

## 6. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde die Methode der Biegebalkentechnik zur Messung intrinsischer Filmspannungen, gepaart mit *in situ* Rastertunnelmikroskopie genutzt, um den Einfluss mechanischer Spannung auf Wachstum und magnetoelastische Kopplung anhand ausgewählter epitaktischer Dünnschichtsysteme zu untersuchen.

Das Wachstum von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungsschichten auf  $\text{Si}(001)$ -Substraten wurde konzentrationsabhängig bei 900 K untersucht. Es konnte folgendes Bild des Filmwachstums gewonnen werden: **(i)** bei reinen Germaniumfilmen und Legierungsschichten mit Siliziumkonzentrationen  $< 20\%$  findet das Wachstum im Stranski-Krastanow-Modus statt. Die typischen Wachstumsetappen (anfängliches 2D-Lagenwachstum gefolgt von 3D-Inselbildung) können eindeutig in den Spannungskurven mitverfolgt werden: das Lagenwachstum ist aufgrund des Misfit mit hoher Spannung verbunden, während das 3D-Inselwachstum mit einer deutlichen Reduktion der Filmspannung einhergeht. **(ii)** Ab einer Siliziumkonzentration  $> 20\%$  wechselt das Wachstum in ein reines 3D-Inselwachstum, das von Anbeginn ohne Benetzungsschicht stattfindet. Solange isolierte Inseln vorliegen, ist die Filmspannung vernachlässigbar. Erst bei Koaleszenz der Inseln nach ca. 3 nm kommt es zum Aufbau von Spannungen, da die kohärent gewachsenen Inseln bei Perkolation ein Spannungsfeld entwickeln, das experimentell messbar ist. Dieses Ergebnis wird durch Strukturuntersuchungen mit dem Rastertunnelmikroskop bestätigt, die bei nominellen Schichtdicken von 1 nm regelmäßige Inseln einheitlicher Größe zeigen. Der vollständige Wechsel des Wachstumsmodus hat aber drastische Konsequenzen.

zen, wenn man nach der Triebkraft für 3D-Inselbildung fragt. Vom Standpunkt der Oberflächenenergie wird zu Beginn stets eine Benetzungsschicht beim Wachstum von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungsschichten auf Si(001) vorausgesagt. Diese wird bei fortgesetzter Deposition von Inselwachstum abgelöst, weil 3D-Inseln das Wachstum geringer verspannt ermöglichen. Da dieses Bild in krassem Widerspruch zu den gemessenen Daten steht, wurde zur Auflösung dieses Widerspruchs hier ein modifiziertes (kinetisches) Modell vorgeschlagen. Dabei ermöglichen Fluktuationen von Adatomen sowie eine Diffusionskinetik an der Oberfläche und in den entstehenden Inseln das Clusterwachstum von Anbeginn. Bestätigt wird dieser Erklärungsansatz durch eine statistische Auswertung der Größenverteilung der Inseln, die ein thermodynamisches Wachstum gemäß dem Volmer-Weber-Modus ausschließt.

Die im Rahmen dieser Arbeit erstmals durchgeführten Spannungsmessungen von Fe/GaAs(001) bei  $175^\circ\text{C}$  bestätigen, in Einklang mit der Literatur, das Auftreten einer Interdiffusionsschicht zwischen Film- und Substratmaterial (Fe, Ga und As). Dabei wurde überraschenderweise eine Zugspannungskomponente bis 6 nm Schichtdicke gemessen, die durch den Misfit nicht zu erklären ist. Durch die Diffusion von Substratmaterial aus der GaAs-Matrix kommt es zu einer Verzerrung des Substratgitters, die die gemessene Zugspannungskomponente erklärt. Zusätzlich konnte gezeigt werden, dass auch bei 300 K die Interdiffusion nicht vollständig unterdrückt ist. Sie ist lediglich um ca. 30% reduziert und kann damit auf keinen Fall vernachlässigt werden. Die bestimmende Rolle von Arsen bei dieser Diffusion konnte nachgewiesen werden.

Die Untersuchungen zum epitaktischen Wachstum von Eisen auf Magnesiumoxid(001) bestätigen das Bild eines Frank-Van der Merwe-Systems. Unterhalb einer kritischen Temperatur (500 K) wird die Abwärtsdiffusion der Adatome an Stufenkanten durch Ehrlich-Schwoebel-Barrieren behindert, so dass es zu einer Aufrauung der Filme kommt. Oberhalb 500 K spielen diese Stufenkantenbarrieren eine untergeordnete Rolle, und es findet Lagenwachstum mit atomar flachen Terrassen statt. Der Misfit von 3,5% bewirkt dabei eine hohe Verspannung der Schichten. Nach wenigen Nanometern erfolgt daraufhin ein drastischer Abbau der Filmspannungen deutlich unterhalb eines Wertes, der einer makroskopischen Reißfestigkeit entspricht. Wie die Rastertunnelmikroskopieaufnahmen

zeigen, wird an diesem Punkt ein regelrechtes Netzwerk von Versetzungen eingebaut, das ursächlich für den Spannungsabbau ist.

Schließlich konnte durch das systematische Wachstum verschieden verspannter Eisenschichten auf unterschiedlichen Substraten erstmals ein detailliertes Bild der Spannungsabhängigkeit der magnetoelastischen Kopplung von Eisen präsentiert werden. Die wichtigsten Ergebnisse dazu sind:

- Für beide Kopplungskonstanten,  $B_1$  und  $B_2$  (und damit für zwei verschiedene Richtungen in der Bandstruktur des Fe), gibt es eine ausgeprägte Abhängigkeit von der (positiven) Gitterverzerrung. Dabei erfolgt sogar ein Vorzeichenwechsel bei  $\epsilon = +0,35\%$  ( $B_1$ ) bzw.  $\epsilon = +2\%$  ( $B_2$ ).
- Für zugverspannte Filme ( $\epsilon > 0$ ) konnten die magnetoelastischen Kopplungskonstanten zweiter Ordnung  $D_1$  (zu  $B_1$ ) und  $D_2$  (zu  $B_2$ ) quantitativ bestimmt werden. Der funktionale Zusammenhang  $B = f(\epsilon)$  ist dabei in Richtung der kubischen Hauptachsen ( $B_1$ ) deutlich stärker ausgeprägt als entlang der Diagonalen ( $B_2$ ). Bereits ab einer relativ geringen Gitterverzerrung von ca. 1% kommt es bei  $B_1$  zum Abweichen von einem (anfänglichen) linearen Verhalten.
- Die ersten Messungen zu druckverspannten Eisenfilmen ( $\epsilon < 0$ ) zeigen hinsichtlich Betrag und Vorzeichen ein unerwartetes Verhalten. Es kommt hier zu einem Vorzeichenwechsel der Kopplungskonstante 2. Ordnung bereits bei sehr kleinen Druckspannungen. Dieses Verhalten ist mit jüngsten *ab initio* Rechnungen nicht konsistent.
- Im gesamten untersuchten Schichtdickenbereich von 2 - 100 nm wurde Volumenverhalten hinsichtlich Magnetisierung und magnetischer Anisotropie von Eisenfilmen gefunden. Durch das epitaktische Wachstum von Eisen auf Cr-Pufferschichten wurden außerdem geringverspannte, dünne Fe-Filme gewachsen. Damit konnte eine Schichtdickenabhängigkeit der magnetoelastischen Kopplung bis hinunter zu 2 nm ausgeschlossen werden.

Die Biegebalken-Methode wird bis jetzt nur von einer kleinen Zahl von Arbeitsgruppen weltweit genutzt, weshalb die Anzahl der untersuchten Materialsysteme gering ist. Es bedarf aber weitaus mehr Film-Substrat-Kombinationen, um die bis jetzt gewonnenen Ergebnisse zu untermauern und allgemeingültige Aussagen zu formulieren. Beispielsweise müssen zukünftige Untersuchungen zeigen, ob das Ergebnis der hier erstmals vorgestellten Messungen zur magnetoelastischen Kopplung druckverspannter Fe-Filme allein durch die komprimierte Gitterzelle erklärt wird, oder ob As eventuell als Elektronen-Donor dafür verantwortlich ist.