

## 2. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden theoretische Grundlagen erläutert, die für das weitere Verständnis der vorliegenden Arbeit wichtig sind. Zunächst folgt eine Einführung in das Filmwachstum mit besonderer Berücksichtigung der in Kapitel 4 untersuchten Materialsysteme. Anschließend werden Grundlagen zur intrinsischen Spannung und magnetoelastischen Kopplung dünner Filme erläutert. Danach wird das Biegebalkenmessprinzip und der Einsatz als Magnetometer vorgestellt. Zum Abschluss wird die Rastertunnelmikroskopie als eine diese Arbeit ergänzende Messmethode erwähnt.

### 2.1 Grundlagen des Filmwachstums

#### 2.1.1 Kategorien des Filmwachstums

Das in dieser Arbeit ausschließlich betrachtete epitaktische Wachstum eines Kristalls (Filmmaterial) auf einer wohldefinierten Unterlage (Substrat) kann im thermodynamischen Gleichgewicht erfolgen oder fernab davon durch kinetische Wachstumsparameter beeinflusst stattfinden.

#### **Wachstum im thermodynamischen Gleichgewicht**

In der Literatur werden drei Wachstumsmodi unterschieden: das Volmer–Weber oder Inselwachstum [27], das Frank–Van der Merwe oder Lage–für–Lage–Wachstum [28] und

das Stranski–Krastranow oder Lagen–Insel–Wachstum [29] (**Abb. 2-1**).

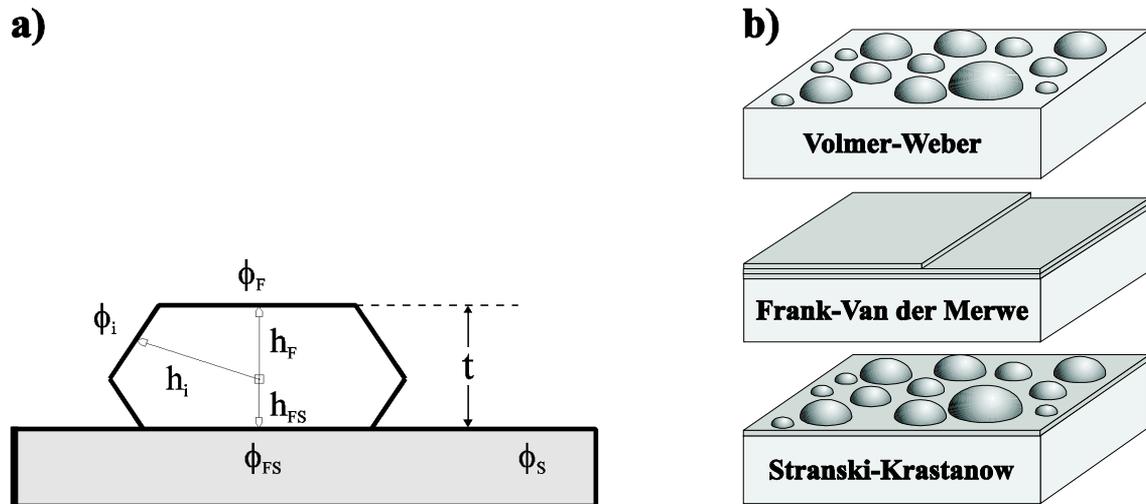
Betrachtet man den Prozess der Nukleation des Filmes, so überwiegen natürlich Oberflächen- und Grenzflächenatome deutlich gegenüber Atomen, die dem Volumen zuzuordnen sind. Deshalb wird bei einer energetischen Betrachtung die Gleichgewichtsform durch die freie Oberflächenenergie  $\phi_i$  der Kristalloberflächen sowie die Grenzflächenenergie  $\phi_{FS}$  bestimmt. Aus der Theorie der heterogenen Nukleation ergibt sich folgende Beziehung [30]:

$$\frac{\phi_i}{h_i} = \frac{\phi_F}{h_F} = \frac{\phi_{FS} - \phi_S}{h_{FS}} = \frac{\phi_F - \beta}{h_{FS}} = \frac{\Delta\mu}{2V_{at}} = \frac{kT}{2V_{at}} \cdot \ln \frac{P}{P_\infty}. \quad (2.1)$$

Hier ist  $\Delta\mu$  das chemische Potential,  $h_i$  der zentrale Abstand der jeweiligen Kristallfacetten,  $k$  die Boltzmannkonstante,  $T$  die Substrattemperatur,  $P$  der Dampfdruck der Inseln,  $P_\infty$  der Dampfdruck des Volumenmaterials und  $V_{at}$  das Volumen eines Filmatoms. Kommen Film (F) und Substrat (S) in Kontakt, so wird die Adhäsionsenergie  $\beta$  frei; die Grenzflächenenergie berechnet sich dann zu:  $\phi_{FS} = \phi_F + \phi_S - \beta$ . Die wichtige Information über die Art des Filmwachstums steckt im Wert von  $h_{FS}$ . Dieser kann sowohl positiv als auch negativ sein, im Gegensatz zu  $h_i$  und  $h_F$ , die immer positive Werte haben. Abhängig von  $h_{FS}$  unterscheidet man folgende (oben erwähnte) Wachstumsmodi:

**Volmer–Weber–Wachstum.** Für den Fall  $\Delta\mu > 0$ , d.h. der Übersättigung während des Filmwachstums, folgt:  $h_{FS} > -h_F$ , solange  $\beta < 2\phi_F$ . Damit ergibt sich 3D–Inselwachstum, da die Teilchendicke  $t$  senkrecht zum Substrat gegeben ist durch  $t = h_F + h_{FS}$ . Im weiteren Wachstumsverlauf koaleszieren diese Inseln in größere Gleichgewichtsformationen. Ab einer kritischen Inselgröße ist aus kinetischen Gründen diese Gleichgewichtsformation nicht mehr haltbar [31], es werden erste Korngrenzen gebildet. Am Perkulationspunkt wächst die Mehrzahl der Inseln zusammen und Kanäle dazwischen werden gefüllt. Notwendigerweise sind derart gewachsene Filme rau, da die individuellen Körner verschiedene Höhen aufweisen und durch Nanometer tiefe Gräben getrennt sein können. Typische Vertreter für Volmer–Weber–Wachstum sind Ag, Cu, Au auf mica(001) [32].

**Frank–Van der Merwe–Wachstum.** Erreicht die freie Adhäsionsenergie  $\beta$  den



**Abb. 2-1:** Modell zum Filmwachstum im thermodynamischen Gleichgewicht (a) und die sich daraus ergebenden verschiedenen Wachstumsmodi (b).

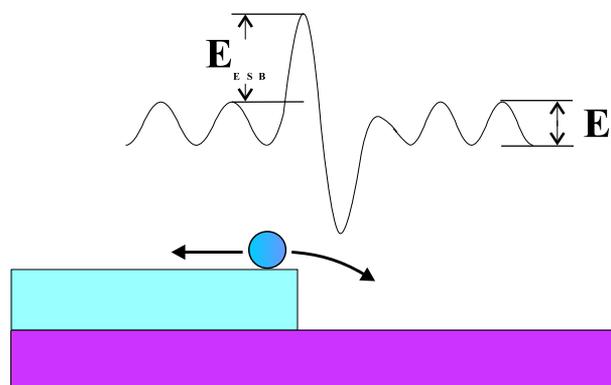
Wert  $2\phi_F$ , dann verschwindet die Teilchendicke  $t$ :  $h_{FS} \rightarrow -h_F$ . Damit benetzt der Film das Substrat vollständig, d.h. das Wachstum erfolgt Lage-für-Lage. Das Frank-Van der Merwe-Wachstum wird vielfach bei der Deposition von Metallen auf Metallen gefunden [33].

**Stranski-Krastanow-Wachstum.** Hier findet zunächst Lagenwachstum statt, dass nach wenigen Monolagen Schichtdicke von 3D-Inselwachstum abgelöst wird (z.B. Ge/Si(001), Abschnitt 2.1.2). Dieses Wachstum folgt jedoch nicht unmittelbar aus dem o.a. Modell. Die freie Oberflächenenergie der ersten Monolagen kann sich signifikant von der des freien Filmmaterials  $\phi_F$  unterscheiden (bspw. durch die Entstehung einer Film-Substrat-Legierung). Die 2D-Zwischenschichtlage muss dann als neues Substrat angenommen werden, auf welches die thermodynamische Betrachtung für das weitere Wachstum (s.o.) erneut anzuwenden ist. Der Übergang zu 3D-Inselwachstum kann aber auch aufgrund der Verspannung des Films bei Gitterfehlanpassung (Misfit, Abschnitt 2.2) stattfinden [34]. Die Inselbildung ermöglicht das weitere Filmwachstum deutlich geringer verspannt, da 3D-Inseln Gitterverzerrungen relaxieren können [8, 9, 35, 36]. Obwohl in diesem Fall die Oberflächenenergie erhöht wird, befindet sich das System wegen der geringeren Verspannungsenergie global im energetischen Minimum.

## Kinetisches Wachstum

Viele in jüngster Zeit veröffentlichte Experimente zum epitaktischen Filmwachstum unterschiedlicher Materialsysteme werfen Fragen auf, die eine ausschließlich thermodynamische Betrachtung des Filmwachstums nicht beantworten kann. Beispielsweise erwartet man bei Homoepitaxie stets ein Lage-für-Lage-Wachstum. Tatsächlich wird aber auch bei solchen Systemen (Pt/Pt(111) [37], Ge/Ge(001) [38]) Inselwachstum beobachtet. Zur Erklärung dieser Resultate müssen zusätzliche Aspekte berücksichtigt werden. Dazu gehören unterschiedliche Defekte wie Fehlstellen, Adatome, Stufenkanten, Stapelfehler, Versetzungen, Domänengrenzen bei Oberflächenrekonstruktionen, eingebaute Fremdatome etc.. Diese Defekte können energetische Senken für an der Oberfläche diffundierende Atome sein, da die Koordinationszahl im Vergleich zur flachen Terrasse möglicherweise erhöht ist. Zusätzlich können Energiebarrieren und Verzerrungsgradienten auftreten, womit insgesamt eine lokale Diffusionskinetik entsteht, die in einem kritischen Bereich das System global in einen anderen thermodynamischen Zustand zwingen kann.

Ein wichtiger Aspekt ist das Vorhandensein von Energiebarrieren an Stufenkanten (**Ehrlich-Schwoebel-Barrieren** (ESB) [39, 40, 41, 42]), die die Diffusion von Atomen auf Terrassen und über Stufenkanten hinweg beeinflussen können (**Abb. 2-2**). Dabei wird die Abwärtsdiffusion ankommender Atome durch eine erhöhte Energiebarriere ( $E_{ESB}$ ) unterdrückt bzw. reduziert. Dies kann zu einem Übergang von 2D-Lagen- zu 3D-Inselwachstum führen. Zur analytischen Beschreibung wird ein verallgemeinerter



**Abb. 2-2:** An Stufenkanten atomarer Terrassen kann für diffundierende Atome eine zusätzliche Energiebarriere ( $E_{ESB}$ ) auftreten, die Ehrlich-Schwoebel-Barriere.

Langevin-Ansatz für MBE-Wachstum (Molecular Beam Epitaxy — Molekularstrahlepitaxie) herangezogen [43]:

$$\frac{\partial h(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} - [\vec{\nabla} h(\vec{r}, t)] + f(\vec{r}, t). \quad (2.2)$$

Hier ist  $\vec{j}$  die (Atom-)Diffusionsstromdichte,  $h(\vec{r}, t)$  die lokale Höhe an der Position  $\vec{r}$  als Funktion der Depositionszeit,  $f(\vec{r}, t)$  die lokale Depositionsrate und ihre zeitliche Fluktuation. Eine Lösung von Gl. 2.2 liefert unter bestimmten Bedingungen eine pyramidiale Inselstruktur des Filmes [44, 45, 46], in Übereinstimmung mit dem Experiment [37, 38, 47]. Ein wichtiger Parameter ist hierbei die Substrattemperatur, die die thermische (kinetische) Energie der auf dem Substrat diffundierenden Atome bestimmt. Eine Erhöhung bewirkt das Überwinden von Stufenbarrieren und führt damit zum Abflachen der Filme.

Das Verschwinden der Stufenbarrieren geht aber nicht zwangsläufig mit idealem Lagenwachstum einher. Beispielsweise hat auch die **Nukleationsdichte** im Anfangsstadium des Filmwachstums einen Einfluss auf den Wachstumsmodus. Die Nukleation einer neuen Lage beginnt, wenn sich mehrere diffundierende Adatome zu 2D-Inseln zusammenfügen. Der Prozess setzt bereits ein, bevor die darunterliegende Schicht vollständig geschlossen ist. Nun bestimmt die Keimdichte der auf der obersten Atomlage nukleierenden 2D-Inseln, ob dieser Prozess fortwährend zu einem Lage-für-Lage-Wachstum oder nach wenigen Atomlagen zu einem 3D-Inselwachstum führt.

In heteroepitaktischen Systemen wachsen die Filme wegen der Gitterfehlpassung verspannt auf. Die dabei auftretenden (nicht unerheblichen) intrinsischen **Spannungen** können Einfluss auf die Kinetik der mikroskopischen Prozesse und damit auf die Film-morphologie haben [48]. Dabei beeinflusst die Verzerrung der einzelnen Lagen die Adatom-mobilität und verzögert die Koaleszenz entstehender Inseln [49, 50]. Als physikalische Ursache wird der Einfluss von Verspannungen auf Diffusionsbarrieren vorgeschlagen [35].

Auch beim kinetischen Wachstum findet man Insel-, Lagen- und Stranski-Krastanow Wachstum. Unter realen Bedingungen gibt es deshalb keine Trennung zwischen thermodynamischem und kinetischem Wachstum — beide müssen gleichzeitig in Betracht gezogen werden.

## 2.1.2 Wachstum der untersuchten Materialsysteme

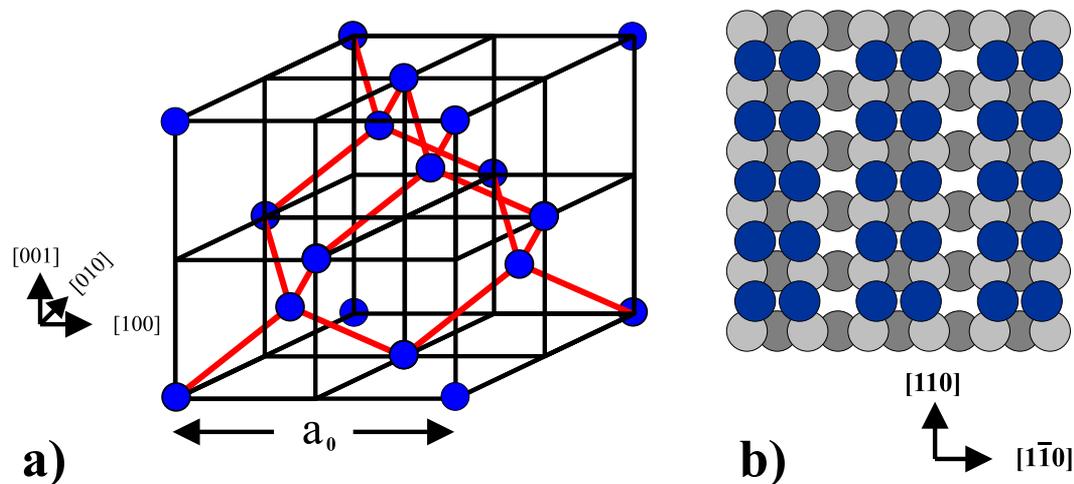
### Ge/Si(001)

Silizium (Si) und Germanium (Ge) kristallisieren im kubisch flächenzentrierten Raumgitter mit zweiatomiger Basis  $(000, \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$ . In dieser sogenannten Diamantstruktur (**Abb. 2-3a**) ist jedes Atom Mittelpunkt eines regelmäßigen Tetraeders. Der Gitterabstand beträgt unter Normalbedingungen  $a_{Ge} = 5,66 \text{ \AA}$  und  $a_{Si} = 5,43 \text{ \AA}$ , die Gitterfehlpassung bei 300 K somit  $-4,1\%$  [51]. Die nominelle Schichtdicke einer einzelnen Atomlage auf der (001)–Oberfläche ist  $a_{Ge}/4 = 1,415 \text{ \AA}$  bzw.  $a_{Si}/4 = 1,357 \text{ \AA}$ .

Charakteristisch für die Si(001)–Oberfläche ist eine  $(1 \times 2)$ –Rekonstruktion. Ursächlich dafür ist das Bestreben, die nominell zwei ungesättigten Bindungen pro Oberflächenatom (engl. dangling bonds) maximal abzusättigen. Das führt dazu, dass jeweils zwei benachbarte Atome dichter zusammenrücken. Die dabei gebildeten Dimere formieren sich zu Atomreihen in  $[110]$ –Richtung (**Abb. 2-3b**). Da aber die atomar nächsthöhere (–tiefere) Terrasse eine um  $90^\circ$  gedrehte dangling–bond Orientierung aufweist, kommt es bei Raumtemperatur zur Bildung von  $(1 \times 2)$ – und  $(2 \times 1)$ –Überstrukturen.

Das epitaktische Wachstum von Germanium auf Silizium(001) erfolgt in dem weiten Temperaturbereich von ca. 800 - 1000 K im Stranski–Krastanow–Modus. Zu Beginn findet lagenweises Wachstum statt. Infolge der Gitterfehlpassung von  $-4,1\%$  entsteht ein hoch verspannter Film. Dieser zeigt im STM bereits Gräben, die auf eine Relaxation der hohen Filmspannungen hindeuten [52]. Ab ca. 5 - 6 ML geht das Lagenwachstum in ein 3D–Inselwachstum über. Die nukleierten Inseln sind kohärent mit der darunterliegenden Schicht und zeigen keinerlei Versetzungen [53, 54]. Zunächst beobachtet man kleine, rechteckige Inseln (”Hut–Cluster”). Diese metastabilen Mikroinseln ( $15 \text{ \AA} \times 15 \text{ \AA}$ ) mit  $\{105\}$  Seitenfacetten werden im weiteren Wachstumsverlauf durch größere Inseln (”Domes”) mit  $\{113\}$ –Seitenfacetten abgelöst [55].

Bei fortgesetztem Wachstum ermöglichen 3D–Inseln eine deutliche Reduktion der Misfitverzerrung, weil in den höheren Insellagen die Gitterabstände in Richtung Gleichgewichtsgitterkonstante relaxiert werden können. Das legt natürlich die Vermutung nahe, dass die Verspannung der Ge–Filme für den Übergang zum 3D–Inselwachstum verant-



**Abb. 2-3:** Das Si-Kristallgitter (a) und die Si(001)-Oberfläche mit den Dimerenreihen in [110]-Richtung (b).

wortlich ist. Die Verspannungsenergie wächst dabei in der Benetzungsschicht soweit an, dass selbst auf Kosten einer erhöhten Oberflächenenergie durch 3D-Inselbildung das System in ein globales Energieminimum läuft, wenn dadurch Spannung relaxiert werden kann [8, 9, 35, 36].

Demgegenüber gibt es aber auch Vorschläge, das Wachstum mit einer lokalen Vorzugsdiffusion der Ge-Atome zu erklären. Dabei bewegen sich Adatome von Bereichen hoher Verspannung (Benetzungsschicht) in Bereiche niedrigerer Verspannung (höhere Lagen großer Inseln) [7], wobei ebenfalls die Verspannungsenergie (lokal) reduziert wird. Der resultierende Teilchenstrom ist dann aber Teil eines kinetisch getriebenen Aufrauvorgangs. Derzeit wird heftig in der Literatur diskutiert, inwieweit thermodynamische oder kinetische Mechanismen für das Wachstum von Ge/Si(001) maßgebend sind.

### Fe/MgO(001)

Magnesiumoxid (MgO) kristallisiert in der NaCl-Struktur, einem fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis  $(000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ . Der Gitterabstand von MgO beträgt  $a_{MgO} = 4,21 \text{ \AA}$  [51]. Eisen (Fe) wächst auf MgO(001) entsprechend dem Frank-Van der Merwe-Modus. Dabei ordnen sich die Fe-Atome der ersten Monolage über den Sauerstoffatomen der obersten MgO-Atomlage an [56]. Die [100]-Richtung des entstehenden bcc-Eisenfilmes ist um  $45^\circ$  gegenüber der [100]-Richtung des fcc-Magnesiumoxidsubstrates verdreht (**Abb. 2-**

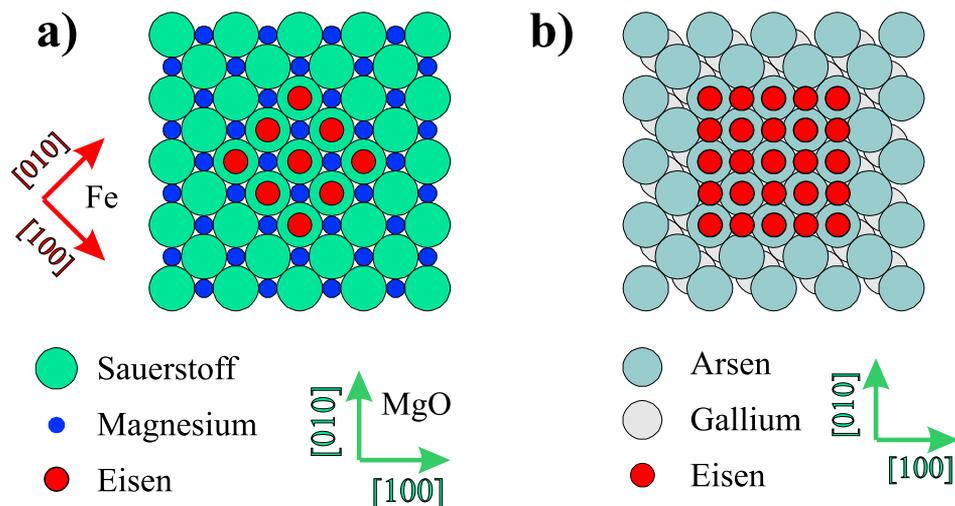
**4a).** Die epitaktische Orientierung ist demzufolge  $\text{bcc-Fe}(001) \parallel \text{fcc-MgO}(001)$  und  $\text{Fe}[100] \parallel \text{MgO}[110]$ . In der pseudomorphen Wachstumsphase ist der Fe-Gitterabstand um 3,5% gegenüber dem Gleichgewichtsgitterabstand ( $a_{\text{Fe}} = 2,866 \text{ \AA}$ ) aufgeweitet. Mit den elastischen Konstanten des Fe für Volumenmaterial entspricht diese Verzerrung einer mechanischen Spannung von 6,8 GPa.

Das Wachstum von Fe/MgO(001) hängt entscheidend von der Depositionstemperatur ab. Wie bereits in der Vergangenheit intensiv untersucht [11], ist erst oberhalb von 500 K die Beweglichkeit der Fe-Atome und damit die Diffusionslänge an der Substratoberfläche ausreichend, um Lagenwachstum zu ermöglichen. Unterhalb 500 K wird das Wachstum nicht mehr vom thermodynamischen Gleichgewicht, sondern zunehmend von kinetischen Wachstumsparametern bestimmt. Beispielsweise wird die Abwärtsdiffusion der Fe-Atome an Stufenkanten durch Diffusionsbarrieren behindert. Dadurch kommt es zu einem Übergang von 2D-Lagen- zu 3D-Inselwachstum [37]. Die Oberflächenkorruption beträgt einige Nanometer. Unterhalb von 400 K sind die Oberflächenstrukturen weitgehend unregelmäßig, während zwischen 400 und 450 K regelmäßige, quadratische, abgeflachte Pyramiden einheitlicher Größe auftreten [47].

### Fe/GaAs(001)

Galliumarsenid (GaAs) ist ein Verbindungshalbleiter mit Zinkblendestruktur. Die Gitterkonstante beträgt  $a_{\text{GaAs}} = 5,65 \text{ \AA}$  [51]. Es gibt im wesentlichen zwei Arten von GaAs(001)-Oberflächen: die Ga-reiche Oberfläche mit einer  $(4 \times 6)$ -Oberflächenrekonstruktion [57] und die As-reiche Oberfläche mit einer  $(2 \times 4)$  bzw.  $c(4 \times 4)$  [25, 58]. Eisen wächst epitaktisch so auf GaAs(001), dass gilt:  $\text{bcc-Fe}(100) \parallel \text{GaAs}(001)$  und  $\text{Fe}[100] \parallel \text{GaAs}[100]$ . Dabei muss beachtet werden, dass sich lateral zwei Eisenatome entlang eines GaAs-Gitterabstandes anordnen. Damit ergibt sich eine Gitterfehlانpassung von Fe bezüglich des (halben) GaAs-Gitterabstandes von  $-1,36 \%$  (**Abb. 2-4b**). Bei perfekt pseudomorphem Lagenwachstum entspricht das einer Verspannung von  $-2,8 \text{ GPa}$ .

Das Wachstum von Fe/GaAs(001) ist in den letzten Jahren durch eine Reihe von Arbeitsgruppen intensiv untersucht worden. Wegen der höheren Beweglichkeit wird Eisen überwiegend bei einer Substrattemperatur von  $175^\circ\text{C}$  deponiert [23, 24]. Die Keimbil-



**Abb. 2-4:** Atomanordnung von Fe auf der (001)-Oberfläche von MgO (a) und GaAs (b).

derung zu Beginn des Filmwachstums erfolgt über 3D-Inseln, wobei die Koaleszenz dieser Inseln nach wenigen Monolagen einsetzt [25]. Erst ab diesem Zeitpunkt können Fe(001)-Beugungsbilder im LEED (engl. Low Energy Electron Diffraction) beobachtet werden, was eine strukturelle Ordnung der Filme bedeutet [59]. Beim weiteren Wachstum bleibt die Oberflächenmorphologie rau, mit einer rms-Rauigkeit (engl. root mean square) von 1 nm [25].

In der Anfangsphase des Filmwachstums kommt es zu einer Interdiffusion, bei der Ga und As in den Fe-Film diffundieren, weshalb keine scharfe Grenzschicht ausgebildet wird. Stattdessen treten in der Zwischenschicht verschiedene Fe-Ga-As-Verbindungen auf, wie FeAs, Fe<sub>2</sub>As, Fe<sub>3</sub>Ga<sub>2-x</sub>As<sub>x</sub>. Unabhängig von der zugrundeliegenden Oberfläche — Ga-reiche (4 × 6) oder As-reiche (2 × 4) bzw. c(4 × 4) — entsteht eine dünne Lage Fe<sub>3</sub>Ga<sub>2-x</sub>As<sub>x</sub> an der Metall/Halbleiter-Grenzfläche, die nur die Hälfte der Magnetisierung von Volumen-Eisen zeigt. Außerdem diffundiert As in höhere Filmlagen und segregiert bis zur Oberfläche [25, 26, 57].

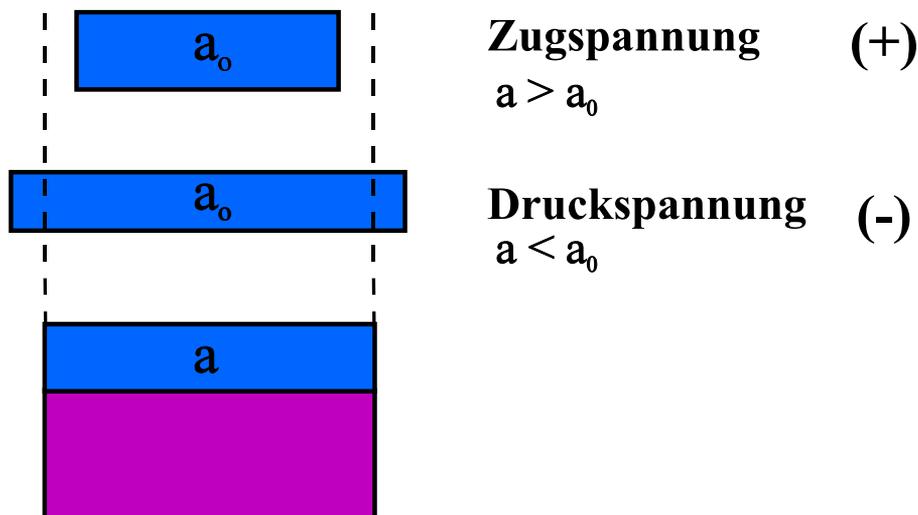
Um die Durchmischungseffekte zwischen Film- und Substratmaterial zu unterdrücken, wird Fe seit kurzem auch bei geringeren Temperaturen deponiert. Auf der Ga-reichen (4 × 6)-Oberfläche konnte bei 300 K Depositionstemperatur gute Epitaxie beobachtet werden [59, 60, 61].

## 2.2 Intrinsische Spannung dünner Filme

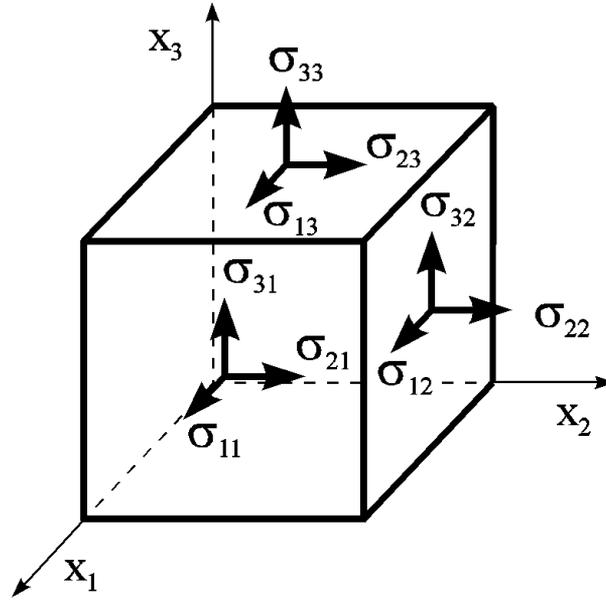
Man spricht von Verzerrung eines dünnen Filmes, wenn seine Abmessungen  $a$  (Länge, Breite, Dicke) gegenüber den Gleichgewichtsabmessungen  $a_0$  verändert sind. Beim heteroepitaktischen Filmwachstum wird diese Verzerrung durch den Misfit veranschaulicht. In der vorliegenden Arbeit wird der (temperaturabhängige) Misfit definiert als Differenz zwischen der Gitterkonstante des Filmmaterials  $a_F$  und der Gitterkonstante des Substrates  $a_S$ :

$$f(T) = \frac{a_S(T) - a_F(T)}{a_F(T)} \quad (2.3)$$

Die Verzerrung des Gitters führt zu einer mechanischen Spannung im Kristall, die als eine auf einen Querschnitt wirkende Kraft ( $\text{N/m}^2$  bzw. Pa) angegeben wird. Das Vorzeichen der Spannung hängt von der Art der Verzerrung ab. Löst man in Gedanken einen verspannten Film vom Substrat, so ändert er seine Dimensionen, wie in **Abb. 2-5** anhand eines uniaxial verspannten Filmes illustriert. Muss der Film dabei "gedrückt" werden, um wieder auf das Substrat zu passen, spricht man von Druckspannung (vereinbarungsgemäß negatives Vorzeichen), anderenfalls von Zugspannung (positives Vorzeichen).



**Abb. 2-5:** Schematische Darstellung von Druck- bzw. Zugspannung eines uniaxial verspannten Filmes mit dem Gleichgewichtsgitterabstand  $a_0$ .



**Abb. 2-6:** Komponenten des Spannungstensors im kubischen Kristallsystem.

Es ergeben sich ca. 1 - 2 GPa Misfit-Spannung pro 1% Misfit-Verzerrung. In der Praxis können aber nur wenige Prozent Misfit vollständig übertragen werden.

Allgemein ist die Spannung ein Tensor zweiter Stufe. Vergleicht man diesen im kubischen Kristallsystem mit einem Würfel (**Abb. 2-6**), so gehören die Komponenten  $\sigma_{ij}$  des Tensors  $\tilde{\sigma}$  zu Kräften in Richtung  $x_i$  auf Ebenen normal zu  $x_j$ . Das bedeutet, dass die  $\sigma_{ii}$  die Normalkomponenten und die  $\sigma_{ij}$  ( $i \neq j$ ) die Scherkomponenten der Spannung darstellen. Die lineare Elastizitätstheorie gibt nun einen Zusammenhang zwischen den Spannungen  $\sigma_{ij}$  und den (im Rahmen der Theorie kleinen) Verzerrungen  $\epsilon_{ij}$ :

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} c_{ijkl} \cdot \epsilon_{kl} \quad (2.4)$$

$$\epsilon_{ij} = \sum_{kl} s_{ijkl} \cdot \sigma_{kl} \quad (2.5)$$

Hier sind  $c_{ijkl}$  die elastischen Modulen und  $s_{ijkl}$  die elastischen Koeffizienten. Sie stellen Tensoren vierter Stufe mit 81 Komponenten dar. Da  $\tilde{\sigma}$  und  $\tilde{\epsilon}$  symmetrisch sind (d.h.  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  und  $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ ), sind nur 36 Komponenten davon unabhängig. Zudem ist auch der Tensor  $c_{ijkl}$  selbst aufgrund von Energiebetrachtungen symmetrisch. Diese Symmetrie reduziert die Zahl seiner unabhängigen Komponenten weiter auf 21. Schließlich führt die

hohe Kristallsymmetrie im kubischen System auf nurmehr drei unabhängige elastische Modulen:  $c_{1111}$ ,  $c_{1122}$ ,  $c_{1212}$ . In elastisch isotropen Festkörpern genügen zwei voneinander unabhängige Konstanten (Youngmodul  $Y$  und die Querkontraktionszahl  $\nu$ ).

Für den Fall kubischer Kristallsysteme ist die elastische Energie pro Volumen gegeben als [62]:

$$E_{EL}(\tilde{\epsilon}) = \frac{1}{2}c_{11}(\epsilon_{11}^2 + \epsilon_{22}^2 + \epsilon_{33}^2) + c_{12}(\epsilon_{11}\epsilon_{22} + \epsilon_{22}\epsilon_{33} + \epsilon_{33}\epsilon_{11}) + 2c_{44}(\epsilon_{12}^2 + \epsilon_{13}^2 + \epsilon_{23}^2) \quad (2.6)$$

Die Komponenten des Spannungstensors  $\sigma_{ij}$  erhält man durch Differenzieren der elastischen Energie nach den zugehörigen Komponenten der Filmverzerrung  $\epsilon_{ij}$ . Damit ergibt sich für  $\sigma_{ij}$ :

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= c_{11} \cdot \epsilon_{11} + c_{12} \cdot (\epsilon_{22} + \epsilon_{33}) & \sigma_{12} &= 4c_{44} \cdot \epsilon_{12} \\ \sigma_{22} &= c_{11} \cdot \epsilon_{22} + c_{12} \cdot (\epsilon_{11} + \epsilon_{33}) & \sigma_{13} &= 4c_{44} \cdot \epsilon_{13} \\ \sigma_{33} &= c_{11} \cdot \epsilon_{33} + c_{12} \cdot (\epsilon_{11} + \epsilon_{22}) & \sigma_{23} &= 4c_{44} \cdot \epsilon_{23} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Diese Gleichungen stellen das Hooke'sche Gesetz in drei Dimensionen dar. Für pseudomorphes Wachstum eines (001)-Filmes auf einem Substrat mit quadratischem Gitter gilt für die Verzerrung in der Filmebene biaxial in Richtung [100] und [010]:  $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = f$  sowie  $\epsilon_{12} = \epsilon_{13} = \epsilon_{23} = 0$ . Für Spannungen in der Filmebene gilt:  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma$ . Außerdem kann der Film Spannungen senkrecht zur Filmebene relaxieren, d.h.  $\sigma_{33} = 0$ . Damit folgt aus Gl. 2.7 für die Misfitspannung:

$$\sigma = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11}} \cdot f \quad (2.8)$$

Zur Auswertung der gemessenen Filmspannungen können auch die (richtungsabhängigen) Werte von  $Y$  und  $\nu$  herangezogen werden. In der kubischen Kristallklasse werden diese nach folgenden Gleichungen für beliebige Richtungen berechnet:

Material	Youngmodul $Y$ $10^9 \text{ N/m}^2$	Poissonzahl $\nu$
MgO(001)[100]	249,4	0,239
MgO(001)[110]	318,0	0,030
GaAs(001)[100]	84,9	0,310
GaAs(001)[110]	120,8	0,020
Si(001)[110]	169,0	0,064

**Tab. 2.1:** Youngmodul  $Y$  und Poissonzahl  $\nu$  der verwendeten Substratmaterialien und Kristallorientierungen (berechnet mit Elastizitätsmodulen aus [62]).

$$\frac{1}{Y} = s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2) \quad (2.9)$$

$$\nu = -\frac{s_{12} + (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 m_1^2 + l_2^2 m_2^2 + l_3^2 m_3^2)}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2)} \quad (2.10)$$

Hier sind die  $l_i$  die Richtungscosinusse des Richtungsvektors  $\vec{l}$ ,  $m_i$  die Richtungscosinusse des Einheitsvektors  $\vec{m}$  in der Filmebene senkrecht zu  $\vec{l}$  und  $s_{ij}$  die drei unabhängigen elastischen Koeffizienten bezüglich der kubischen [100]-Achse.

Die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Filme waren durchweg biaxial verspannt. Der zugehörige biaxiale Modul ist isotrop und berechnet sich aus den elastischen Koeffizienten bzw. elastischen Modulen mit folgender Formel [32]:

$$\frac{Y}{(1 - \nu)} = \frac{1}{(s_{11} + s_{12})} = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11}} \quad (2.11)$$

Zur Auswertung der Filmspannung im Biegebalkenexperiment sind nur die elastischen Eigenschaften ( $Y$ ,  $\nu$ ) des Substrates maßgebend. Für die in der Arbeit verwendeten Materialien MgO(001), GaAs(001) und Si(001) sind  $Y$  und  $\nu$  in **Tab. 2.1** aufgelistet. Zu beachten ist hier, dass zwar der biaxiale Modul in der kubischen Kristallklasse für die (001)-Oberfläche isotrop ist, nicht jedoch die Werte für  $Y$  und  $\nu$  selbst.

## 2.3 Die magnetoelastische Kopplung

### 2.3.1 Magnetismus und Kristallenergie

Bestimmte Materialien (Ferromagnetika) zeigen in kristallisierter Form unterhalb einer kritischen Temperatur eine spontane kollektive Ordnung der permanenten magnetischen Momente, die **Magnetisierung**. Die Richtungsabhängigkeit dieser Magnetisierung und die sich dabei ausbildende Domänenstruktur wird durch verschiedene Energiebeiträge beeinflusst. Dazu gehören die magnetostatische Energie oder **Formanisotropie**, die magnetokristalline Energie oder **Kristallanisotropie** und die **magnetoelastische Energie**.

#### Formanisotropie

Dieser von der Probenform abhängige Energiebeitrag hat seine Ursache in der klassischen Dipol–Dipol–Wechselwirkung. Diese bewirkt in dünnen ferromagnetischen Schichten, dass der resultierende Magnetisierungsvektor  $\vec{M}$  aufgrund der Streufeldminimierung in den allermeisten Fällen in der Ebene liegt. Die Formanisotropieenergiedichte  $E_F$  wird durch den Entmagnetisierungstensor  $\tilde{N}$  beschrieben:

$$E_F = \frac{1}{2} \mu_0 M^2 (\alpha_1^2 N_1 + \alpha_2^2 N_2 + \alpha_3^2 N_3) \quad (2.12)$$

wobei das Entmagnetisierungsfeld  $\vec{H}_D = -\tilde{N} \cdot \vec{M}$  beträgt. Die  $N_i$  sind die Diagonalkomponenten von  $\tilde{N}$ ,  $\mu_0$  die Induktionskonstante. Für dünne Schichten ist nur der Entmagnetisierungsfaktor senkrecht auf die Filmebene von Null verschieden. Üblicherweise gibt man die Formanisotropieenergiedichte als Funktion des polaren Winkels  $\Theta$  an:

$$E_F = K_F \cos \Theta \quad (2.13)$$

Die Formanisotropiekonstante  $K_F$ , welche der Entmagnetisierungsenergie von dünnen Schichten bei senkrechter Magnetisierung entspricht, liegt bei einigen MJ/m<sup>3</sup> (z.B. Fe: 1,92 MJ/m<sup>3</sup>). Sie ist damit deutlich höher als magnetokristalline Energiebeiträge (s.u.).

### Kristallanisotropie

Die Kristallanisotropie (magnetokristalline Energie) bewirkt die Ausrichtung der Magnetisierung entlang definierter kristallographischer Achsen. Die Ursache dafür ist die Spin–Bahn–Wechselwirkung, durch die der Spin an teilweise eingefrorene Bahnmomente gekoppelt ist. Das Ergebnis ist das Auftreten von leichten und schweren Magnetisierungsachsen im Kristall. Die magnetokristalline Energiedichte  $E_K$  eines kubischen Kristalls lässt sich mit den zugehörigen Konstanten  $K_i$  darstellen als:

$$E_K = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 \quad (2.14)$$

wobei die  $\alpha_i$  die Richtungscosinusse des Magnetisierungsvektors  $\vec{M}$  bezüglich der kubischen Achsen sind. In ultradünnen Schichten gewinnen Oberflächen und Grenzflächen energetisch an Einfluss. Diese zusätzlichen Energiebeiträge lassen sich in einer effektiven, schichtdickenabhängigen Anisotropiekonstante  $K^{eff}$  zusammenfassen:

$$K^{eff} = K^{Vol} + \frac{K^{OF}}{d_F} \quad (2.15)$$

mit dem Volumenwert  $K^{Vol}$ , dem Oberflächenbeitrag  $K^{OF}$  und der Filmdicke  $d_F$ . Die Größenordnung der Kristallanisotropie bewegt sich im Bereich von 10 kJ/m<sup>3</sup>.

### Magnetoelastische Energie

Die Gesamtenergie des magnetischen Festkörpers hängt außerdem von seinem Verzerungszustand ab. Die Wechselwirkung zwischen der mechanischen Verzerrung und der Magnetisierung des Kristallgitters wird durch die magnetoelastische Energiedichte  $E_{MEL}$  beschrieben:

$$E_{MEL} = B_1(\epsilon_{11}(\alpha_1^2 - \frac{1}{3}) + \epsilon_{22}(\alpha_2^2 - \frac{1}{3}) + \epsilon_{33}(\alpha_3^2 - \frac{1}{3})) + 2B_2(\epsilon_{12}\alpha_1\alpha_2 + \epsilon_{23}\alpha_2\alpha_3 + \epsilon_{31}\alpha_3\alpha_1) \quad (2.16)$$

Hier wurde wieder der einfache Fall des kubischen Systems angenommen. Die  $\alpha_i$  sind die Richtungscosinusse der Magnetisierung und die  $B_i$  die magnetoelastischen Kopplungskonstanten. Da (abhängig von  $\epsilon_{ij}$  und  $B_i$ ) das Vorzeichen der magnetoelastischen Energie sowohl positiv als auch negativ sein kann (im Gegensatz zur stets positiven elastischen Energie:  $E_{EL} \propto \epsilon^2$ , vgl. Gl. 2.6), kann ein magnetischer Kristall seine Gesamtenergie durch kleine Gitterdeformationen minimieren. Im unverspannten Kristall mit seinem Gleichgewichtsgitterabstand ist der Energiebeitrag von  $E_{MEL}$  mit ca.  $100 \text{ J/m}^3$  gegenüber den anderen Energiebeiträgen vollständig zu vernachlässigen. Wird der Kristall aber aufgrund von Gitterfehlpassung bei heteroepitaktischem Wachstum extern verzerrt ( $\epsilon$  variiert), so gelangt der magnetoelastische Energiebeitrag ( $E_{MEL} \propto B \cdot \epsilon$ ) jedoch in die Größenordnung der anderen Energiebeiträge. Für epitaktische Fe(001)–Schichten auf MgO(001)–Substraten ( $\epsilon = 0,035$ ;  $B_1 = -3,43 \times 10^6 \text{ J/m}^3$ ) erreicht dieser Energiebeitrag einen Wert von  $\approx 10^5 \text{ J/m}^3$ , was dem doppelten Wert der magnetokristallinen Anisotropiekonstante  $K_1$  von Fe ( $5,46 \times 10^4 \text{ J/m}^3$ ) entspricht [63]. Da dieses Phänomen Bestandteil der vorliegenden Arbeit ist, soll im nächsten Abschnitt näher darauf eingegangen werden.

### 2.3.2 Magnetostriktion und magnetoelastische Kopplung

Wie im vorangegangenen Abschnitt bereits besprochen, kann eine Veränderung der Magnetisierung eines ferromagnetischen Kristalls auch zu einer Änderung des Verzerrungszustandes und damit der Kristallform führen (**Magnetostriktion**). Umgekehrt kann ebenso eine externe Gitterverzerrung Einfluss auf die magnetischen Anisotropieenergien nehmen. Dieses Wechselspiel zwischen magnetischer und elastischer Energie wird als magnetoelastische Kopplung bezeichnet.

Die Magnetostriktion wird üblicherweise in zwei Arten unterschieden:

- **Gestaltmagnetostriktion** bezeichnet die Formänderung in Richtung der Magnetisierung (longitudinale Magnetostriktion) oder senkrecht zur Magnetisierungsrichtung (transversale Magnetostriktion). Dabei wird nur die Form des Kristalls geändert, das Volumen bleibt erhalten.

- **Volumenmagnetostriktion** bezeichnet die Volumenänderung des Kristalls, die aus der Kombination transversaler und longitudinaler Magnetostriktion resultiert.

Diese Arbeit befasst sich ausschließlich mit der Gestaltmagnetostriktion, da im Falle des hier untersuchten Eisens eine Volumenveränderung beim Ummagnetisieren vernachlässigt werden kann. Die Längenänderung  $\Delta l/l$  in einer beliebigen Richtung  $\vec{\beta}$  ergibt sich allgemein zu:

$$\frac{\Delta l}{l} = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} \beta_i \beta_j \quad (2.17)$$

wobei  $\beta_i$  die Richtungen der Kristallachsen bezeichnen, bezüglich derer die Längenänderung gemessen wird und  $\epsilon_{ij}$  sind die Komponenten des Verzerrungstensors. Für die Beschreibung der Magnetostriktion wird die Längenänderung üblicherweise in Termen der Sättigungsmagnetostriktionskonstanten  $\lambda_{100}$  bzw.  $\lambda_{111}$  angegeben und lautet für kubische Kristalle [64]:

$$\lambda(\alpha, \beta) = \frac{3}{2} \lambda_{100} (\alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3}) + 3 \lambda_{111} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1) \quad (2.18)$$

mit den Richtungen der Magnetisierung  $\alpha_i$ . Die  $\lambda_{100}$  und  $\lambda_{111}$  geben die Sättigungswerte der longitudinalen Magnetostriktion in Richtung [100] und [111] an, d.h. der Differenz zwischen dem unmagnetisierten und dem in Richtung der Magnetisierung gesättigten Zustand. Die magnetostriktiven Längenänderungen sind sehr klein. Sie liegen für die Übergangsmetalle Fe, Co, Ni bei  $\lambda \approx 10^{-5} - 10^{-6}$ .

Wird ein ferromagnetischer Kristall in eine bestimmte Richtung  $\alpha_i$  magnetisiert, so erhält man die Gleichgewichtskonfiguration des Kristalls, indem die Gesamtenergie (also die Summe aus Gl. 2.6 und Gl. 2.16) bezüglich der Verzerrungskoeffizienten  $\epsilon_{ij}$  minimiert wird. Für die Koeffizienten des Verzerrungstensors ergibt sich:

$$\epsilon_{ii} = -B_1 \cdot \frac{(\alpha_i^2 - \frac{1}{3})}{c_{11} - c_{12}} \quad \text{und} \quad \epsilon_{ij} = -B_2 \cdot \frac{\alpha_i \alpha_j}{2c_{44}}, \quad i \neq j \quad (2.19)$$

Setzt man die  $\epsilon$  aus Gl. 2.19 in Gl. 2.17 ein, so erhält man:

$$\frac{\Delta l}{l} = -\frac{B_1}{c_{11} - c_{12}}(\alpha_1^2\beta_1^2 + \alpha_2^2\beta_2^2 + \alpha_3^2\beta_3^2 - \frac{1}{3}) - \frac{B_2}{c_{44}}(\alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2 + \alpha_2\alpha_3\beta_2\beta_3 + \alpha_3\alpha_1\beta_3\beta_1) \quad (2.20)$$

Durch einen Koeffizientenvergleich von Gl. 2.20 und Gl. 2.18 erhält man eine Beziehung zwischen den Magnetostriktionskonstanten  $\lambda$  und den magnetoelastischen Kopplungskonstanten  $B_i$ :

$$\lambda_{100} = -\frac{2}{3} \cdot \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} \quad \text{und} \quad \lambda_{111} = -\frac{1}{3} \cdot \frac{B_2}{c_{44}} \quad (2.21)$$

### Magnetoelastische Kopplung höherer Ordnung

Eine Reihe neuerer theoretischer [65, 66] und experimenteller [11, 12] Untersuchungen zeigen, dass zur vollständigen Beschreibung der magnetoelastischen Kopplung auch Terme höherer Ordnung berücksichtigt werden müssen. Dabei ist das Schlüsselproblem, einen geeigneten Ansatz für die Terme erster und zweiter Ordnung der magnetoelastischen Energiedichte,  $E_{MEL}^{(1)}$  und  $E_{MEL}^{(2)}$ , als Funktion der Richtungskosinusse  $\alpha_i$  der Magnetisierung zu finden. Eine Möglichkeit ist die Entwicklung der magnetoelastischen Energie in Termen der Verzerrung  $\epsilon_{ij}$ :

$$E_{MEL} = E_{MEL}^{(1)} + E_{MEL}^{(2)} = V_{ij}^0 \epsilon_{ij} + \frac{1}{2} V_{ijkl}^0 \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \quad (2.22)$$

wobei die Koeffizienten  $V$  polynomiale Ausdrücke der  $\alpha_i$  sind:

$$\begin{aligned} V_{ij}^0 &= c_{ij} + c_{klij} \alpha_k \alpha_l + c_{klmnij} \alpha_k \alpha_l \alpha_m \alpha_n \\ V_{ijkl}^0 &= d_{ijkl} + d_{mnijkl} \alpha_m \alpha_n + d_{mnopijkl} \alpha_m \alpha_n \alpha_o \alpha_p \end{aligned}$$

mit den elastischen Modulen  $c$ . In kubischen Systemen reduziert sich wegen der Kristallsymmetrie die Anzahl der unabhängigen magnetoelastischen Kopplungskonstanten; im Fall der magnetoelastischen Kopplung erster Ordnung zu ebenden bereits genannten Konstanten  $B_1$  und  $B_2$ . Betrachtet man die magnetoelastische Kopplung zweiter Ordnung, so unterscheidet sich der in Gl. 2.22 dargestellte allgemeine Ansatz von dem der

Pionierarbeit zu diesem Thema von O'Handley et al. [67]. Dieser schlug vor, die magnetoelastische Energie zweiter Ordnung darzustellen durch einen Ausdruck der Form:

$$E_{MEL}^{(2)} = d_{ijkl}\epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\alpha_i\alpha_j\alpha_k\alpha_l \quad (2.23)$$

In einer neueren Arbeit von Fähnle et al. [66] wurde gezeigt, dass dieser Ansatz nicht vollständig ist, weil er zwingend verlangt, dass jeder Index von  $\epsilon$  mit einem Index von  $\alpha$  gekoppelt ist. Einer der Folgen wäre dann, dass nur Terme vierter Ordnung in  $\alpha$  auftreten, was eine starke Einschränkung bedeutet.

Der zweite und mithin fundamentalere Weg zur Behandlung der magnetoelastischen Kopplung höherer Ordnung ist die Konstruktion der Energie durch Skalarprodukte der symmetrisierten Verzerrungsvariablen. Diese sind ein Basissatz einer gegebenen irreduziblen Darstellung der Punktgruppe des Kristalls. Durch die Erzeugung der Entwicklungskoeffizienten aus harmonischen Polynomen und die Aufsummation über alle irreduziblen Darstellungen erhält man einen Ausdruck für die magnetoelastische Energie [68]. Eine Reihe von Vereinfachungen — keine Scherspannung, Magnetisierung parallel zur kubischen Achse usw. — und die Hinzunahme der elastischen Energie erlauben die Angabe eines Ausdrucks für die totale Energie  $E_{TOT}$  des Kristalls gemäß:

$$\begin{aligned} E_{TOT} = & \frac{1}{2}c_{11}(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2) + c_{12}(\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_2\epsilon_3 + \epsilon_3\epsilon_1) \\ & + \epsilon_1 f_1(\alpha_1) + \epsilon_2 f_1(\alpha_2) + \epsilon_3 f_1(\alpha_3) \\ & + \epsilon_1^2 f_2(\alpha_1) + \epsilon_2^2 f_2(\alpha_2) + \epsilon_3^2 f_2(\alpha_3) \\ & + \epsilon_1\epsilon_2 g(\alpha_3) + \epsilon_2\epsilon_3 g(\alpha_1) + \epsilon_3\epsilon_1 g(\alpha_2) \end{aligned} \quad (2.24)$$

mit den Ausdrücken:

$$\begin{aligned} f_1(\alpha) &= b^{\gamma,2}\alpha^2 + b^{\gamma,4}(\alpha^4 - \frac{6}{7}\alpha^2) + b^{\gamma,6}(\alpha^6 - \frac{15}{11}\alpha^4 + \frac{5}{11}\alpha^2) \\ f_2(\alpha) &= \frac{1}{2}(m_1^{\gamma,2} + b^{\gamma,2})\alpha^2 + \frac{1}{2}(m_1^{\gamma,4} + b^{\gamma,4})(\alpha^4 - \frac{6}{7}\alpha^2) \\ g(\alpha) &= \frac{1}{2}m_2^{\gamma,2}\alpha^2 + \frac{1}{2}m_2^{\gamma,4}(\alpha^4 - \frac{6}{7}\alpha^2) \end{aligned}$$

Dabei stellen die  $b^{\gamma,l}$  die magnetoelastischen Kopplungskonstanten erster Ordnung, und die  $m_j^{\gamma,l}$  die Konstanten zweiter Ordnung dar. In Gl. 2.24 ist zur vereinfachten Darstellung der Indizes die Voigt–Notation verwendet worden (vgl. [69]).

Bei der experimentellen Bestimmung der magnetoelastischen Kopplungskonstanten wird zunächst nur eine effektive Konstante  $B_1^{eff}$  gemessen:

$$B_1^{eff} = B_1 + D_1 \cdot \epsilon_0 \quad (2.25)$$

mit einem konstanten Term  $B_1$  und dem von der (lateralen) Verspannung des magnetischen Kristalls abhängigen Term  $D_1 \cdot \epsilon_0$ . Durch Herstellung unterschiedlich verspannter Filme (Variation von  $\epsilon_0$ ) ergeben sich unterschiedliche Werte für  $B_1^{eff}$ . Eine Auswertung des funktionalen Zusammenhangs  $B_1^{eff} = f(\epsilon)$  ermöglicht dann die Bestimmung von  $B_1$  und  $D_1$ .

Entsprechend dem erläuterten Ansatz (Gl. 2.24) ist  $B_1 = f_1(\alpha)$  und damit näherungsweise gleich dem Volumenwert  $B^{Vol}$ . In Kapitel 5 wird deshalb zur Vereinfachung  $B_1 = B_1^{Vol}$  gesetzt. Hingegen ist  $D_1$  eine komplizierte Kombination von magnetoelastischen Kopplungskonstanten erster und zweiter Ordnung,  $b^{\gamma,l}$  und  $m_j^{\gamma,l}$ . Sie muss deshalb ebenfalls als effektive magnetoelastische Kopplungskonstante  $D_1^{eff}$  geschrieben werden:

$$D_1^{eff} = 2f_2(\alpha) + \frac{(2c_{12} + g(\alpha))g(\alpha)}{C_{11}} \quad (2.26)$$

mit den zugehörigen Ausdrücken  $f_2(\alpha)$  und  $g(\alpha)$  aus Gl. 2.24. Damit ist es möglich, die experimentell zugänglichen Kopplungskonstanten  $B$  und  $D$  auch theoretisch zu berechnen.

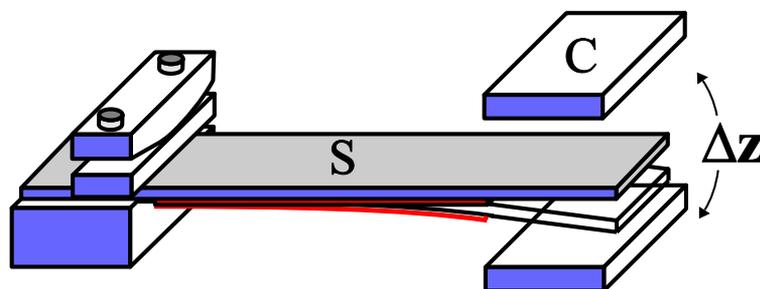
## 2.4 Experimentelle Methoden

In diesem Kapitel soll zunächst das Prinzip der Messung intrinsischer Filmspannungen mithilfe des Biegebalkens erläutert werden. Anschließend wird der Einsatz der Biegebalkenmessanordnung als Magnetometer beschrieben, wobei insbesondere auf die Messung der Magnetostriktion bzw. der magnetoelastischen Kopplungskonstanten eingegangen wird.

### 2.4.1 Das Biegebalkenmessverfahren

Es gibt im wesentlichen zwei methodische Ansätze, den Verzerrungszustand dünner Schichten zu untersuchen. Eine Gruppe von Messverfahren basiert auf der Messung interatomarer Abstände mit Beugungsmethoden, wie z.B. SPA-LEED (engl. Spot Analyzed Low Energy Electron Diffraction). Durch Beobachtung der Veränderung des Atomabstandes kann die Verzerrung des Kristalls bestimmt und schließlich in eine mechanische Spannung umgerechnet werden [70].

Die andere Möglichkeit besteht darin, die Spannung des Kristalls direkt zu messen, indem die Verbiegung eines Substrates detektiert wird. Dieser Biegebalken ist dabei an einer Seite fest eingespannt und an der anderen frei beweglich, um auf Spannungen reagieren zu können, die sich bei Aufdampfung eines Filmes oder Adsorbates entwickeln (**Abb. 2-7**). Die Substratverbiegung steht in direktem Zusammenhang mit der intrinsischen Filmspannung und erlaubt eine quantitative Aussage über die mechanische



**Abb. 2-7:** Spannungsmessung mit dem Biegebalken. Detektiert wird hier die Auslenkung  $\Delta z$  am freibeweglichen Substratende (S) mittels eines Differentialkondensators (C).

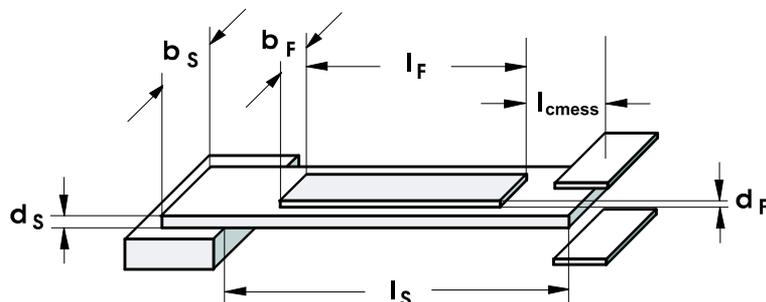
Spannung des gewachsenen Materials. Ist dabei die Filmdicke  $d_F$  klein im Vergleich zur Substratdicke  $d_S$ , so ist die resultierende Filmspannung  $\sigma_F$  umgekehrt proportional zum Radius  $R$  der Krümmung des Substrates und wurde erstmals 1909 von Stoney hergeleitet [71]. Berücksichtigt man zusätzlich die Querkontraktion des Substrates ( $\nu_S$ ), so gilt für die Spannung  $\sigma_x$  entlang der langen Biegebalkenachse (Messrichtung  $x$ ) [72, 73, 74, 75]:

$$\sigma_x = \frac{Y_S \cdot d_S^2}{6 \cdot (1 - \nu_S) \cdot d_F} \cdot \frac{1}{R_x} \quad (2.27)$$

Hier ist  $Y_S$  der Youngmodul des Substrates und  $R$  der Krümmungsradius des Biegebalkens.

Die Substratkrümmung wird entweder optisch über die Änderung des Reflexionswinkels eines Laserstrahls bestimmt [76, 77, 78], oder die Auslenkung  $\Delta z$  am freibeweglichen Substratende wird (wie hier) mithilfe einer kapazitiven Methode detektiert. In unserem Messaufbau befindet sich das freibewegliche Ende des Substrates inmitten eines Plattenkondensators und fungiert als dritte Kondensatorplatte, deren Position genau bestimmt werden kann. Eine phasensensitive Lock-In-Signalverarbeitung gewährleistet eine hohe Empfindlichkeit. Bei einer Biegebalkenlänge von ca. 20 mm betragen die kleinsten detektierbaren Auslenkungen ca. 0,5 nm, was einem Drehmoment von  $2 \times 10^{-10}$  N/m entspricht. Damit sind auch die intrinsischen Spannungen von Submonolagen mit großer Genauigkeit messbar.

Bei der hier verwendeten kapazitiven Messmethode wird nicht der gesamte Biegebalk-



**Abb. 2-8:** Messgeometrie des Biegebalkens, wie sie für quantitative Auswertung verwendet wird. Nur ein Teil des Balkens ist mit Filmmaterial bedampft.

ken bedampft (**Abb. 2-8**). Die Auslenkung des Biegebalkens  $\Delta z$  im Kondensator setzt sich zusammen aus dem Anteil  $z_R$ , der durch die Krümmung des aufgedampften Filmes verursacht wird, und dem Anteil  $z_{c,me\text{ss}}$ , der vom ungekrümmten Endstück des Balkens mit der Steigung des Filmendpunktes weiterläuft:

$$\Delta z = z_R + z_{c,me\text{ss}} \approx \frac{l_F^2}{2 \cdot R_x} + \frac{l_F}{R_x} \cdot l_{c,me\text{ss}} = \frac{1}{2 \cdot R_x} (l_F + 2 \cdot l_{c,me\text{ss}}) \cdot l_F \quad (2.28)$$

mit der Filmlänge  $l_F$  und dem Abstand  $l_{c,me\text{ss}}$  vom Filmende bis zur Mitte des Substratstückes, das in den Kondensator hineinragt (Herleitung vgl. [79]).

Zur quantitativen Bestimmung der Filmkraft benötigt man die Zuordnung zwischen dem Messwert einer definierten Auslenkung und der zugehörigen Kraft (**Eichung**). Dazu wird die Auslenkung des Biegebalkens durch die Schwerkraft benutzt. Das zugehörige Drehmoment eines Balkens unter seinem eigenen Gewicht ergibt sich zu:

$$T_g(x) = -\frac{1}{2} \cdot \rho_S \cdot g \cdot b_S \cdot d_S \cdot (l_S - x)^2 \quad (2.29)$$

mit der Breite  $b_S$ , Dicke  $d_S$ , Länge  $l_S$  und Dichte  $\rho$  des Balkens, sowie der Erdbeschleunigung  $g$  [80]. Die Variable  $x$  läuft vom Einspannpunkt bis zum Balkenende. Die Verbiegung führt zu einem Rückstellmoment:

$$T_B = \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} z \cdot \sigma_x dA = \frac{Y_S \cdot b_S \cdot d_S^3}{12 \cdot (1 - \nu_S^2)} \cdot \left( \frac{1}{R_x} + \nu_S \cdot \frac{1}{R_y} \right) = \frac{Y_S \cdot b_S \cdot d_S^3}{12} \cdot \frac{1}{R_x} \quad (2.30)$$

wobei  $Y_S$  der Youngmodul,  $\sigma_x$  die Spannung bezüglich der  $x$ -Achse,  $\nu_S$  die Querkontraktion und  $dA$  der Querschnitt ist. Es gilt weiter:

$$\frac{1}{R_y} = -\frac{\nu_S}{R_x} \quad (2.31)$$

da in  $y$ -Richtung keine Kräfte wirken. Für den Krümmungsradius gilt die Näherung:

$$\frac{1}{R_x} \approx \frac{d^2 z}{dx^2} \quad (2.32)$$

Schließlich erhält man für die Auslenkung des Biegebalkens bei der Eichung [81]:

$$z_{eich} = \frac{3}{2} \cdot \frac{\rho_S \cdot g}{Y_S \cdot d_S^2} \cdot l_S^4 \cdot \left(1 - \frac{4}{3} \cdot \frac{l_{c,eich}}{l_S}\right) \quad (2.33)$$

dabei ist  $l_{c,eich}$  die Hälfte der Substratlänge, die sich im Kondensator befindet. Im Experiment bekommt man  $2 \cdot z_{eich}$ , da der Balken von der waagerechten Position eine  $180^\circ$ -Rotation um die lange Substratachse erfährt.

Löst man Gleichung 2.28 nach  $R_x$  auf, setzt in Gleichung 2.27 ein und berücksichtigt die Eichmessung mit deren Eichsignal  $S_{eich}$ , so erhält man die Messgleichung für die Filmkraft in Abhängigkeit des elektronischen Messsignals  $S_{mess}$  [82]:

$$\frac{F_F}{b_S} = \frac{\rho_S \cdot g \cdot l_S^4 \cdot \left(1 - \frac{4}{3} \cdot \frac{l_{c,eich}}{l_S}\right)}{2 \cdot (1 - \nu_S^{mess}) \cdot l_F \cdot (l_F + 2 \cdot l_{cmess})} \cdot \frac{Y_S^{mess}}{Y_S^{eich}} \cdot \frac{b_S}{b_F} \cdot \frac{1}{S_{eich}} \cdot S_{mess} \quad (2.34)$$

unter der Annahme, dass die Eichung im Normalfall bei einer anderen Temperatur erfolgt als die Messung. Allerdings variiert der Youngmodul des Substrates ( $Y_S$ ) für viele Materialien nur schwach mit der Temperatur und kann daher in den meisten Fällen als konstant angenommen werden. Gl. 2.34 macht außerdem deutlich, dass nicht die Spannung selbst ( $\text{N/m}^2$ ), sondern die Kraft pro Einheitsbreite ( $\text{N/m}$ ), im folgenden Filmkraft genannt, gemessen wird. Bei einer Auftragung dieser Filmkraft gegenüber der Filmdicke ergibt dann die Steigung an die Kurve die inkrementelle Filmspannung  $\sigma_F$ .

### 2.4.2 Der Biegebalken als Magnetometer

Das Biegebalken-Messverfahren zur Messung intrinsischer Filmspannungen kann zu einem sensiblen UHV-Magnetometer erweitert werden [83]. Dazu wird die Biegebalkenanordnung in das Zentrum senkrecht aufeinanderstehender homogener Magnetfelder gebracht, nachdem ein magnetischer Film auf das Substrat abgeschieden worden ist. Dann ist es möglich die **Magnetisierung**, die **magnetische Anisotropie** und die **magnetoelastische Kopplung** quantitativ zu vermessen.

#### Bestimmung der Filmmagnetisierung

Zur Bestimmung der Filmmagnetisierung wird der Umstand ausgenutzt, dass ein magnetischer Dipol in einem externen homogenen Magnetfeld ein Drehmoment erfährt. Liegt, bedingt durch die Formanisotropie, die Filmmagnetisierung  $\vec{M}$  in der Filmebene (engl. in plane), so kann durch ein senkrecht zum Film angelegtes, wohldefiniertes äußeres Magnetfeld  $\vec{B}$  (Messfeld) ein Drehmoment  $\vec{T}$  im Film erzeugt werden:

$$\vec{T} = \vec{M} \times \vec{B} \quad (2.35)$$

Dies führt zu einer Auslenkung des Biegebalkens, so dass gilt (**Abb. 2-9**):

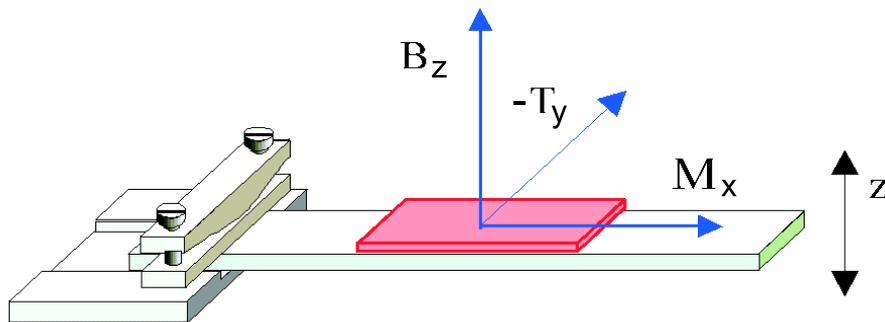
$$T_y = -M_x \cdot B_z \quad (2.36)$$

Dabei kann in erster Näherung die Beeinflussung der Filmmagnetisierung vernachlässigt werden. Die Auslenkung verursacht ein Rückstellmoment  $T_B$ , gemäß Gl. 2.30. Im Gleichgewicht sind beide dem Betrag nach gleich groß. In Verbindung mit der Eichung des Substrates ergibt sich für den Messwert der Magnetisierung des Filmes [82]:

$$M_x = \frac{1}{4 \cdot B_z} \cdot \frac{\rho_S \cdot g \cdot b_S \cdot d_S \cdot l_S^4 \cdot \left(1 - \frac{4}{3} \cdot \frac{l_{c,eich}}{l_S}\right)}{l_F \cdot (l_F + 2 \cdot l_{c,mess}) \cdot l_F \cdot d_F \cdot b_F} \cdot \frac{1}{S_{eich}} \cdot S_{mess} \quad (2.37)$$

Ist die leichte Magnetisierung hingegen senkrecht zur Filmebene, so wird der Film in  $z$ -Richtung magnetisiert und das Messfeld in  $x$ -Richtung angelegt. Die Messgleichung folgt

analog. Eine vollständige magnetische Hysterese ergibt sich, indem das magnetisierende äußere Feld Punkt für Punkt von einem Maximalwert  $H_{max}$  über Null zu  $-H_{max}$  gefahren und an jedem Punkt mithilfe des Messfeldes  $B$  ein zugehöriger Wert für  $M$  aufgenommen wird.

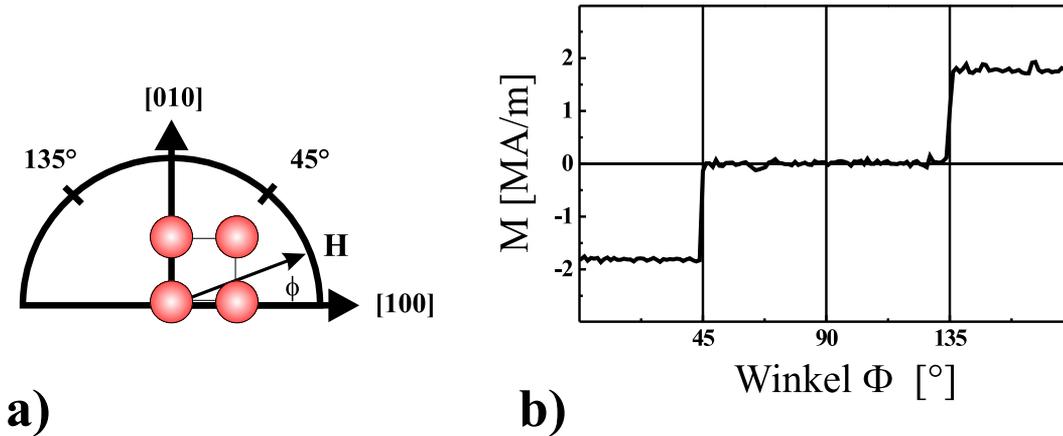


**Abb. 2-9:** Vektorgeometrie bei der Magnetisierungsmessung. Liegt die zu messende Magnetisierung des Filmes in der Filmebene entlang der langen Biegebalkenachse ( $M_x$ ), so erzeugt ein senkrecht dazu stehendes, wohldefiniertes kleines Magnetfeld ( $B_z$ ) ein Drehmoment ( $T_y$ ), das gemessen und daraus ein Wert für die Magnetisierung bestimmt werden kann.

### Bestimmung der magnetischen Anisotropie

Mit dem Biegebalkenmagnetometer kann auch die magnetische Anisotropie dünner Filme untersucht werden. Dazu wird der Biegebalken parallel zum magnetisierenden Feld in kleinen Winkelschritten um  $180^\circ$  rotiert. Nach jedem Winkelschritt erfolgt die Messung der remanenten Filmmagnetisierung  $M$ , die sich entlang der leichten Magnetisierungsrichtung orientiert hat. Wird ein kritischer Rotationswinkel  $\Phi$  überschritten, so klappt der Magnetisierungsvektor schlagartig in Richtung der nächstfolgenden leichten Achse. In **Abb. 2-10a** ist dies am Beispiel von Fe illustriert. Hier liegen die leichten Magnetisierungsrichtungen entlang der kubischen Filmachsen  $[100]$  und  $[010]$ .

Trägt man die Magnetisierung  $M$  gegenüber dem Rotationswinkel  $\Phi$  auf, so erhält man bei Vorhandensein magnetischer Anisotropie eine Abweichungen vom Cosinusverhalten eines magnetischen Filmes ohne Vorzugsrichtung (isotroper Fall), **Abb. 2-10b**. Bei Anisotropiemessung mit  $\text{Fe}[100] \parallel x$  (Messrichtung) kippt die Magnetisierung nach



**Abb. 2-10:** Messung der magnetischen Anisotropie von Fe(001). (a) Der Magnetisierungsvektor  $\vec{M}$  klappt bei Rotation von  $H$  nach  $45^\circ$  von Fe[100] nach Fe[010]. (b) Messkurve der remanent gemessenen Magnetisierung  $M$  eines 25 nm Fe(001)-Filmes in Abhängigkeit des Rotationswinkels  $\Phi$  des magnetisierenden Feldes.

$45^\circ$  von der  $x$ -Achse in die  $y$ -Achse. Die so orientierte Magnetisierung ist, bedingt durch die Messgeometrie, nicht detektierbar und liefert daher den Messwert Null. Nach  $135^\circ$  klappt  $\vec{M}$  in die Gegenrichtung ( $-x$ ) und wird wieder detektiert.

### Bestimmung der magnetoelastischen Kopplungskonstanten

Wie bereits in Abschnitt 2.3.2 erwähnt, sind die magnetoelastischen Kopplungskonstanten experimentell zugänglich. Durch die Wahl der geeigneten Messgeometrien ist es nun möglich, für bestimmte Kristalle die verschiedenen Kopplungskonstanten getrennt voneinander zu messen. Da sich die vorliegende Arbeit zu einem Teil mit Messungen zur magnetoelastischen Kopplung von Eisen beschäftigt, soll in diesem Zusammenhang am Beispiel von Fe(001) noch einmal kurz der Messablauf zur Bestimmung von  $B_1$  und  $B_2$  erläutert werden. Eine ausführliche Darstellung findet sich in [82].

Die Magnetisierung eines ferromagnetischen Filmes führt zu einer Formänderung. Da der Film durch das Substrat daran gehindert wird, seine Form zu verändern, kommt es zu mechanischen Spannungen, die zu einer Auslenkung des Biegebalkens führen. Weil der unmagnetische Zustand einer magnetischen Dünnschicht nicht eindeutig definiert ist,

wird zur Bestimmung der magnetoelastischen Kopplungskonstante der Film nacheinander entlang zweier verschiedener definierter Richtungen magnetisiert und das Differenzsignal beider Substratauslenkungen ausgewertet. Verursacht die Magnetisierung dabei eine Kontraktion des Filmes, bewirkt dies eine Zugspannung, die definitionsgemäß positiv ist. Die zugehörige kontraktive Magnetostriktion ist hingegen mit negativem Vorzeichen zu versehen. Es gilt also:  $\frac{\Delta l}{l} < 0 \Rightarrow \sigma > 0 \Rightarrow \lambda = -\epsilon$  und *vice versa*.

**Bestimmung von  $B_1$ .** In **Abb. 2-11** ist der Messablauf schematisch skizziert. Das fettgedruckte Rechteck soll das Substrat im Gleichgewicht darstellen. Die geometrischen Veränderungen aufgrund der beiden magnetisierten Zustände sind durch dünne Rechtecke illustriert. In der vorgegebenen Messgeometrie ist die Fe[100]–Richtung entlang der Biegebalkenmessrichtung ( $x$ –Achse) orientiert.

(a) Liegt die Magnetisierung längs der Fe[100]–Richtung, so gilt für die Komponenten der Verzerrung:  $\epsilon_{12} = \epsilon_{23} = \epsilon_{31} = 0$ . Die Längenänderung  $\Delta l/l$  in  $x$ – und  $y$ –Richtung ergibt sich gemäß Gl. 2.19 zu:

$$\epsilon_x^a = -\frac{2}{3} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} \quad \text{und} \quad \epsilon_y^a = \frac{1}{3} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} \quad (2.38)$$

(b) Analog erhält man für die Magnetisierung entlang Fe[010]:

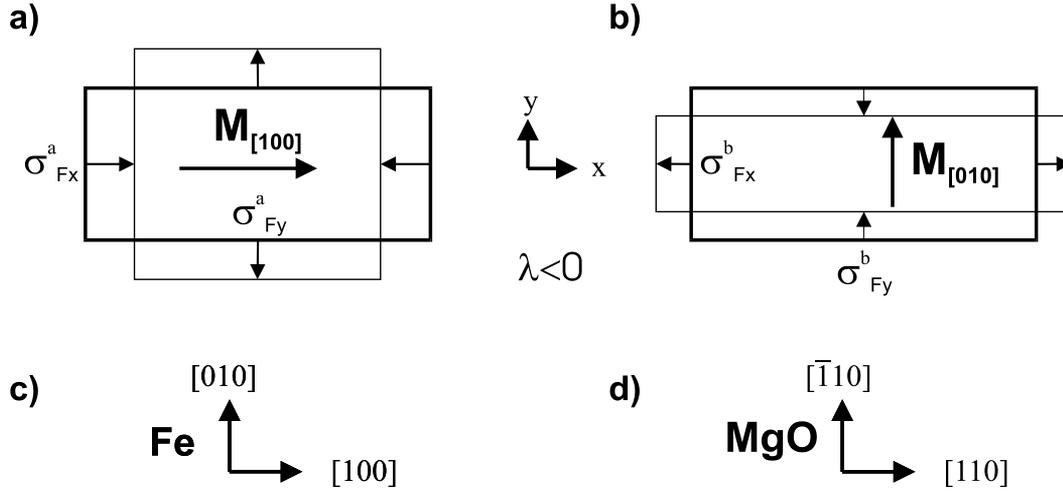
$$\epsilon_x^b = \frac{1}{3} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} \quad \text{und} \quad \epsilon_y^b = -\frac{2}{3} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} \quad (2.39)$$

Mit dem Hooke'schen Gesetz erhält man aus den Längenänderungen  $\epsilon_i^k$  die zugehörigen Spannungskomponenten  $\sigma_i^k$  (mit  $i = x, y$  und  $k = a, b$ ). Schließlich gelangt man, unter Berücksichtigung von  $\sigma_{F_x}^a = \sigma_{F_y}^b$  und  $\sigma_{F_x}^b = \sigma_{F_y}^a$  im kubischen Fall, zu:

$$\sigma_{F_x}^a - \sigma_{F_x}^b = -\frac{3}{2}(c_{11} - c_{12}) \cdot \lambda_{[100]} = B_1 \quad (2.40)$$

Mit dem Biegebalkenmagnetometer wird also direkt die magnetoelastische Kopplungskonstante  $B$  und nur indirekt die Magnetostriktion  $\lambda$  gemessen. Wurden die Eisenfilme verspannt aufgewachsen, so wird  $B_1^{eff}$  gemessen, für das gilt:

$$B_1^{eff} = B_1^{Vol} + D_1 \cdot \epsilon_0 \quad (2.41)$$



**Abb. 2-11:** Bestimmung von  $B_1$ . Gemessen wird die Differenz der magnetostriktiven Spannung bei Magnetisierung entlang  $x$ -Richtung (a) und  $y$ -Richtung (b). Die angedeuteten geometrischen Veränderungen beziehen sich auf den Fall  $\lambda < 0$ ; zugehörige Orientierung der Fe(001)-Dünnschicht (c) und des MgO(001)-Substrates (d).

mit dem Volumenwert  $B_1^{Vol}$ , der Kopplungskonstante  $D_1$  und der mittleren (lateralen) Verzerrung des Eisenfilmes  $\epsilon_0$ , entsprechend den Ausführungen zu Gl. 2.25.

**Bestimmung von  $B_2$ .** Zur Messung von  $B_2$  muss das Substrat so zugeschnitten werden, dass die Fe[110]-Richtung des Filmes in Messrichtung ( $x$ -Achse) zeigt (**Abb. 2-12**).

(a) Liegt die Magnetisierungsrichtung entlang Fe[110], so ergibt sich für die Verzerrungskomponenten in  $x$ - und  $y$ -Richtung gemäß Gl. 2.19:

$$\epsilon_x^a = -\frac{1}{6} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} - \frac{1}{4} \frac{B_2}{c_{44}} \quad \text{und} \quad \epsilon_y^a = -\frac{1}{6} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} + \frac{1}{4} \frac{B_2}{c_{44}} \quad (2.42)$$

(b) Ist die Magnetisierung entlang Fe[ $\bar{1}10$ ] so folgt:

$$\epsilon_x^b = -\frac{1}{6} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} + \frac{1}{4} \frac{B_2}{c_{44}} \quad \text{und} \quad \epsilon_y^b = -\frac{1}{6} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}} - \frac{1}{4} \frac{B_2}{c_{44}} \quad (2.43)$$

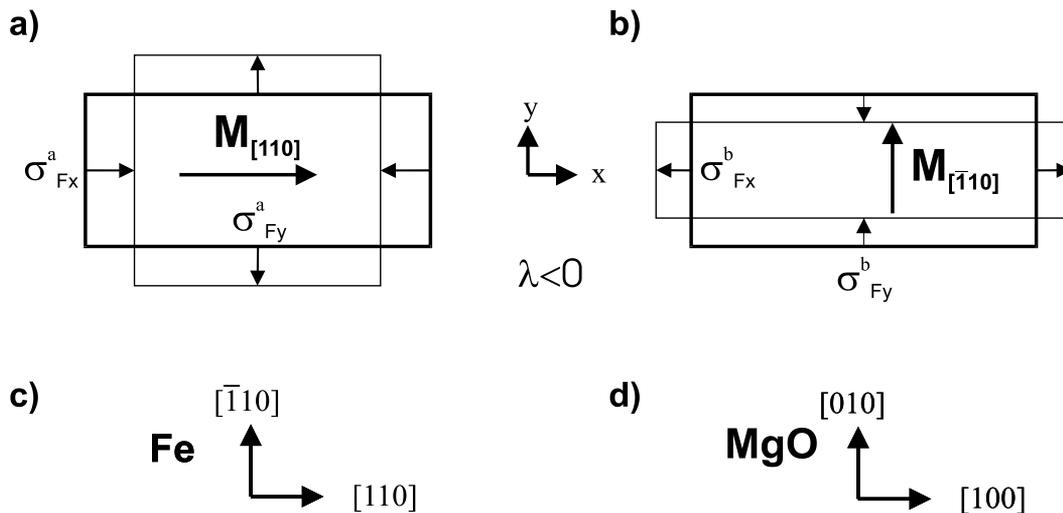
Die weitere Rechnung erfolgt im Prinzip wie für  $B_1$ . Zu beachten ist jedoch, dass zur Realisierung zweier Sättigungsmagnetisierungen entlang schwerer Magnetisierungsrichtungen eine Rotation des Substrates während der hochempfindlichen Messung er-

folgen müsste, da nur ein hinreichend dimensionierter Elektromagnet zur Verfügung steht. Das ist aber mit dem gegebenen Messaufbau nicht realisierbar. Da die magnetoelastischen Kopplungskonstanten proportional zum Quadrat der Magnetisierung sind ( $\lambda \propto M^2(H)$  [84]), ergibt sich ein zweiter definierte Zustand, wenn die Magnetisierung entlang einer der leichten Fe-Richtungen verläuft ([100] oder [010]). Das bedeutet für den Messablauf: zunächst wird entlang einer schweren Richtung (Fe[110]) bis zur Sättigung magnetisiert und anschließend entlang einer leichten Richtung (Fe[100]). Das entspricht einer Drehung von  $45^\circ$ . Für diese Messabfolge erhält man schließlich:

$$\sigma_{F_x}^a - \sigma_{F_y}^b = \frac{Y_{F_{110}}}{1 + \nu_{F_{110}}} \cdot \frac{B_2}{4 \cdot c_{44}} = \frac{1}{2} B_2 \quad (2.44)$$

Auch hier wird eine effektive magnetoelastische Kopplungskonstante  $B_2^{eff}$  gemessen, für die (analog zu  $B_1^{eff}$ ) gilt:

$$B_2^{eff} = B_2^{Vol} + D_2 \cdot \epsilon_0 \quad (2.45)$$



**Abb. 2-12:** Bestimmung von  $B_2$ . Gemessen wird die Differenz der magnetoelastischen Spannung bei Magnetisierung entlang  $x$ -Richtung (a) und  $y$ -Richtung (b). Die angedeuteten geometrischen Veränderungen beziehen sich auf den Fall  $\lambda < 0$ ; zugehörige Orientierung der Fe(001)-Dünnschicht (c) und des MgO(001)-Substrates (d).

## 2.5 Rastertunnelmikroskopie

Die Rastertunnelmikroskopie wird benutzt, um Kristalloberflächen im atomaren Maßstab abzubilden. Hierbei wird der quantenmechanische Tunneleffekt ausgenutzt. Das bedeutet, dass es für Elektronen quantenmechanisch eine endliche Wahrscheinlichkeit gibt, eine klassisch sonst verbotene Energiebarriere zu überwinden, zu "durchtunneln". In der praktischen Umsetzung fährt man dabei mit einer dünnen Metallspitze so dicht über die Oberfläche einer Probe, dass beim Anliegen einer Spannung zwischen Abtastspitze und Probe ein Tunnelstrom  $I$  fließt. Dieser Strom ist empfindlich vom Abstand zwischen Probe und Spitze abhängig. Üblicherweise hält man den Strom konstant, während die Probe zeilenweise abgerastert wird. Der Abstand der Spitze zur Oberfläche wird nachgeregelt, wobei dann das Regelsignal die Information über die Oberflächenstruktur beinhaltet. Die Steuerung der  $x$ - und  $y$ -Richtung (Probenfläche) ebenso wie der  $z$ -Abstand (Probenhöhe) erfolgt über Piezokristalle. Man ist damit sehr sensitiv für kleinste Abstandsänderungen, wobei die vertikale Auflösung prinzipiell  $10^{-2}\text{Å}$  betragen kann.

Aus der Störungstheorie erster Ordnung folgt ein quantenmechanischer Ausdruck für den Tunnelstrom [17]:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu,\nu} \{f(E_\mu)[1 - f(E_\nu)] - f(E_\nu)[1 - f(E_\mu)]\} |M_{\mu,\nu}|^2 \delta(E_\nu + V - E_\mu) \quad (2.46)$$

mit der Elementarladung  $e$ , der Planck-Konstante  $\hbar$ , der Fermi-Funktion  $f(E)$ , dem Spannungsabfall  $V$ , dem Tunnelmatrixelement  $M_{\mu,\nu}$  zwischen den Zuständen  $\Psi_\mu$  und  $\Psi_\nu$ .  $E_i$  ist die Energie des Zustandes  $\Psi_i$ . Für kleine Spannungen und eine  $s$ -Orbital Spitzensymmetrie vereinfacht sich der Ausdruck zu:

$$I \propto \sum_{\nu} |\Psi_\nu(\vec{r}_t)|^2 \delta(E_\nu - E_\mu) \equiv \rho(\vec{r}_t, E_F) \quad (2.47)$$

mit der Fermienergie-Zustandsdichte  $\rho(\vec{r}_t, E_F)$  am Ort der Spitze. Das bedeutet, dass das Rastertunnelmikroskop in erster Näherung eine Fläche konstanter lokaler Zustandsdichte

abbildet.

Von Simmons wurde für ein eindimensionales Modell mit rechteckiger Potentialbarriere der Höhe  $\Phi_0$  gezeigt, dass bei kleinen Spannungen  $V$  im Vergleich zur Potentialbarriere für den Tunnelstrom  $I$  gilt [85]:

$$I \propto \frac{V}{z} \cdot \exp\left(-\frac{2z}{\hbar} \cdot \sqrt{2m\phi_0}\right) \quad (2.48)$$

mit der Breite der Tunnelbarriere  $z$  und der Masse des Elektrons  $m$ . Aufgrund des exponentiellen Zusammenhangs bewirken kleine Ortsänderungen große Stromänderungen, was ein Konstanthalten des Abstandes zwischen Probe und Spitze bei der experimentellen Realisierung erleichtert.