

# Kapitel 2

## Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zum Verständnis der experimentellen Resultate und deren Interpretation beitragenden Theorien zusammengefaßt.

### 2.1 Ferromagnetismus

Während ein permanentes magnetisches Moment bei Atomen sehr häufig beobachtet werden kann, ist ein permanentes magnetisches Moment im Festkörper eher die Ausnahme. Die Elemente Eisen, Kobalt und Nickel aus der 3d-Reihe gehören zu den Ferromagneten. Solche Materialien zeichnen sich durch eine endliche spontane Magnetisierung  $M$  aus, die als mittleres magnetisches Moment pro Volumeneinheit definiert ist. In der Tabelle 2.1 wurden einige physikalische Eigenschaften der ferromagnetischen 3d-Übergangsmetalle zusammengefaßt.

Die Ursache des Magnetismus im Festkörper ist eine langreichweitige magnetische Ordnung, so daß die magnetischen Momente der Atome parallel ausgerichtet sind. Diese langreichweitige magnetische Ordnung wird in der Quantenmechanik als die Austauschwechselwirkung bezeichnet. Im Rahmen eines quantenmechanischen Bildes kommt die Austauschwechselwirkung durch eine Kombination des Pauli-Prinzips und der Coulomb-Wechselwirkung zustande. Im einfachsten Fall betrachtet man hier die Austauschwechselwirkung, die zwischen zwei beteiligten ungepaarten Elektronenspins  $\vec{s}_1$  und  $\vec{s}_2$  wirkt. Somit ist die Wechselwirkung zwischen  $\vec{s}_1$  und  $\vec{s}_2$  mit Hilfe des Heisenberg-Operators beschrieben [5]:

$$H = -2J\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \quad , \quad (2.1)$$

wobei  $J$  das Austauschintegral bezeichnet. Das Vorzeichen von  $J$  hängt stark von der Form der Wellenfunktion und vom räumlichen Abstand der Spins ab. Die Wellenfunktion eines

	Fe	Co	Ni
$M_s$ [G] bei $T = 0$ K	1752	1446	510
$M_s$ [G] bei $T = 296$ K	1707	1400	485
$\mu$ [ $\mu_B$ ]	2.22	1.72	0.606
$T_c$ [K]	1043	1388	627
$g$	2.091	2.187	2.183
Schmelzpunkt [K]	1811	1770	1728

Tabelle 2.1: Einige physikalische Eigenschaften der 3d-Übergangsmetalle: [1–4].

Elektrons ist eine Funktion der Ortskoordinaten und des Spins. Der energetisch günstigere Zustand, wenn die Ortswellenfunktionen zweier benachbarten Elektronen antisymmetrisch sind, ist derjenige, der die symmetrische Spinwellenfunktion aufweist, und somit  $J > 0$ . In diesem Fall sind die Elektronen ferromagnetisch gekoppelt. Wenn die Ortswellenfunktionen symmetrisch sind, müssen die Spinwellenfunktionen aufgrund des Pauli-Prinzips antisymmetrisch sein, und somit  $J < 0$ . In diesem Fall sind die Spins antiferromagnetisch gekoppelt.

In dem Heisenberg-Modell ist der Magnetismus durch interatomare, d.h. direkte Austauschwechselwirkung verursacht, während in den metallischen Festkörpern der 3d-Elemente wie Eisen, Kobalt und Nickel die magnetische Ordnung durch itinerante, d.h. delokalisierte 3d-Elektronen hervorgerufen wird. Ein Modell, in dem sowohl der Grad der Lokalisierung der Valenzelektronen als auch Bandstruktureffekte berücksichtigt wurde, ist das sog. Stoner-Modell. (vgl. Lehrbücher des Magnetismus, z.B. [6]). Das Stoner-Modell liefert korrekte Aussagen des magnetischen Grundzustandes von Fe, Co und Ni. Weiterhin können im Bandmodell des Magnetismus auch die nicht-ganzzahligen Werte der magnetischen Spinmomente im Festkörper (Fe: 2.22; Co: 1.72; Ni: 0.61  $\mu_B$ /Atom) verstanden werden.

Im Ferromagnetismus ist es in vielen Fällen eine gute Näherung, den Spin als klassischen Drehimpulsvektor zu behandeln. Es wurde eine näherungsweise gültige Beziehung zwischen dem Austauschintegral  $J$  und der Curie-Temperatur  $T_c$  hergeleitet [1]. Dabei wurde angenommen, daß das betrachtete Atom  $z$  nächste Nachbarn hat, von denen jeder durch die Wechselwirkung  $J$  mit dem Zentralatom verbunden ist. Für weiter entfernte Nachbarn sei  $J$  gleich Null. Die Molekularfeldtheorie ergibt [1].

$$J = \frac{3k_B T_c}{2zS(S+1)} \quad . \quad (2.2)$$

Bessere Näherungen ergeben etwas verschiedene Resultate. Für sc-, bcc- und fcc-Strukturen mit  $S = 1/2$  geben Rushbrook und Wood  $k_B T_c / zJ = 0.28$ ; 0.35; und 0.346; im Vergleich

dazu erhält man aus der Gl. (2.2) für alle drei Strukturen den Wert 0.500. Beschreibt man Eisen mit  $S = 1$  im Heisenberg-Modell, so entspricht die beobachtete Curie-Temperatur einem  $J = 11.9 \text{ meV}$  [1].

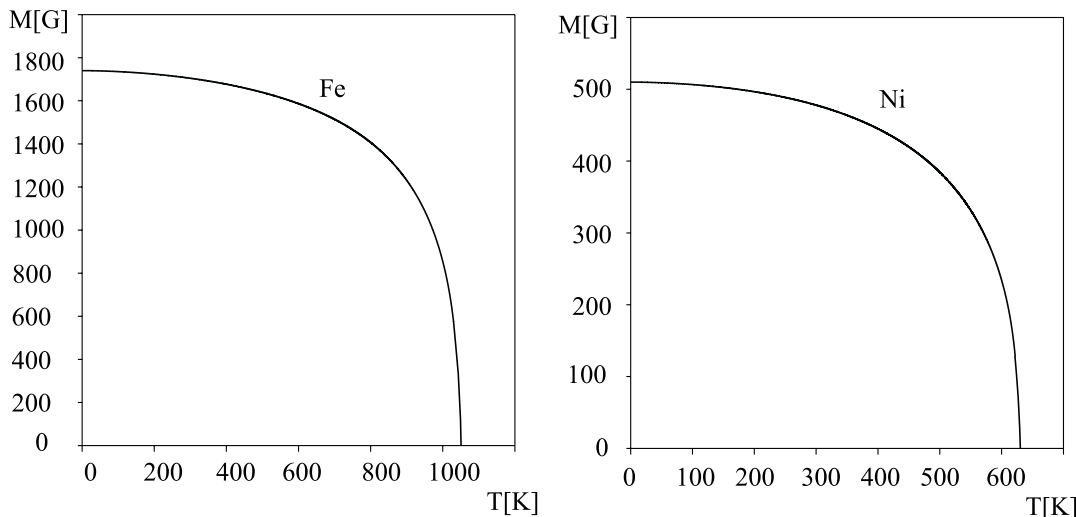


Abbildung 2.1: Magnetisierung von Eisen und Nickel als Funktion der Temperatur.

Die Magnetisierung stellt eine temperaturabhängige Größe  $M(T)$  dar. Die Temperatur, bei der die Magnetisierung verschwindet, nennt man Curie-Temperatur  $T_c$ . Hier findet der Phasenübergang vom Ferromagnetismus zum Paramagnetismus statt, der zum Verlust der magnetischen Ordnung führt. Die Funktion  $M(T)$  spielt in der vorliegenden Arbeit eine zentrale Rolle. Es existiert kein Modell, das die Magnetisierungskurve über den gesamten Temperaturbereich hinreichend gut wiedergibt. Deshalb wurden in Abb. 2.1 die diskreten Meßwerte des Festkörpers [1] durch einen Potenzreihenansatz angepaßt, der kein physikalisches Modell beinhaltet.

Die Systeme reduzierter Dimensionen wie ultradünne Filme und Cluster zeigen besondere magnetische Eigenschaften, die im Volumenkristall nicht zu finden sind. Mit abnehmender Schichtdicke ist  $T_c$  keine Materialkonstante sondern eine Funktion der Schichtdicke. Die experimentellen Beobachtungen zeigen z.B. für niedrigdimensionale Fe- und Ni- Systeme eine Abnahme der  $T_c$  gegenüber der des Volumens. In den niedrigdimensionalen Systemen werden die ferromagnetisch gekoppelten Bereiche durch die Schichtdicke begrenzt, was eine Reduzierung der Ordnungstemperatur zur Folge hat. Im Rahmen der Molekularfeldtheorie kann die Abnahme der Ordnungstemperatur durch eine reduzierte Zahl der effektiven nächsten Nachbarn, die auf die an den Grenzflächen fehlenden nächsten Nachbarn zurückgeht, verstanden werden (vgl. Kap. 8).

Eine theoretische Rechnung für Cluster mit weniger als 201 Atomen zeigt, daß sich bei einer Temperatur von 25 % der Curie-Temperatur die Magnetisierung quer durch das Teilchen um 20 % ändert, da an der Oberfläche die Austauschwechselwirkung aufgrund der kleineren Zahl von Nachbaratomen geringer ist [7]. Andererseits führt die Reduzierung der Zahl der nächsten Nachbarn an der Oberfläche zu einer Erhöhung der Zustandsdichte an der Fermi-Kante, und das hat zu Folge, daß eine Zunahme der magnetischen Momente der Oberflächenatome gegenüber denen der Volumenatome beobachtet wird [8]. Dies konnte theoretisch für Fe-, Ni- und Co-Teilchen nachgewiesen werden [9]. Billas et al. haben experimentell für unterschiedliche Anzahl von Atomen im Teilchen  $N$  ( $20 \leq N \leq 700$ ) festgestellt, daß das mittlere magnetische Moment pro Atom für kleine Teilchen eine Erhöhung gegenüber dem des Volumen aufweist [10]. Solche konträren Beispiele zeigen, daß die niedrigdimensionalen Systeme sehr komplex sind und anhand der einfachen Molekularfeldtheorie nicht eindeutig zu verstehen sind.

Ein weiterer Aspekt der magnetischen Systeme ist die Bildung magnetischer Domänen, durch die die Gesamtenergie des Systems minimiert wird [6, 11]. Im Falle kleiner magnetischer Partikel existiert eine kritische Größe, unterhalb derer sie auch ohne Anwesenheit eines äußeren Feldes nur aus einer einzigen Domäne bzw. einem Weißschen Bezirk bestehen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß in Teilchen, die kleiner als diese kritische Domänengröße sind, der Energiegewinn durch die Ausbildung kleinerer Domänen niedriger ist als die Energie, die zum Aufbau einer Domänenwand erforderlich wäre. Auf der Basis magnetostatistischer Überlegungen wurde festgestellt, daß der kritische Teilchenradius  $r_c$  proportional zur Domänenwandenergie  $\gamma$  ist und wie folgt abgeschätzt werden kann [6]:

$$r_c = 9\gamma / (2 \times 4\pi \times M_s^2) \quad , \quad (2.3)$$

wobei  $M_s$  die Sättigungsmagnetisierung darstellt. Das führt z.B. für Eisen zu einen kritischen Teilchenradius von 20 Å [6].

In den ferromagnetischen Systemen bilden sich homogene magnetische Bereiche, in denen alle magnetischen Momente aufgrund der Austauschkopplung parallel zueinander ausgerichtet sind. Die Länge dieses Bereiches kann mit Hilfe der sog. Austauschlänge abgeschätzt werden [6, 12]:

$$l_{\text{ex}} = (A/K)^{1/2} \quad , \quad (2.4)$$

wobei  $A$  die Austauschkonstante (*exchange stiffness*) und  $K$  die im betrachteten System dominierende Anisotropiekonstante darstellen. In niedrigdimensionierten Systemen liefert die Form-Anisotropie den wesentlichen Beitrag der Anisotropie. Diese läßt sich für einen Film

mit  $K = 2\pi M_s^2$  rechnen. Dadurch ergibt sich mit  $K = 2\pi M_s^2$  für Eisen eine Austauschlänge von  $33 \text{ \AA}$  [12] und für Nickel  $34 \text{ \AA}$ .

## 2.2 Magnetische Anisotropie

In einem ferromagnetischen Kristall stellt sich die Magnetisierung entlang einer bevorzugten kristallographischen Richtung, der sog. leichten Achse der Magnetisierung, ein. Die leichten Achsen der Magnetisierung sind im hcp-Co die (0001)-, im bcc-Fe die (001) und im fcc-Ni die (111)-Richtungen. Der energetische Unterschied zwischen den leichten und den dazugehörigen schweren Richtungen wird als magnetische Anisotropieenergien bezeichnet und entspricht der Energie, die aufgebracht werden muß, um die Magnetisierung  $M$  in die betreffende schwere Richtung zu drehen. Die mikroskopischen Ursachen für die Anisotropie sind zum einen die Dipol–Dipol-Wechselwirkung und zum anderen Spin–Bahn-Wechselwirkung. Die Dipol–Dipol-Wechselwirkung verursacht die sog. Form-Anisotropie, die zum Beispiel für einen Film eine Magnetisierung in der Filmebene favorisiert. Die Spin–Bahn-Wechselwirkung ruft die magnetokristalline Anisotropie hervor, die die Magnetisierung an das Kristallgitter und dessen Symmetrie koppelt. Die Austauschwechselwirkung im Heisenberg-Modell trägt nicht zur Anisotropieenergie bei, da das Skalarprodukt der Spinvektoren isotrop ist.

Häufig wird durch das Experiment eine sog. effektive Anisotropie gemessen, die aus verschiedenen Einzelbeiträgen besteht. Somit kann die Energiedichte der gesamten magnetischen Anisotropie  $F$  als Summe der verschiedenen Einzelbeiträge beschrieben werden:

$$F = F_{\text{dem}} + F_{\text{mc}} + F_{\text{mel}} + F_{\text{s}} \quad , \quad (2.5)$$

wobei  $F_{\text{dem}}$  für die Form-Anisotropie,  $F_{\text{mc}}$  die für die magnetokristalline Anisotropie,  $F_{\text{mel}}$  für die magnetoelastische Anisotropie und  $F_{\text{s}}$  für die Oberflächen-Anisotropie stehen. Die magnetischen Anisotropieenergien sind in der Größenordnung von einigen  $\mu\text{eV}/\text{Atom}$ , während die Gesamtenergie eines Volumenkristalls einige  $\text{eV}/\text{Atom}$  beträgt. Obwohl die Anisotropieenergien vergleichsweise klein sind, bestimmen sie z.B. die Richtung der Magnetisierung und sind der Grund für die Beobachtung der spontanen Magnetisierung in den Ferromagnetika. Im folgenden werden die einzelnen Anisotropie-Beiträge diskutiert.

### 2.2.1 Form-Anisotropie

Die nicht kompensierten magnetischen Dipole an der Probenoberfläche einer magnetischen Spezies mit einer begrenzten Größe erzeugen ein magnetisches Feld (Entmagnetisierungs-

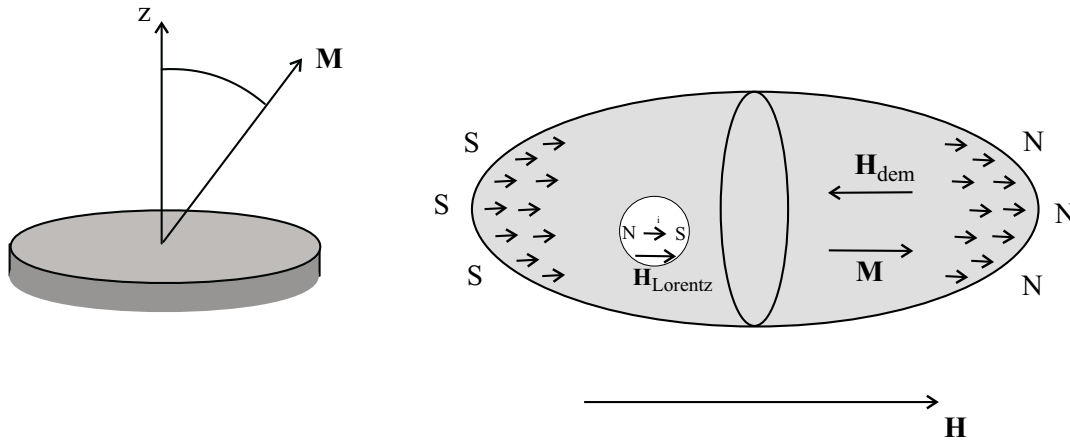


Abbildung 2.2: Skizze zur Veranschaulichung der vorliegenden Geometrien.

feld)  $H_{\text{dem}}$ , das in der entgegengesetzten Richtung der Magnetisierung steht und eine Funktion der Magnetisierung ist [6]. In der klassischen Elektrodynamik ist dieses Feld für ellipsoidförmige Körper homogen und hängt linear von der Magnetisierung ab:

$$H_{\text{dem}} = -\underline{N}M \quad , \quad (2.6)$$

wobei das Minuszeichen bedeutet, daß das Entmagnetisierungsfeld der Magnetisierung stets entgegengerichtet ist.  $\underline{N}$  steht für den sog. Entmagnetisierungstensor, dessen Spur stets eine Konstante ist und z.B. im CGS-Einheiten einen Wert von  $4\pi$  ergibt. Die Komponenten dieses Tensors hängen lediglich von der Form des Körpers und nicht von seinem Volumen ab. Das Entmagnetisierungsfeld ist die Ursache für die Form-Anisotropie. Zum Beispiel wird die Form des Ellipsoids als das Verhältnis der Halbachsen des Ellipsoids (Aspektverhältnis) ausgedrückt. Die Dichte der Anisotropieenergie ( $F_{\text{dem}}$ ) ergibt sich durch die Integration des Skalarprodukts aus der Magnetisierung  $M$  und dem Entmagnetisierungsfeld  $H_{\text{dem}}$  über das Volumen des Körpers [13]:

$$F_{\text{dem}} = -\frac{1}{2} \int M \cdot H_{\text{dem}} d\tau \quad . \quad (2.7)$$

Diese Integration kann für einen Ellipsoid analytisch gelöst werden. Für eine dünne Schicht, die den Grenzfall eines Rotationsellipsoids darstellt ( $c \ll a = b$ ) mit der Annahme, daß  $z$  senkrecht zur Schichtebene steht, gilt:

$$N_{xx} = N_{yy} = 0 \quad \text{und} \quad N_{zz} = 4\pi \quad . \quad (2.8)$$

Setzt man Gl. (2.6) in Gl. (2.8) ein und führt man die Integration durch, so erhält man:

$$F_{\text{dem}} = 2\pi M^2 \cos^2 \theta \quad , \quad (2.9)$$

wobei  $\theta$  den Winkel zwischen Oberflächennormale und Magnetisierung darstellt (vgl. Abb. 2.2). Man erkennt anhand der  $\cos^2 \theta$ -Abhängigkeit, daß eine Magnetisierung innerhalb der Ebene bevorzugt wird. Dieses Modell kann benutzt werden, um die experimentellen Ergebnisse zu beschreiben [14].

Bisher haben wir anhand des Kontinuumsmodells das Entmagnetisierungsfeld für einen Ellipsoid behandelt. Da die Cluster auf der Oberfläche häufig keine Ellipsoide sind, muß man ein mikroskopisches Bild zur Bestimmung des Feldes benutzen, in dem man ein Gitter von magnetischen Dipolen mit dem magnetischen Moment  $\mu_i$  am Gitterpunkt  $i$  betrachtet. Die potentielle Energie dieses Systems lautet:

$$E_{\text{dem}} = -\frac{1}{2} \sum_i \mu_i \cdot h_i \quad , \quad (2.10)$$

wobei  $h_i$  das Feld am Gitterpunkt  $i$  darstellt, der durch die Anwesenheit der umgebenden Dipole hervorgerufen wird. Dieses Feld nennt man auch Dipolsumme und berechnet sich wie folgt:

$$h_i = \sum_{j, j \neq i} \left[ -\frac{\mu_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} + \frac{3(\mu_j \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^5} \right] \quad . \quad (2.11)$$

Wenn die Körper, für welche die Dipolsumme berechnet werden soll, nicht aus zu vielen Atomen besteht ( $i < \text{einige tausend}$ ), so kann die Summation explizit ausgeführt werden. Das gemittelte Dipolfeld in Abhängigkeit vom Aspektverhältnis, das als das Verhältnis des Radius zur Höhe des Halbellipsoids definiert ist, wurde für kleine Co-Cluster gerechnet [15]. Dabei wurde festgestellt, daß das Dipolfeld mit steigendem Aspektverhältnis abnimmt und bei  $h/r > 1.8$  sogar ein Minus Vorzeichen zeigt, was auf eine senkrechte Magnetisierung hinweist. In dieser Arbeit wurde die Dipolsumme verwendet, um die Dipol–Dipol-Wechselwirkung zwischen den einzelnen Clustern abzuschätzen (siehe Kap. 6).

Die Form-Anisotropie hängt grundsätzlich von der Magnetisierung und der Form, die durch das Aspektverhältnis ausgedrückt wird, ab. Kittel (1948) und Snoek (1948) haben zum ersten Mal direkt aus der Bewegungsgleichung der Magnetisierung für ferromagnetische Resonanz den Einfluß des Demagnetisierungsfeldes auf die Resonanzposition ausgerechnet [16]. Nimmt man direkt die Lösung der Bewegungsgleichung, die analytisch für parallele ( $\theta = 90^\circ$ ) und senkrechte ( $\theta = 0^\circ$ ) Anordnung definiert sind, kann man für ein Ellipsoid das Resonanzfeld in Abhängigkeit des Aspektverhältnisses (Höhe/Breite) berechnen.

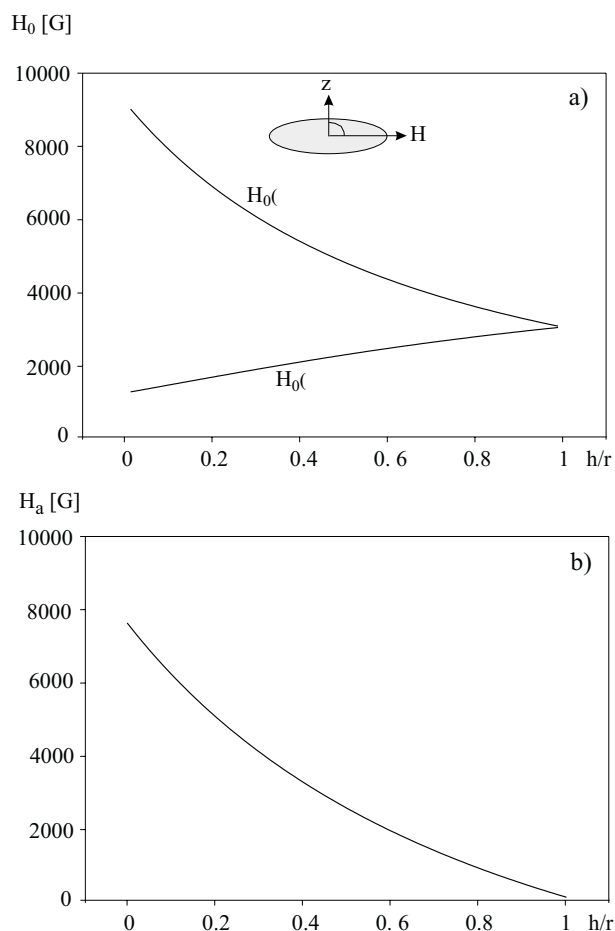


Abbildung 2.3: a) Resonanzfeld des ferromagnetischen Ni-Teilchens als Funktion der Teilchenform ( $h/r$ ) für zwei Orientierungen. b) Form-Anisotropie ( $H_a = H_0(0^\circ) - H_0(90^\circ)$ ) als Funktion der Teilchenform.

Abbildung 2.3 zeigt diese Abhängigkeit für Ni. Dabei wurden die Magnetisierung bei Raumtemperatur (485 G) und der  $g$ -Wert des Nickels im Volumen des Festkörpers eingesetzt. Das Anisotropiefeld ist die Differenz zwischen den beiden Kurven ( $H_a = H_0(0^\circ) - H_0(90^\circ)$ ). Das Anisotropiefeld ist für unendlich flache Teilchen maximal ( $4\pi M$ ), nimmt mit steigendem Aspektverhältnis ab und ist schließlich für kugelförmige Teilchen gleich Null.

Die Anisotropieenergie stellt eine temperaturabhängige Größe dar. Die Energiedichte der Form-Anisotropie für einen Film ist proportional zu  $M^2$  (siehe Gl. (2.9)) und ist dadurch eine Funktion der Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung. Somit sinkt die Energiedichte der Form-Anisotropie mit steigender Temperatur und verschwindet bei der Curie-Temperatur  $T_c$ .



### 2.2.2 Magnetokristalline Anisotropie

Die magnetokristalline Anisotropie beruht auf der Spin–Bahn–Wechselwirkung, über die der Spin an das Kristallgitter gekoppelt ist. Im allgemeinen hat die magnetokristalline Anisotropie die gleiche Symmetrie wie der Kristall und wird phänomenologisch als Abhängigkeit der freien Energiedichte von dem Winkel zwischen Magnetisierung und Kristallachsen beschrieben.

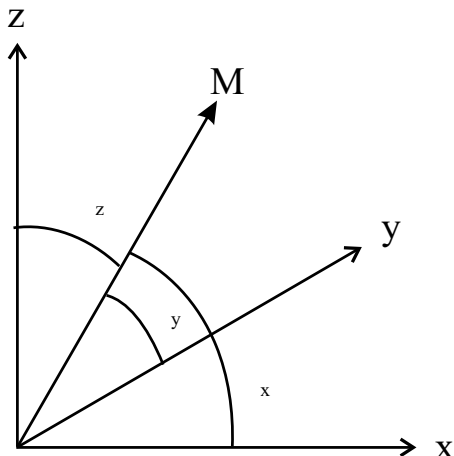


Abbildung 2.4: Skizze zur Veranschaulichung der vorliegenden kubischen Geometrie.

Für kubische Systeme, wie Fe und Ni, kann die magnetokristalline Anisotropie als Potenzreihe der Richtungscosinus  $\alpha$  der Magnetisierung bezüglich der kubischen Kristallachsen beschrieben werden (vgl. Abb. 2.4):

$$F_{\text{mc}} = K_0 + K_4(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2 + \alpha_z^2\alpha_x^2) + K_6\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2 + \dots \quad , \quad (2.12)$$

wobei  $K_i$  als Anisotropiekonstante  $i$ -ter Ordnung bezeichnet wird. Der Wert von  $K_0$  verschiebt lediglich den Nullpunkt und wird deshalb bei allen weiteren Betrachtungen nicht weiter diskutiert. Da die Anisotropiekonstanten mit zunehmender Ordnung schnell abnehmen, werden jeweils nur der erste oder die ersten beiden winkelabhängigen Terme berücksichtigt. Bei bcc-Fe ist  $K_4 > 0$ , und die leichten Achsen liegen entlang den Würfelkanten (100), (010) und (001). Im Falle von fcc-Ni ist  $K_4 < 0$ , und die leichten Achsen sind die vier Raumdiagonalen des Würfels ((111), usw.). Aufgrund der in den meisten Fällen hohen Kristallsymmetrie ist das Bahnmoment der Elektronen nahezu ausgelöscht. Daher stellt die magnetokristalline Anisotropie im Vergleich zur Form-Anisotropie auch nur einen kleinen Beitrag dar. Wie bereits im letzten Abschnitt gezeigt: Die Form-Anisotropie kann für einen

Film in der Größenordnung von  $4\pi M$  abgeschätzt werden. Damit beträgt das Anisotropiefeld bezüglich der Form-Anisotropie z.B. für fcc-Ni etwa 8 kG. Die magnetokristalline Anisotropie kann durch  $K/M$  abgeschätzt werden. Damit beträgt das Anisotropiefeld bezüglich der magnetokristallinen Anisotropie bei Raumtemperatur z.B. für fcc-Ni im Volumen etwa 110 G und für Eisen etwa 250 G.

Die magnetokristallinen Anisotropiekonstanten von Festkörperproben zeigen starke Temperaturabhängigkeiten, obwohl die Spin–Bahn-Wechselwirkung, als Ursache der magnetokristallinen Anisotropie, nicht temperaturabhängig ist. Im Rahmen einer klassischen Theorie wurde in verschiedenen Ansätzen [17–19] die Temperaturabhängigkeit beschrieben. Diese basieren auf der Annahme, daß um einen Gitterpunkt ein Bereich kurzreichweitiger magnetischer Ordnung existiert, in dem die lokale Anisotropiekonstante temperaturunabhängig ist. Bei erhöhter Temperatur sind aber diese Bereiche nicht mehr parallel zueinander ausgerichtet, sondern aufgrund der thermischen Fluktuation sind die Richtungen der lokalen Magnetisierung zufällig verteilt. Dies führt zu einer Abnahme der Gesamtmagnetisierung und auch zu einer Reduktion der über die gesamte Probe gemittelten Anisotropieenergie. Somit verursacht die Temperaturunabhängigkeit der Magnetisierung eine Änderung der Anisotropie [6]. Die Anisotropie in ferromagnetischen Systemen verschwindet, wenn die Magnetisierung bei der Curie-Temperatur verschwindet. Die Temperaturabhängigkeit der Anisotropie ist stärker als die der Magnetisierung. Um diese Abhängigkeit darzustellen, wird der Vorschlag von Zener zugrunde gelegt [17], der durch Carr entwickelt wurde [18]. Beschreibt man die Anisotropieenergie in Termen der Kugelflächenfunktionen, die die Rolle des Kristallfeldes und der Spin–Bahn-Wechselwirkung widerspiegeln, erhält man einen Zusammenhang zwischen den Anisotropiekoeffizienten  $k_i$  und der Magnetisierung:

$$\frac{k_i(T)}{k_i(0)} = \left(\frac{M(T)}{M(0)}\right)^{i(i+1)/2} \quad , \quad (2.13)$$

wobei  $i$  die Ordnung der Konstante ist. Man erhält  $k_2 \sim M(T)^3$  und  $k_4 \sim M(T)^{10}$ . Die Gleichung (2.13) ist in diesem Sinne universell, daß sie sowohl im Rahmen der Molekularfeld-Näherung als auch über diverse mikroskopische Ansätze hergeleitet wurde [20]. Die Anisotropiekonstanten  $K_i$  können aus den Anisotropiekoeffizienten  $k_i$  abgeleitet werden.

### 2.2.3 Magnetoelastische Anisotropie

Es gibt einen weiteren Beitrag zur magnetischen Anisotropie, der ebenfalls auf der Spin–Bahn-Wechselwirkung beruht, die sog. magnetoelastische Anisotropie  $K_{\text{mel}}$ . Die magnetoelasti-

sche Anisotropie in einer ferromagnetischen Probe ist die Folge von Verzerrung des Kristallgitters und kann die Richtung der Magnetisierung verändern. Bei heteroepitaktischem Wachstum, wo üblicherweise der Misfit zwischen dem Deponat und dem Substrat im Prozentbereich auftreten, können die magnetoelastischen Anisotropiebeiträge sehr große Werte annehmen. Eine Bestimmung der magnetoelastischen Anisotropie benötigt eine genaue Kenntnis des Misfits und wurde daher in der Literatur nur in wenigen Fällen explizit berücksichtigt [21, 22]. Beispielsweise liegt die magnetoelastische Anisotropie von epitaktischen Fe(001)-Schichten auf MgO(001) bei einem Misfit von 3.5 % im  $10^5$  J/m<sup>3</sup>-Bereich (bzw. 6.8  $\mu$ eV/Atom), was etwa dem doppelten Wert der magnetokristallinen Anisotropiekonstanten  $K_4$  von Fe entspricht [23].

### 2.2.4 Oberflächen-Anisotropie

Bereits von Néel wurde gezeigt, daß der Symmetriebruch an der Oberfläche oder Grenzfläche zu einem zusätzlichen Anisotropiebeitrag führt [24]. Dieser Anisotropiebeitrag, der auf der Spin–Bahn-Wechselwirkung beruht, ist als Oberflächen-Anisotropie bekannt. Die Oberflächen-Anisotropie ist für dünne Filme und kleine Teilchen besonders wichtig, da für solche Systeme das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen groß ist. Die Oberflächen-Anisotropie stellt im allgemeinen ein komplexes Problem dar, das nur in speziellen Fällen durch einen phänomenologischen Ansatz behandelt wird.

Im Falle dünner Filme läßt sich die Energiedichte bezüglich der Oberflächen-Anisotropie  $F_s$  in Abhängigkeit von der Dicke  $d$  wie folgt darstellen:

$$F_s = (1/d) \cdot K_s \cos^2 \theta \quad , \quad (2.14)$$

wobei in  $K_s$  sowohl der Oberflächenbeitrag (zum Vakuum) als auch der Grenzflächenbeitrag (zum Substrat) zusammengefaßt werden. Im Falle kugelförmiger Teilchen kann die Oberflächen-Anisotropie als Funktion des Teilchenradius  $R$  durch einen ähnlichen Ansatz beschrieben werden [25]:

$$F_s = (6/R) \cdot K_s \quad , \quad (2.15)$$

wobei der Faktor  $6/R$  das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen darstellt.

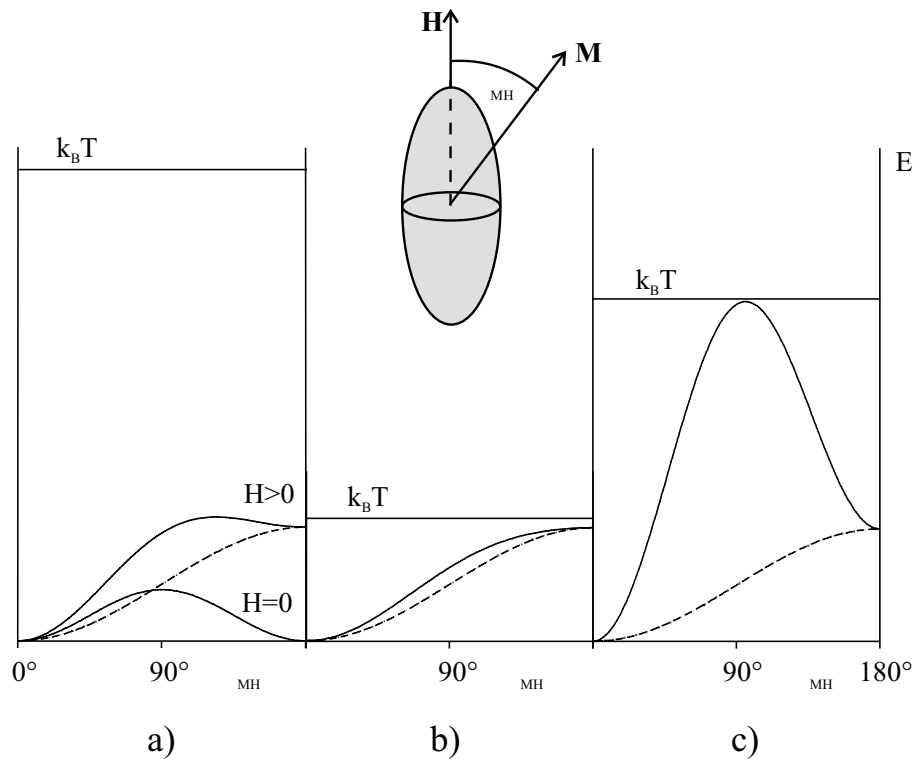


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der Anisotropiebarrieren für a) isotropen SPM, b) SPM mit schwacher Anisotropie, c) SPM mit starker Anisotropie [15].

## 2.3 Superparamagnetismus

Das magnetische Moment eines Teilchens, das sich aus der Vektorsumme der austauschgekoppelten Atommomente ergibt, liegt in der Richtung der leichten Achsen der Magnetisierung, die die Minima der Gesamtenergie des Systems darstellen. Diese Energieminima sind durch die Anisotropiebarriere getrennt. Für kleine Teilchen, die unterhalb einer kritischen Größe nur aus einer Domäne bestehen, wird die Anisotropiebarriere durch  $K_i \cdot V$  beschrieben. Dabei sind  $K_i$  eine Anisotropiekonstante beliebiger Ursache und  $V$  das Teilchenvolumen. Für solche ein-domänige Teilchen führt eine Abnahme der Teilchengröße zur Abnahme der Anisotropiebarriere oder Anisotropieenergie  $K_i \cdot V$ . Wenn die thermische Energie  $k_B T$  in der Größenordnung der Anisotropieenergie ist, ist das magnetische Moment nicht mehr entlang der leichten Achse der Magnetisierung gerichtet, sondern kann durch thermische Anregung fluktuieren (vgl. Abb. 2.5). Dieses Phänomen wird Superparamagnetismus (SPM) genannt [26]. Der Ausdruck 'Superparamagnetismus' ist keine universelle Aussage, weil eine Beobachtung des superparamagnetischen Effekts von der Zeitskala des

Experiments abhängt. Bevor wir solche dynamischen Effekte behandeln, sollen hier zuerst die statischen Effekte betrachtet werden.

In der isotropen SPM Grenze ist die Anisotropieenergie im Vergleich zur thermischen Energie vernachlässigbar ( $k_B T \gg K_i V$ ), und das Gesamtmoment des Teilchens kann eine freie Rotation im Raum ausführen (Abb. 2.5 a). Die Magnetisierung eines Ensembles solcher Teilchen ist in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes gleich Null. Das Ensemble verhält sich wie ein Paramagnet, jedoch weisen die einzelnen Teilchen ein vielfach größeres Moment auf, da sie aus bis zu mehreren tausend Atomen bestehen können. Das Anlegen eines äußeren Magnetfeldes  $H$  im Falle eines isotropen superparamagnetischen Ensembles führt zu einer Magnetisierung wie folgt: Betrachtet man ein magnetisch isotropes Teilchen mit einem Gesamtmoment von  $\mu_p = \sum \mu_{\text{Atom}}$ , das mit dem Winkel  $\theta_{\text{MH}}$  zum äußeren Magnetfeld  $H$  gerichtet ist, so ist die Energie dieses Teilchens durch  $-\mu_p H \cos \theta_{\text{MH}}$  gegeben. Für ein Ensemble solcher Teilchen im thermodynamischen Gleichgewicht existiert eine Boltzmann-Verteilung der Spins als Funktion von  $\theta_{\text{MH}}$ . Der Anteil der Magnetisierung, der durch das Feld gerichtet wurde, kann mit Hilfe der Langevin-Funktion  $L(x)$  beschrieben werden [26]:

$$M = M_s L(x) = M_s [\coth(x) - 1/x] \quad (2.16)$$

mit  $x = \mu_p H / k_B T$ . Im Falle schwacher Anisotropie, d.h. für  $K_i V \ll \mu_p H$ , läßt sich noch eine Boltzmann-ähnliche Verteilung annehmen (vgl. Abb. 2.5 b). Wenn die Anisotropie nicht schwach ist, sind alle Winkel a priori nicht mehr gleich wahrscheinlich, und deshalb kann die Boltzmann-Statistik nicht verwendet werden. Ein einfaches Beispiel ist ein System mit einer uniaxialen Anisotropie im statischen Magnetfeld  $H$ . Die Gesamtenergie dieses System lautet:  $E = K_2 V \cos^2 \theta - \mu_p H \cos \theta$  (s. Abb. 2.5 c). Dabei ist  $K_2$  eine Anisotropiekonstante beliebiger Ursache. Bisher wurde das System statisch behandelt. Da der Meßvorgang ein dynamischer Prozeß ist, soll man auch die Dynamik in Betracht ziehen. Dazu soll zuerst die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Potentialminimum zum anderen mit Hilfe einer einfachen klassischen Betrachtungsweise abgeschätzt werden [13]:

$$\nu_{+/-} = c_{+/-} e^{-\frac{K_2 V}{k_B T} (1 \pm H/H_{K_2})^2} \quad (2.17)$$

Hierbei ist  $H_{K_2}$  das der Anisotropiekonstanten äquivalente Anisotropiefeld ( $H_{K_2} = 2K_2/M$ ). Die Konstanten  $c_+$  und  $c_-$  liegen je nach verwendeter Literatur im Bereich von  $10^9 - 10^{13} \text{ s}^{-1}$  [27]. Man erkennt, daß die Sprungrate von einem Potentialminimum zum anderen exponentiell von Teilchengröße und Temperatur abhängt. Ein Ensemble der Teilchen kann

als superparamagnetisch betrachtet werden, wenn die Sprungrate in der Größenordnung der Meßzeit des jeweiligen Experiments (im Falle FMR etwa  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ ) ist.

## 2.4 Ferromagnetische Resonanz

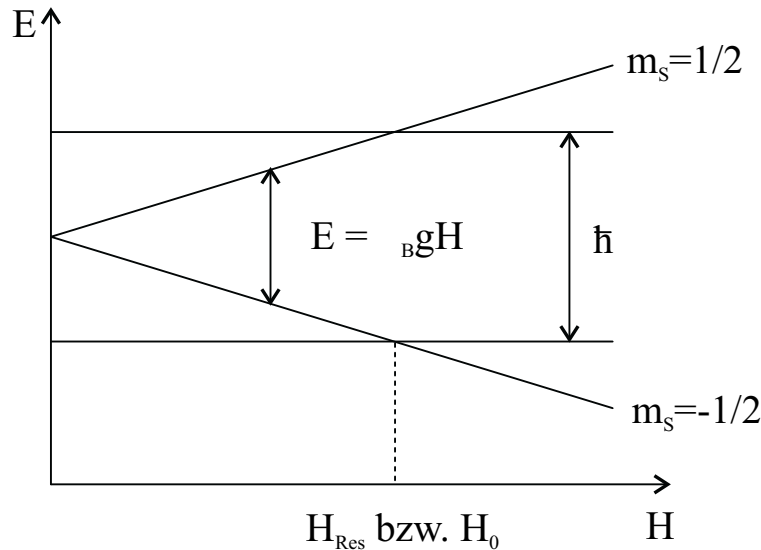


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung des Resonanzprozesses für die ESR.

Unter ferromagnetischer Resonanz (FMR) versteht man die resonante Absorption von Strahlung (im vorliegenden Fall im Bereich der Mikrowellen) durch eine ferromagnetische Probe. Bei der FMR wird dieselbe Meßtechnik angewendet wie bei der Elektronenspinresonanz (ESR). Der Unterschied zwischen der ferromagnetischen Resonanz (FMR) und der Elektronenspinresonanz (ESR) besteht darin, daß in der FMR die Spins aufgrund der starken Austauschkopplung im Ferromagneten parallel zueinander stehen, während in der ESR die Spins unabhängig voneinander sind. Bevor wir mit der Diskussion der FMR beginnen, wird zunächst die Grundlage der ESR erläutert. Im quantenmechanischen Bild ist das Energieniveau eines freien Elektrons bei der Abwesenheit eines Magnetfeldes zweifach entartet. Legt man ein Magnetfeld entlang der  $z$ -Richtung an (s. Abb. 2.6), so wird die Entartung aufgehoben. Die daraus resultierenden Energieniveaus sind durch die Zeeman-Energie aufgespalten.

Der Übergang zwischen den beiden Zeeman-Niveaus (von  $m_s = -1/2$  nach  $m_s = +1/2$ ) kann durch Mikrowellenstrahlung der Frequenz  $\omega$  induziert werden, falls die Photonenergie  $\hbar \omega$  gleich der Differenz der beiden Zeeman-Niveaus  $\Delta E = E(1/2) - E(-1/2)$  ist. Somit ist

die Resonanzbedingung gegeben durch:

$$\hbar\omega = g\mu_B H_0 \quad , \quad (2.18)$$

wobei  $H_0$  als Resonanzfeld und  $g$  als der sog. spektroskopische Aufspaltungsfaktor oder Landésche  $g$ -Faktor bezeichnet werden.

Das gesamte magnetische Moment besteht aus der Vektorsumme des Bahnmoments und des Spinnmoments, wobei aus der relativistischen Quantentheorie bekannt ist, daß das magnetische Moment des Elektronenspins mit einem Faktor 2 im Gesamtmoment eingeht. Um dieser Tatsache Rechnung zu tragen, ist der  $g$ -Faktor:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad . \quad (2.19)$$

Für reines Elektronenspin,  $L = 0$ ,  $J = S$ , erhält man  $g = 2$ , daß doppelt so groß ist wie für reines Bahnmoment  $S = 0$ ,  $J = L$ . Der  $g$ -Faktor für ein freies Elektron beträgt  $g = 2.0023$  und die für Fe, Ni und Co wurden in der Tabelle 2.1 zusammengefaßt.

In ferromagnetischen Substanzen führt die starke Austauschwechselwirkung dazu, daß in der Resonanzgleichung der FMR anstelle von  $H_0$  ein effektives Feld  $H_{\text{eff}}$  auftritt:

$$\hbar\omega = g\mu_B H_{\text{eff}} \quad , \quad (2.20)$$

wobei  $H_{\text{eff}}$  sich aus der Summe von äußerem Feld  $H$ , Mikrowellenfeld  $H_1$  und internem Feld  $H_a$  ergibt ( $H_{\text{eff}} = H + H_1 + H_a$ ). Hier ist die Summe aller Anisotropiefelder im internen Feld beinhaltet.

Die FMR wird üblicherweise in einem quasiklassischen Bild wie folgt beschrieben: In einem äußeren Feld  $H$  präzediert die Magnetisierung  $M$  um  $H$ , und aufgrund der starken Dämpfung richtet sich parallel zu  $H$  aus. Wird zusätzlich ein Wechselfeld (Mikrowellenfeld  $H_1$ ) senkrecht zu  $H$  angelegt, so präzediert  $M$  um  $H_{\text{eff}}$  mit der sog. Larmor-Frequenz  $\omega_L$ . Es kommt zu der resonanten Absorption der Mikrowellenstrahlung, wenn die Frequenz des Wechselfeldes der Larmor-Frequenz entspricht ( $\omega = \omega_L$ ). Auf die Magnetisierung  $M$  im Feld  $H_{\text{eff}}$  wirkt das Drehmoment  $M \times H_{\text{eff}}$ . Die Bewegung der Magnetisierung in Ferromagneten um ihre Gleichgewichtslage wird durch folgende Gleichung beschrieben [16, 28]:

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma M \times H_{\text{eff}} + R \quad , \quad (2.21)$$

wobei  $\gamma$  das magnetogyrische Verhältnis ( $\gamma = g\mu_B/\hbar$ ) darstellt. Neben dem Term  $M \times H_{\text{eff}}$  wurde ein Reibungsterm  $R$  eingeführt, der die Dämpfung beschreibt. Für  $R$  werden in der Literatur phänomenologische Ansätze gewählt, die dann die intrinsische Linienbreite

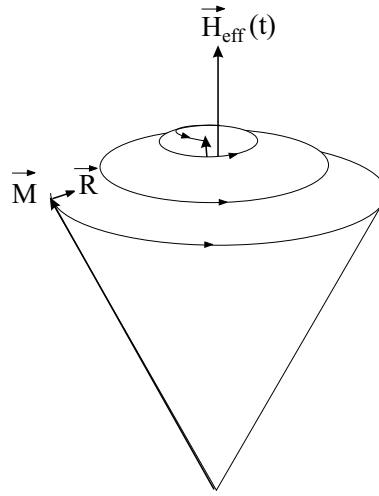


Abbildung 2.7: Gedämpfte Präzessionsbewegung des Magnetisierungsvektors.

beschreiben. Da diese aber sehr klein ist verglichen mit der tatsächlich gemessenen Linienbreite und somit gegenüber den inhomogenen Linienverbreiterungen vernachlässigt werden kann, soll hier auf eine detaillierte Diskussion der verschiedenen Ansätze verzichtet werden. Die Gl. (2.21) stellt ein System von gekoppelten Differentialgleichungen dar, das schwierig zu lösen ist. Ein einfacherer Weg, um die Resonanzgleichung zu erhalten, führt zum Formalismus der freien Energie  $F$  von Smit und Beljers, der in Polarkoordinaten die folgende Gleichung ergibt [29]:

$$\left(\frac{\omega}{\gamma}\right)^2 = \frac{1}{M^2 \sin^2 \theta} (F_{\theta\theta} F_{\varphi\varphi} - F_{\theta\varphi}^2) \quad , \quad (2.22)$$

wobei Dämpfungsterme vernachlässigt wurden. Die mit  $\theta$  und  $\varphi$  indizierten Größen sind die entsprechenden partiellen Ableitungen von  $F$ . Die Gleichung (2.22) liefert nicht für alle Kombinationen von Winkeln die richtigen Werte. Deshalb wurde von Baselgia et al. eine korrigierte Form angegeben [30]:

$$\left(\frac{\omega}{\gamma}\right)^2 = \frac{1}{M^2} \left[ F_{\theta\theta} \left( \frac{F_{\varphi\varphi}}{\sin^2 \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} F_{\theta} \right) - \left( \frac{F_{\theta\varphi}}{\sin \theta} - \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{F_{\varphi}}{\sin \theta} \right)^2 \right] \quad . \quad (2.23)$$

Die freie Energiedichte  $F$  besteht aus verschiedenen Termen:  $F_{\text{mc}}$  die magnetokristalline Anisotropieenergie,  $F_{\text{mol}}$  die Energie einer von außen angelegten mechanischen Spannung (verknüpft mit Magnetostraktion),  $F_{\text{shape}}$  die Form-Anisotropieenergie und  $F_{\text{Zeeman}}$  die Zeeman-Energie:

$$F = F_{\text{mc}} + F_{\text{mol}} + F_{\text{shape}} + F_{\text{Zeeman}} \quad . \quad (2.24)$$



Wenn man die Abhängigkeiten der einzelnen Terme von der Magnetisierung kennt, kann man mit Hilfe eines numerischen Verfahrens für eine bestimmte Lage des äußeren statischen Magnetfeldes die Gleichgewichtslage der Magnetisierung und das Resonanzfeld  $H_0$  berechnen, wobei die Lage der Magnetisierung in der obigen Formulierung erhalten wird. Für den Spezialfall einer uniaxialen *out-of-plane*-Anisotropie läßt sich das Resonanzfeld analytisch ermitteln, wenn das äußere Magnetfeld parallel oder senkrecht zur Kristallebene steht [15].

Die Resonanzbedingung eines SPM ist identisch mit der für ein paramagnetisches Ensemble ( $\omega = \gamma H$ ) [31]. Im Grenzfall der isotropen superparamagnetischen Proben zeigt solch ein System im äußeren Feld ein Resonanzfeld am g-Wert. Zwischen den beiden Grenzfällen (ferromagnetischer Probe und isotroper superparamagnetischer Probe) gibt es einen kontinuierlichen Übergang, in dem das Resonanzfeld vom Volumen der Teilchen abhängt. Dabei handelt es sich um die Proben mit schwacher Anisotropie ( $K_i V \ll \mu_p H$ ). In diesem Fall führt die thermische Fluktuation der Momente um die leichte Achse zu einem 'Schmelzen' der Anisotropie [32], was eine Verschiebung der Resonanzlage verursacht. Die Verteilung der Orientierung der Teilchenmomente bei angelegtem äußeren Magnetfeld ist eine Boltzmann-ähnliche Verteilung. Raikher et al. haben anhand der Lösung der Bewegungsgleichung der magnetischen Momente eines superparamagnetischen Ensembles die Anisotropiekonstanten bestimmt [32]. Diese Anisotropiekonstanten sind das Produkt aus den Volumen-Anisotropiekonstanten mit einem reduzierenden Faktor, der ein Langevin-ähnliches Verhalten aufweist.

Eine weitere Kenngröße in der FMR-Spektroskopie ist die Intensität der Signale. Für ein ferromagnetisch gekoppeltes System ist die FMR-Signalintensität wesentlich höher als für ein paramagnetisches System mit der gleichen Anzahl von Spins, da die Intensität von der Differenz der Population benachbarter Zeeman-Niveaus abhängt [33]. Im folgenden wird gezeigt, daß die FMR-Signalintensität proportional zum gesamten magnetischen Moment der Probe ist. Die Anregung eines magnetischen Mediums durch ein hochfrequentes Wechselfeld  $H_1$  führt zu einer phasenverschobenen Antwort, die durch die komplexe Hochfrequenzsuszeptibilität  $\chi$  wie folgt beschrieben wird:

$$m e^{i(\omega t - \varphi)} = \chi H_1 e^{i\omega t} \quad . \quad (2.25)$$

Hier wird nur die lineare Antwort des Systems betrachtet.  $\chi$  ist eine komplexe Größe:

$$\chi = \chi' - i\chi'' \quad , \quad (2.26)$$

wobei der Realteil  $\chi'$  die Dispersion beschreibt und der Imaginärteil  $\chi''$  für die Absorption

verantwortlich ist.

Die Intensität des FMR-Signals ist proportional zur absorbierten Mikrowellen-Leistung und wird über die Änderung der Güte des Resonators im Resonanzfall bestimmt. Die mittlere absorbierte Leistung pro Einheitsvolumen ist proportional zu  $\chi''$  und dem Mittelwert des Hochfrequenzfelds  $\langle H_1^2 \rangle$  [34]:

$$P_{\text{abs}} = \frac{1}{2} \omega \chi'' \langle H_1^2 \rangle \quad . \quad (2.27)$$

Die Intensität  $I$  ergibt sich aus der Integration des Absorptionssignals  $\chi''(H)$  über das äußere Feld  $H$ . Da  $\chi''$  proportional zur Magnetisierung ist, ist die Intensität ebenfalls proportional zur Magnetisierung der Probe. Entsprechend erhält man die Intensität im Falle der Messung von  $\partial\chi''/\partial H$  nach zweifacher Integration über das äußere Feld  $H$ .

Für dünne ferromagnetische Filme haben Celinski et al. gezeigt, daß die FMR-Intensität proportional zur Sättigungsmagnetisierung und zur Schichtdicke des Films ist [35]. Es wurde theoretisch hergeleitet und experimentell bestätigt, daß die Intensität linear mit der Menge an ferromagnetisch gekoppelten Atomen ansteigt. Dieser Zusammenhang gilt, solange die Schichtdicke kleiner als die Eindringtiefe der Mikrowellenstrahlung ist. Diese liegt aber im Bereich einiger  $\mu\text{m}$  und kann daher für alle hier behandelten Fragestellungen vernachlässigt werden.

Geht man zu ferromagnetischen Teilchen über, so ist die FMR-Intensität  $I$  proportional zum Produkt aus der Anzahl der Teilchen  $N$  und dem magnetischen Moment der Teilchen  $\mu_p$ :

$$I \sim N \cdot \mu_p \quad . \quad (2.28)$$

Im Falle des isotropen SPM muß die thermische Fluktuation der Magnetisierung in Betracht gezogen werden. Gekht et al. haben gezeigt, daß die Signalintensität  $I$  zusätzlich proportional zur Langevin-Funktion ist [31]. Es ergibt sich:

$$I \sim N \cdot \mu_p L(x) \quad , \quad (2.29)$$

wobei wie oben  $x = \mu_p H / k_B T$ . Man erkennt, daß die thermische Fluktuation der Magnetisierung eines superparamagnetischen Ensembles zu einer Abnahme der FMR-Intensität führt. Diese Intensitätsabnahme hängt von der Magnetisierung, der Teilchengröße und der Temperatur ab.

## 2.5 Nukleation und Wachstum

Um das Wachstum der aufgebrachten Metalle aus der Gasphase auf einer Kristalloberfläche zu beschreiben, wurden im wesentlichen zwei Ansätze gemacht. Der erste Ansatz basiert auf thermodynamischen Überlegungen und gibt allgemeine Auskünfte über den Wachstumsmodus. Der zweite Ansatz geht von Elementarschritten des Wachstums aus, bei den die Kinetik eine zentrale Rolle spielt. Zunächst wird der thermodynamische Ansatz erläutert.

Bringt man auf eine Kristalloberfläche  $S$  (Substrat), mit einer Oberflächenenergie  $\gamma_S$ , ein von  $S$  unterschiedliches Adsorbat  $A$  auf, so spricht man von Heteroepitaxie. Das Material  $A$  wird im allgemeinen eine andere Oberflächenenergie  $\gamma_A$  besitzen. Zwischen dem Substrat und dem Adsorbat existiert eine definierte Grenzflächenenergie  $\gamma_I$ . Je nach dem Größenverhältnis der Energien bilden sich unterschiedliche Wachstumsmodi aus. Im Falle von

$$\gamma_A + \gamma_I < \gamma_S \quad (2.30)$$

wächst  $A$  in geschlossenen Lagen auf  $S$ , und das Wachstum einer neuen Atomlage beginnt erst dann, wenn die darunter liegende Lage ganz geschlossen ist. Man sagt dann, daß das Wachstum im Frank-van-der-Merwe-Modus verläuft. Dieses lagenweise Wachstum tritt in der Regel bei der Heteroepitaxie von Metallen auf Metall auf [36]. Im Falle von

$$\gamma_A + \gamma_I > \gamma_S \quad (2.31)$$

wächst  $A$  inselförmig auf  $S$ , und erst bei hohen Bedeckungen ist das Substrat vollständig bedeckt. In diesem Fall spricht man von Volmer-Weber-Wachstum. Dies ist häufig bei Metall/Oxid-Systemen vorzufinden [37]. Mit anderen Worten: Es ist für die Bildung von dreidimensionalen metallischen Clustern bei der Deposition des Metalls auf einer oxidischen Oberfläche erforderlich, daß die Bindungsenergie zwischen den adsorbierten Atomen größer ist als die Energie der Adsorbat–Substrat-Bindung.

Darüber hinaus gibt es die Möglichkeit, daß sich zunächst geschlossene epitaktische Lagen bilden, die durch unterschiedliche Gitterkonstanten verspannt sind (*strain*-Energie). Eine Möglichkeit, um die Verspannung abzubauen, ist die Bildung dreidimensionaler Inseln nach der Komplettierung von wenigen geschlossenen Lagen. Man spricht von Wachstum im Stranski-Krastanov-Modus. Aus solchen energetischen Überlegungen ist die Vorhersage des Wachstumsmodus ein komplexes Problem, das kritisch vom Misfit und von der Größe der Spannung abhängt [36].

Die AFM-Aufnahmen zeigen, daß Ni in Form von dreidimensionalen Teilchen auf Saphir wächst. Hieraus kann man schließen, daß die Metall–Metall-Wechselwirkung größer ist als die Metall–Substrat-Wechselwirkung. Das dreidimensionale Wachstum wurde auch für andere Übergangsmetalle wie Pd, Rh, Co und Ir auf einem Aluminiumoxidfilm beobachtet [38, 39].

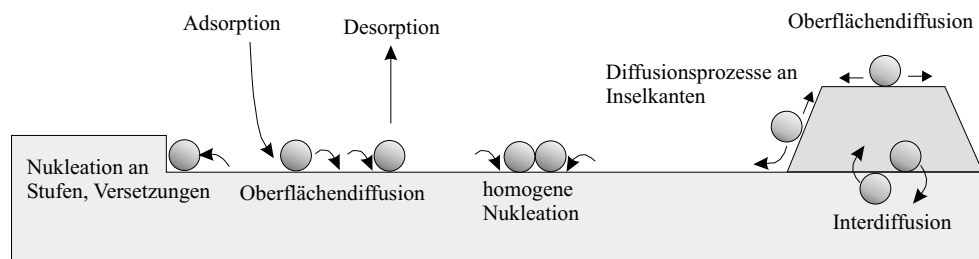


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung einiger während des Wachstums auftretenden Elementarprozesse.

Man unterscheidet zwischen homogener und heterogener Nukleation. Bei heterogener Nukleation hängt die Inseldichte hauptsächlich von der Dichte der Substrat-Defekte ab. In realen Systemen besitzt das Substrat Defekte, die bevorzugte Nukleationsplätze sind.

Die Grundlagen der Nukleation und des Wachstums wurde von Venables et al. anhand verschiedener Elementarschritte des Wachstums untersucht [40] (siehe Abb. 2.8). Einige Beispiele der Nukleation und des Wachstums der Metalle auf Oxidoberflächen wurden ausführlich in [41, 42] berichtet. Wenn ein Metall von der Gas-Phase auf das Substrat auftrifft, bleiben die Atome mit einer Haft-Wahrscheinlichkeit auf dem Substrat. Diese Atome diffundieren auf das Substrat, können sich treffen und Nukleationskeime bilden. Dieser Prozeß ist durch die Substrat-Temperatur, Absorptionsenergie und die Diffusionsbarriere der Adatome auf dem Substrat beeinflusst [40]. Hierbei wird die Substratoberfläche als periodisches Potential vorgestellt. Dadurch beeinflusst das Substrat die Nukleation und das Wachstum der Adatome.