 Ketten aus Übergangsmetalloxiden auf Pt(001)

Im vorangegangenen Kapitel konnten durch SP-STM Messungen zwei magnetische Nanostrukturen auf dem Ir(001) Substrat identifiziert werden. Während die Kopplung entlang der Ketten von FeO₂ und MnO₂ AFM ist, konnte auch eine langreichweitige Wechselwirkung zwischen den Ketten gefunden werden. Die Ursache liegt in der indirekten RKKY-Wechselwirkung, die einerseits zu einer kollinearen und andererseits zu einer chiralen Kopplung zwischen den periodisch angeordneten Ketten führt.

Nach Kapitel 3 hängt die durch RKKY-Wechselwirkung vermittelte Kopplung zum einen vom Abstand der Ketten und zum anderen vom Fermivektor k_F des Substrats ab. Während eine Änderung des magnetischen Zustands für zwei Fe-Atome oder für Fe-Cluster auf Pt(111) in Abhängigkeit vom Abstand gezeigt werden konnte [7, 8], läuft der Wachstumsprozess der TMO-Ketten auf Ir(001) von selbst ab und führt zu einer regelmäßigen (3×1) Struktur. Eine Variation der RKKY-Wechselwirkung über den Abstand von Ketten ist somit nicht möglich.

Die zweite Möglichkeit zum Nachweis liegt in einer Änderung des Fermivektors durch die Wahl eines anderen Substrats. Für die TMO-Ketten bietet sich hier Pt(001) an, auf dem das Wachstum der CoO₂-Ketten bereits nachgewiesen ist und zudem eine ähnliche DM-Wechselwirkung zu erwarten ist [14]. Sind auch bei den TMO-Ketten auf Pt(001) Spinspiralen und eine großflächige Kopplung der Ketten zu beobachten, spricht dies für die RKKY-Wechselwirkung als Ursache. Durch die Veränderung des Fermivektors werden dabei die Energiebeiträge der durch die RKKY-Wechselwirkung vermittelten indirekten Austauschwechselwirkung und der indirekten DM-Wechselwirkung beeinflusst (vgl. Kapitel 3), weshalb die magnetischen Strukturen auf Pt(001) von denen auf Ir(001) abweichen können. Dabei ist es sehr wahrscheinlich, dass der zuvor kollineare Zustand der FeO₂-Ketten und die chirale Ordnung der MnO₂-Ketten aufgrund der Konkurrenz von symmetrischer Austauschwechselwirkung und DM-Wechselwirkung durch den veränderten Fermivektor beeinflusst werden. Dies soll im folgenden Kapitel in Analogie zum Ir(001) Substrat durch SP-STM Messungen untersucht werden. Dazu wird zunächst die Oberfläche von Pt(001) betrachtet, bevor das Wachstum und die magnetischen Eigenschaften der bekannten CoO₂-Ketten und den auf Pt(001) noch nicht nachgewiesenen FeO₂ und MnO₂-Ketten analysiert wird.

5.1 Aktueller Stand der Forschung

Neben der im Kapitel 4.2 diskutierten (5×1) Rekonstruktion der Ir(001) Oberfläche [86, 92] rekonstruieren auch Au(001) und Pt(001) auf ähnliche Weise [105–110]. Zeigt Ir(001) noch zwei Domänen, die sich in der Streifenorientierung unterscheiden, ist die Pt(001) Rekonstruktion komplexer. Dies liegt einerseits an der großen strukturellen Einheitszelle, die entweder eine Moiré-artige $c(26 \times 118)$ oder eine inkommensurable $c(26, 6 \times 118)$ Überstruktur ist [110]. Andererseits können Domänen mit verdrehter Streifenorientierung vorliegen, die sich in Abhängigkeit der Temperatur aus einer kleinen Rotation der hexagonalen Oberflächenschicht bezüglich des quadratischen Kristallgitters ergeben [110–113]. Einen weiteren Unterschied gegenüber Ir(001) stellt die Adsorption von Sauerstoff dar. Während bei Ir(001) eine (2×1) Rekonstruktion von Sauerstoff vorliegt, ist dies bei der Oberfläche von Pt(001) nicht der Fall [14, 114]. Die Pt(001) Rekonstruktion bleibt unter Erhitzung in einer Sauerstoffatmosphäre stabil.

Aus diesem Grund muss das $3d$ -Übergangsmetall bei einer Präparation der TMO-Ketten direkt auf die hexagonale Oberflächenrekonstruktion des Pt(001) Substrats aufgedampft werden. Damit fällt der erste Prozess der Umverteilung von Pt-Atomen weg. Entsprechend müssen ungefähr 50 % der Oberflächenatome während des Wachstumsprozesses der TMO-Ketten umverteilt werden, die durch die gleichzeitige Auflösung der Rekonstruktion und der Ausbildung der fehlenden Substratreihe nach dem Modell in Abb. 4.1 verdrängt werden [14]. In diesem Fall ist eine hohe Mobilität der Pt-Atome durch hohe Wachstumstemperaturen gefordert, um großflächig flache Terrassen mit TMO-Ketten zu beobachten. Allerdings ist die Bindungsenergie des Sauerstoffs auf Pt(001) gegenüber der Ir(001) Oberfläche geringer und die (3×1) Struktur deshalb bei höheren Temperaturen instabil [14]. Im konkreten Fall von CoO_2 -Ketten ist die maximale Heiztemperatur mit etwa 500°C ungefähr 200°C geringer als auf Ir(001) und führt zu kleinen strukturellen Domänen sowie Inseln auf der Oberfläche [14].

Auch die magnetischen Eigenschaften der CoO_2 -Ketten auf Pt(001) grenzen sich vom Ir(001) Substrat ab. Während auf Ir(001) nach DFT-Rechnungen eine FM-Kopplung vorhergesagt wird, ist diese auf Pt(001) AFM mit einer schwachen Wechselwirkung zwischen den Ketten [13, 14]. Für die FeO_2 und die MnO_2 -Ketten liegen hingegen weder magnetische noch strukturelle Daten vor, weshalb hier auch das Wachstum selbst nachgewiesen werden muss.

5.2 Die Pt(001)-Oberfläche

Bevor das Wachstum nach Ref. [14] reproduziert wird, möchte ich zunächst die Pt(001) Oberfläche vorstellen. Um eine möglichst hohe Oberflächenqualität zu erreichen, wird der Kristall unter mehreren Zyklen der Kathodenzerstäubung bei einer Energie von $1,5\text{ keV}$ und einen Sputterstrom von $5\ \mu\text{m}$ sowie Heizen auf $T = 900^\circ\text{C}$ gereinigt. Zur Reduzierung von Kohlenstoffver-

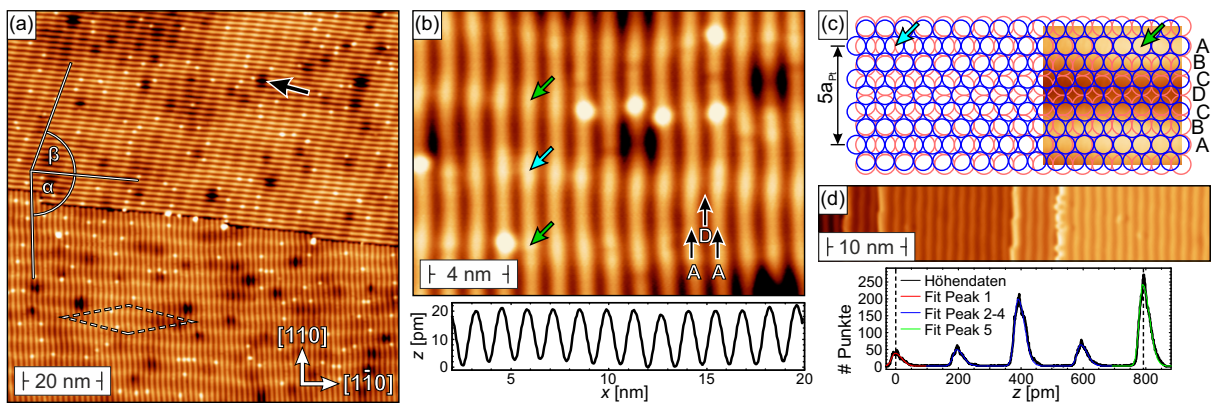


Abbildung 5.1 (a) Messung der Pt(001) Oberfläche mit Domänengrenze. Die Streifen der Rekonstruktion weisen einen Winkel α zueinander auf. Die $c(26 \times 118)$ Einheitszelle ist als gestrichelte Raute dargestellt. Die dunklen Punkte sind Defekte unterhalb der Oberfläche. Die hellen Defekte liegen auf den Streifen, wie in der Detailaufnahme (b) zu sehen ist. Das zugehörige Linienprofil zeigt den Abstand der Streifen von $5a_{\text{Pt}}$. (c) Strukturmodell der Oberflächenrekonstruktion nach Ref. [110] mit dem roten quadratischen Gitter des Pt(001) Kristalls und der blauen hexagonalen Oberflächenschicht. Bei A-Linien liegen Oberflächenatome direkt auf (grüner Pfeil) darunter liegenden Atomen oder dazwischen (blauer Pfeil). Oberflächenatome der D-Linien liegen hingegen in den Vertiefungen zwischen vier Atomen und Brückenpositionen. (d) Höhenanalyse an Pt(001) Stufenkanten. Scanparameter: $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$.

unreinigungen werden identisch zu Ir(001) die ersten Heizprozesse unter Sauerstoffatmosphäre durchgeführt.

Das Ergebnis der Präparation ist anhand der Übersichtsaufnahme mit zwei Domänen und einer Domänengrenze in Abb. 5.1(a) zu sehen. In der unteren Domäne verlaufen die Streifen in $[110]$ Richtung, während in der oberen Domäne eine deutliche Abweichung zu der $[\bar{1}10]$ Orientierung zu erkennen ist. Daraus resultiert ein Winkel $\alpha \approx 84^\circ$ zwischen den Streifen der beiden Domänen. Darüber hinaus sind dunkle und helle Defekte auf der Probe zu sehen. Die dunklen Defekte erinnern an die Ir(001) Oberfläche und werden in Analogie tiefer liegenden Kristalldefekten zugeordnet. Die hellen Defekte sind $(30 - 50) \text{ pm}$ hoch und befinden sich auf den Streifen der Rekonstruktion. Wahrscheinlich handelt es sich dabei um Defekte in der hexagonalen Oberflächenschicht.

Der Abstand der beobachteten Streifen wird durch die höhere Auflösung und dem Linienprofil in Abb. 5.1(b) zu $(1,37 \pm 0,15) \text{ nm}$ bei einer Korrugation von $(19 \pm 2) \text{ pm}$ bestimmt und ist in beiden Domänen gleich. Bei einem Pt(001) Gittervektor von $a_{\text{Pt}} = 277 \text{ pm}$ [114] entspricht die Periode $5a_{\text{Pt}}$ und ist typisch für die Rekonstruktionen der $5d$ (001) Metalloberflächen von Ir, Au und Pt [105–107, 109, 110]. Ein Modell für die Pt(001) Rekonstruktion ist in Abb. 5.1(c) skizziert [110]. Wie bei der Ir (5×1) Rekonstruktion ist auch hier der Grund für die Streifen ein Moiré zwischen dem kubischen Gitter des Substrats (rot) und der hexagonalen Oberflächenschicht (blau). Durch die höhere Dichte der hexagonalen Schicht passen auf fünf Atomreihen des Substrats sechs Reihen der hexagonalen Schicht. Dies führt zu sich periodisch wiederholenden Adsorptionsplätzen im Abstand von $5a_{\text{Pt}}$.

In Reihe A liegen die Atome der obersten Schicht zunächst auf Atomen des quadratischen Gitters (A_{top} -Position, grüner Pfeil). Entlang der Reihe A ändert sich durch den geringeren Atomabstand der Adsorptionsplatz von rechts nach links zu einer Brückenposition (blauer Pfeil) und danach wieder zu der A_{top} -Position. Aus der Reduzierung des Atomabstands folgt für die Atome der benachbarten Reihe B ebenfalls eine Verschiebung gegenüber der darunter liegenden Atomreihe in senkrechter Richtung. Aufgrund der hexagonalen Anordnung der Atome ist zusätzlich die Abfolge des Adsorptionsplatzes von rechts nach links verschieden. Im vorliegenden Fall sind die Atome der Reihe B rechts in einer Brückenposition und verschieben nach links in eine nahezu A_{top} -Positionen. Damit liegen an der Stelle von A_{top} -Positionen (Brückenpositionen) der Reihe A Brückenpositionen (A_{top} -Positionen) der Reihe B vor. Über Reihe C verschiebt sich der Adsorptionsplatz weiter und die Atome der Reihe D befinden sich entweder in vertikalen Brückenpositionen oder innerhalb der Lücke zwischen vier darunter liegenden Atomen.

Als Resultat der verschiedenen Adsorptionsplätze erhält man die hellen Streifen an A_{top} -Positionen der Reihe A und B, an denen die Atome am weitesten aus der Oberflächenebenen herausstehen. Im Gegensatz dazu sinken die Atome der Reihe D durch die Lücke tiefer ein und es wird ein niedriger Kontrast in der Topographie beobachtet. Dies führt zu der Beobachtung der Streifenstruktur mit der Periode von $5a_{\text{Pt}}$. Durch die zusätzliche Verschiebung der Position entlang der Streifen kommt es zu einer Modulation, die als helle und dunkle Teilstücke registriert werden. Die hellen Teilstücke können entsprechend den grünen und blauen Pfeilen in den Abbildungen 5.1(b) & (c) abwechselnd A_{top} -Positionen der Reihe A und B zugeordnet werden. Somit führt die Veränderung des Adsorptionsplatzes innerhalb der Streifen zu einer Modulationslinie senkrecht zu den Streifen und ist auch für die untere Domäne in Abb. 5.1(a) zu sehen, wobei durch eine genauere Strukturanalyse die durch ein gestricheltes Parallelogramm dargestellte (26×118) Einheitszelle folgt [110].

Die Situation ändert sich unter einer Rotation der hexagonalen Oberflächenschicht bezüglich des quadratischen Substratgitters. Neben der nicht orthogonalen Streifenorientierung der Domänen in Abb. 5.1(a) ist auch der Winkel $\beta = 75^\circ$ zwischen Streifen und Modulationslinien ein deutlicher Hinweis auf eine vorliegende Rotation, die nach Ref. [111] für Heiztemperaturen von $T \geq 850^\circ\text{C}$ zu beobachten sind. Da die verwendete Temperatur während der Präparation bei $T = 900^\circ\text{C}$ lag und die Abweichung der Streifen vom orthogonalen Fall mit 6° im Bereich von 8° aus Ref. [113] liegt, kann die obere Domäne einer verdrehten hexagonalen Deckschicht zugeschrieben werden. Um die strukturelle Beschreibung der Pt(001) Oberfläche abzuschließen, wird als letzter Schritt in Abb. 5.1(d) die Stufenhöhe des Substrats ermittelt. Dazu dienen eine Aufnahme über fünf verschiedene Terrassen und die dazugehörige Auswertung der Höhendaten. Dabei ist die asymmetrische Form der Peaks auf die Spitzengeometrie zurückzuführen und hat keinen Einfluss auf die Bestimmung der Stufenhöhe. Diese wird über den Abstand der Peaks

zu (203 ± 15) pm bestimmt und ist in guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert von 196 pm [114].

5.3 Wachstum der TMO-Ketten auf Pt(001)

In diesen Abschnitt soll analog zu den TMO-Ketten auf Ir(001) zunächst das Wachstum überprüft werden. Nach der atomaren Auflösung der Ketten mit einer W-Spitze folgen spinaufgelöste Messungen zur Bestimmung der magnetischen Struktur. Neben den in Ref. [14] diskutiertem Wachstum von CoO_2 -Ketten, sollen auch FeO_2 und MnO_2 -Ketten untersucht werden. Aufgrund der Stabilität der Pt(001) Oberfläche gegenüber Oxidation [14, 114] besteht der Standardprozess aus dem Aufdampfen einer Drittel ML des $3d$ -Übergangsmetalls auf die rekonstruierte Oberfläche mit folgendem Heizen von 3 min bei den jeweils angegebenen Temperaturen und einem Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_x} \approx 1 \times 10^{-7}$ mbar. Wie für das Wachstum der TMO-Ketten auf Ir(001) wird die Heizleistung abschließend unter Sauerstofffluss innerhalb von 1 min abgestellt.

5.3.1 CoO_2 -Ketten

Wie im Abschnitt 5.1 beschrieben, ist das Wachstum von CoO_2 -Ketten auf Pt(001) nach Ref. [14] nachgewiesen und folgt einer zur Ir(001) ähnlichen Präparation. Des Weiteren liegt mit der AFM-Kopplung entlang der Ketten nach DFT-Rechnungen ein magnetisches Modell vor [13, 14], weshalb die Betrachtung hier mit CoO_2 -Ketten auf Pt(001) begonnen wird.

Da sich der erste Schritt des direkten Aufdampfens auf die rekonstruierte Pt(001) Oberfläche von der Präparation der TMO-Ketten auf Ir(001) unterscheidet und zudem eine Bestimmung der Verdampfungsrate durch die beobachtete Bedeckung möglich ist, wird zuerst das Wachstum der Submonolage untersucht. In Abb. 5.2 sind dazu die Messungen nach dem Aufdampfen der Submonolagen sowie die Präparation der (3×1) Phase bei warmen (a) & (b) und kalten (c)–(f) Substrattemperaturen gezeigt. Die Co/Pt(001) Oberfläche nach dem Wachstum auf das warme Substrat ($T > T_{\text{Raum}}$) in Abb. 5.2(a) weist eine Bedeckung von 0,24 ML mit einer isotropen Verteilung von kompakten, (163 ± 15) pm hohen Inseln auf. Diese werden durch eine ausreichende Mobilität der adsorbierten Co-Atome ermöglicht, wodurch nur wenige Co-Atome zwischen den Inseln auf der bekannten Pt(001) Rekonstruktion verbleiben. Bei genauerer Betrachtung der Inseloberflächen ist auch hier eine Streifenstruktur zu erkennen. Dabei verlaufen die hellen Streifen in den Vertiefungen der Pt-Rekonstruktion. Während dies für eine geordnete innere Struktur der Inseln spricht, kann auch die längliche Ausdehnung der Inseln durch eine bevorzugte Diffusion der Co-Atome entlang der Pt-Rekonstruktion in die $[1\bar{1}0]$ Richtung erklärt werden.

Nach dem Heizen der warm präparierten Co/Pt(001) Oberflächen auf $T = 650 - 700$ °C unter Sauerstofffluss wird ausschließlich eine Oberfläche wie in Abb. 5.2(b) beobachtet. Im Wesentli-

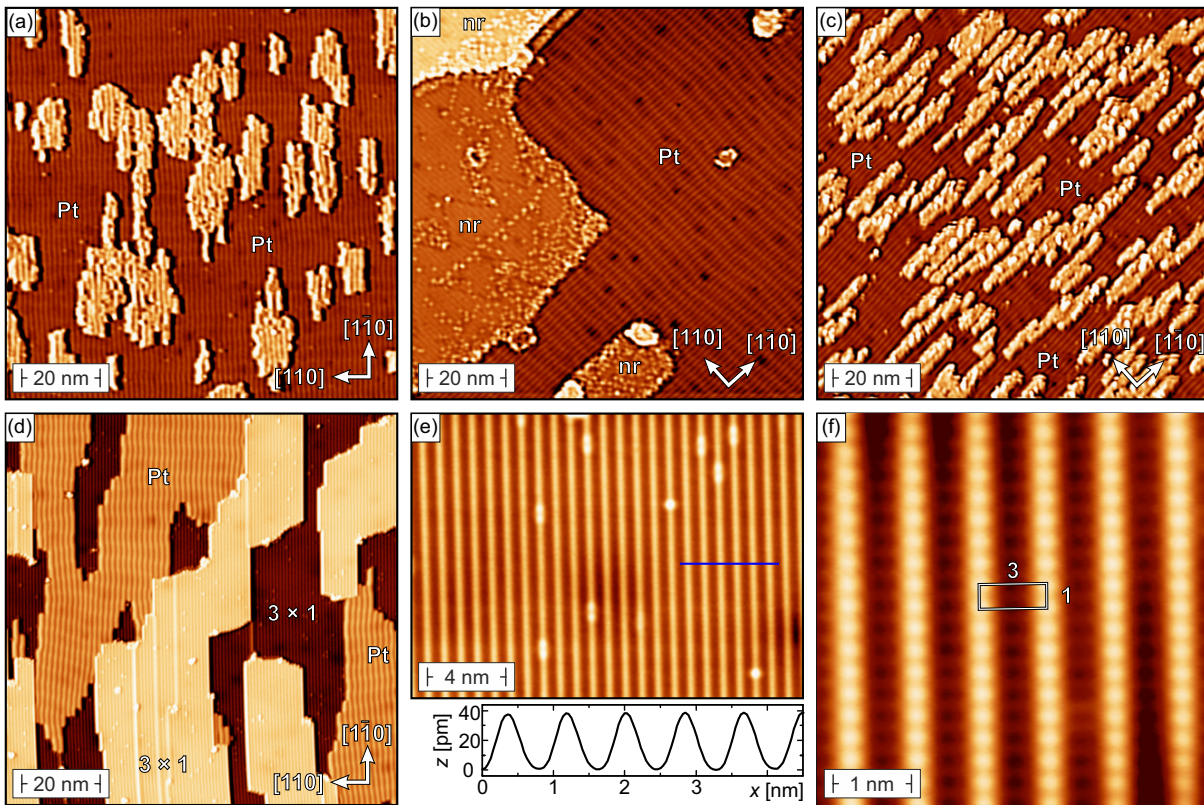


Abbildung 5.2 Wachstum von CoO_2 -Ketten auf $\text{Pt}(001)$. (a) Topographie von $\text{Co}/\text{Pt}(001)$ beim Aufdampfen auf die warme $\text{Pt}(001)$ Oberfläche. (b) Nach dem Heizen der Probe (a) in Sauerstoff wird keine (3×1) Struktur beobachtet. (c) Nach dem Aufdampfen auf das kalte Substrat sind die Co -Inseln ungeordnet. (d) Heizen der Probe (c) in Sauerstoff führt zu (3×1) Domänen. (e) Höhere Auflösung mit Linienprofil und (f) atomare Auflösung der CoO_2 -Ketten. Scanparameter: (a) – (d) $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$; (e) $U = -100 \text{ mV}$, $I = 1, 5 \text{ nA}$; (f) $U = 50 \text{ mV}$, $I = 5 \text{ nA}$.

chen sind hier zwei Regionen voneinander zu unterscheiden. Bei der ersten Region handelt es sich um die $\text{Pt}(001)$ Rekonstruktion, die im Gegensatz zu $\text{Ir}(001)$ auch nach dem Heizen im Sauerstoff zu beobachten ist. Während diese Beobachtung in Übereinstimmung mit der Literatur ist [14, 114], werden anstelle der (3×1) Struktur Regionen mit nicht rekonstruierter (nr) Oberfläche festgestellt. Zwar sind darauf teilweise Streifen mit schwacher Korrugation zu erkennen, mit einer Periode von $(1, 26 \pm 15) \text{ nm}$ liegen diese aber im Bereich von $5a_{\text{Pt}} = 1, 39 \text{ nm}$ der Pt -Rekonstruktion. Da auch die Stufenhöhe mit $(90 \pm 8) \text{ pm}$ um mehr als die Hälfte unterhalb der Pt -Stufenkante aus dem vorherigen Kapitel liegt, vermute ich hier eine Legierung von Co und Pt . Die Ausbildung einer CoO -Schicht vergleichbar mit der Präparation bei Überdosierung von Co auf $\text{Ir}(001)$ ist dabei unwahrscheinlich, da dies eine dichtere Co Bedeckung als die ermittelten $0,24 \text{ ML}$ voraussetzt.

Bei den folgenden Präparationen der Submonolage Co auf $\text{Pt}(001)$ wird das Substrat im STM auf eine Temperatur von $T \approx 5,5 \text{ K}$ abgekühlt, bevor es zurück in die Präparationskammer transferiert und mit Co bedampft wird. Die hierdurch resultierende Topographie von Co unter-

scheidet sich dabei von dem Aufdampfen bei erhöhten Substrattemperaturen. Zum einen sind die Inseln in Abb. 5.2(c) kleiner und zum anderen sind keine geordneten Streifen auf den Inseln zu sehen. Für eine geringere Mobilität während des Wachstums spricht auch die Existenz von Co-Clustern auf den lang gezogenen Inseln. Insgesamt erscheint die Oberfläche damit weniger geordnet als die Co/Pt(001) Oberfläche nach dem Aufdampfen auf das warme Substrat aus Abb. 5.2(a).

Das Ergebnis der Oxidation der kalt präparierten Probe ist in Abb. 5.2(d) gezeigt. Im Vergleich zur Oxidation der warm präparierten Co/Pt(001) Probe liegen Streifenstrukturen vor. Der beschriebene Unterschied bei der Präparation der Co/Pt(001) Probe hat signifikante Auswirkungen auf das Ergebnis der nachfolgenden Oxidation. Während nach der Oxidation der warm präparierten Probe in Abb. 5.2(b) nicht rekonstruierte Bereiche und die Pt(001) Oberfläche zu sehen sind, wird bei der kalt präparierten Probe in Abb. 5.2(d) eine zusätzliche Streifenstruktur beobachtet. Die Pt-Rekonstruktion mit ihrer Periode von $(1,37 \pm 0,15)$ nm teilt dabei die Stufenhöhe von (199 ± 10) pm zwischen der unteren und der oberen Terrasse mit Streifenstruktur im Verhältnis 2 : 1. Damit erscheint die obere Terrasse (68 ± 7) pm höher als die Pt-Rekonstruktion. Dieses Verhältnis für $U = 1$ V ändert sich in Abhängigkeit der Tunnelspannung und wird auf die unterschiedliche Leitfähigkeit der Oberflächen mit Streifenstruktur und Pt(001) Rekonstruktion zurückgeführt. Die Domänen der Streifenstruktur besitzen auf der unteren und oberen Ebenen eine maximale Größe von bis zu (20×20) nm² und werden von hell erscheinenden Liniendefekten getrennt. Nach Abb. 5.2(e) ist die Periode der Streifen (830 ± 20) pm und entspricht den für CoO₂-Ketten erwarteten $3a_{\text{Pt}} = 833$ pm. Zusätzlich bestätigen die für TMO-Ketten typischen Defekte auf den Ketten und ein Atomabstand von (278 ± 15) pm aus Abb. 5.2(f) die (3×1) Struktur von CoO₂-Ketten.

Bei der Gegenüberstellung des Wachstums der TMO-Ketten auf Ir(001) und Pt(001) ergeben sich aus den Messungen zwei grundlegende Unterschiede. Dazu gehört das Verhalten des Pt(001) Substrats, dessen Rekonstruktion auch nach dem Heizen im Sauerstoff zu beobachten ist. Der wichtigere Punkt betrifft aber die Ausbildung der (3×1) Domänen. Während auf Ir(001) flache Terrassen mit ausgedehnten Domänen durch ausreichend hohe Temperaturen erreicht werden können, ist dies auf Pt(001) nicht möglich. So zeichnet sich die in Abb. 5.2(d) gezeigte Topographie durch verschiedene Ebenen von Pt-Rekonstruktion und TMO-Ketten aus. Zwar gelingt es, die (3×1) Struktur großflächig zu präparieren, dennoch ist die Temperatur für die Ausbildung großer Domänen und flacher Terrassen mit TMO-Ketten nicht ausreichend. Da sich bei niedrigen Temperaturen ($T < 650$ °C) die Ketten nicht ausbilden und bei zu hohen Temperaturen ($T > 700$ °C) die TMO-Ketten durch Desorption von Sauerstoff zerstört werden, existiert nur ein sehr kleines Temperaturfenster, in dem die Rekonstruktion stabil ist.

Nach der Diskussion des Wachstums von CoO₂-Ketten und der Bestätigung der Struktur nach

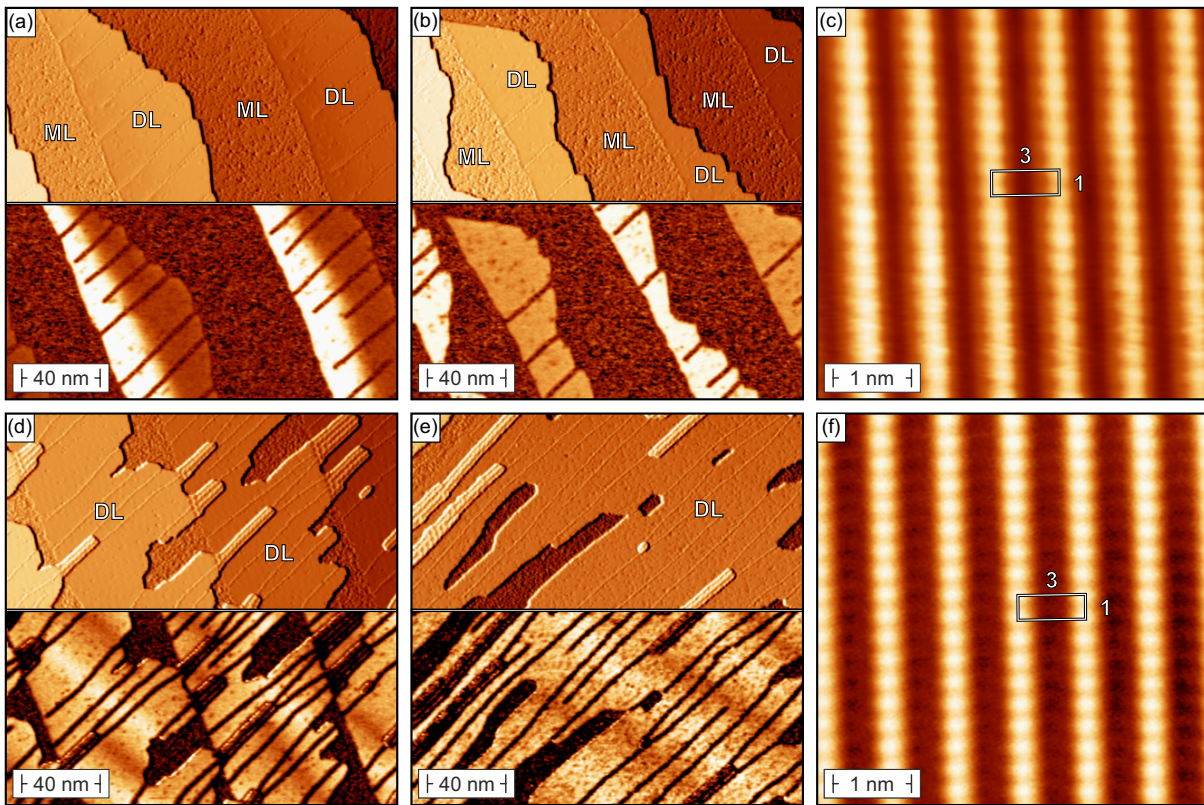


Abbildung 5.3 Magnetische Messungen von CoO_2 -Ketten auf Pt(001). (a) Topographie und dI/dU -Signal der DL Fe/W(110) vor und (b) nach der Messung mit einer out-of-plane Spitze auf den CoO_2 -Ketten in (c). (d) und (e) Messungen mit der verwendeten in-plane Spitze vor und nach der Messung der Ketten in (f). Für beide Polarisationsrichtungen liegen keine magnetischen Nanostrukturen vor. Scanparameter: (a), (b) & (d), (e), $U = 700 \text{ mV}$, $I = 500 \text{ pA}$; (c) $U = 10 \text{ mV}$, $I = 3 \text{ nA}$; (f) $U = 10 \text{ mV}$, $I = 1 \text{ nA}$.

Ref. [14] soll nun überprüft werden, ob CoO_2 -Ketten wie mittels DFT-Rechnungen vorhergesagt AFM koppeln. Dazu dienen die SP-STM Messungen in Abb. 5.3, wobei das Vorgehen analog zu den magnetischen Untersuchungen der TMO-Ketten auf Ir(001) ist. Entsprechend dienen die Topographien und die dI/dU -Karten der Vormessung in Abb. 5.3(a) und der Kontrollmessung in (b) zur Charakterisierung der Cr/W-Spitze auf der Referenzprobe Fe/W(110). In beiden Messungen befinden sich Streifen der DL mit den bekannten Versetzungslinien an den Stufenkanten. Während in Abb. 5.3(a) auf den beiden Streifen der DL ein Kontrastwechsel an einer Domänenwand in der dI/dU -Karte zu erkennen ist, alterniert der Kontrast in Abb. 5.3(b) zwischen den einzelnen Streifen. Trotz des typischen out-of-plane Kontrasts in beiden Messungen lässt sich aus dem in Abb. 5.3(b) im Verhältnis zu Abb. 5.3(a) geringeren gemessenen dI/dU -Signal folgern, dass ein Spitzenwechsel stattgefunden hat. Allerdings zeigen beide Datensätze dennoch einen ausgeprägten out-of-plane Kontrast, so dass eine out-of-plane Magnetisierung der Spitze zwischen der Vor- und Kontrollmessung anzunehmen ist. Die direkt vor der Kontrollmessung aufgenommene atomare Auflösung der CoO_2 -Ketten in Abb. 5.3(c) zeigt keinen Hinweis auf einen

magnetischen Kontrast. Somit kann für eine out-of-plane polarisierte Spitze kein AFM-Kontrast der CoO₂-Ketten nachgewiesen werden.

Die Topographien und die dI/dU -Karten in den Abbildungen 5.3(d) & (e) sind mit einer Fe/W-Spitze aufgenommen. Während auf der Oberfläche in beiden Messungen lange kleine Inseln der dritten ML beobachtet werden, sind in den entsprechenden dI/dU -Karten helle und dunkle Linien zu sehen. Damit ist der typische dreistufige Kontrast für die Vormessung in Abb. 5.3(e) eindeutig einer in-plane Polarisierung zuzuordnen. Im Vergleich dazu ist der Kontrast der Kontrollmessung deutlich geringer, was erneut für eine Änderung der Polarisierung spricht. Aber auch in diesem Fall verlaufen die dunklen und hellen Streifen entlang von Domänenwänden, was durch eine Messung bei $U = 50$ mV unter Ausnutzung des TMAR-Effekts bestätigt wird (nicht gezeigt). Zusätzlich kann über einen Fit der Domänenwände nach Gleichung 3.16 eine in-plane Komponente bestätigt werden, wobei der Polarisationsvektor der Spitze ungefähr 20° gegen die Probenebene geneigt ist. Die mit dieser in-plane Spitze aufgenommene atomare Auflösung in Abb. 5.3(f) zeigt eine typische atomare Korrugation ähnlich zu der nicht magnetischen Messung aus Abb. 5.2(f). Da auch Übersichtsaufnahmen über strukturelle Domänengrenzen bei verschiedenen Spannungen keine Kontrastunterschiede in den dI/dU -Karten liefern, gibt es keinen Hinweis auf eine in-plane Polarisierung der Probe.

Zusammengefasst kann das strukturelle Wachstum der CoO₂-Ketten auf Pt(001) nach Ref. [14] bestätigt werden, wobei die Existenz der (3×1) Struktur von der Substrattemperatur während des Aufbringens von Co abhängt. Eine AFM-Ordnung, wie sie durch DFT-Rechnungen vorhergesagt wird [13, 14], kann mittels SP-STM für die CoO₂-Ketten auf Pt(001) nicht festgestellt werden. Auch magnetische Nanostrukturen sind, identisch zu CoO₂-Ketten auf Ir(001), durch die atomare Auflösung für beide Polarisationsrichtungen auszuschließen.

5.3.2 FeO₂-Ketten

Durch die Untersuchung von Co/Pt(001) ist bekannt, dass das Wachstum der Übergangsmetalle auf Pt(001) von der Substrattemperatur während des Aufdampfens abhängen kann. Da dieses Wachstum für Co/Pt(001) einen Einfluss auf die Existenz der (3×1) Struktur der TMO-Ketten hat, werden auch für Eisen verschiedene Temperaturen getestet und die Ergebnisse der Fe/Pt(001) Oberfläche in Abb. 5.4 dargestellt.

Die Übersichtsaufnahme in den Abb. 5.4(a) zeigt die Fe/Pt(001) Oberfläche nach dem Verdampfen von Fe bei Raumtemperatur. Dabei bilden sich kleine kompakte Inseln, die isotrop verteilt sind und deren größere laterale Ausdehnung vorzugsweise in die [110] Richtung liegt. Die Inseln sind (189 ± 10) pm hoch und zeigen nur vereinzelt den Ansatz einer zweiten Fe Lage. Aus der höheren Auflösung der Aufnahme 5.4(b) erkennt man sowohl zwischen als auch auf den Inseln Streifen mit einer Periode von $5a_{\text{Pt}}$. Während zwischen den Inseln von der regulären Rekon-

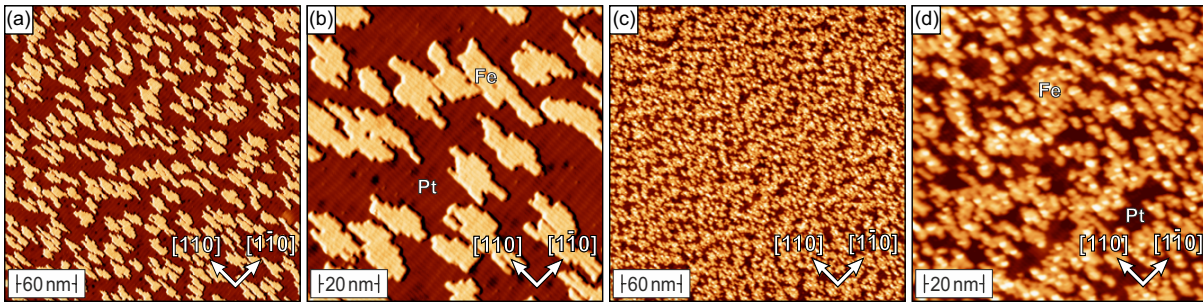


Abbildung 5.4 Topographie von Fe/Pt(001) nach dem Verdampfen bei Raumtemperatur (a) & (b) und nach dem Abkühlen im STM und anschließenden Aufdampfen in der Präparationskammer (c) & (d). Im Gegensatz zur Präparation bei Raumtemperatur mit kompakten Fe-Inseln ist das Fe aufgrund der geringeren Mobilität bei kalten Temperaturen ungeordnet. Scanparameter: $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$.

struktion von Pt(001) ausgegangen werden kann, sind die dazu parallel verlaufenden Streifen auf den Inseln ein Indiz für eine Ordnung der Fe-Atome. Dabei fallen die Streifen der Inseln mit den Tälern der Pt(001) Oberfläche zusammen, was für eine Positionierung der Fe-Atome in den Mulden der Rekonstruktion spricht. Ein weiterer Hinweis darauf ist auch die Ausdehnung der Inseln in die $[110]$ Richtung, die wie im Fall von Co auf eine bevorzugte Bewegung der adsorbierten Fe-Atome entlang der Rekonstruktionsstreifen zurückgeführt werden kann. Damit ist das Wachstum mit biatomaren Fe-Ketten auf der rekonstruierten Ir(001) Oberfläche vergleichbar, bei denen sich ebenfalls isolierte Ketten aus Fe-Doppelreihen zwischen den Streifen der Rekonstruktion befinden [90, 115].

Zur Überprüfung des Wachstums auf kalte Pt(001) Oberflächen wird der saubere Kristall im STM auf eine Temperatur von $T \approx 5,5 \text{ K}$ abgekühlt. Danach erfolgt ein schneller Transfer zurück in die Präparationskammer und das Aufdampfen des Eisens. Beim Vergleich der Topographien aus den Abbildungen 5.4(c) & (d) mit dem zuvor diskutierten Wachstum bei Raumtemperatur ist ein deutlicher Unterschied zu erkennen. So bilden sich bei dieser Präparation keine Inseln und das Eisen ist wesentlich gleichmäßiger auf der Oberfläche verteilt, wobei eine Korrugation von $(160 \pm 15) \text{ pm}$ für eine einfache Bedeckung und eine Korrugation von $(320 \pm 20) \text{ pm}$ für 2 ML in Abb. 5.4(d) festzustellen ist. Trotz dieser ungeordneten Phase ist auch in diesem Fall die Pt(001) Rekonstruktion zwischen den adsorbierten Fe-Atomen zu sehen und vervollständigt die Analogie zur Co/Pt(001) Oberfläche. Nachdem bei den Co/Pt(001) Proben das Wachstum der Submonolage einen Einfluss auf die Existenz der (3×1) Struktur hat und der Unterschied der Submonolage bei Fe deutlicher ausfällt, wird im Folgenden die Oxidation der Fe/Pt(001) Proben untersucht.

Dazu wird zunächst die Oxidation bei Raumtemperatur gewachsener Fe/Pt(001) Proben unter einen Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_x} \approx 1 \times 10^{-7} \text{ mbar}$ bei verschiedenen Temperaturen analysiert. Die Topographie in Abb. 5.5(a) nach der Oxidation bei $T = 480^\circ \text{C}$ zeigt in Übereinstimmung zur Oxidation der warm präparierten Co/Pt(001) Probe keine (3×1) Phase. Vielmehr sind kleine,

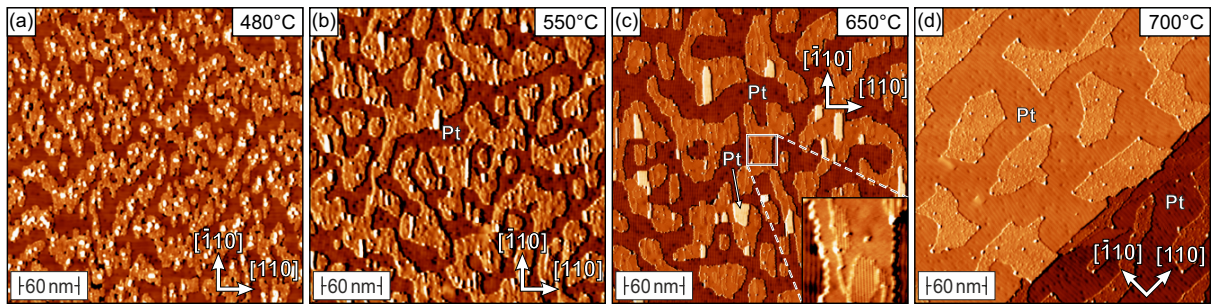


Abbildung 5.5 Übersichtsaufnahmen nach dem Heizprozess des bei Raumtemperatur gewachsenen Eisens unter Sauerstoffatmosphäre bei (a) 480 °C, (b) 550 °C, (c) 650 °C und (d) 700 °C. Scanparameter: $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$.

miteinander verbundene Inseln zu sehen, die im Gegensatz zu den Fe-Inseln auf Pt(001) keine Vorzugsrichtung besitzen. Die strukturelle Veränderung der Inseln gegenüber Fe/Pt(001) ist zusätzlich durch die Abwesenheit der Streifen sowie einer reduzierten Stufenhöhe von 60 – 90 pm zu erkennen. Dies entspricht dem vom Co bekannten Szenario, wobei auch hier eine Legierungsbildung nicht ausgeschlossen werden kann [116, 117]. Dafür sprechen auch die Rauigkeit der Inseloberflächen und die Bildung von zusätzlichen Clustern mit einer Höhe von bis zu 250 pm, die möglicherweise aus überschüssigen Pt-Atomen gebildet werden. Fe-Atome werden als Ursache hingegen ausgeschlossen, da die Inseln der bei Raumtemperatur präparierten Fe/Pt(001) Probe keine Fe-Cluster auf den Inseln besitzen.

Während auch eine Erhöhung der Temperatur auf $T = 550 \text{ °C}$ in Abb. 5.5(b) keine Hinweise auf die gesuchte (3×1) Struktur von FeO_2 -Ketten gibt, steigt die durchschnittliche Inselgröße im Vergleich zu $T = 480 \text{ °C}$ an. Weitgehend unverändert bleibt die Stufenhöhe mit 40 – 70 pm und die Rauigkeit auf den Inseln. Zusätzlich bilden sich anstelle der Cluster bei dieser Temperatur längliche Inseln, die eine Höhe bezüglich der Pt(001) Oberfläche von etwa 200 pm aufweisen. Bei einer Temperatur von $T = 650 \text{ °C}$ in Abb. 5.5(c) setzt sich das beobachtete Muster fort. Anstatt miteinander verbunden zu sein, existieren zunehmend einzelne kompakte Inseln mit einer Inselhöhe von ungefähr 70 pm. Auf diesen Inseln sind analog zu niedrigen Temperaturen höhere Inseln zu sehen, die hier wie in Abb. 5.5(a) für $T = 480 \text{ °C}$ eine Fläche von 5% einnehmen. Mit einer Höhe von $(194 \pm 15) \text{ pm}$, bezogen auf das sichtbare Pt(001) Substrat, liegen diese im Bereich der Pt-Stufenhöhe und werden deshalb Pt-Inseln zugeordnet. Aus diesem Grund kann davon ausgegangen werden, dass es sich auch bei den Clustern aus den Abbildungen 5.5(a) & (b) um Pt handelt, das erst bei höheren Temperaturen und damit ausreichender Mobilität kompaktere Inseln bildet. Dabei liegt die Vermutung nahe, dass das Pt aus dem Bereich der niedrigen Inseln unter Bildung einer Fe-Pt Phase verdrängt wird.

Im Gegensatz zu niedrigen Temperaturen können für $T = 650 \text{ °C}$ aber auch kleine Regionen mit Streifenstruktur auf den Inseln beobachtet werden. Einer dieser Bereiche ist im rechten unteren Eck in höherer Auflösung dargestellt. Die Periode dieser Streifen liegt mit $(839 \pm 40) \text{ pm}$

im Bereich der für TMO-Ketten zu erwartenden Distanz von $3a_{\text{Pt}}$, wohingegen eine schwache Korrugation entlang der Streifen mit einer Periode von (555 ± 25) pm einen Abstand von $2a_{\text{Pt}}$ entspricht. Im Gegensatz dazu sind bei einer Temperatur von $T = 700^\circ\text{C}$ in Abb. 5.5(d) keine Streifenstrukturen auf den jetzt großen und voneinander getrennten Inseln zu erkennen. Die Ursache könnte eine geringe Stabilität dieser Struktur gegenüber hohen Temperaturen sein, wodurch die Beobachtung der Streifenstruktur ähnlich zu den CoO_2 -Ketten auf Pt(001) nur innerhalb eines schmalen Temperaturbereichs um $T = 650^\circ\text{C}$ möglich ist. Des Weiteren fällt bei $T = 700^\circ\text{C}$ das Fehlen der Pt-Inseln auf, was an der Rekombination der Pt-Atome an der benachbarten Stufenkante des Substrats liegen könnte.

Als Ergebnis für die Oxidation der bei Raumtemperatur gewachsenen Fe/Pt(001) Probe liegt für den Temperaturbereich von $T = 480 - 700^\circ\text{C}$ keine geordnete und großflächige (3×1) Struktur vor. Zwar sind bei $T = 650^\circ\text{C}$ kleine Domänen mit einer periodischen Anordnung von Streifen mit einem Abstand von $3a_{\text{Pt}}$ zu sehen, diese sind aber nur in einen kleinen Temperaturbereich stabil. Darüber hinaus weist die geänderte Stufenhöhe im Vergleich zu Fe/Pt(001) sowie der Materialtransport von Pt auf eine Legierungsbildung hin, die auch für die entsprechende Oxidation der warm präparierten Submonolage Co/Pt(001) vermutet wird.

Um eine Legierungsbildung zu vermeiden, kann Fe auf die kalte Pt(001) Oberfläche aufgedampft und im Anschluss oxidiert werden. Dazu wird analog zu vorher der Heizprozess für 3 min unter einem Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_x} \approx 1 \times 10^{-7}$ mbar bei verschiedenen Temperaturen durchgeführt. Die Ergebnisse für eine Temperatur von $T = 600^\circ\text{C}$ sind für eine nicht magnetische Spitze in Abb. 5.6 gezeigt. Die Inseln nehmen im Übersichtsscan aus Abb. 5.6(a) eine Fläche von 60% ein und können auf die Pt-Atome zurückgeführt werden, die während des Wachstumsprozesses der TMO-Ketten aus der obersten Lage des Substrats verdrängt werden. Auch die Stufenkanten besitzen mit der $[\bar{1}10]$ und der $[110]$ Richtung gegenüber der oxidierten warm gewachsenen Fe/Pt(001) Probe klare Vorzugsrichtungen. Die Stufenhöhe lässt sich zu (199 ± 15) pm bestimmen und liegt im Bereich der Stufenhöhe des Pt(001) Substrats. Auch die Rauigkeit der Inseloberflächen ist, abgesehen von einzelnen Liniendefekten, deutlich reduziert.

Im Vergleich zur Oxidation der bei Raumtemperatur aufgebrachten Submonolage Fe/Pt(001) liegen somit wesentliche Unterschiede vor. Die Form der Inseln, deren Stufenkanten und die reduzierte Rauigkeit zeigen Übereinstimmungen mit der im vorherigen Abschnitt diskutierten Oberfläche der CoO_2 -Ketten. Dass tatsächlich eine geordnete Phase vorliegt, ist in Abb. 5.6(b) in einer höher aufgelösten Aufnahme zu erkennen. Sowohl auf den Inseln als auch auf der unteren Terrasse liegen Domänen mit zwei verschiedenen Streifenorientierungen in die $[\bar{1}10]$ und $[110]$ Richtung vor. Die innere Struktur der Streifen ist aus der Detailaufnahme in Abb. 5.6(c) ersichtlich. Die Distanz zwischen zwei Streifen wird durch das Linienprofil in Abb. 5.6(d) an der Position der blauen Linie in (c) ermittelt. Mit (844 ± 40) pm bei einer Korrugation von

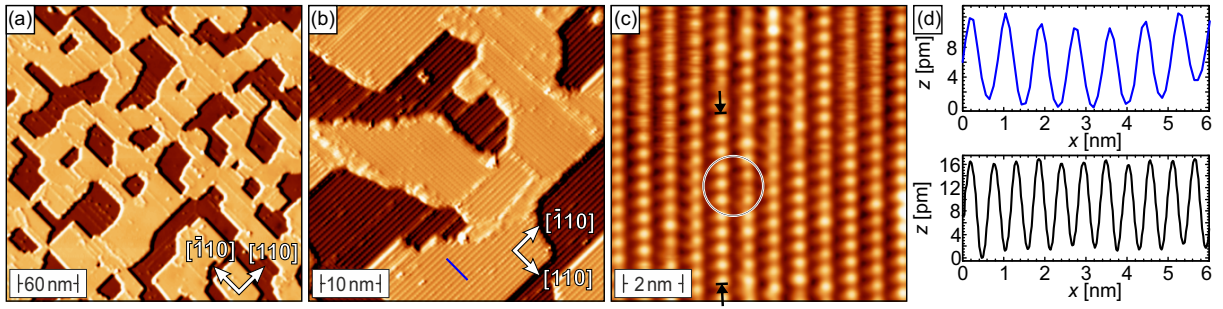


Abbildung 5.6 Übersichtsaufnahmen (a) und höher aufgelöste Messung (b) nach der Oxidation der bei kalten Temperaturen gewachsenen Fe/Pt(001) Probe. Die Detailaufnahme (c) zeigt die innere Struktur der Streifen. (d) Linienprofile senkrecht zu der Streifenstruktur (oben) an der Stelle der blauen Linie in (b) und entlang der Streifen (unten) zwischen den Pfeilen in (c). Scanparameter: (a), (b), $U = 1$ V, $I = 300$ pA; (c), $U = 100$ mV, $I = 1$ nA.

$(10,6 \pm 0,6)$ pm liegt der Abstand im Bereich von $3a_{\text{Pt}}$. Während dieser Abstand und die zuvor erfolgte Strukturanalyse somit durchaus für eine strukturelle (3×1) TMO-Phase sprechen, unterscheidet sich die Struktur entlang der Streifen von dieser. So erhält man aus der Analyse der Korrugation von $(14,8 \pm 0,8)$ pm entlang der Streifen aus dem Linienprofil in Abb. 5.6(d) eine Periode von (543 ± 25) pm. Das entspricht dem zweifachen Gittervektor der Pt(001) Oberfläche und ist bisher nur für magnetische Messungen der TMO-Ketten beobachtet worden. Allerdings wird auf den hier beobachteten Streifen eine nicht magnetische Spitze verwendet, wie auch Kontrollmessungen auf der DL Fe/W(110) bestätigen.

Bei näherer Betrachtung der Abb. 5.6(c) fallen darüber hinaus Unregelmäßigkeiten in der Struktur auf. Entweder die hellen Punkte von benachbarten Reihen stehen in Opposition oder sie sind um a_{Pt} entlang der Streifen gegeneinander verschoben. Die Beziehung von benachbarten Streifen bleibt dabei keineswegs konstant und kann durch Defekte gestört werden. Ein solcher Fall ist im Bereich des Kreises in Abb. 5.6(c) hervorgehoben. Im unteren Bereich stehen die hellen Punkte auf den benachbarten Ketten in Opposition, wohingegen es im weiteren Verlauf durch eine Störung in der rechten Kette zu einer verschobenen Konfiguration kommt. Die Tatsache, dass sich in den betrachteten Streifen die Beziehung dreimal ändert und dies ebenfalls im gleichen Bild noch bei anderen Streifen zu beobachten ist, zeigt die Unregelmäßigkeit innerhalb der Streifenstruktur.

Zusammenfassend lässt sich weder die (3×1) Phase von FeO₂-Ketten auf Pt(001) bestätigen noch eine regelmäßige Struktur feststellen. Da auch die atomare Auflösung der Streifen trotz mehreren Versuchen nicht möglich war, ist die innere Struktur der Streifen entweder rein struktureller Natur oder durch eine Peierls-Instabilität hervorgerufen. Bei einer Peierls-Instabilität kommt es zu einem Metall-Isolator Übergang innerhalb der Ketten bei niedrigen Temperaturen, wodurch unterhalb einer Übergangstemperatur innerhalb eindimensionaler Systeme eine Periode von $2a$ beobachtet werden kann [118, 119]. Handelt es sich tatsächlich um eine solche

Peierls-Instabilität, liegt die Übergangstemperatur oberhalb von $T = 5,5 \text{ K}$ und könnte durch Messungen bei variablen Temperaturen genauer bestimmt werden. Bei Erwärmung der Probe würde es dabei zu einer Halbierung der Periodizität von $2a_{\text{Pt}}$ zu a_{Pt} der Kette kommen. Eine solche Bestimmung der Übergangstemperatur ist mit dem verwendeten STM allerdings nicht möglich. Aus diesem Grund kann die Struktur der Streifen nicht vollständig geklärt werden, weshalb auf eine magnetische SP-STM Analyse aus Gründen der Vergleichbarkeit mit den anderen TMO-Ketten verzichtet wird.

5.3.3 MnO₂-Ketten

Aus den Untersuchungen zu den FeO₂-Ketten auf Pt(001) wird deutlich, dass es sich beim Wachstum der TMO-Ketten um ein komplexes System handelt. Zur Studie des Wachstums der MnO₂-Ketten wird deshalb analog zu vorher zunächst die bei Raumtemperatur gewachsene Mn/Pt(001) Probe analysiert. Das Ergebnis für eine Mn-Bedeckung von 0,55 ML in Abb. 5.7(a) zeigt lange Stränge mit einer Höhe von $(195 \pm 20) \text{ pm}$ in Richtung der sichtbaren Pt-Rekonstruktion. Dabei sind diese Stränge auf der unteren Terrasse ausschließlich in die $[\bar{1}10]$ Richtung und auf der oberen Terrasse in die $[110]$ Richtung orientiert. Während bei dieser Bedeckung die Terrassen eine hohe Bedeckung aufweisen, sind die Stränge bei 0,25 ML in Abb. 5.7(b) vorzugsweise an Stufenkanten oder Domänengrenzen zu beobachten. Da sich zusätzlich nur wenige Atome auf der sichtbaren Pt(001) Flächen befinden, kann von einer Diffusion der adsorbierten Mn-Atome entlang der Mulden der Pt-Rekonstruktion ausgegangen werden. Stufenkanten und Domänengrenzen stellen in diesem Fall natürliche Barrieren dar, wodurch sich Mn an diesen Stellen sammelt.

Eine bevorzugte Diffusion entlang der Mulden der Pt-Rekonstruktion ist auch für Co und Fe zu beobachten, wodurch sich auf den Proben kompakte Co- und Fe-Inseln für die Präparation bei Raumtemperatur bilden. Diese Inseln besitzen eine Streifenstruktur auf der Oberfläche und sind für die Mn/Pt(001) Oberfläche nicht zu beobachten. Vielmehr ist das Wachstum mit den Oberflächen der kalt präparierten Co/Pt(001) und Fe/Pt(001) Proben vergleichbar, weshalb im Folgenden die Oxidation der bei Raumtemperatur gewachsenen Mn/Pt(001) Oberfläche analysiert wird.

Die Übersichtsaufnahme in Abb. 5.7(c) zeigt das Ergebnis der Oxidation bei einer Temperatur von $T = 650 \text{ °C}$. Im Allgemeinen ist diese mit der durch Inseln geformten labyrinthartigen Struktur vergleichbar, die auch für die CoO₂-Ketten in Ref. [14] beschrieben wird. Die obere Ebene nimmt eine Fläche von 60% ein und stimmt mit der Oxidation der kalt gewachsenen Fe/Pt(001) Probe überein, was erneut auf dem Materialtransport von Pt-Atomen während der Ausbildung einer (3×1) Struktur hindeutet. Die Stufenkanten verlaufen dabei in die $[110]$ und $[\bar{1}10]$ Richtung, wobei Letztere die längeren Stufenkanten aufweist und möglicherweise auf die großflächig

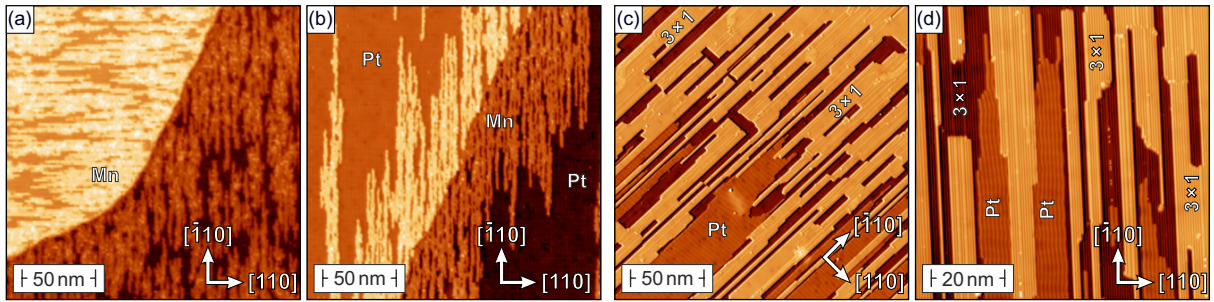


Abbildung 5.7 Wachstum und Oxidation der Mn/Pt(001) Oberfläche. (a) Übersichtsaufnahme von 0,55 ML Mn/Pt(001) und (b) 0,25 ML Mn/Pt(001). Mn wächst entlang der Streifen der Pt-Rekonstruktion und weist an Stufenkanten eine höhere Bedeckung auf. (c) Oxidierte Mn/Pt(001) Oberfläche mit möglicher (3×1) Streifenstruktur auf Inseln und Terrassen. (d) Höher aufgelöste Aufnahme mit kleinen Streifenstrukturen und Regionen der Pt(001) Oberfläche. Scanparameter: $U = 1$ V, $I = 300$ pA.

beobachtete Vorzugsrichtung von Strängen auf der Mn/Pt(001) Probe zurückzuführen ist.

Neben den Inseln mit einer Stufenhöhe von (200 ± 20) pm weisen auch die unteren Terrassen eine Streifenstruktur auf, die deutlicher in Abb. 5.7(d) zu sehen ist. Die Periode von (827 ± 40) pm kann der dreifachen Gitterkonstante von Pt(001) zugeordnet werden. Mit einer Ausdehnung von $(10 \dots 20)$ nm sind die kleinen Domänen mit denen von CoO_2 -Ketten auf Pt vergleichbar und auf die niedrige Temperatur während der Oxidation zurückzuführen. Zusätzlich sind aufgrund der Mn-Unterdosierung, analog zu den Präparationen von CoO_2 -Ketten, Flächen der rekonstruierten Pt(001) Oberfläche zu sehen. Der Höhenunterschied zwischen diesen Regionen und der Inseloberfläche von (95 ± 15) pm ist bei einer Tunnelspannung von $U = 1$ V in etwa die Hälfte der Stufenhöhe zwischen den Terrassen mit Streifenstruktur.

Die kleinen Domänengrößen für eine Oxidation der Mn/Pt(001) Probe bei $T = 650^\circ\text{C}$ erschweren die Analyse einer magnetischen Struktur für die MnO_2 -Ketten. Geht man von der chiralen magnetischen (9×2) Einheitszelle auf Ir(001) aus, sind Domänengrößen von mehr als 5 nm wünschenswert. Da in diesem Fall die Domänengrößen aus Abb. 5.7 im kritischen Bereich liegen, muss eine alternative Präparation gewählt werden. Hier kommen als möglichen Stellschrauben entweder eine höhere Heiztemperatur oder ein geringerer Sauerstoffdruck infrage. Eine höhere Heiztemperatur führt zu einer höheren Mobilität der Mn-Atome und könnte die Größe der Inseln vergrößern. Auch für einen geringeren Sauerstoffdruck kann die Mobilität der Mn-Atome durch fehlenden Sauerstoff höher liegen. Dabei ist zu beachten, dass hohe Temperaturen und fehlender Sauerstoff zur Bildung einer Legierung führen können.

In Abb. 5.8(a) ist die Übersichtsaufnahme einer oxidierten Mn/Pt(001) Probe bei einem reduzierten Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_2} = 1 \times 10^{-8}$ mbar gezeigt. Diese Probe unterscheidet sich in mehreren Punkten von der Oberfläche in Abb. 5.7(c). Zum einen scheint die Mn-Bedeckung deutlich geringer zu sein und könnte an einer unbeabsichtigten Schwankung der Aufdampfrate des Verdampfers ohne Flussreglung liegen. Zum anderen existieren Bereiche, die weder eine Pt-Rekonstruktion

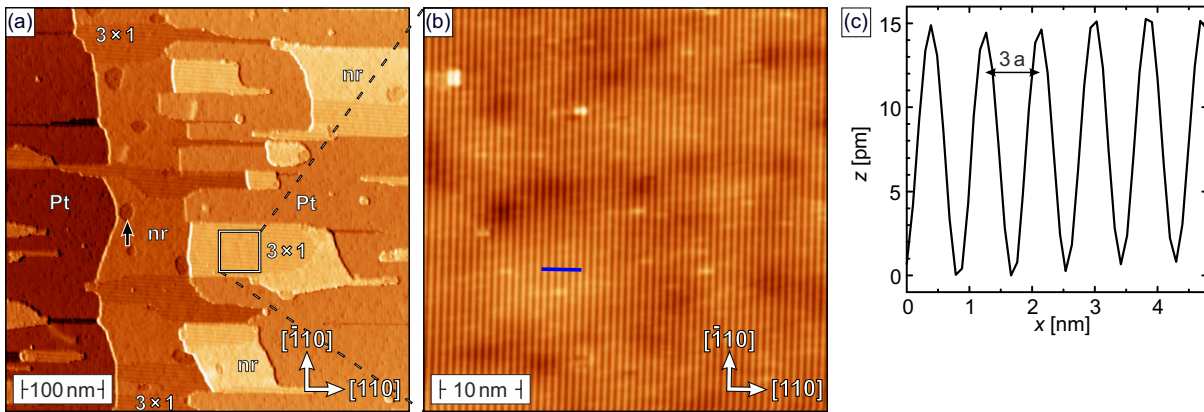


Abbildung 5.8 Strukturelle Analyse der Streifenstruktur von MnO_2 -Ketten auf Pt(001). (a) Übersichtsaufnahme der oxidierten Mn/Pt(001) Oberfläche bei einem reduzierten Sauerstoffdruck von $p_{\text{O}_x} = 1 \times 10^{-8}$ mbar. Neben der Pt(001) Rekonstruktion und den (3×1) Regionen sind nicht rekonstruierte (nr) Bereiche sichtbar. (b) Hohe Auflösung der Streifen auf einer großen Domäne. (c) Linienprofil an der Position der blauen Linie in (b) mit der Periode der Streifen von $3a_{\text{Pt}}$. Scanparameter: $U = 1$ V, $I = 300$ pA.

noch eine Streifenstruktur besitzen (nr). Diese befinden sich an Substratstufenkanten und in direkter Nachbarschaft zu den Streifen, was an die Oxidation der warm gewachsenen Fe/Pt(001) Probe aus Abb. 5.5(c) erinnert. Des Weiteren ist auch eine reduzierte Stufenhöhe dieser Regionen von (125 ± 12) pm zu beobachten, die mit den Beobachtungen für Co und Fe übereinstimmt und auf die Bildung einer Oberflächenlegierung hindeutet. Ein weiterer Hinweis für eine Legierungsbildung der adsorbierten Mn-Atome mit der Pt-Oberfläche könnten auch die ausschließlich auf der nicht rekonstruierten Fläche auftretenden Löcher sein (Pfeil).

Die Regionen mit Streifenstruktur nehmen 18% der Übersichtsaufnahme in Abb. 5.8(a) ein. Hierbei ist zu beachten, dass die in Abb. 5.8(a) sichtbaren Streifen aus einem Moiré zwischen der Auflösung der Messung und den tatsächlichen Streifen resultieren. Diese tatsächlich existierenden Streifen besitzen eine gegenüber der Übersichtsaufnahme deutlich geringere Periode, wie anhand der höheren Auflösung der in [110] Richtung verlaufenden Streifen in Abb. 5.8(b) zu erkennen ist. Die Periode wird über das Linienprofil in Abb. 5.8(c) bestimmt und liegt mit (866 ± 45) pm bei einer Korrugation von $(14,8 \pm 0,8)$ pm im Bereich des Abstands von $3a_{\text{Pt}}$ für TMO-Ketten. Abgesehen von den typischen Defekten des Pt(001) Kristalls und wenigen punktförmigen Defekten auf den Ketten sind die Domänengrößen ausreichend groß, um magnetische Strukturen mit einer Periode von bis zu 20 nm zu identifizieren.

Am Fall der FeO_2 -Ketten auf Pt(001) war zu sehen, dass eine periodische Anordnung der Streifen nicht gleichbedeutend mit einer strukturellen (3×1) Einheitszelle sein muss. Deshalb werden in Abb. 5.9(a) die mit einer nicht magnetischen W-Spitze atomar aufgelösten Ketten gezeigt. Mit (281 ± 19) pm liegen die Atomabstände entlang der Ketten im Bereich des Pt(001) Gittervektors, womit für MnO_2 -Ketten die bekannte (3×1) der TMO-Ketten bestätigt werden kann. Für die

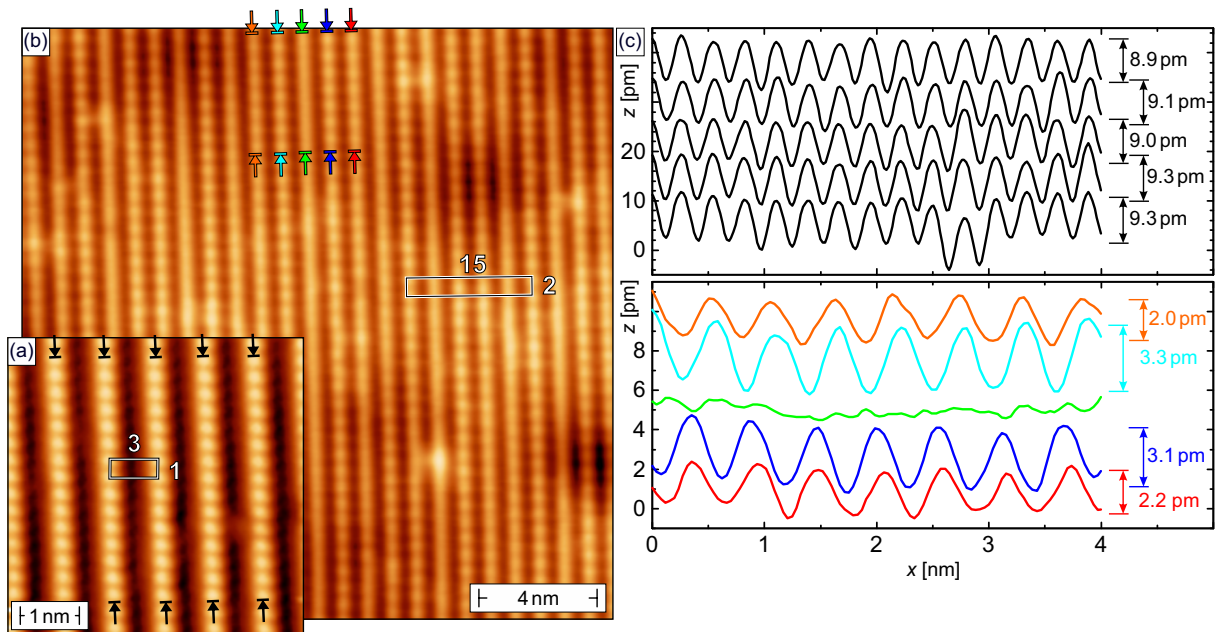


Abbildung 5.9 Atomare Auflösung der MnO_2 -Ketten auf Pt(001) mit einer nicht magnetischen W-Spitze (a) und mit einer magnetischen Cr/W-Spitze (b). Die strukturelle Einheitszelle der (3×1) Struktur ist klar erkennbar. Die magnetische Einheitszelle stellt eine (15×2) Phase dar. (c) Korrugation entlang der Ketten für die spingemittelte Messung (schwarz) und der magnetischen Messung (bunt). Für die W-Spitze ist die Korrugation nahezu konstant, während sich die Korrugation der Ketten für die Cr/W-Spitze deutlich unterscheidet. Scanparameter: (a), $U = -5 \text{ mV}$, $I = 20 \text{ nA}$; (b), $U = 1 \text{ V}$, $I = 300 \text{ pA}$.

spingemittelte Messung liegt die Korrugation zwischen den schwarzen Pfeilen von fünf benachbarten Ketten nach Abb. 5.9(c) im Bereich von $(9,1 \pm 0,2) \text{ pm}$ und bestätigt die strukturelle Gleichheit der Ketten.

Nach der Bestätigung der Struktur sollen die spinpolarisierten Messungen mit einer Cr/W-Spitze in Abb. 5.9(b) diskutiert werden. Dazu werden analog zu den spingemittelten Messungen Linienprofile entlang fünf benachbarter Ketten zwischen den bunten Pfeilen mit entsprechenden Farben in Abb. 5.9(c) dargestellt. Analysiert man zunächst die Periode der Korrugation, kann durch den Vergleich mit den nichtmagnetischen Daten eine Verdopplung festgestellt werden. Die damit verbundene AFM-Kopplung entlang der Ketten ist mit der Beobachtung von magnetischen Nanostrukturen für FeO_2 und MnO_2 -Ketten auf Ir(001) zu vergleichen.

Eine weitere Ähnlichkeit zu den MnO_2 -Ketten auf Ir(001) stellen die fünf verschiedenen Kontrastniveaus von Ketten dar, die vor allem anhand der Linienprofile in Abb. 5.9(c) zu erkennen sind. Die grüne Kette hat dabei keine messbare Korrugation. Im Gegensatz dazu zeigen die benachbarten Ketten mit den hellblauen und dunkelblauen Linienprofilen mit $(3, 1 \dots 3, 3) \text{ pm}$ die höchsten Korrugationen. Hinzu kommen die rote sowie die orange Kette mit mittlerer Korrugation um die 2 pm.

Des Weiteren existieren in Übereinstimmung mit den Ketten auf Ir(001) auch hier Phasenbe-

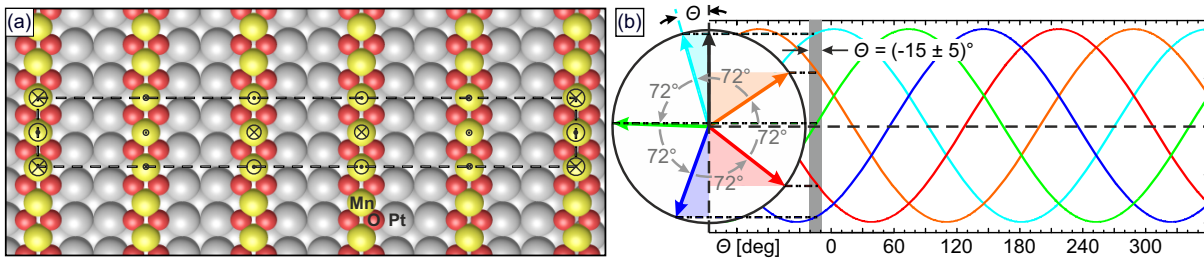


Abbildung 5.10 (a) Modell der magnetischen (15×2) Einheitszelle. Die Kreise mit Punkten (Kreuzen) stehen für die Spinrichtung aus der (in die) Probenebenen. Der Durchmesser korreliert mit dem Anteil der out-of-plane Komponenten. (b) Zeigerdiagramm für eine Rotation der Spins von 72° zwischen den Ketten. Der senkrechte schwarze Pfeil zeigt die Spinpolarisierung der Spitze an. Der Winkel Θ entspricht dem Winkel der Spinpolarisierung zwischen Spitze und den Mn-Spin der Kette höchster Korrigation.

ziehungen zwischen den Ketten, die durch eine Verschiebung um a_{Pt} in den Linienprofilen zu erkennen sind. Die grüne Kette mit niedrigem Kontrast kann dabei als Übergang von einer Phase in die andere angesehen werden. So bilden die orange und hellblaue Kette das linke Kettenpaar sowie die dunkelblaue und rote Kette das rechte Kettenpaar. Während innerhalb der Kettenpaare die Phase gleich ist, unterscheidet sich diese zwischen den Kettenpaaren und entspricht einer Verschiebung um genau einen Gittervektor a_{Pt} . Somit ist die Situation für die MnO_2 -Ketten auf Pt(001) vergleichbar mit der auf Ir(001), wobei es sich hier um eine magnetische (15×2) Einheitszelle handelt, die exemplarisch in der Topographie der spinpolarisierten Messung eingezeichnet ist.

Anhand der Vergleichbarkeit von MnO_2 -Ketten auf Pt(001) und Ir(001) wird auch hier eine Spinspirale als Ursache für den magnetischen Kontrast vermutet. Nach den theoretischen Berechnungen aus Kapitel 4.4.3 handelt es sich auf Ir(001) um eine zykloidale Spinspiral, die durch die indirekt DM-Wechselwirkung in diesem System stabilisiert wird. Aufgrund der Spiegelebenen senkrecht zu den MnO_2 -Ketten in Verbindung mit den Regeln von Moriya resultiert eine Rotationsachse parallel zu den Streifen, die in der Probenebenen liegt [56]. Das Modell einer solchen Spinspirale ist in Abb. 5.10(a) auf Basis der strukturellen (3×1) Struktur der TMO-Ketten skizziert.

Betrachtet man den Spin der Mn-Atome entlang der Ketten, wird der AFM-Kopplung durch den Wechsel der Spinorientierung in die Probe (Kreis mit Kreuz) und aus der Probe (Kreis mit Punkt) Rechnung getragen. Die Größe der Kreise stehen dabei in Relation zum Betrag der out-of-plane Komponenten, der sich durch eine Rotation der Spins von 72° zwischen benachbarten Ketten ändert. Ausgehend von einer maximal möglichen out-of-plane Komponente auf der äußersten linken Kette führt eine Verdrehung um 72° in der benachbarten Kette aufgrund der Gleichung 4.2 zu einem geringen magnetischen Korrigationssignal. Bei einer weiteren Drehung um 72° ist die out-of-plane Komponente der Mn-Atome entgegengesetzt zur Spinpolarisation der Spitze orientiert. Entsprechend sind die beiden folgenden Ketten mit mittlerer Korrigation

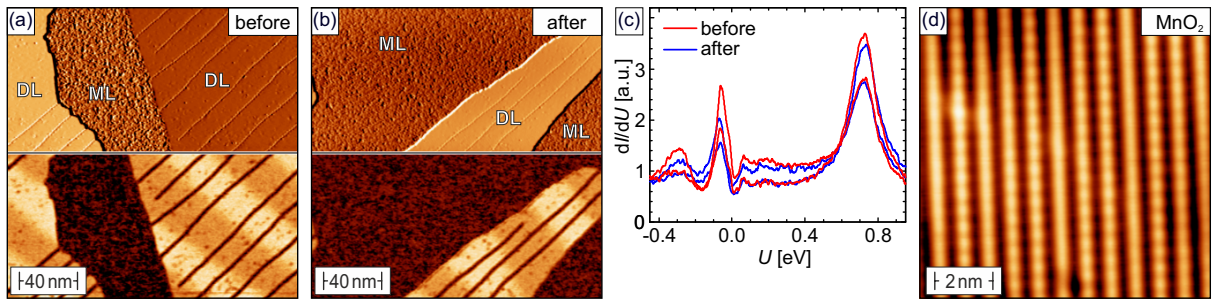


Abbildung 5.11 Charakterisierung der out-of-plane Spitze auf der DL Fe/W(110) vor (a) und nach (b) der Messung auf den MnO₂-Ketten auf Pt(001). (c) Spektroskopie auf den hellen und dunklen Domänen in (a) und (b). Die Spektren sind nahezu identisch und weisen auf eine stabile Spitzenpolarisierung hin. (d) Kontrast auf den MnO₂-Ketten bestätigt die out-of-plane Komponente der Mn-Spins. Scanparameter: (a), (b), $U = 700$ mV, $I = 1$ nA; (d), $U = 100$ mV, $I = 1$ nA.

gegenüber den zwei Ketten davor phasenverschoben. Die aus der Winkelbeziehung zwischen den Ketten folgende parallele und antiparallele Ausrichtung der Spinorientierungen folgt dabei den experimentellen Beobachtungen.

Zum besseren Verständnis dient das Zeigerdiagramm in Abb. 5.10(b), das die Kontrastverhältnisse der experimentellen Messung aus Abb. 5.9(b) widerspiegeln soll. Dabei wird von einer Verkippung der Spinpolarisierung zwischen Spitze und Mn-Momenten der hellblauen Kette um den Winkel $\Theta = (-15 \pm 5)^\circ$ ausgegangen. Dies führt zum einen zu dem beobachteten niedrigen Kontrast der grünen Kette und zum anderen zu jeweils zwei Ketten mit nahezu identischer Korrugation. So besitzen in Übereinstimmung mit der Messung die hellblauen und dunkelblauen Ketten die höchste Korrugation, wohingegen die orangefarbenen und roten Ketten eine mittlere Korrugation aufweisen. Der Unterschied zwischen den Ketten mit nahezu identischen Korrugationen ist allerdings die Projektion der Spinkomponenten auf die Spitzenpolarisation. Identisch zur Messung ist das Kettenpaar aus hellblauer und orangefarbener Kette phasenverschoben gegenüber dem Kettenpaar von dunkelblauer und roter Kette. Dies lässt sich auch an den fünf um 72° gegeneinander verschoben Kosinuskurven an der Stelle des grauen Balkens ablesen. Hier ist der Beitrag zum Tunnelstrom für die rote und blaue Kette negativ, wohingegen dieser für grüne, hellblaue und orangefarbene Ketten positiv ist.

Um das Modell einer zyklidalen Spinspirale aus Abb. 5.10(a) zu bestätigen, sind weitere Messung mit in-plane und out-of-plane polarisierten Spitzen notwendig. Als Referenzsystem der out-of-plane Messungen mit einer Cr/W-Spitze dient ein weiteres Mal die DL Fe/W(110). Dazu wird in bekannter Vorgehensweise die Spitzenpolarisation mit Hilfe der Topographie und der differentiellen Leitfähigkeit dI/dU in einer Vormessung in Abb. 5.11(a) und einer Kontrollmessung in Abb. 5.11(b) analysiert. In beiden Messungen kann der typische out-of-plane Kontrast mit zwei Kontrastniveaus auf der Fe DL festgestellt werden. Der identische Kontrast in den dI/dU -Karten der Vor- und Kontrollmessung wird durch die Spektroskopie in Abb. 5.11(c) bestätigt.

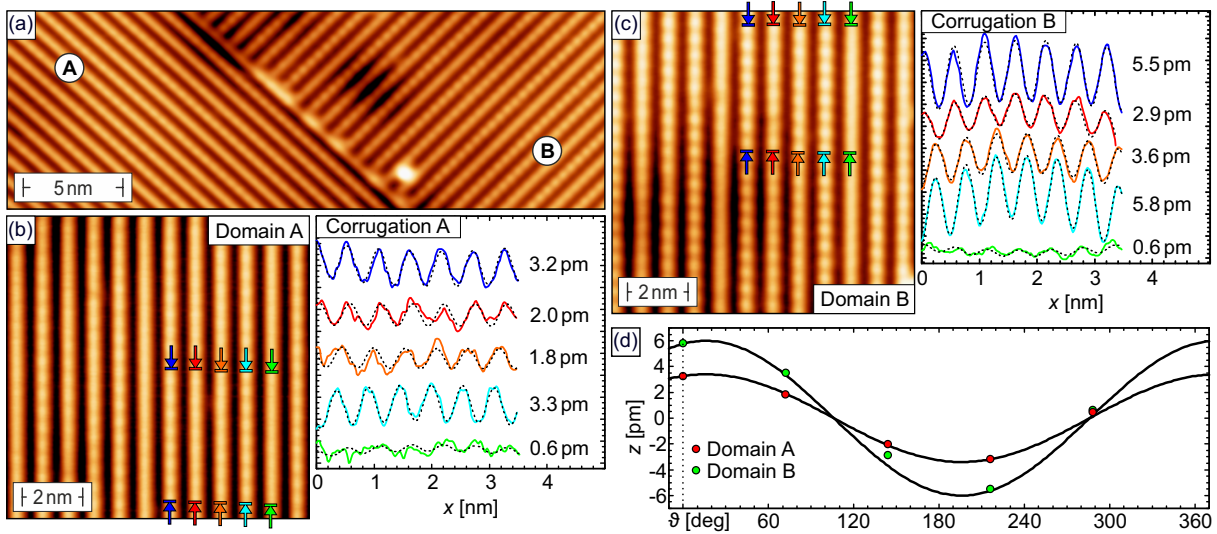


Abbildung 5.12 Messungen an einer strukturellen Domänengrenze der MnO_2 -Ketten mit einer in-plane Fe/W-Spitze. **(a)** Übersichtsaufnahme über die Domänengrenze von Domäne A und B. **(b)** Detailaufnahme auf Domäne A mit Linienprofilen zwischen den farbigen Pfeilen. **(c)** Hoch aufgelöste Messung auf Domäne B. Die Korrugation entlang der Ketten ist höher als in Domäne A. **(d)** Die Korrugationen der beiden einzelnen Domänen folgen dem Verlauf eines Kosinus. Die Amplitude in Domäne A ist dabei deutlich höher als in Domäne B. Scanparameter: $U = 100 \text{ mV}$, $I = 1 \text{ nA}$.

Hierbei sind die blauen (roten) Kurven auf zwei Domänen mit entgegengesetzter Magnetisierung vor (nach) der magnetischen Messung auf den MnO_2 -Ketten aus Abb. 5.11(d) aufgenommen. Die Tatsache, dass die Spektren identischer magnetischer Domänen nahezu gleich sind, lässt auch in diesem Fall auf eine stabile Spitzenmagnetisierung während der Messungen auf MnO_2 -Ketten schließen. Diese zeigen erneut einen magnetischen Kontrast, wie in Abb. 5.11(d) zu erkennen ist. Deshalb ist im vorliegenden Fall von einer out-of-plane Komponente der Mn-Spins auszugehen, die das skizzierte Modell einer zykloidalen Spinspirale stützt.

Die entsprechende Rotation der Spinspirale mit unterschiedlicher out-of-plane Komponente der Spins impliziert automatisch die Variation der entsprechenden in-plane Komponenten, die im Folgenden mit einer in-plane Fe/W-Spitze untersucht wird. Dazu dient erneut die Messung an einer strukturellen Domänengrenze in Abb. 5.12(a), wobei die Orientierung der Ketten in Domäne A und B zueinander orthogonal ist. Aus Gründen der Anisotropieenergie ist dabei von einer Relation zwischen den Spinvektoren der Mn-Atome und der Kettenorientierung auszugehen. Dies führt bereits in der Übersichtsaufnahme mit einer in-plane Spitze zu einem sichtbaren Unterschied beider Domänen in der Korrugation entlang der Streifen, die in Domäne B im Gegensatz zu Domäne A deutlich zu sehen ist. Eine weitere Bestätigung des vorliegenden Kontrastunterschieds liefern die Detailaufnahmen mit einer Auswertung der Korrugationen entlang fünf benachbarter Ketten in den Abbildungen 5.12(b) & (c). Hier ist aus den Linienprofilen eine deutlich höhere Korrugation entlang der Ketten von Domäne B zu sehen, während die Periode von $2a_{\text{Pt}}$ in beiden Domänen die AFM-Kopplung bestätigt. Darüber hinaus existieren, ähnlich

zu den bereits diskutierten magnetischen Messungen, in beiden Domänen zwei Ketten mit hoher (hellblau, dunkelbau) und zwei mit mittlerer (orange, rot) Korrugation, die auch die diskutierte Phasenbeziehung aufweisen.

Um die Korrugationen quantitativ auszuwerten, werden die Linienprofile in den Abbildungen 5.12(b) & (c) durch eine Sinusfunktion mit zusätzlichem parabolischen Untergrund gefittet (schwarze, gepunktete Linien). Anschließend werden die so bestimmten Werte für die Korrugation aus beiden Domänen in die Winkeldarstellung aus Abb. 5.12(d) eingetragen. Hierzu wird mit dem höchsten Kontrast der hellblauen Ketten bei $\vartheta = 0^\circ$ angefangen und unter Berücksichtigung des Rotationswinkels von 72° zwischen benachbarten Ketten die Korrugationen der orangen, roten, dunkelblauen und grünen Ketten aufgetragen. Das z -Signal der beiden Domänen folgt dabei jeweils einen Kosinusverlauf (schwarze Kurven), der sich in der Amplitude unterscheidet. Diese Beobachtung lässt sich mit Hilfe des skizzierten magnetischen Modells aus Abb. 5.10 erklären. Dazu kann man dieses Modell auf die in-plane Komponente übertragen, wobei durch die Projektion der Mn-Spinvektoren in die Probenebene Ketten mit hoher (geringer) out-of-plane Komponente eine geringe (hohe) in-plane Komponente aufweisen. Dies führt für magnetische Messungen mit einer in-plane Spitze zu unterschiedlichen Korrugation der Ketten innerhalb einer Domäne, wobei die in-plane Komponenten der Mn-Spinvektoren senkrecht zu den Ketten liegen. Damit ist der Kosinusverlauf innerhalb der beiden Domänen durch die Projektion der Spinvektoren in die Probenebene zu erklären.

Die unterschiedliche Amplitude des Kosinusverlaufs ist hingegen auf die orthogonale Beziehung zwischen den in-plane Komponenten der Spinvektoren und der strukturellen Kettenorientierung zurückzuführen. Während sich der Azimutwinkel zwischen Spitzenpolarisation und in-plane Spinkomponenten innerhalb einer Domäne nicht ändert, ist die Korrugation in der 90° gedrehten Domäne nach Gleichung 4.2 für spinpolarisierte Messung entsprechend anders. Im Allgemeinen können die beobachteten Korrugationen z_{SP} durch die Formel

$$z_{\text{SP}} \propto P_t \cdot (P_{\text{SV}} \cdot \cos \vartheta) \cdot \cos \phi, \quad (5.1)$$

beschrieben werden. Während es sich im Wesentlichen um die bekannte Formel für spinaufgelöste Messungen handelt, ist der Term in Klammern als die Projektion der Polarisation des Mn-Spinvektors P_{SV} in die Oberflächenebene zu verstehen. Der Polarwinkel ϑ befindet sich in diesem Fall zwischen den Spinvektoren der Mn-Atome und der Oberflächenebenen. Die Verdrehung zwischen senkrecht zur Kette orientierter in-plane Komponente und Spitzenpolarisierung P_t wird durch den Azimutwinkel ϕ ausgedrückt. Genau dieser Winkel entscheidet über das Verhältnis zwischen den Amplituden der Korrugation aus beiden Domänen. Im Fall von $\phi = 90^\circ$ wäre die magnetische Korrugation auf einer Domäne nicht zu sehen, wohingegen die Maximale

auf der Anderen zu registrieren wäre. Für $\phi = 45^\circ$ wäre der Kontrast entsprechend auf beiden Domänen gleich. Für das vorliegende Verhältnis der höchsten Korngattungen erhält man aus der numerischen Lösung der Gleichung $\frac{\cos \phi}{\cos(\phi+90^\circ)} = \frac{3,3}{5,8}$ einen Winkel $\phi = -60^\circ$. Das heißt, dass die Spitzenpolarisierung in Domäne A um 60° und in Domäne B um 30° von der in-plane Orientierung der Mn-Spins abweicht.

Der Azimutwinkel ϕ erklärt somit die unterschiedlichen Amplituden der Kosinuskurven. Bei näherer Betrachtung der Kurven in Abb. 5.12(d) kann festgestellt werden, dass das Maximum der Kosinuskurven bei einem Polarwinkel von $\vartheta = (16 \pm 5)^\circ$ und nicht bei $\vartheta = 0^\circ$ zu finden ist. Somit liegt im Fall einer homogenen zyklidalen Spinspirale mit einer Rotation von 72° zwischen den Ketten für keine der fünf Ketten die Orientierung der Mn-Spins vollständig in der Probenebenen. Aufgrund des Azimutwinkels von $\vartheta = (16 \pm 5)^\circ$ auf einer der Ketten und einem Rotationswinkel von 72° zwischen den Ketten kann auch eine Orientierung der Mn-Spins parallel zur Oberflächennormalen ausgeschlossen werden. Als Folge ist auch auf den Ketten mit geringster Korngattung eine Modulation von $z_{\text{SP}} = 0,6 \text{ pm}$ zu beobachten. Allerdings kann hier auch ein Einfluss der magnetischen Anisotropie nicht ausgeschlossen werden, die sich für die in-plane und die out-of-plane Richtung unterscheiden kann. Eine solche Konstellation kann, wie im Kapitel 3.6 erwähnt, zu einer leichten Verdrehung der Spins in die leichte Magnetisierungsrichtung führen. Diese inhomogene Spinspirale würde somit von der einheitlichen 72° Rotation abweichen und könnte die Beobachtung ebenfalls erklären.

Aus der bisherigen Analyse der magnetischen Messungen mit in-plane und out-of-plane polarisierten Spitzen erhält man in Übereinstimmung mit der Theorie eine zyklidale Spinspirale, die durch eine Rotation der Mn-Spins von 72° zwischen benachbarten Ketten eine (15×2) Einheitszelle bildet. Betrachtet man allerdings große Domänen, wie in Abb. 5.13(a), werden Differenzen zu dem vorgeschlagenen Modell sichtbar. Diese werden anhand blauer Hilfslinien verdeutlicht, die zwischen Ketten unterschiedlicher Phase verlaufen. Dabei ist bei fünf Linien ein Sprung zu erkennen, der durch die Änderung der Spinausrichtung entlang der Ketten mit schwacher Korngattung zu erklären ist. Tatsächlich ist die damit verbundene Abweichung von der kollinearen AFM-Ordnung entlang der Ketten mit schwachem Kontrast durch die Änderung der Korngattung deutlich zu erkennen. Um die die Abweichung α von einer AFM 180° Drehung zwischen benachbarten Mn-Spins innerhalb einer Kette abzuschätzen, wird die mit dem schwarzen Pfeil markierte Kette herangezogen. Entlang dieser Kette ändert sich die Korngattung von niedrig zu hoch. Angesichts der Tatsache, dass von minimaler zu maximaler Korngattung der Winkel von 90° durchlaufen wird und die Kette im Aufnahmebereich aus ungefähr 96 Atomen besteht, erhält man $\alpha < 1^\circ$ als Differenz zum kollinearen AFM-Zustand.

Eine weitere mit dem Modell nicht vereinbare Beobachtung ist die direkte Nachbarschaft von Domänen mit jeweils drei Ketten gleicher Phase. Am Besten kann das anhand der Zeigerdia-

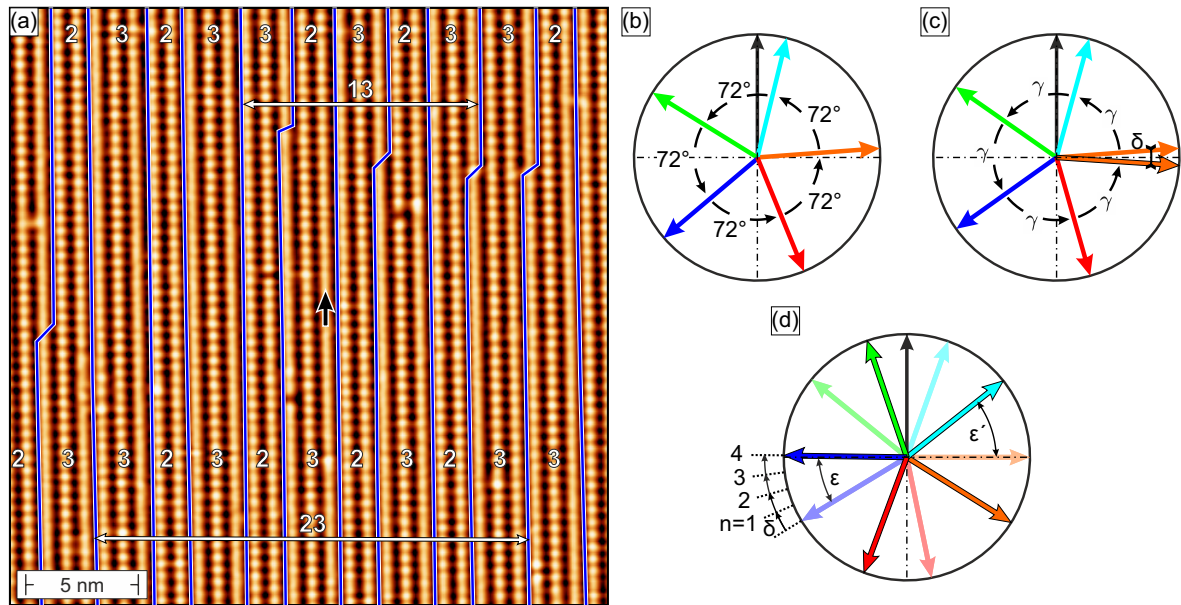


Abbildung 5.13 (a) Laplace gefilterte Darstellung einer spinaufgelösten großen Domäne. Die blauen Linien in der Topographie verlaufen entlang von Phasengrenzen. Als Folge eines Rotationswinkels γ von weniger als 72° zwischen den Spins benachbarter Ketten existieren Domänen mit drei Ketten in direkter Nachbarschaft. (b) Zeigerdiagramm mit Verteilung der Spinrichtungen bei einem Rotationswinkel von 72° zwischen den Ketten. (c) Bei $\gamma < 72^\circ$ kommt es zu einem Phasensprung. Dieser wird durch eine Verkipfung δ zwischen der Spinrichtung der orangefarbenen Kette der ersten Gruppe (Pfeil ohne Umrandung) und der zweiten Gruppe (Pfeil mit Umrandung) hervorgerufen. (d) Durch die Verkipfung δ kommt es nach einer bestimmten Anzahl von Gruppen zu Phasensprüngen. Der Winkel ϵ liegt zwischen blauer Spinrichtung der ersten Gruppe und der orthogonalen Stellung bezüglich der Spitzenpolarisierung (schwarzer Pfeil) und dient als untere Schranke für die Bestimmung des Rotationswinkel in (a). Als obere Schranke wird der Winkel ϵ' zwischen hellblauer Spinrichtung der fünften Gruppe (Pfeil mit Umrandung) und der orthogonalen Stellung bezüglich der Spitzenpolarisierung verwendet. Scanparameter: $U = 1$ V, $I = 300$ pA.

gramme aus den Abbildungen 5.13(b)–(d) erklärt werden. Das Zeigerdiagramm in (b) mit einem einheitlichen Rotationswinkel von 72° entspricht dem vorgeschlagenen Modell einer (15×2) Phase. Wie oben beschrieben, entstehen Domänen mit jeweils zwei und drei Ketten gleicher Phase. Im skizzierten Fall haben die orangefarbene, die hellblaue und die grüne Kette eine parallele Spinausrichtung zur Spitzenpolarisierung (schwarzer Pfeil). Die Spins der blauen und roten Kette sind entsprechend antiparallel ausgerichtet. Durch den Rotationswinkel von 72° bilden jeweils fünf Ketten äquivalente Gruppen, weshalb eine Nachbarschaft von zwei Domänen mit drei Ketten gleicher Phase nicht erklärt werden kann.

Dies ändert sich beim Übergang zu kleineren Rotationswinkeln γ in Abb. 5.13(c). Im Gegensatz zu dem Zeigerdiagramm mit einem Rotationswinkel von 72° ist nach der Rotation über fünf Ketten der orangefarbene Pfeil nicht mehr deckungsgleich, sondern um den Winkel δ gegenüber der Ausgangslage verkippt. Während also die Spins der orangefarbenen, hellblauen und grünen Kette der ersten Gruppe (Pfeile ohne Umrandung) eine parallele Spinausrichtung besitzen, ist diese für die blaue und rote Kette der ersten Gruppe antiparallel. Durch den Differenzwinkel

$\delta = (360^\circ - 5\gamma)$ kommt es zudem zum Phasensprung der orangefarbenen Kette der zweiten Gruppe (Pfeil mit Umrandung) und somit zu zwei Domänen mit drei Ketten gleicher Phase. Die Messung in Abb. 5.13(a) zeigt Phasensprünge nach 23 Ketten im unteren und nach 13 Ketten im oberen Bereich. Allgemein kommt es dabei nach $(5n - 2)$ Ketten zum Phasensprung, wobei n die Anzahl der Gruppen beschreibt. Um daraus den Rotationswinkel abzuschätzen, soll zunächst das Zeigerdiagramm in Abb. 5.13(d) diskutiert werden. Gegenüber (b) und (c) sind die Spins der orangefarbenen Kette der ersten Gruppe orthogonal zur Spitzenpolarisierung. Mit dieser Ausgangslage muss die blaue Spinrichtung um den kleinsten notwendigen Winkel $\epsilon = (3\gamma - 180^\circ)$ verdreht werden, um den nächsten Phasensprung zu beobachten. Aufgrund des Differenzwinkels verkippnen die Spinrichtungen von Gruppe zu Gruppe um δ und der Phasensprung ist für $\epsilon < n\delta$ festzustellen. Im Zeigerdiagramm der Abb. 5.13(d) ist dies nach vier Gruppen der Fall und es gilt $\epsilon < 4\delta$. Nach diesem Schema ist der nächste Phasensprung für die hellblaue Kette nach einer maximalen Verdrehung um $\epsilon' = (\gamma - n\delta)$ zu beobachten. Mithilfe der oberen Schranke ϵ' und der unteren Schranke ϵ wird die Anzahl n der Gruppen für den Bereich $60^\circ < \gamma < 72^\circ$ mit einer Schrittweite von $0,1^\circ$ berechnet. Daraus erhält man einen Phasensprung für $n = 5$ im Winkelbereich $\gamma = (70, 3 \dots 70, 7)^\circ$ für den unteren Teil der Messung und für $n = 3$ im Winkelbereich $\gamma = (68, 6 \dots 70, 0)^\circ$ für den oberen Bereich der Messung. Zusammengefasst ist unter der Voraussetzung eines einheitlichen Rotationswinkels die Messung im oberen und unteren Teil nicht vereinbar, was auf lokal unterschiedliche Drehwinkel und einer inhomogenen Spinspirale hinweist.

Als Ergebnis für die MnO_2 -Ketten auf Pt(001) lässt sich aus den spinpolarisierten Messungen ähnlich den magnetischen Strukturen der FeO_2 und MnO_2 -Ketten auf Ir(001) eine AFM-Kopplung entlang der Ketten feststellen, die geringfügig vom kollinearen Zustand abweichen kann. Senkrecht zu den Ketten liegt hingegen in Übereinstimmung mit dem theoretischen Modell aus Kapitel 4.4.3 eine zyklonale Spinspirale vor, deren Rotationswinkel sich lokal unterscheidet. Aufgrund der Ähnlichkeit der Systeme von MnO_2 -Ketten auf Pt(001) und Ir(001) ist auch hier von einer Konkurrenz der Energiebeiträge von isotroper Austauschwechselwirkung und anisotroper DM-Wechselwirkung auszugehen. Wie für MnO_2 auf Ir(001) beschrieben, werden diese durch die indirekte RKKY-Wechselwirkung mittels Leitungselektronen vermittelt. Während die Änderung der DM-Wechselwirkung beim Übergang von Ir zu Pt mit den Ordnungszahlen von $Z = 77$ und $Z = 78$ als gering eingeordnet wird, kann der Einfluss auf die RKKY-Wechselwirkung durch die Änderung des Fermivektors signifikant sein. Dies kann die deutlich kleinere Rotation der Spins von 72° auf Pt(001) gegenüber 120° auf Ir(001) bei einem gleichen Kettenabstand von $3a_{\text{Pt}}$ erklären.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel sollen die in dieser Arbeit mittels STM untersuchten strukturellen und magnetischen Eigenschaften von TMO-Ketten auf den Substraten Ir(001) und Pt(001) zusammengefasst werden. Während die strukturellen (3×1) Einheitszellen nach dem Modell von Ferstl *et al.* [12, 13] für CoO₂, FeO₂ und MnO₂-Ketten auf Ir(001) bestätigt werden konnten, wurde das System um die CrO₂-Ketten erweitert. Im Unterschied zu den bekannten Ketten war in diesem Fall die Identifikation der Übergangsmetallketten schwierig, da neben dem strukturellen Beitrag der Ketten zum Tunnelstrom ein vergleichbares elektronisches Signal der Ir-Doppelreihe vorlag. Über eine detaillierte Auswertung der spannungsabhängigen Messungen und den atomaren Aufnahmen konnten die CrO₂-Ketten identifiziert und die (3×1) Struktur bestätigt werden.

Um die magnetischen Eigenschaften der Ketten zu analysieren, dienten im Anschluss an die jeweiligen Strukturanalysen spinpolarisierte Messungen. Hierfür wurden die W-Spitzen mit Fe oder Cr beschichtet und anschließend die Polarisierung auf der DL Fe/W(110) bestimmt. Mit Hilfe dieser charakterisierten Spitzen konnten sowohl die magnetischen Strukturen als auch die leichten Magnetisierungsrichtungen der TMO-Ketten bestimmt werden. Im Fall von CoO₂ und CrO₂-Ketten auf Ir(001) bleiben die Messungen ohne Hinweise auf ein magnetisches Signal, wohingegen FeO₂ und MnO₂-Ketten magnetische Nanostrukturen aufweisen.

In beiden Fällen handelt es sich um eine AFM-Kopplung von benachbarten Atomen entlang der Ketten, wohingegen sich die Kopplung zwischen den Ketten unterscheidet. FeO₂-Ketten weisen eine kollineare FM-Kopplung auf, die großflächig auftritt und damit ein stabiles magnetisches System darstellt. Dabei sind die Fe-Spins parallel zur Oberflächennormalen orientiert, wie aus der Analyse von in-plane und out-of-plane Messungen hervorgeht. Im Gegensatz dazu liegt auf den MnO₂-Ketten eine Spinspirale mit einem Rotationswinkel von 120° zwischen den Ketten vor. Die magnetische (9×2) wird von den theoretischen Berechnungen bestätigt und erklärt mit dem Beitrag der DM-Wechselwirkung den experimentell beobachteten einheitlichen Drehsinn der Spinspirale. Somit sind die MnO₂-Ketten mit den bereits bekannten Systemen von magnetischen Atomen und Clustern auf Pt(111) vergleichbar, bei denen es zur Verkipfung der Spins durch die indirekte DM-Wechselwirkung kommt [7, 8].

Um die indirekte DM-Wechselwirkung zwischen eindimensionalen Ketten zu verifizieren und weitere magnetische Nanostrukturen zu finden, wurde zusätzlich das Wachstum der TMO-Ketten auf einem Pt(001) Substrat untersucht. Neben den auf Pt(001) bereits bekannten CoO₂-Ketten

[13, 14] konnte die (3×1) Struktur auch für MnO_2 -Ketten durch atomare Auflösung nachgewiesen werden, während für Fe die Struktur nicht eindeutig bestimmt werden konnte. In Übereinstimmung mit den CoO_2 -Ketten auf Ir(001) konnten auch auf Pt(001) keine magnetischen Nanostrukturen festgestellt werden, wohingegen die MnO_2 -Ketten auf Pt(001) eine zykloida-
le Spinspirale aufweisen. Aufgrund der Abhängigkeit der indirekten DM-Wechselwirkung vom Substrat ist die Periode der magnetischen Struktur durch einen geringeren Rotationswinkel von 72° zwischen benachbarten Ketten länger als für MnO_2 -Ketten auf Ir(001).

Damit handelt es sich bei den MnO_2 -Ketten auf Ir(001) und Pt(001) um eindimensionale Systeme, die durch indirekte DM-Wechselwirkung miteinander koppeln und zu einem chiralen Magnetismus führen. Dabei können diese Systeme als Erweiterung der Modelle für Atome und Cluster auf Pt(111) verstanden werden, die mit ihren bistabilen Zustand Potential für zukünftige Datenspeicher haben [7, 8]. Ob diese Anwendung auch für TMO-Ketten realisierbar ist, müssen weitere Untersuchungen zeigen. Ein erster Ansatz könnte hier beispielsweise die beobachtete magnetische Domänenwand innerhalb einer strukturellen Domäne sein, die durch Manipulation zum Schalten zwischen zwei Zuständen einer magnetischen Domäne führen kann und somit eine erste Grundvoraussetzung für ein Speichersystem liefert.

Literatur

- [1] Wolf, S. A., Awschalom, D. D., Buhrman, R. A. et al.: „Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future“. *Science* **294**.5546, 1488–1495 (2001) (siehe S. 1).
- [2] Khajetoorians, A. A. und Heinrich, A. J.: „Toward single-atom memory“. *Science* **352**.6283, 296–297 (2016) (siehe S. 1).
- [3] Bhatti, S., Sbiaa, R., Hirohata, A. et al.: „Spintronics based random access memory: a review“. *Materials Today* **20**.9, 530–548 (2017) (siehe S. 1, 31).
- [4] Hirjibehedin, C. F., Lutz, C. P. und Heinrich, A. J.: „Spin Coupling in Engineered Atomic Structures“. *Science* **312**.5776, 1021–1024 (2006) (siehe S. 1, 31).
- [5] Loth, S., Baumann, S., Lutz, C. P. et al.: „Bistability in Atomic-Scale Antiferromagnets“. *Science* **335**.6065, 196–199 (2012) (siehe S. 1, 31).
- [6] Donati, F., Rusponi, S., Stepanow, S. et al.: „Magnetic remanence in single atoms“. *Science* **352**.6283, 318–321 (2016) (siehe S. 1).
- [7] Khajetoorians, A. A., Steinbrecher, M., Ternes, M. et al.: „Tailoring the chiral magnetic interaction between two individual atoms“. *Nature Communications* **7**, 10620– (Feb. 2016) (siehe S. 1, 22, 24, 25, 31, 51, 64, 71, 95, 96).
- [8] Hermenau, J., Ibañez-Azpiroz, J., Hübner, C. et al.: „A gateway towards non-collinear spin processing using three-atom magnets with strong substrate coupling“. *Nature Communications* **8**.1, 642– (2017) (siehe S. 1, 31, 64, 71, 95, 96).
- [9] Gambardella, P., Dallmeyer, A., Maiti, K. et al.: „Ferromagnetism in one-dimensional monatomic metal chains“. *Nature* **416**, 301– (März 2002) (siehe S. 1, 31).
- [10] Shen, J., Skomski, R., Klaua, M. et al.: „Magnetism in one dimension: Fe on Cu(111)“. *Phys. Rev. B* **56**, 2340–2343 (Aug. 1997) (siehe S. 1, 31).
- [11] Dupé, B., Bickel, J. E., Mokrousov, Y. et al.: „Giant magnetization canting due to symmetry breaking in zigzag Co chains on Ir(001)“. *New Journal of Physics* **17**.2, 023014 (2015) (siehe S. 1, 31).
- [12] Ferstl, P., Hammer, L., Sobel, C. et al.: „Self-Organized Growth, Structure, and Magnetism of Monatomic Transition-Metal Oxide Chains“. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 046101 (Juli 2016) (siehe S. 1, 31–34, 39, 41–43, 45, 46, 50, 52, 53, 62, 67, 68, 95).

- [13] Ferstl, P.: „Einidimensionale Metalloxydketten“. Dissertation. Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg (2017) (siehe S. [1](#), [31](#), [33](#), [34](#), [39](#), [41](#), [43](#), [45](#), [46](#), [52](#), [53](#), [62](#), [72](#), [75](#), [79](#), [95](#), [96](#)).
- [14] Ferstl, P., Mittendorfer, F., Redinger, J. et al.: „Monatomic Co, CoO_2 , and CoO_3 nanowires on Ir(100) and Pt(100) surfaces: Formation, structure, and energetics“. *Phys. Rev. B* **96**, 085407 (Aug. 2017) (siehe S. [1](#), [14](#), [31](#), [71](#), [72](#), [75](#), [76](#), [78](#), [79](#), [84](#), [96](#)).
- [15] Bode, M.: „Spin-polarized scanning tunnelling microscopy“. *Reports on Progress in Physics* **66.4**, 523 (2003) (siehe S. [3](#)).
- [16] Wiesendanger, R.: „Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy“. Cambridge University Press (2001) (siehe S. [3](#)).
- [17] Chen, C. J.: „Introduction to Scanning Tunneling Microscopy“. Oxford University Press (2008) (siehe S. [3](#), [5](#), [7](#), [8](#)).
- [18] Lounis, S.: „Theory of Scanning Tunneling Microscopy“. *ArXiv e-prints* (Apr. 2014) (siehe S. [4–6](#), [10](#), [12](#), [13](#)).
- [19] Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C. et al.: „Tunneling through a controllable vacuum gap“. *Applied Physics Letters* **40.2**, 178–180 (1982) (siehe S. [6](#)).
- [20] Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C. et al.: „Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy“. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 57–61 (Juli 1982) (siehe S. [6](#)).
- [21] Binnig, G. und Rohrer, H.: „Scanning tunneling microscopy“. *Surface Science* **126.1**, 236–244 (1983) (siehe S. [6](#)).
- [22] Bardeen, J.: „Tunnelling from a Many-Particle Point of View“. *Phys. Rev. Lett.* **6**, 57–59 (Jan. 1961) (siehe S. [6](#)).
- [23] Tersoff, J. und Hamann, D. R.: „Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope“. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1998–2001 (Juni 1983) (siehe S. [6](#), [7](#)).
- [24] Tersoff, J. und Hamann, D. R.: „Theory of the scanning tunneling microscope“. *Phys. Rev. B* **31**, 805–813 (Jan. 1985) (siehe S. [6–8](#)).
- [25] Chen, C. J.: „Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning tunneling microscopy“. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 448–451 (Juli 1990) (siehe S. [7](#), [8](#), [11](#)).
- [26] Kemmer, J.: „Strukturelle und elektronische Eigenschaften metallischer Oberflächen unter dem Einfluss von Korrelationseffekten“. Doktorarbeit. Julius Maximilians Universität Würzburg Graduate School of Science und Technology (2016) (siehe S. [7](#)).
- [27] Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C. et al.: „(111) facets as the origin of reconstructed Au(110) surfaces“. *Surface Science* **131.1**, L379–L384 (1983) (siehe S. [8](#)).

-
- [28] Hallmark, V. M., Chiang, S., Rabolt, J. F. et al.: „Observation of Atomic Corrugation on Au(111) by Scanning Tunneling Microscopy“. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2879–2882 (Dez. 1987) (siehe S. 8).
- [29] Wintterlin, J., Wiechers, J., Brune, H. et al.: „Atomic-Resolution Imaging of Close-Packed Metal Surfaces by Scanning Tunneling Microscopy“. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 59–62 (Jan. 1989) (siehe S. 8).
- [30] Ohnishi, S. und Tsukada, M.: „Molecular orbital theory for the scanning tunneling microscopy“. *Solid State Communications* **71.5**, 391–394 (1989) (siehe S. 8).
- [31] Heinze, S., Blügel, S., Pascal, R. et al.: „Prediction of bias-voltage-dependent corrugation reversal for STM images of bcc (110) surfaces: W(110), Ta(110), and Fe(110)“. *Phys. Rev. B* **58**, 16432–16445 (Dez. 1998) (siehe S. 8).
- [32] Krammel, C.: „Entwicklung, Aufbau und Charakterisierung eines Rastertunnelmikroskops“. Masterarbeit. Julius-Maximilians-Universität Würzburg (2013) (siehe S. 8).
- [33] Ternes, M.: „Scanning tunneling spectroscopy at the single atom scale“. Dissertation. Lausanne: École Polytechnique Fédérale de Lausanne (2006), S. 156 (siehe S. 11).
- [34] Bode, M., Kubetzka, A., Heinze, S. et al.: „Spin-orbit induced local band structure variations revealed by scanning tunnelling spectroscopy“. *Journal of Physics: Condensed Matter* **15.5**, S679 (2003) (siehe S. 11–13, 26, 47).
- [35] Julliere, M.: „Tunneling between ferromagnetic films“. *Physics Letters A* **54.3**, 225–226 (1975) (siehe S. 13).
- [36] Blügel, S., Pescia, D. und Dederichs, P. H.: „Ferromagnetism versus antiferromagnetism of the Cr(001) surface“. *Phys. Rev. B* **39**, 1392–1394 (Jan. 1989) (siehe S. 13).
- [37] Wiesendanger, R., Güntherodt, H.-J., Güntherodt, G. et al.: „Observation of vacuum tunneling of spin-polarized electrons with the scanning tunneling microscope“. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 247–250 (Juli 1990) (siehe S. 13).
- [38] Bode, M., Getzlaff, M. und Wiesendanger, R.: „Spin-Polarized Vacuum Tunneling into the Exchange-Split Surface State of Gd(0001)“. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4256–4259 (Nov. 1998) (siehe S. 13).
- [39] Pietzsch, O., Kubetzka, A., Bode, M. et al.: „Real-Space Observation of Dipolar Antiferromagnetism in Magnetic Nanowires by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy“. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5212–5215 (Mai 2000) (siehe S. 13, 26, 27, 58).
- [40] Wiesendanger, R. und Bode, M.: „Nano- and atomic-scale magnetism studied by spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy“. *Solid State Communications* **119.4**, 341–355 (2001) (siehe S. 13, 27).

- [41] Heinze, S., Bode, M., Kubetzka, A. et al.: „Real-Space Imaging of Two-Dimensional Antiferromagnetism on the Atomic Scale“. *Science* **288**.5472, 1805–1808 (2000) (siehe S. 13).
- [42] Ferriani, P., Bergmann, K. von, Vedmedenko, E. Y. et al.: „Atomic-Scale Spin Spiral with a Unique Rotational Sense: Mn Monolayer on W(001)“. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 027201 (Juli 2008) (siehe S. 13, 24, 26).
- [43] Yoshida, Y., Schröder, S., Ferriani, P. et al.: „Conical Spin-Spiral State in an Ultrathin Film Driven by Higher-Order Spin Interactions“. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 087205 (Feb. 2012) (siehe S. 13).
- [44] Heinze, S., Bergmann, K. von, Menzel, M. et al.: „Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions“. *Nature Physics* **7**, 713– (Juli 2011) (siehe S. 13, 25, 32).
- [45] Bergmann, K. von, Kubetzka, A., Pietzsch, O. et al.: „Interface-induced chiral domain walls, spin spirals and skyrmions revealed by spin-polarized scanning tunneling microscopy“. *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**.39, 394002 (Sep. 2014) (siehe S. 13, 20, 24).
- [46] Bode, M., Krause, S., Berbil-Bautista, L. et al.: „On the preparation and electronic properties of clean W(110) surfaces“. *Surface Science* **601**.16, 3308–3314 (2007) (siehe S. 14).
- [47] Zakeri, K., Peixoto, T., Zhang, Y. et al.: „On the preparation of clean tungsten single crystals“. *Surface Science* **604**.2, L1–L3 (2010) (siehe S. 14).
- [48] Gross Rudolf/ Marx, A.: „Festkörperphysik“. Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2012) (siehe S. 17–22).
- [49] „Magnetische Schichtsysteme, Vorlesungsmanuskripte“. Institut der Festkörperforschung der Forschungszentrum Jülich GmbH (1999) (siehe S. 17–22).
- [50] Bergmann, K. von, Bode, M. und Wiesendanger, R.: „Magnetismus mit Dreh. Spinspiralen an Oberflächen“. *Physik in unserer Zeit* **39**.2, 93–97 (2008) (siehe S. 20, 22).
- [51] Bode, M., Heide, M., Bergmann, K. von et al.: „Chiral magnetic order at surfaces driven by inversion asymmetry“. *Nature* **447**, 190– (Mai 2007) (siehe S. 20, 22, 24, 26).
- [52] Fert, A., Cros, V. und Sampaio, J.: „Skyrmions on the track“. *Nature Nanotechnology* **8**, 152– (März 2013) (siehe S. 21, 22).
- [53] Ruderman, M. A. und Kittel, C.: „Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons“. *Phys. Rev.* **96**, 99–102 (Okt. 1954) (siehe S. 21).

-
- [54] Kasuya, T.: „A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener’s Model“. *Progress of Theoretical Physics* **16.1**, 45–57 (1956) (siehe S. 21).
- [55] Dzyaloshinskii, I. E.: „Thermodynamical Theory of weak ferromagnetism in antiferromagnetic substances“. *Sov. Phys. JETP* Bd. 5.6, S. 1259–1262 (1957) (siehe S. 22).
- [56] Moriya, T.: „Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism“. *Phys. Rev.* **120**, 91–98 (Okt. 1960) (siehe S. 22, 23, 63, 88).
- [57] Cheong, S.-W. und Mostovoy, M.: „Multiferroics: a magnetic twist for ferroelectricity“. *Nature Materials* **6**, 13– (Jan. 2007) (siehe S. 22).
- [58] Vedmedenko, E. Y., Udvardi, L., Weinberger, P. et al.: „Chiral magnetic ordering in two-dimensional ferromagnets with competing Dzyaloshinsky-Moriya interactions“. *Phys. Rev. B* **75**, 104431 (März 2007) (siehe S. 24).
- [59] Smith, D.: „New mechanisms for magnetic anisotropy in localised S-state moment materials“. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **1.3**, 214–225 (1976) (siehe S. 24).
- [60] Fert, A. und Levy, P. M.: „Role of Anisotropic Exchange Interactions in Determining the Properties of Spin-Glasses“. *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1538–1541 (Juni 1980) (siehe S. 24, 25).
- [61] Krönlein, A., Schmitt, M., Hoffmann, M. et al.: „Magnetic Ground State Stabilized by Three-Site Interactions: Fe/Rh(111)“. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 207202 (Mai 2018) (siehe S. 25).
- [62] Schmitt, M.: „Studien der Interkalation von Gd auf Graphen/Ir(111)“. Masterarbeit. Julius-Maximilians-Universität Würzburg (2015) (siehe S. 25).
- [63] Bergmann, K. von: „Iron nanostructures studied by spin-polarised olarised scanning tunneling microscopy“. Dissertation. Universität Hamburg (2004) (siehe S. 25, 26).
- [64] Wachowiak, A., Wiebe, J., Bode, M. et al.: „Direct Observation of Internal Spin Structure of Magnetic Vortex Cores“. *Science* **298.5593**, 577–580 (2002) (siehe S. 26).
- [65] Kleiber, M., Bode, M., Ravlić, R. et al.: „Magnetic properties of the Cr(001) surface studied by spin-polarized scanning tunneling spectroscopy“. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **240.1**. 4th International Symposium on Metallic Multilayers, 64–69 (2002) (siehe S. 26).
- [66] Kubetzka, A., Bode, M., Pietzsch, O. et al.: „Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy with Antiferromagnetic Probe Tips“. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 057201 (Jan. 2002) (siehe S. 26).

- [67] Bode, M., Pietzsch, O., Kubetzka, A. et al.: „Experimental Evidence for Intra-Atomic Noncollinear Magnetism at Thin Film Probe Tips“. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2142–2145 (März 2001) (siehe S. 26, 27, 47).
- [68] Pietzsch, O., Kubetzka, A., Bode, M. et al.: „Observation of Magnetic Hysteresis at the Nanometer Scale by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy“. *Science* **292**, 2053–2056 (2001) (siehe S. 26, 58).
- [69] Bode, M., Heinze, S., Kubetzka, A. et al.: „Magnetization-Direction-Dependent Local Electronic Structure Probed by Scanning Tunneling Spectroscopy“. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 237205 (Nov. 2002) (siehe S. 26, 28, 29, 47).
- [70] Kubetzka, A., Pietzsch, O., Bode, M. et al.: „Spin-polarized scanning tunneling microscopy study of 360° walls in an external magnetic field“. *Phys. Rev. B* **67**, 020401 (Jan. 2003) (siehe S. 26, 29, 30, 47).
- [71] Vedmedenko, E. Y., Kubetzka, A., Bergmann, K. von et al.: „Domain Wall Orientation in Magnetic Nanowires“. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 077207 (Feb. 2004) (siehe S. 26, 47).
- [72] Elmers, H. J., Hauschild, J. und Gradmann, U.: „Onset of perpendicular magnetization in nanostripe arrays of Fe on stepped W(110) surfaces“. *Phys. Rev. B* **59**, 3688–3695 (Feb. 1999) (siehe S. 26, 27, 58).
- [73] Gradmann, U. und Waller, G.: „Periodic lattice distortions in epitaxial films of Fe(110) on W(110)“. *Surface Science* **116.3**, 539–548 (1982) (siehe S. 26).
- [74] Bode, M., Pascal, R., Dreyer, M. et al.: „Nanostructural and local electronic properties of Fe/W(110) correlated by scanning tunneling spectroscopy“. *Phys. Rev. B* **54**, R8385–R8388 (Sep. 1996) (siehe S. 26, 27).
- [75] Hauschild, J., Elmers, H. J. und Gradmann, U.: „Dipolar superferromagnetism in monolayer nanostripes of Fe(110) on vicinal W(110) surfaces“. *Phys. Rev. B* **57**, R677–R680 (Jan. 1998) (siehe S. 26, 27, 31).
- [76] Meckler, S., Mikuszeit, N., Preßler, A. et al.: „Real-Space Observation of a Right-Rotating Inhomogeneous Cycloidal Spin Spiral by Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy in a Triple Axes Vector Magnet“. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 157201 (Okt. 2009) (siehe S. 26, 47, 59).
- [77] Bethge, H., Heuer, D., Jensen, C. et al.: „Misfit-related effects in the epitaxial growth of iron on W(110)“. *Surface Science* **331-333**. *Proceedings of the 14th European Conference on Surface Science*, 878–884 (1995) (siehe S. 27).

- [78] Jensen, C., Reshöft, K. und Köhler, U.: „Direct observation of strain relaxation in iron layers on W(110) by time-resolved STM“. *Applied Physics A* **62.3**, 217–221 (März 1996) (siehe S. 27).
- [79] Gould, C., Rüster, C., Jungwirth, T. et al.: „Tunneling Anisotropic Magnetoresistance: A Spin-Valve-Like Tunnel Magnetoresistance Using a Single Magnetic Layer“. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 117203 (Sep. 2004) (siehe S. 28).
- [80] Bergmann, K. von, Menzel, M., Serrate, D. et al.: „Tunneling anisotropic magnetoresistance on the atomic scale“. *Phys. Rev. B* **86**, 134422 (Okt. 2012) (siehe S. 28).
- [81] Elmers, H. J., Hauschild, J., Höche, H. et al.: „Submonolayer Magnetism of Fe(110) on W(110): Finite Width Scaling of Stripes and Percolation between Islands“. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 898–901 (Aug. 1994) (siehe S. 31).
- [82] Fiorentini, V., Methfessel, M. und Scheffler, M.: „Reconstruction mechanism of fcc transition metal (001) surfaces“. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1051–1054 (Aug. 1993) (siehe S. 32).
- [83] Rhodin, T. und Brodén, G.: „Preparation and chemisorptive properties of the clean normal and reconstructed surfaces of Ir(100) — role of multiplets“. *Surface Science* **60.2**, 466–484 (1976) (siehe S. 32).
- [84] Gao, Q. J. und Tsong, T. T.: „Direct observation of atomic structures in the surface reconstruction of Ir and Pt (001), (110), and (131) surfaces“. *Phys. Rev. B* **36**, 2547–2556 (Aug. 1987) (siehe S. 32, 35, 36).
- [85] Johnson, K., Ge, Q., Titmuss, S. et al.: „Unusual bridged site for adsorbed oxygen adatoms: Theory and experiment for Ir₁₀₀–(1 × 2)–O“. *The Journal of Chemical Physics* **112.23**, 10460–10466 (2000) (siehe S. 32–34).
- [86] Schmidt, A., Meier, W., Hammer, L. et al.: „Deep-going reconstruction of Ir(100)-5 × 1“. *Journal of Physics: Condensed Matter* **14.47**, 12353 (2002) (siehe S. 32, 36, 72).
- [87] Bickel, J. E., Meier, F., Brede, J. et al.: „Magnetic properties of monolayer Co islands on Ir(111) probed by spin-resolved scanning tunneling microscopy“. *Phys. Rev. B* **84**, 054454 (Aug. 2011) (siehe S. 32).
- [88] Marczinowski, F., Bergmann, K. von, Bode, M. et al.: „Growth of Cr on Ir(111) studied by scanning tunneling microscopy“. *Surface Science* **600.5**, 1034–1039 (2006) (siehe S. 32).
- [89] Bergmann, K. von, Heinze, S., Bode, M. et al.: „Observation of a Complex Nanoscale Magnetic Structure in a Hexagonal Fe Monolayer“. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 167203 (Apr. 2006) (siehe S. 32).
- [90] Hammer, L., Meier, W., Schmidt, A. et al.: „Submonolayer iron film growth on reconstructed Ir(100) – (5 × 1)“. *Phys. Rev. B* **67**, 125422 (März 2003) (siehe S. 32, 80).

- [91] Klein, A., Schmidt, A., Hammer, L. et al.: „Lateral nanoscale Fe-Ir superlattices on Ir(100)“. *EPL (Europhysics Letters)* **65.6**, 830 (2004) (siehe S. 32).
- [92] Grant, J.: „A LEED study of the Ir (100) surface“. *Surface Science* **18.2**, 228–238 (1969) (siehe S. 33, 72).
- [93] Lerch, D., Klein, A., Schmidt, A. et al.: „Unusual adsorption site of hydrogen on the unreconstructed Ir(100) surface“. *Phys. Rev. B* **73**, 075430 (Feb. 2006) (siehe S. 33).
- [94] Gilarowski, G., Méndez, J. und Niehus, H.: „Initial growth of Cu on Ir(100)-(5 × 1)“. *Surface Science* **448.2**, 290–304 (2000) (siehe S. 33).
- [95] Ferstl, P., Schmitt, T., Schneider, M. A. et al.: „Structure and ordering of oxygen on unreconstructed Ir(100)“. *Phys. Rev. B* **93**, 235406 (Juni 2016) (siehe S. 33, 34).
- [96] Heinz, K., Schmidt, G., Hammer, L. et al.: „Dynamics of the reconstruction process Ir(100) 1 × 1 → 1 × 5“. *Phys. Rev. B* **32**, 6214–6221 (Nov. 1985) (siehe S. 33).
- [97] Arblaster, J. W.: „Crystallographic Properties of Iridium“. *Platinum Metals Review* **54.2**, 93–102 (2010) (siehe S. 35, 36).
- [98] Giovanardi, C., Hammer, L. und Heinz, K.: „Ultrathin cobalt oxide films on Ir(100)–(1 × 1)“. *Phys. Rev. B* **74**, 125429 (Sep. 2006) (siehe S. 41, 42).
- [99] Tröppner, C., Schmitt, T., Reuschl, M. et al.: „Incommensurate Moiré overlayer with strong local binding: CoO(111) bilayer on Ir(100)“. *Phys. Rev. B* **86**, 235407 (Dez. 2012) (siehe S. 41, 42).
- [100] Heinz, K. und Hammer, L.: „Epitaxial cobalt oxide films on Ir(100)—the importance of crystallographic analyses“. *Journal of Physics: Condensed Matter* **25.17**, 173001 (2013) (siehe S. 41, 42).
- [101] Kurz, P., Förster, F., Nordström, L. et al.: „Ab initio treatment of noncollinear magnets with the full-potential linearized augmented plane wave method“. *Phys. Rev. B* **69**, 024415 (Jan. 2004) (siehe S. 62).
- [102] „Die DFT-Berechnungen in dieser Arbeit stammen von Bihlmayer, G. und Blügel, S. von Peter Grünberg Institut and Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich & JARA, 52425 Jülich, Germany“. () (siehe S. 62, 63).
- [103] Vosko, S. H., Wilk, L. und Nusair, M.: „Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis“. *Canadian Journal of Physics* **58.8**, 1200–1211 (1980) (siehe S. 62).

- [104] Shick, A. B., Liechtenstein, A. I. und Pickett, W. E.: „Implementation of the LDA+U method using the full-potential linearized augmented plane-wave basis“. *Phys. Rev. B* **60**, 10763–10769 (Okt. 1999) (siehe S. 62).
- [105] Fedak, D. und Gjostein, N.: „On the anomalous surface structures of gold“. *Surface Science* **8.1**, 77–97 (1967) (siehe S. 72, 73).
- [106] Palmberg, P. W. und Rhodin, T. N.: „Surface Structure of Clean Au (100) and Ag (100) Surfaces“. *Phys. Rev.* **161**, 586–588 (Sep. 1967) (siehe S. 72, 73).
- [107] Binnig, O., Rohrer, H., Gerber, C. et al.: „Real-space observation of the reconstruction of Au(100)“. *Surface Science* **144.2**, 321–335 (1984) (siehe S. 72, 73).
- [108] Wang, X.-Q.: „Phases of the Au(100) surface reconstruction“. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3547–3550 (Dez. 1991) (siehe S. 72).
- [109] Hove, M. V., Koestner, R., Stair, P. et al.: „The surface reconstructions of the (100) crystal faces of iridium, platinum and gold: I. Experimental observations and possible structural models“. *Surface Science* **103.1**, 189–217 (1981) (siehe S. 72, 73).
- [110] Hammer, R., Meinel, K., Krahn, O. et al.: „Surface reconstruction of Pt(001) quantitatively revisited“. *Phys. Rev. B* **94**, 195406 (Nov. 2016) (siehe S. 72–74).
- [111] Heilmann, P., Heinz, K. und Müller, K.: „The superstructures of the clean Pt(100) and Ir(100) surfaces“. *Surface Science* **83.2**, 487–497 (1979) (siehe S. 72, 74).
- [112] Behm, R. J., Hösler, W., Ritter, E. et al.: „Correlation between domain boundaries and surface steps: A scanning-tunneling-microscopy study on reconstructed Pt(100)“. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 228–231 (Jan. 1986) (siehe S. 72).
- [113] Borg, A., Hilmen, A.-M. und Bergene, E.: „STM studies of clean, CO- and O₂-exposed Pt(100)-hex-R0.7°“. *Surface Science* **306.1**, 10–20 (1994) (siehe S. 72, 74).
- [114] Morgan, A. und Somorjai, G.: „Low energy electron diffraction studies of gas adsorption on the platinum (100) single crystal surface“. *Surface Science* **12.3**, 405–425 (1968) (siehe S. 72, 73, 75, 76).
- [115] Menzel, M., Mokrousov, Y., Wieser, R. et al.: „Information Transfer by Vector Spin Chirality in Finite Magnetic Chains“. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 197204 (Mai 2012) (siehe S. 80).
- [116] Jerdev, D. I. und Koel, B. E.: „Fe deposition on Pt(111): a route to Fe-containing Pt–Fe alloy surfaces“. *Surface Science* **513.1**, L391–L396 (2002) (siehe S. 81).
- [117] Lee, T.-Y., Sarbach, S., Kuhnke, K. et al.: „Growth and surface alloying of Fe on Pt(997)“. *Surface Science* **600.16**, 3266–3273 (2006) (siehe S. 81).

- [118] Losio, R., Altmann, K. N. und Himpsel, F. J.: „Continuous Transition from Two- to One-Dimensional States in Si(111)-(5×2)-Au“. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 808–811 (Juli 2000) (siehe S. 83).
- [119] Houselt, A. van, Gnielka, T., Brugh, J. M. A. de et al.: „Peierls instability in Pt chains on Ge(001)“. *Surface Science* **602.10**, 1731–1735 (2008) (siehe S. 83).

Anhang

Abbildungsverzeichnis

2.1	Die eindimensionale Potentialbarriere.	4
2.2	Geometrie der Tunnelspitze nach Tersoff und Einfluss der Spitzenwellenfunktion auf die Korrugation.	7
2.3	Funktionsweise des STM.	9
2.4	Schematische Darstellung zum spinpolarisierten STM nach dem Stoner-Modell.	12
2.5	Foto des verwendeten UHV-Systems	14
3.1	Arten der magnetischen Wechselwirkung im Festkörper.	21
3.2	Unterscheidung von Spinspiralen und Zeigerdiagramm der SP-STM Messung.	23
3.3	Magnetische Analyse der DL Fe/W(110)	27
3.4	Charakterisierung magnetischer Spitzen auf der DL Fe/W(110)	29
4.1	Schematische Darstellung der (2×1) Sauerstoffrekonstruktion und der (3×1) TMO-Struktur.	33
4.2	Diskussion der sauberen Ir(001) Oberfläche.	35
4.3	(2×1) Sauerstoffrekonstruktion bei verschiedenen Heiztemperatur und konstanten Sauerstoffdruck.	37
4.4	Auswirkung des Sauerstoffdrucks auf die (2×1) Rekonstruktion von Sauerstoff.	38
4.5	Einfluss der Abkühlphase auf die Sauerstoffrekonstruktion auf Ir(001).	40
4.6	Einfluss der Co-Dosierung auf die Beobachtung einer (3×1) Phase.	42
4.7	Einfluss der Heiztemperatur auf das Wachstums der CoO_2 -Ketten.	43
4.8	Magnetische Messung auf den (3×1) CoO_2 -Ketten.	44
4.9	Nicht magnetische Messungen der FeO_2 -Ketten.	46
4.10	Vergleich von spingemittelter und spinaufgelöster atomarer Auflösung von FeO_2 -Ketten.	47
4.11	Bestimmung der weichen Magnetisierungsrichtung für FeO_2 -Ketten.	48
4.12	Magnetisches Modell für FeO_2 -Ketten und Messung an einer strukturellen Domänengrenze.	49
4.13	Nicht magnetische Übersichtsaufnahme der MnO_2 -Ketten.	52
4.14	Atomar aufgelöste Bilder der MnO_2 -Ketten mit W-Spitze und spinpolarisierter Spitze.	53
4.15	Schematische Darstellung der chiralen magnetischen (9×2) Struktur für MnO_2 -Ketten.	54
4.16	Überprüfung der in-plane Komponente für MnO_2 -Ketten ean einer strukturellen Domänengrenze.	56

4.17	Messung der MnO ₂ -Ketten mit einer senkrecht zur Probenoberfläche polarisierten Spitze.	58
4.18	Darstellung der vier möglichen Kontrastniveaus für die 120° MnO ₂ -Spinspiralen in Abhängigkeit der Polarisationsrichtung und der Drehrichtung der Mn Spins.	59
4.19	Experimentelle Überprüfung der Drehrichtung von MnO ₂ Spinspiralen durch voneinander unabhängiger Domänen.	60
4.20	Beobachtung einer magnetischen Domänenwand innerhalb einer strukturellen Domäne der MnO ₂ -Ketten.	61
4.21	Graphische Darstellung der Ergebnisse für die DFT-Berechnungen der magnetischen Wechselwirkungen innerhalb des Systems der MnO ₂ -Ketten.	63
4.22	Messungen der CrO ₂ -Ketten mit einer W-Spitze.	65
4.23	Spannungsabhängige Messungen auf der Streifenstruktur von CrO ₂	66
4.24	Magnetische Messungen an der CrO ₂ Streifenstruktur.	68
5.1	Charakterisierung der sauberen Pt(001) Oberfläche.	73
5.2	Wachstum von Co/Pt(001) und CoO ₂ -Ketten auf Pt(001).	76
5.3	Magnetische Messungen von CoO ₂ -Ketten auf Pt(001).	78
5.4	Wachstum von Fe/Pt(001) bei verschiedenen Temperaturen.	80
5.5	Oxidation der bei Raumtemperatur gewachsenen Fe/Pt(001) Oberfläche bei verschiedenen Heiztemperaturen.	81
5.6	Streifenstruktur nach der Oxidation der bei kalten Temperaturen gewachsenen Fe/Pt(001) Probe.	83
5.7	Wachstum und Oxidation der Mn/Pt(001) Oberfläche.	85
5.8	Strukturelle Analyse der Streifenstruktur von MnO ₂ -Ketten auf Pt(001).	86
5.9	Atomare Auflösung der MnO ₂ -Ketten auf Pt(001) mit einer nicht magnetischen W-Spitze und mit einer magnetischen Cr/W-Spitze.	87
5.10	Modell der magnetischen (15 × 2) Einheitszelle für MnO ₂ -Ketten auf Pt(001).	88
5.11	Überprüfung der out-of-plane Komponente der MnO ₂ -Struktur auf Pt(001).	89
5.12	Überprüfung und Analyse des in-plane Kontrast für MnO ₂ -Ketten auf Pt(001) an einer strukturellen Domänengrenze.	90
5.13	Laplace gefilterte Darstellung einer großen magnetischen Aufnahme von MnO ₂ -Ketten auf Pt(001) mit Abweichungen zur (15 × 2) Phase.	93

Tabellenverzeichnis

4.1 Übersicht über die magnetische Kopplung der verschiedenen TMO-Ketten nach DFT-Berechnungen von Ferstl <i>et al.</i> [12].	34
---	----

Abkürzungsverzeichnis

TMO	Transition–Metal oxide	Übergangsmetalloxid
AFM	Antiferromagnetic	Antiferromagnetisch
FM	Ferromagnetic	Ferromagnetisch
DFT	Density Functional Theory	Dichtefunktionaltheorie
LDOS	Local Density Of States	Lokale Zustandsdichte
ML	Monolayer	Monolage
DL	Doublelayer	Doppellage
3L	Third Layer	Dritte Lage
DM	Dzyalshinskii–Moriya	Dzyalshinskii–Moriya
RKKY	Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida	Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida
SBK	Spin-Orbit Coupling	Spin-Bahn-Kopplung
STM	Scanning Tunneling Microscopy	Rastertunnelmikroskopie
STS	Scanning Tunneling Spectroscopy	Rastertunnelspektroskopie
SP–STM	Spin-Polarized STM	Spin-polarisiertes STM
LEED	Low-Energy Electron Diffraction	Niederenergetische Elektronenbeugung
UHV	Ultra High Vacuum	Ultrahochvakuum

Verzeichnis eigener Publikationen

- Wilfert, S., Schmitt, M., Schmidt, H., Maurerer, T., Sesse, P., Wang, H., Mao, Q., Fang, M., und Bode, M.: „Scanning tunneling microscopy and spectroscopy studies of the heavy-electron superconductor TlNi_2Se_2 “. *Phys. Rev. B* **97** 014514 (2018).
- Krönlein, A., Schmitt, M., Hoffmann, M., Kemmer, J., Seubert, N., Vogt, M., Küspert, J., Böhme, M., Alonzi, B., Kügel, J., A.-Albrithen, H., Bode, M., Bihlmayer, G., und Blügel, S.: „Magnetic ground state stabilized by Three-Site Interactions: Fe/Rh(111)“. *Phys. Rev. Lett.* **120** 207202 (2018).
- Schreyeck, S., Schmitt, M., Brunner, K., Karczewski, G., Sessi, P., Vogt, M., Wilfert, S., Odolesko, A. B., Molenkamp, L. W. und Bode, M.: „Breaking crystalline symmetry of epitaxial SnTe films by strain“. *Phys. Rev. Mat.* **3** 024203 (2019).
- Vogt, M., Buschmann, R., Toksabay, S., Schmitt, M., Schwab, M., Bode, M. und Krueger, A.: „Self-Assembly and Electronic Structure of Tribenzotriquinacenes on Ag(111)“. *J. Phys. Chem. C* **123** 5469 (2019).
- Schmitt, M., Moras, P., Bihlmayer, G., Cotsakis, R., Vogt, M., Kemmer, J., Belabbes, A., Sheverdyaeva, P. M., Kundu, A. K., Carbone, C., Blügel, S. und Bode, M.: „Indirect chiral magnetic exchange through Dzyaloshinskii-Moriya-enhanced RKKY interactions in manganese oxide chains on Ir(100)“. *Nature Comm.* **10** 2610 (2019).
- Schmitt, M., Park, C.H., Weber, P., Jäger, A., Kemmer, J., Vogt, M. und Bode M.: „Structural and magnetic properties of 3d transition metal oxide chains on the (001) surfaces of Ir and Pt“. *Phys. Rev. B* **100** 054431 (2019).

Danksagung

Im Rahmen dieser Arbeit und im Laufe der Promotionszeit bin ich von meinem Umfeld und Betreuern immer wieder motiviert und unterstützt worden. Letztendlich waren viele an meiner wissenschaftlichen Arbeit direkt und indirekt beteiligt. Besonderer dank gilt:

- *Prof. Dr. Matthias Bode* für die Möglichkeit der Promotion an seinen Lehrstuhl. Seine Betreuung war hervorragend und die regelmäßige Diskussion der Messergebnisse hilfreich um das messtechnische Vorgehen zu optimieren.
- *Prof. Dr. Fakher Assaad* für die Bereitschaft zum zweiten Betreuer und die damit verbundene Zweitkorrektur dieser Arbeit.
- *Prof. Dr. Roland Baumhauer* vom Lehrstuhl für Geografie, der sich als dritter Betreuer engagiert auf die Physik eingelassen hat.
- *Matthias Vogt* für die kollegiale Zusammenarbeit als Team am VT- und LT3-Messsystem. Vor allem zum Aufrechterhalten des Messbetriebs während des Urlaubs und das hervorragende Arbeitsklima im Raum F186 sind hier zu nennen.
- *Jens Kügel* für das Korrekturlesen dieser Arbeit.
- *Anita Gebhard*, die immer als Ansprechpartnerin diente, wenn es um Bestellung rund um das UHV-System und Verdampfer ging. Ohne Sie wäre an unserem Lehrstuhl sicher weniger Ordnung.
- *Dem EP II Team* für die wunderschönen vier Jahre an diesem Lehrstuhl. Vor allem die Grillabende, die traditionelle Feuerzangenbowle und die Betriebsausflüge waren immer ein Erlebnis.
- *Meinen Eltern* für die Unterstützung während meines gesamten Studiums.
- *Meiner Frau Marina* für die Geduld und das Verständnis, dass man am Morgen nicht weiß, wie spät es am Abend werden wird.
- *Allen Anderen*, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Zu nennen wären hier vor allem die Teams der Heliumverflüssigung, der wissenschaftlichen Werkstatt und des technischen Betriebs.

Affidavit

I hereby confirm that my thesis entitled „Structural analysis and magnetic properties of *3d* transition-metal oxide chains on Ir(001) and Pt(001)“ is the result of my own work. I did not receive any help or support from commercial consultants. All sources and / or materials applied are listed and specified in this thesis.

Furthermore, I confirm that this thesis has not yet been submitted as part of another examination process neither in identical nor in similar form.

Würzburg, den 28.02.2019

Martin Schmitt

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die Dissertation „Strukturanalyse und magnetische Eigenschaften von Ketten aus *3d*-Übergangsmetalloxiden auf Ir(001) und Pt(001)“ eigenständig, d.h. insbesondere selbstständig und ohne Hilfe einer kommerziellen Promotionsberatung angefertigt und keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet zu haben.

Ich erkläre außerdem, dass ich die Dissertation weder in gleicher noch in ähnlicher Form bereits in einem anderen Prüfungsvorhaben vorgelegen hat.

Würzburg, den 28.02.2019

Martin Schmitt