

**Resonante magnetische
Röntgenuntersuchungen an einem Co/Cu/Co-
Schichtsystem
und an Platinlegierungen**

Von der Fakultät für Mathematik und Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Uwe Grüner

aus Ulm

Hauptberichter: Prof. Dr. G. Schütz
Mitberichter: Prof. Dr. J. Wrachtrup
Tag der mündlichen Prüfung: 02. August 2006

Max-Planck-Institut für Metallforschung
Stuttgart
2006

Summary

Multilayer systems consisting of magnetic and non-magnetic components have gained steadily growing interest of aspects of fundamental physics as well as for technical applications, since these artificial media exhibit new fascinating properties. Due to the oscillatory exchange coupling in combination with Giant Magneto Resistance (GMR) and Tunneling Magneto Resistance (TMR), multilayer systems are basic components for magnetic sensors to read out magnetic storage media and for magneto- and spin-electronic devices as used in Magnetic Random Access Memories (MRAM). Because of strong magnetic contributions in the resonant scattering cross section, it is possible to study also in an element and site-selective manner magnetic characteristics of these structural components by x-ray resonant magnetic reflectometry (XRMR) using circularly polarized synchrotron radiation.

Comparable to non-magnetic specular reflectivity experiments which can lead to a well known analysis of layer thickness and interface roughness, specular magnetic measurements provide quantitative information of magnetization profiles perpendicular to the surface related to momentum transfer in this direction. Due to the high sensitivity of this method even small effects of nonmagnetic at the interfaces polarized atoms can be investigated in detail.

Measuring two reflection spectra in the near of an absorption edge with inverted magnetization of the sample or with inverted helicity allows to get the asymmetry ratio. In contradiction to the reflected intensity the asymmetry ratio is free of superimposed noise and includes all information of the depth-dependent magnetization profile of the investigated layers. The modeling of the magneto-optical constants which are proportional to the magnetization occurs by a new developed program, where the layered system is artificially subdivided into small sliced layers. To simulate and interpret the reflectivities and asymmetry ratios correctly, both the polarization dependences and the angle dependences of nonmagnetic and magnetic parts of the scattering amplitude have been included into the commonly used Parratt algorithm within this thesis.

For each simulation both of the reflectivities and of the asymmetry ratios it is essential to know the optical constants of each layer. The absorptive parts of the charge term of the complex index of refraction are appropriated by an XAS-experiment. The magnetic absorptive parts are determined by an XMCD-experiment. The calculation of the dispersion both of the magnetic and of the nonmagnetic is deduced by the Kramers-Kronig-relation.

Within this thesis a Si-bulk/CoFe/Cu/CoFe/Cr-layered system has been investigated. It has been successfully achieved for the first time to determine the magnetization progressing of a

copper layer inside of a GMR-element. To appoint the chemical profile of the layered system nonmagnetic reflectivity measurements have been done. The thicknesses have been determined to: 18,7nm (CoFe), 2,4nm (Cu), 5,9nm (CoFe) and 2,5nm (Cr).

XRMR-measurements at the CuL₃-edge have shown an averaged magnetic moment per copper atom of 0,004μ_B due to the 3d-3d-hybridisation. The maximal value of 0,01μ_B has been achieved at a copper concentration of only 0,1%.

Investigations at the CoL₃-edge have shown a reduction of the magnetization of the bulk value of 43% at the interfaces to the copper layer. At the interface to the chromium upper layer an increase of 23% has been found. At the interface to the Si-substrate the magnetization per Cobalt atom has been increased by 12%.

Both the XRMR-measurements and the nonmagnetic reflectivity measurements have been performed at the helical undulator UE-46PGM at the berlin synchrotron BESSY.

The great potential and the singularity of the method of the resonant magnetic reflectometry have been demonstrated. Only with this technique it is possible to do nondestructive investigations of buried layers in layer systems. Furthermore with this technique studies on magnetic-electronic components of the new, promising “spintronic” can be done in an excellent way. This method is only restricted by a limited number of same or similar layers in a layer system. Owing to interference effects when modeling many interfaces simultaneous the unambiguity of the simulation could be lost.

Beyond asymmetry measurements with the XRMR-method it is possible to measure element specific hysteresis of buried layers and to do spectroscopy under reflectivity conditions. By a further development of the new program there is now a software available to calculate XAS-spectra obtained under reflection. Additionally the software allows the modification the potential to simulate also dichroic energy spectra both for constant angle of incidence and for constant momentum transfer.

By a further development of a still existing XMCD-experiment in the hard x-ray range there is a new method available with many advantages compared to conventional dichroic spectroscopy. Owing to the application of a phase retarder it is possible to perform dichroic measurements even with linear polarized x-rays at wiggler or undulator beamlines or at XFELs (X-ray Free Electron Laser) in the future. On the basis of a digital lock in technique this method achieves a signal to noise ratio of pure photon statistics and provides an enormous gain of time compared to methods with changing the external magnetic field. Applying the new square function for the regulation of the phase retarder the maximum circular polarization is obtained constantly. This maximal polarization is significantly bigger than the

effective polarization of the former used sine function.

Owing to special modifications of the still existing equipment tailored to the ANKA-MPI-MF-beamline, a portable system is available which can be built up and adjusted in a very short time.

For the investigation of three different platinum alloys the symmetric (400)-reflex of two existing diamonds has been used. This restricts the application of the phase retarder to photon energies bigger than 7keV.

To interpret the XMCD-spectra quantitatively it is essential to know the degree of circular polarization. For the energy of the PtL₃-edge ($E = 11,56\text{keV}$) the degree of circular polarization has been determined to $P_C = 87\%$. Simulations with a new developed program have confirmed this result.

With the digital lock in technique it is possible to record very low-noise XAS- and XMCD-spectra from three different platinum alloys.

A rolled Fe₈₀Pt₂₀-alloy has shown a XMCD-effect of 11,9% related to the edge lift. A dichroic effect of 4,8% has been found for a thinned Co₅₀Pt₅₀-single crystal and a thinned Fe₅₀Pt₅₀-single crystal has shown a XMCD-effect of 4,2%. The values of the single crystals are always in relation to the edge lift. All dichroic and nondichroic measurements have demonstrated clearly the big advantage of digital signal processing. All measurements were taken at room temperature and at ambient pressure.

Tests at energies below 7keV by using the asymmetric (220)- and (111)-reflex have approved the application for lower energies. Simulations of the degree of circular polarization have also been done for lower energies. To reduce the inevitable large absorption in air a new construction has been developed. A large part of the setup has been put under vacuum or under helium atmosphere. Particularly, for the investigation of hard magnetic alloys in the future the use of asymmetric reflexes for lower energies will be of big interest. A new construction of a sensitive ionization chamber and the new development of adequate specimen holders will even pave the way for XRMR-measurements in the hard x-ray range. Many interesting magneto-optical storage media can be and will be investigated with this technique in the future.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
1.1	Technologisches Interesse an magnetischen Dünnschichtsystemen.....	1
1.2	Gegenstand der Arbeit.....	3
2	Resonante magnetische Röntgenreflektometrie an einem CoFe/Cu/CoFe-Schichtsystem	5
2.1	Theoretische Grundlagen	5
2.1.1	Röntgenreflektometrie.....	5
2.1.1.1	Fresnel-Reflektivität	6
2.1.1.2	Optische Konstanten und Kramers-Kronig-Relation.....	8
2.1.1.3	Reflexion an Schichtsystemen	10
2.1.1.4	Grenzflächenrauigkeiten.....	12
2.1.2	Resonante magnetische Effekte.....	16
2.1.2.1	Zirkularer magnetischer Röntgendichroismus (XMCD)	18
2.1.2.2	Magneto-optische Konstanten in Resonanz.....	21
2.1.2.3	Resonante magnetische Röntgenreflektometrie.....	24
2.1.2.3.1	Streuamplitude bei resonanter Streuung	24
2.1.2.3.2	Einbindung des magnetischen Dichroismus in die Streugeometrie	25
2.1.3	Entwicklung einer Software zur Auswertung der XRMR.....	29
2.1.3.1	Simulation und Anpassung der Reflektivität	32
2.1.3.2	Simulation und Anpassung des Asymmetrieverhältnisses.....	33
2.2	Experimentelles und Messmethodik der XRMR	36
2.2.1	Messprinzip der XRMR	36
2.2.2	Synchrotronstrahlung	40
2.2.2.1	Erzeugung von Synchrotronstrahlung.....	40
2.2.2.2	Ablenkmagnete	42
2.2.2.3	Wiggler und Undulatoren	42
2.2.2.4	Die Beamline UE46-PGM.....	44
2.2.3	Erweiterung einer Messapparatur für den weichen Röntgenbereich	45
2.2.4	Messverfahren.....	47

2.2.4.1	Durchführung der Justage.....	47
2.2.4.2	XAS- und XMCD-Experimente	48
2.2.4.3	Systematische Fehler bei XAS- und XMCD-Messungen.....	50
2.2.4.4	Reflexionsmessungen	51
2.2.4.5	Systematische Fehler bei Reflexionsexperimenten.....	51
2.2.4.6	Winkelauflösung eines Reflexionsexperimentes	52
2.3	Auswertung und Diskussion der Messergebnisse	56
2.3.1	Das Probensystem	56
2.3.1.1	Makroskopische Magnetisierung des Probensystems.....	57
2.3.2	Bestimmung der optischen Konstanten	61
2.3.2.1	Bestimmung der optischen Konstanten von Kobalt.....	61
2.3.2.1.1	Beiträge aus dem Ladungsterm.....	62
2.3.2.1.2	Beiträge aus dem magnetischen Term	64
2.3.2.2	Bestimmung der optischen Konstanten von Kupfer	66
2.3.2.2.1	Beiträge aus dem Ladungsterm.....	66
2.3.2.2.2	Beiträge aus dem magnetischen Term	67
2.3.3	Bestimmung der Schichtdicken und Rauigkeiten.....	68
2.3.4	Bestimmung des Magnetisierungsverlaufes des Schichtsystems	69
2.3.4.1	Messung des Asymmetrieverlaufes	70
2.3.4.2	Modellierung der induzierten Magnetisierung von Kupfer	71
2.3.4.3	Modellierung des Magnetisierungsverlaufs der Kobaltschichten	75
2.3.5	Diskussion der Ergebnisse	83
2.3.5.1	Diskussion der Ergebnisse der Messung an der CuL ₃ -Kante.....	84
2.3.5.2	Diskussion der Ergebnisse der Messungen an der CoL ₃ -Kante.....	85

3 XMCD-Experimente an Platinlegierungen mit digitaler Lock-In-Technik.....87

3.1	Theoretische Grundlagen	87
3.1.1	Grundlagen der Röntgenbeugung.....	87
3.1.1.1	Vorbemerkungen zur geometrischen Beugung von Röntgenstrahlung.....	87
3.1.1.2	Grundgedanken zur dynamischen Streutheorie	88
3.1.2	Phasenschieber in Bragg-Transmissions-Geometrie	89
3.1.2.1	Phasendifferenz beim Bragg-Transmissions-Fall	90
3.1.2.2	Auswahlkriterien für einen Transmissionsphasenschieber	92
3.1.3	Grundprinzip der Lock-In-Technik	93
3.2	Experimentelle Methoden	94
3.2.1	Messprinzip	94
3.2.2	Strahlungsquellen.....	96

3.2.2.1	Die MPI-MF-Beamline.....	96
3.2.3	Aufbau des Phasenschiebers	97
3.2.3.1	Das Goniometer	98
3.2.3.2	Das Piezoelement.....	99
3.2.3.3	Drehachse zur Einstellung der Streuebene.....	99
3.2.3.4	Diamanten.....	100
3.2.4	Messverfahren.....	100
3.2.4.1	Durchführung der Justage.....	101
3.2.4.2	Suche und Einstellung des Braggreflexes.....	101
3.2.4.3	Bestimmung des Polarisationsgrades.....	103
3.2.4.4	XMCD-Experimente.....	105
3.2.5	Digitale Lock-In-Technik.....	106
3.2.5.1	Messprinzip der digitalen Lock-In-Technik	106
3.2.5.2	Die Rechteckfunktion als digitale Lock-In-Funktion zur Ermittlung des XMCD-Signals	108
3.3	Auswertung und Diskussion der Messergebnisse	110
3.3.1	Polarisationsanalyse	110
3.3.2	Bestimmung der optimalen Lock-In-Frequenz.....	114
3.3.3	XMCD-Messungen an Platinlegierungen.....	116
3.3.3.1	Aufbau und Charakterisierung der Proben.....	116
3.3.3.2	Darstellung der Ergebnisse der XMCD-Messungen.....	117
3.3.4	Diskussion der Ergebnisse und Fehlerbetrachtung.....	121

4 Zusammenfassung und Ausblick122

Literaturverzeichnis

Anhang

Danksagung

Lebenslauf

1 Einleitung

Die vielfältigen Erscheinungsformen des Magnetismus sind aus dem modernen Leben nicht mehr wegzudenken. Trotz enormer Fortschritte im Bereich des Magnetismus sind viele Effekte nicht oder nur unzureichend verstanden. Daher besteht weiterhin ein steigendes Interesse, sowohl im Hinblick auf technische Anwendungen als auch von Seiten der Grundlagenforschung, diese Phänomene zu verstehen. Seit es G. Schütz erstmals gelang, den XMCD-Effekt (X-Ray Magnetic Circular Dichroism) experimentell nachzuweisen [SCH87], steht heute eine Methode zur Verfügung, die bis vor Jahren noch nicht absehbar war. So lassen sich mit deren Hilfe die mikroskopischen Eigenschaften sowohl von hartmagnetischen als auch von weichmagnetischen Elementen und Legierungen quantitativ und elementselektiv untersuchen. Eine Weiterentwicklung des XMCD-Effekts stellt die magnetische Röntgenreflektometrie [GEI03] dar, welche es ermöglicht, magnetische Eigenschaften von Schichtsystemen zu untersuchen. Dies ist die bisher einzige Methode, die es erlaubt Magnetisierungsprofile auch vergrabener Schichten mit äußerster Genauigkeit zu gewinnen.

1.1 Technologisches Interesse an magnetischen Dünnschichtsystemen

Seit der gleichzeitigen Entdeckung des GMR-Effekts (Giant Magneto Resistance) durch P. Grünberg [BIN89] und A. Fert [BAI88] im Jahre 1988 an Fe/Cr-Schichten sind Viellagensysteme aus dem Bereich der Magnetoelektronik nicht mehr wegzudenken. Dieser Riesenmagnetowiderstand, der durch das Auftreten einer oszillatorischen Austauschkopplung [PAR90], [GRÜ02] über eine nichtmagnetische Zwischenschicht weniger Monolagen verknüpft ist, kommt seit 1997 in modernen Laufwerken in Form von Festplattenleseköpfen zur Anwendung. Bei diesen sog. Spinvalve-Systemen, bei denen zwei ferromagnetische Schichten durch eine unmagnetische Zwischenschicht getrennt sind, kommt es zu einer signifikanten Änderung des Widerstandes in Abhängigkeit der Magnetisierung der ferromagnetischen Lagen.

Die GMR- bzw. auch die TMR-Systeme (Tunneling Magneto Resistance) [MOO95], bei denen die ferromagnetischen Schichten durch eine isolierende Schicht getrennt sind, stellen die Bausteine der neuartigen magnetischen Elektronik, der sog. Spintronic dar. Die Vorteile gegenüber konventioneller Elektronik liegen insbesondere in der Möglichkeit der Miniaturisierung und in der Anpassungsfähigkeit an gewünschte Anforderungen durch eine Variation der Schichtdicken, Geometrien und Materialien [BYC00], [GRU01], [WOL01]. Verschiedene Anwendungen dieser Basiskomponenten sind logische Bauelemente, Sensoren und nichtflüchtige Speichermedien, sog. MRAMs (Magnetic Random Access Memory).

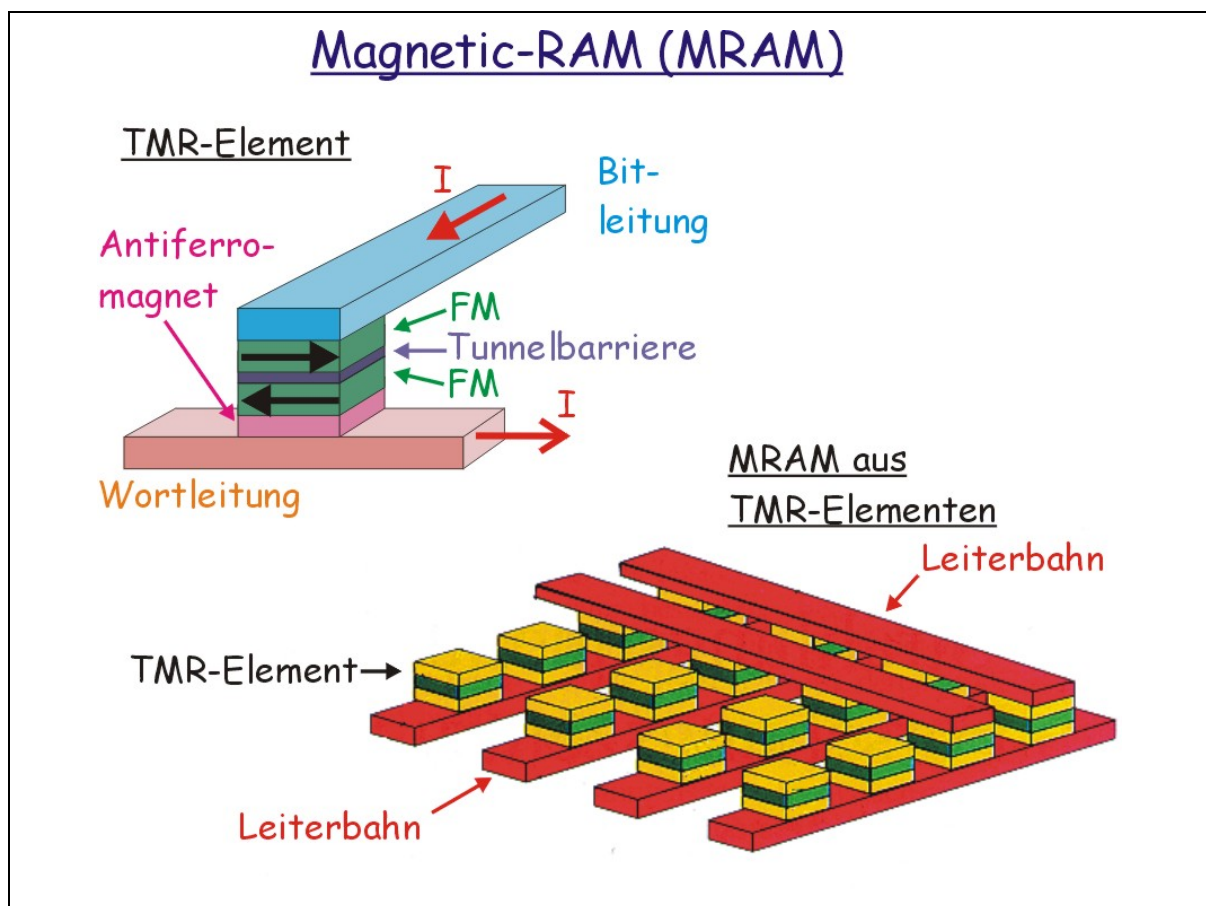


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines TMR-Elements und eines MRAMs. Durch einen Antiferromagneten ist eine ferromagnetische Schicht, der sog. „pinned layer“, in eine Magnetisierungsrichtung fixiert [WMIweb].

Neben diesen magnetischen Schichtsystemen stellen Platinlegierungen ein weiteres interessantes Gebiet im Bereich der magnetischen Datenspeicherung dar. Insbesondere Pt/Fe- und Pt/Co-Legierungen finden aufgrund ihrer großen Sättigungspolarisation als neuartiger

Magnetwerkstoff Anwendung. Hierbei kommt es durch Hybridisierung zu induzierten magnetischen Effekten innerhalb der Platinatome.

1.2 Gegenstand der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wurde basierend auf der Methode der resonanten magnetischen Röntgenreflektometrie ein GMR-Element untersucht und ein magnetisches Dichteprofil von ausgewählten Komponenten des Schichtsystems erstellt. Das System, welches aus einem „CoFe/Cu/CoFe-Trilayer“ besteht, wurde mit der XRMR-Methode untersucht. Dabei handelt es sich um eine Kombination aus dem XMCD-Effekt und der konventionellen Röntgenreflektometrie. Zur Auswertung wurde ein Simulationsprogramm entwickelt, welches es erlaubt, bisherige manuelle Verfahren zu beschleunigen und zu automatisieren. Weiterhin wurde ein bereits bestehendes, im harten Röntgenbereich eingesetztes XMCD-Experiment weiterentwickelt und auf die Geometrien bei der „ANKA-MF-Beamline“ (Beamline des Max-Planck-Instituts für Metallforschung an der Angström-Quelle-Karlsruhe) angepasst. Dabei wurden mit Hilfe der digitalen Lock-In-Technik erste Messungen an verschiedenen Platin-Legierungen durchgeführt.

Die gesamte Arbeit gliedert sich daher in zwei Teile. Der erste Teil befasst sich mit dem im weichen Röntgenbereich durchgeführten XRMR-Experiment. Dazu werden zu Anfang die theoretischen Grundlagen der Röntgenstreuung sowie der resonanten magnetischen Effekte an Absorptionskanten gegeben. Insbesondere soll dabei auf die Einbindung des magnetischen Dichroismus in die Streuamplituden sowie deren Einarbeitung in den Parratt-Formalismus eingegangen werden. Nach der Beschreibung des neu entwickelten Computerprogramms erfolgt die Beschreibung des Messprinzips gefolgt von der Darstellung und Auswertung der Messergebnisse. Hierbei demonstriert das durchgeführte Experiment eindrucksvoll die Einsetzbarkeit der XRMR-Methode. Eine Diskussion der Ergebnisse schließt den ersten Teil der Arbeit ab.

Analog zum ersten Teil erfolgt zu Beginn des zweiten Teiles dieser Arbeit die Einführung der theoretischen Grundlagen gefolgt von der Beschreibung der experimentellen Methoden und des Messverfahrens. Hierbei wird insbesondere auf den Aufbau und die Funktionsweise des zur Erzeugung von zirkular polarisierter Röntgenstrahlung verwendeten Phasenschiebers eingegangen. Anschließend erfolgen die Darstellung der Ergebnisse der Polarisationsanalyse

und deren Simulationen sowie die Ergebnisse der XMCD-Experimente an drei verschiedenen Platin-Legierungen. Eine Diskussion sowie eine Fehlerbetrachtung schließen den zweiten Teil der Arbeit ab. Den Schluss bilden eine Zusammenfassung sowie ein Ausblick auf weiterführende Messungen.

2 Resonante magnetische Röntgenreflektometrie an einem CoFe/Cu/CoFe-Schichtsystem

2.1 Theoretische Grundlagen

Im folgenden Kapitel sollen die physikalischen Aspekte der XRMR Methode erörtert werden. Dazu werden im ersten Teil die Grundlagen der Röntgenreflektometrie eingeführt. Neben der Beschreibung der Reflexion an einer einzelnen Grenzschicht sowie an Mehrschichtsystemen werden verschiedene Modelle zur Beschreibung der Grenzflächenrauigkeit diskutiert. Im zweiten Teil dieses Kapitels wird auf die resonanten magnetischen Streumechanismen eingegangen. Neben der Beschreibung der optischen Konstanten und der Streuamplituden in Resonanz wird hier der XMCD Effekt eingeführt, welcher eine zentrale Rolle in der XRMR-Methode spielt.

2.1.1 Röntgenreflektometrie

Die nichtresonante Röntgenreflektometrie hat sich inzwischen als Standardmethode zur Strukturbestimmung von Schichtsystemen etabliert. Dabei liefert die spekulare Abtastung mit Photonenenergien fern ab der Absorptionskanten Informationen über das chemische Profil von Schichtsystemen. Bei dieser Methode werden keine Anforderungen an eine gut ausgeprägte Kristallstruktur gestellt, da diese ausschließlich auf Änderung des Brechungsindexes sensitiv ist.

Eine Weiterentwicklung dieser Methode stellt die XRMR-Methode (X-Ray Resonant Magnetic Reflektometry) dar. Dies ist eine Kombination aus der nichtresonanten Röntgenreflektometrie verknüpft mit dem XMCD-Effekt (X-Ray Magnetic Circular Dichroism) [SCH87]. Bei dieser Methode verwendet man Photonenenergien welche genau derjenigen der zu untersuchenden Absorptionskante entsprechen. Damit gewinnt man zu den Informationen über Schichtdicken und Grenzflächenrauigkeiten Informationen über

magnetische Effekte an den einzelnen Grenzflächen. Mit Hilfe geeigneter Reflektometer und Strahlungsquellen hoher Brillianz, wie z.B. Synchrotronstrahlung, in Kombination mit einer weiterentwickelten Modellierungsmethode zur Beschreibung der Streumechanismen lassen sich somit magnetische Tiefenprofile von Schichtsystemen erstellen.

2.1.1.1 Fresnel-Reflektivität

Da der Wellenvektorübertrag $q_z = 2k \sin\theta$ entlang der Oberflächennormalen bei kleinen Einfallswinkeln θ klein ist im Vergleich zu den reziproken Gittervektoren, treten im spekularen Reflex, bei dem der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel ist, keine Beugungseffekte auf, so dass die Struktur der Materie vernachlässigbar ist und das zu untersuchende Medium als Kontinuum betrachtet werden kann. Die Beschreibung dieses Phänomens geschieht wie üblich in der Optik durch die Einführung eines komplexen, energieabhängigen Brechungsindex [JAC75]

$$n = 1 - \delta(E) + i\beta(E). \quad (2.1)$$

Die energieabhängigen, für jede Atomsorte charakteristischen optischen Konstanten δ und β beschreiben den dispersiven bzw. den absorptiven Anteil und können aus dem komplexen atomaren Streufaktor $f_i(E)$ berechnet werden [TOL99].

$$n = 1 - \delta(E) + i\beta(E) = 1 - \frac{r_0}{2\pi} \lambda^2 \sum_i n_i f_i(E), \quad (2.2)$$

wobei n_i die Anzahl der Atome pro Einheitszelle, r_0 der klassische Elektronenradius und λ die Wellenlänge der einfallenden elektromagnetischen Wellenlänge ist.

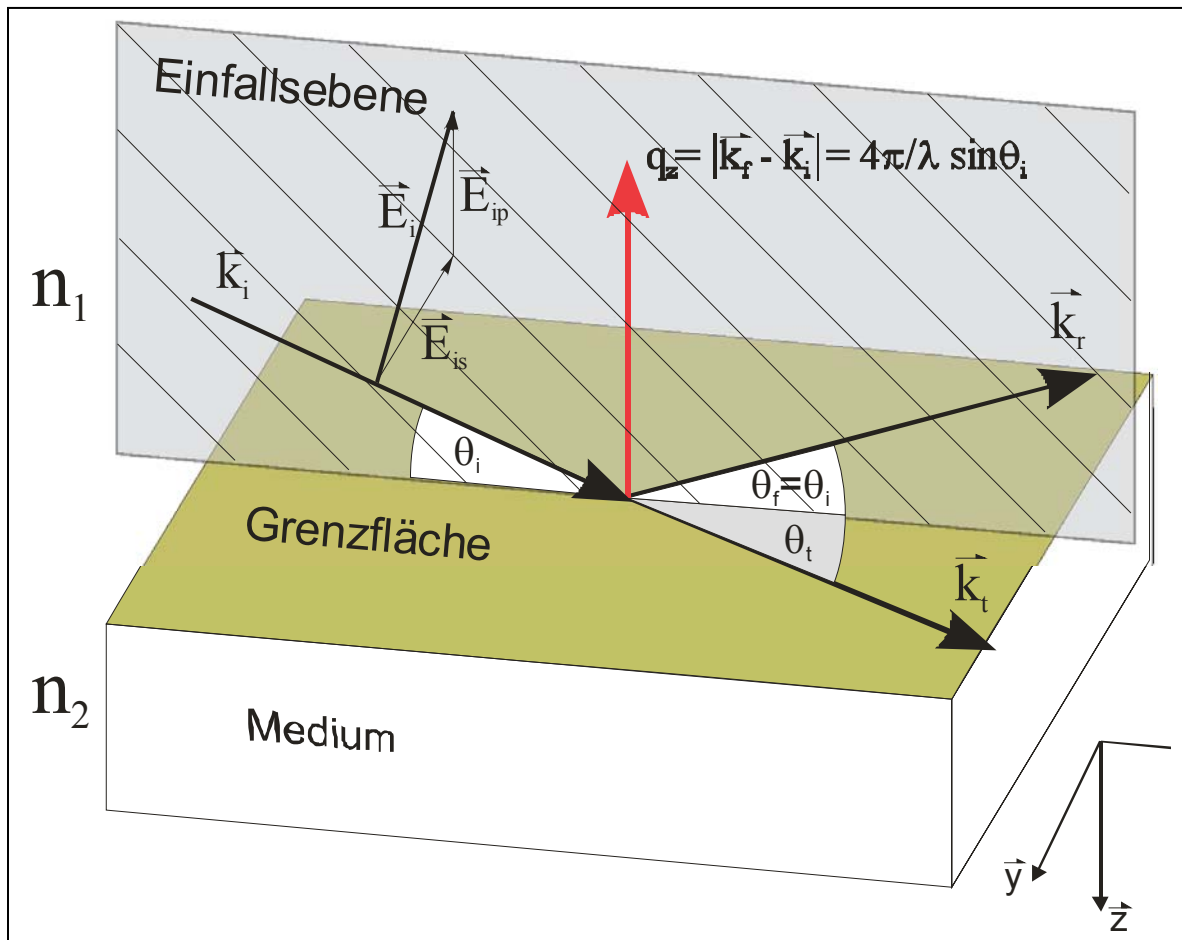


Abbildung 2: Reflexion einer linear polarisierten elektromagnetischen Welle an einer glatten Oberfläche. Der Wellenvektorübertrag parallel zur Oberflächennormalen ist rot eingezeichnet [GEI03].

Wie in Abbildung 2 zu sehen ist, kann eine ebene, unter dem Winkel θ_i auf eine glatte Grenzfläche einfallende Welle mit dem Wellenvektor \vec{k}_i zerlegt werden in einen transmittierten Anteil \vec{k}_t und einen reflektierten Anteil \vec{k}_r . Eine in beliebige Richtung polarisierte Welle setzt sich aus einem senkrecht und parallel zur Einfallsebene polarisierten Anteil zusammen. Den parallelen Anteil zur Streuebene bezeichnet man als π - bzw. p-polarisierte Komponente der Strahlung, der Anteil senkrecht zu dieser wird als σ - bzw. s-polarisierte Komponente bezeichnet.

Stellt man unter Ausnutzung der Stetigkeitsbedingungen der jeweiligen Feldstärkevektoren die Wellengleichungen für beide Seiten, d.h. für einfallende und ausfallende Strahlung, auf, so erhält man die sog. Fresnel'schen Gleichungen [JAC75], [BES73].

$$r_{i,i+1}^{\sigma} = \frac{k_{z,i} - k_{z,i+1}}{k_{z,i} + k_{z,i+1}} \quad t_{i+1}^{\sigma} = \frac{2k_{i+1}}{k_{z,i} - k_{z,i+1}} \quad \text{für } \sigma\text{-Polarisation,} \quad (2.3)$$

$$r_{i,i+1}^{\pi} = \frac{n_{i+1}k_{z,i} - n_i k_{z,i+1}}{n_{i+1}k_{z,i} + n_i k_{z,i+1}} \quad t_{i+1}^{\pi} = \frac{2k_{i+1}}{k_{z,i} - k_{z,i+1}} \quad \text{für } \pi\text{-Polarisation,} \quad (2.4)$$

wobei $k_{z,i} = |k_i|(\sin^2 \theta_i - 2\delta_i + 2i\beta)^{1/2}$ die z-Komponente des Wellenvektors im Medium i ist und

$$R = |r|^2 \quad \text{und} \quad T = |t|^2 \quad (2.5)$$

den Zusammenhang zwischen Reflexion bzw. Transmission und den Fresnel-Koeffizienten r und t beschreiben. R und T sind die aus den Feldstärken r und t gewonnen Intensitäten. Für kleine Einfallswinkel gehen beide Koeffizienten ineinander über.

Zu erwähnen sei noch, dass für Photonenenergien im Bereich der Röntgenstrahlung der Realteil des Brechungsindex kleiner als 1 ist, d.h. die Materie ist optisch dünner als das Vakuum. Dies hat zur Folge, dass unterhalb des sog. kritischen Winkels θ_c Totalreflexion auftritt. Typische Werte für den Winkel der Totalreflexion liegen im Bereich von $\theta_c \sim 0.1^\circ$ bis $\theta_c \sim 1^\circ$ [DOS86].

2.1.1.2 Optische Konstanten und Kramers-Kronig-Relation

Die optischen Konstanten, welche wie bereits erwähnt für jedes Element charakteristisch sind, haben ihre Ursache in der Wechselwirkung der Photonen mit der Materie. Quantenmechanisch wird dies beschrieben über einen Wechselwirkungsoperator, wobei unter Betrachtung des Systems in erster Ordnung Störungstheorie insbesondere der Photoeffekt und die Thomsonstreuung zu nennen sind [ALS01].

Trägt man wie in Abb. 3 den absorptiven Anteil β über der Energie auf, erkennt man einen stetigen Abfall von β mit zunehmender Photonenenergie. Dies rührt daher, dass der Wirkungsquerschnitt für Photonen mit zunehmender Energie kleiner wird. Bei bestimmten Energien wird dieser Abfall unterbrochen und es kommt zu einer sprunghaften Erhöhung der Absorption. Diese sog. Absorptionskanten treten auf, wenn die Photonenenergie ausreicht ein

gebundenes Elektron aus den inneren Schalen oberhalb der Fermienergie anzuheben. Bei gewissen Elementen kommt es an diesen sog. Resonanzen zu zusätzlichen Erhöhungen, welche aus historischen Gründen als „Weiße Linien“ bezeichnet werden. Diese beruhen auf einem großen radialen Überlapp der Wellenfunktionen der Anfangs- und des Endzustände und sind beispielsweise bei den ferromagnetischen Elementen bei Übergängen von der 2P-Schale in die 3D-Endzustände besonders stark ausgeprägt. Quantenmechanisch lässt sich dieser Prozess mittels Störungstheorie zweiter Ordnung beschreiben [ALS01].

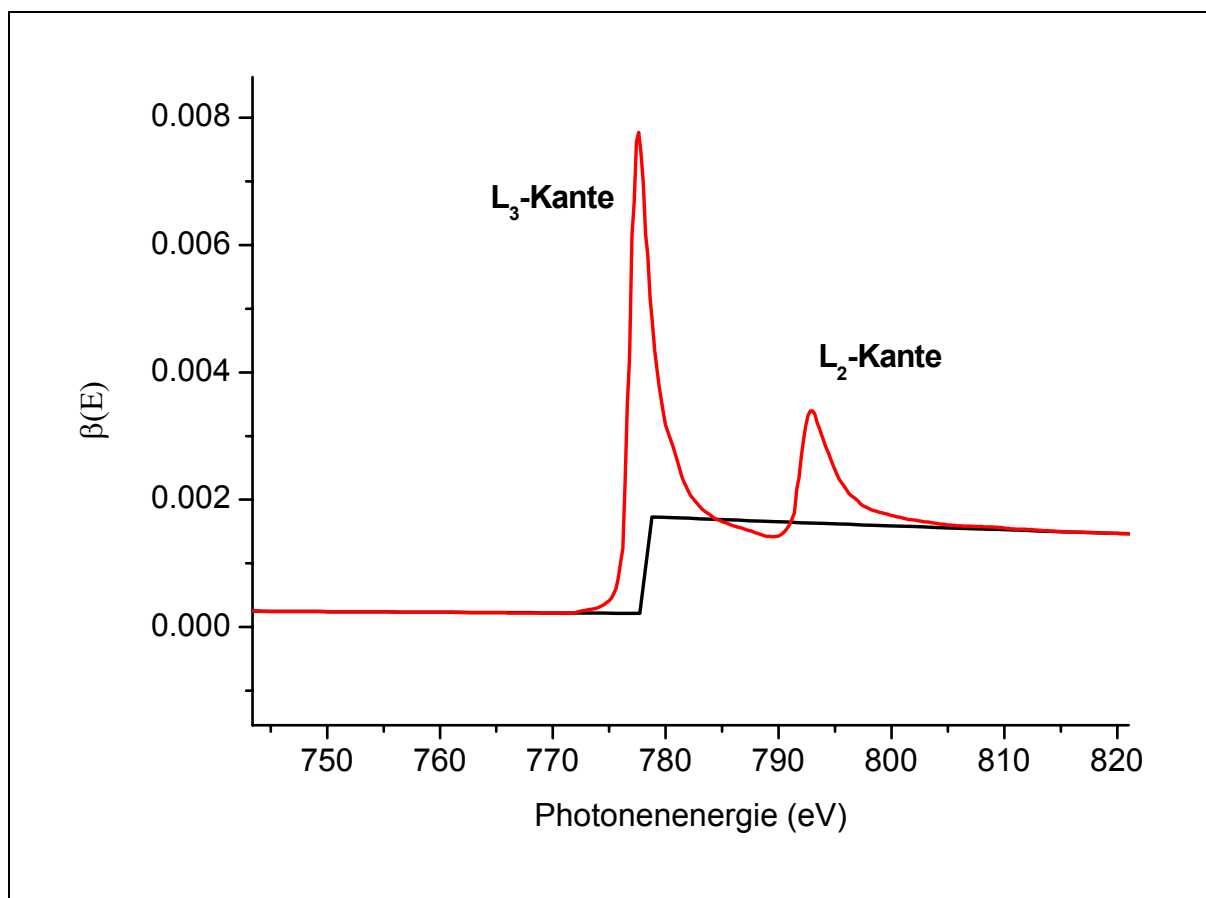


Abbildung 3: Die Energieabhängigkeit des absorptiven Anteils der optischen Konstanten am Beispiel der $\text{Co}_{L_{2,3}}$ -Kante. Dargestellt ist die Absorption aus atomarer Rechnung (schwarz) [HEN93] und der experimentell bestimmte Verlauf (rot), normiert auf die theoretischen Werte [CHE95].

Für die Simulation von Reflektivitäten von Schichtsystemen benötigt man, wie im folgenden Kapitel beschrieben wird, sowohl den absorptiven als auch den dispersiven Anteil der optischen Konstanten. Im Experiment lässt sich quantitativ leicht die Absorption bestimmen. Beide Größen hängen jedoch über einen aus der Mathematik komplexer Funktionen basierenden Antwortformalismus zusammen. Mit dieser sog. Kramers-Kronig-Relation lässt

sich der dispersive Anteil aus dem gemessenen absorptiven Anteil wie folgt berechnen [HOY84], [NEU98], [KRO26]:

$$f'(E_0) = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{E_0 f''(E)}{E_0^2 - E^2} dE \quad (2.6)$$

Die Integrationskonstante des Integrals lässt sich durch Normierung auf theoretische Werte, gewonnen aus atomaren Rechnungen, eliminieren.

2.1.1.3 Reflexion an Schichtsystemen

Bei Reflexionen an Schichtsystemen treten an jeder Schicht bzw. an jeder Grenzfläche Reflexion und Transmission auf. Die Überlagerungen der einzelnen reflektierten Wellen ergeben dabei mitunter komplexe Interferenzmuster in den Reflexionskurven. Dabei sind die Maxima in den Spektren ein Maß für die verschiedenen Schichtdicken bzw. für die Gesamtdicke eines Systems. Trägt man wie üblich die Reflexion über den Impulsübertrag in z-Richtung q_z auf, so sind in den Abständen der Maxima $\Delta q_z = 2\pi/d$ Informationen über diese enthalten. Längere Oszillationen entsprechen dabei den Dicken einzelner Schichten, kurze periodische Oszillationen, sog. „Kiessing-Fringes“ [HOL99], entsprechen der Dicke des gesamten Schichtstapels im reziproken q_z -Raum.

Um solche Reflexionsspektren interpretieren und simulieren zu können, bedient man sich einem auf Parratt [PAR54] zurückgehenden, iterativen Formalismus. Die Herleitung dieses Formalismus erfolgt analog zu derjenigen der Fresnel'schen Formeln, wobei die Grundgedanken in Kürze vorgestellt werden sollen [BES73]. Eine ausführliche Herleitung findet sich für π -polarisierte Strahlung in der Diplomarbeit von M. Harlander [HAR05]. Für σ -polarisierte Strahlung ist sie bei [NRA00] nachzulesen.

Gegeben ist, wie in Abbildung 4 zu sehen, ein Mehrschichtsystem mit N Schichten, wobei Schicht 0 das Vakuum und Schicht N+1 das Substrat ist, welches als unendlich dick angenommen wird, so dass von der Substratunterkante keine Reflexion möglich ist.

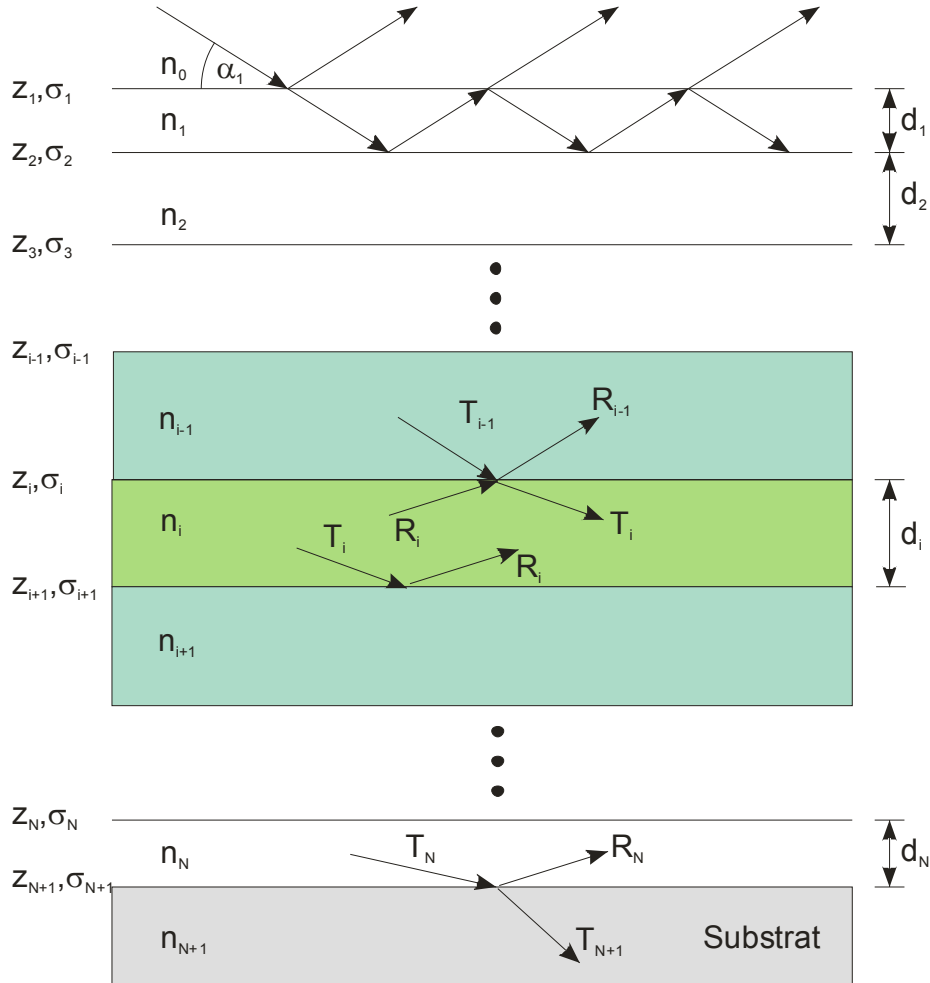


Abbildung 4: Schichtsystem mit N Schichten der Dicken d_i und den Brechungsindizes n_i zur Herleitung der gesamten Reflektivität. Schicht n_0 ist das Vakuum, Schicht n_{N+1} das unendlich ausgedehntes Substrat [GEI03].

Ausgehend von einer unter dem Winkel α einfallenden ebenen Welle Ψ_0 mit dem Vakuumwellenvektor $k_0=2\pi/\lambda$ erhält man mit den Bedingungen der Stetigkeit an den Grenzflächen, der Energieerhaltung sowie unter Berücksichtigung von Mehrfachreflexionen und phasenrichtigem Aufaddieren eine Rekursionsformel für das Verhältnis X_i von reflektierter und transmittierter Amplitude an den Grenzflächen i und $i-1$:

$$X_i = \frac{R_i}{T_i} = e^{2ik_{z,i}(z_{i-1}-z_i)} \cdot \frac{r_{i,i+1} + X_{i+1}e^{-2ik_z(z_{i+1}-z_i)}}{1 + r_{i,i+1} + X_{i+1}e^{-2ik_z(z_{i+1}-z_i)}} \quad (2.7)$$

Dabei ist $k_{z,i}$ die z -Komponente des Wellenvektors in der Schicht i und $r_{i,i+1}$ der Fresnel-Koeffizient der Reflexion der Welle beim Übergang von Schicht i in Schicht $i-1$. Über eine sukzessive Bestimmung aller X_i kann mit diesem Formalismus die vom gesamten

Schichtsystem reflektierte Intensität, d.h. das aus reflektierter Amplitude gewonnene Betragsquadrat, bestimmt werden, wobei die einfallende Intensität auf 1 normiert wird und an der untersten Grenzfläche begonnen wird.

Jede Schicht i ist dabei charakterisiert durch die optischen Konstanten δ_i und β_i , die Schichtdicke d_i sowie die Grenzflächenrauigkeit σ_i , auf die im nächsten Kapitel eingegangen wird. Für die optischen Konstanten stehen für die nichtresonante Röntgenreflektometrie tabellierte Werte zur Verfügung [HEN93]. Diese wurden mittels atomaren Rechnungen bestimmt, welche auf Arbeiten von Cromer, Mann und Libermann [CRO68], [CRO70], [LIB70], [CRO81] zurückgehen. Mit diesen und mit der Kenntnis der Schichtabfolge kann ein gemessenes Reflexionsspektrum durch Variation der Schichtdicken d_i und der Grenzflächenrauigkeiten σ_i charakterisiert und simuliert werden.

Noch zu erwähnen sei, dass magnetische Messungen mit zirkular polarisierter Strahlung durchgeführt werden, welche sich als eine Überlagerung von zwei um 90° phasenverschobenen Lichtwellen darstellen lässt. Dabei kann mit Hilfe des bekannten zirkularen Polarisationsgrades die gesamte Reflektivität berechnet werden, indem die beiden linearen Reflektivitäten anteilmäßig zusammenaddiert werden, worauf im Kapitel 2.1.2.3 noch genauer eingegangen wird.

2.1.1.4 Grenzflächenrauigkeiten

Die Fresnel'schen Gleichungen sowie der im vorigen Kapitel beschriebene Parratt-Formalismus beschreiben die Reflektivität und die Transmission einer glatten Grenzfläche. Reale Schichtsysteme weisen jedoch auf atomarer Ebene immer eine gewisse Rauigkeit auf. Wie in Abbildung 5 zu sehen ist, kann die Rauigkeit in Form von zwei verschiedenen Effekten auftreten.

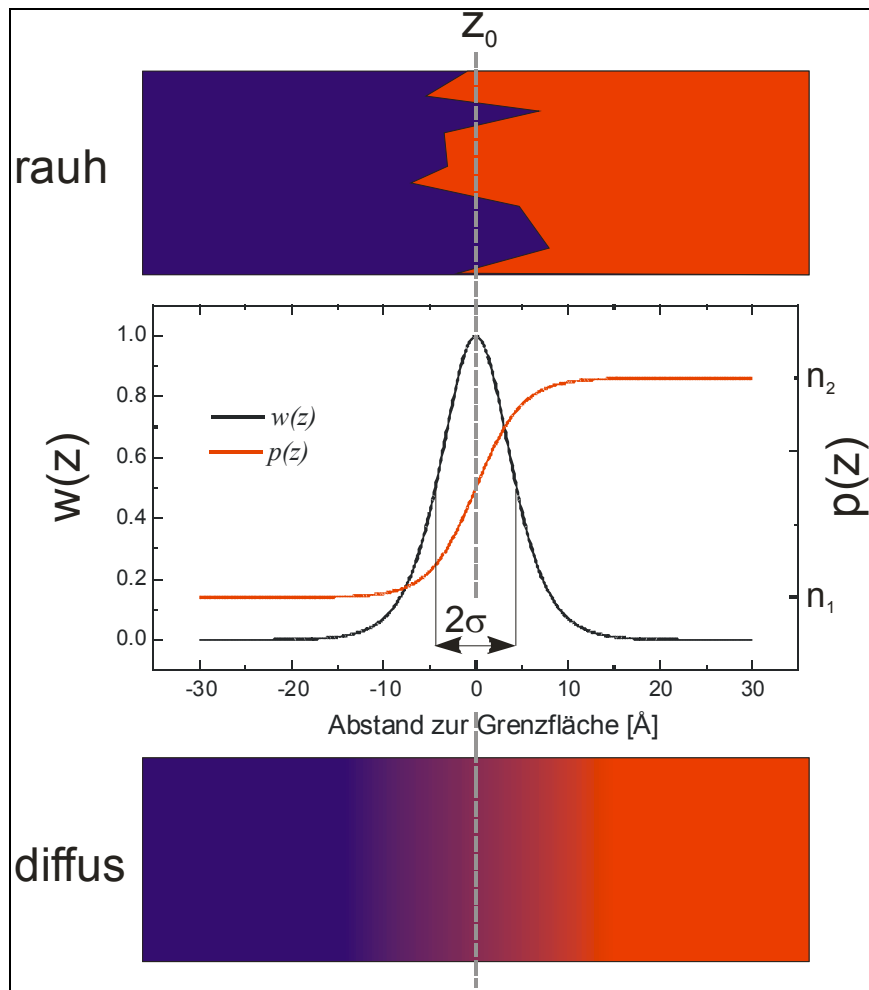


Abbildung 5: Der vertikale Gradient der optischen Konstanten entsteht durch Mittelung über die Welligkeit zweier scharf getrennter Schichten (oben) oder durch Interdiffusion (unten). Beide Fälle werden durch die Rauigkeit σ beschrieben und können durch Messung der spekularen Reflektivität nicht von einander getrennt werden. Die Übergangsfunktion $p(z)$ (Mitte) ist das Integral über der statistischen Verschmierungsfunktion $w(z)$ (aus [GEI03]).

Zum einen kann es an den Grenzflächen zu Welligkeiten kommen, zum anderen zu einer Interdiffusion von Atomen des einen Mediums in das andere. Beide Effekte haben zur Folge, dass die Reflektivität, dessen Abfall bei glatten Übergängen $\sim q_z^{-4}$ ist [HOL99], stärker abfällt. Grund dafür ist das Auftreten von diffuser Streuung, wobei zwischen Welligkeit und Interdiffusion bei der hier verwendeten Messmethode, bei der ausschließlich der spekulare Reflex abgetastet wird, nicht unterschieden werden kann.

Um solche Systeme beschreiben zu können, werden die Reflexionskoeffizienten mit einem exponentiellen Dämpfungsterm modifiziert [NEV80]:

$$r_{i,j}^{rauh} = r_{i,j}^{flach} e^{-k_{z,i} \cdot k_{z,j} \cdot \sigma^2} \quad (2.8)$$

Hierbei sind $k_{z,i}$ und $k_{z,j}$ die Anteile der Wellenvektoren parallel zur Oberflächennormalen in den nebeneinander liegenden Medien i und j . Die Rauigkeit σ beschreibt dabei die mittlere quadratische Abweichung über die Verteilungsfunktion, welche den Übergang von Medium i nach Medium j beschreibt.

In der Literatur werden verschiedene Modelle diskutiert, um einen solchen Übergang an einer rauen Grenzfläche zu beschreiben. Bei Sinha et al. [SIN88], [LEE03] geschieht dies durch die Einführung eines fraktalen Oberflächenmodells, dessen statistischer Beschreibung eine Höhendifferenzfunktion zu Grunde liegt und zusätzlich Wellenvektorüberträge parallel zur Oberfläche mitberücksichtigt werden. Ein weiteres Modell ist das von Stearns [STE89]. Dabei werden die Fresnel'schen Koeffizienten mit den fouriertransformierten Koeffizienten der Ableitungsfunktion des Dichteprofiles modifiziert, wobei das Dichteprofil durch die Funktion $p(z)$ gegeben ist (vgl. Abbildung 5).

Das in der Röntgenreflektometrie am häufigsten verwendete Modell geht auf Nevot und Croce [NEV80], [CRO78] zurück. Hierbei wird von einer gaußverteilten Mischung der optischen Konstanten an der Grenzfläche ausgegangen, dessen integrale Übergangsfunktion derjenigen einer Errorfunktion entspricht. Eine Herleitung dieses Modells findet sich in der Diplomarbeit von M. Harlander [HAR05].

Anstelle der gaußverteilten Durchmischung der Brechungsindizes von Medium i und Medium j wird häufig auch eine $\cosh^2(z)$ -Funktion verwendet, die für kleine Rauigkeiten in eine Gaußfunktion übergeht [HAM91]. Die Dichtefunktion entspricht dann einer Tangenshyperbolicus-Funktion, welche für zwei aufeinander folgende Schichten n_i und n_{i+1} wie folgt aussieht:

$$n(z) = \frac{n_i + n_{i+1}}{2} + \frac{n_i - n_{i+1}}{2} \tanh\left(\frac{z - z_i}{\sigma_i} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\right) \quad (2.9)$$

z_i ist hierbei die nominelle Lage der Grenzfläche, n_i und n_{i+1} die Brechungsindizes von zwei benachbarten Medien und σ_i die Rauigkeit an der Stelle z_i [BAH93]. Zur Auswertung der

Reflexionsspektren im Rahmen dieser Arbeit wird das Modell von Nevot und Croce verwendet.

Weitere Ansätze werden von Salditt et al. beschrieben und diskutiert [SAL03], wobei auf diese nicht weiter eingegangen werden soll. Folgende Abbildung (Abbildung 6) soll nochmals anhand eines frei erfundenen Modellsystems den stärkeren Abfall der Reflektivität bei größeren Rauigkeiten verdeutlichen.

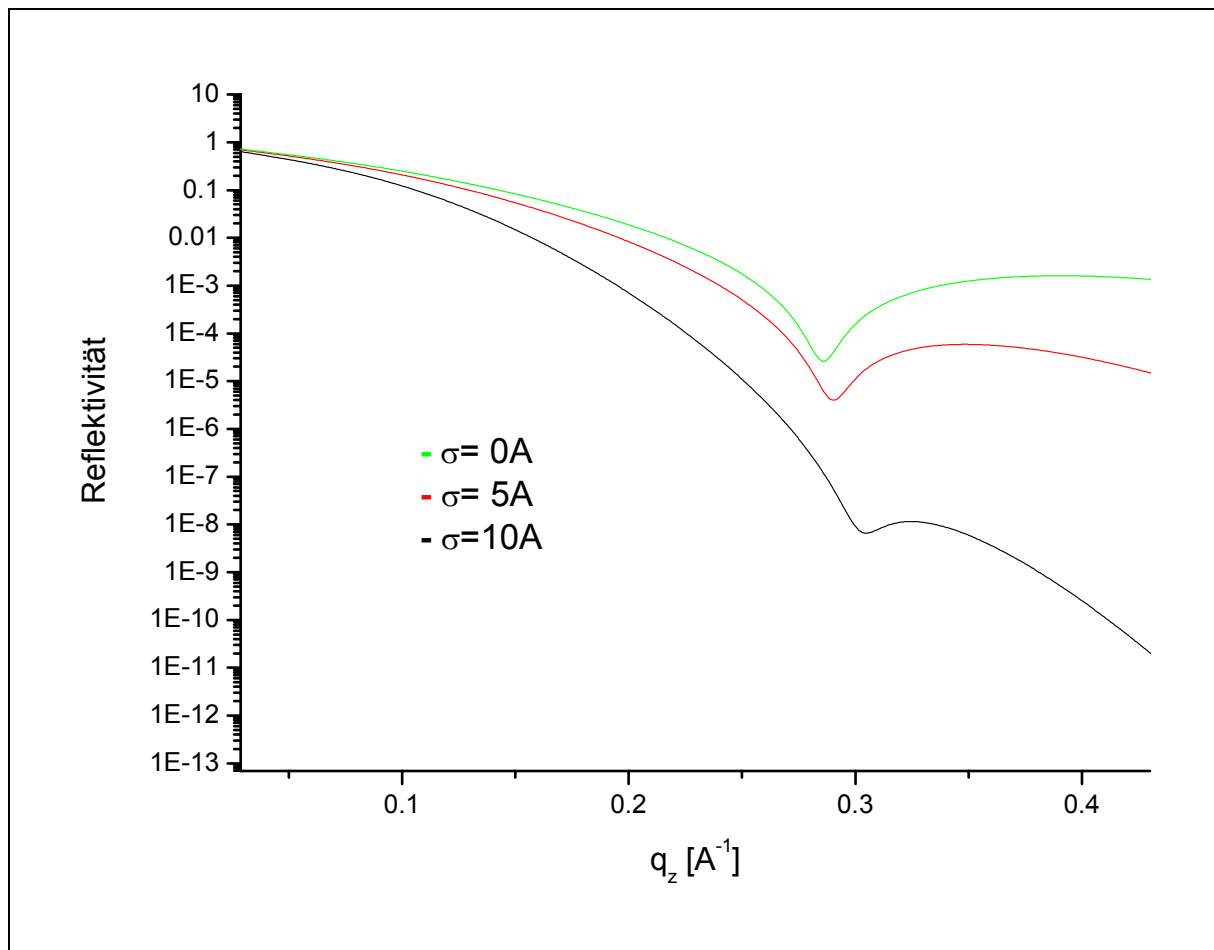


Abbildung 6: Simulation der Reflektivitäten an einer beliebigen 20\AA dicken Schicht mit Variation der obersten Grenzflächenrauigkeit bei einer Energie von $E = 8\text{keV}$ in Abhängigkeit vom Streuvektor q_z .

2.1.2 Resonante magnetische Effekte

Im vorherigen Kapitel wurden die Grundlagen der Röntgenreflektometrie behandelt. In diesem Kapitel werden nun resonante magnetische Effekte vorgestellt. Resonante Effekte im Röntgenbereich treten dann auf, wenn die Energie des einfallenden Photons derjenigen der Bindungsenergie von Elektronen im Atomrumpf entspricht. Dabei können zwei Effekte auftreten. Zum einen kann es zu einer resonanten Absorption kommen, wobei ein Elektron aus einer inneren Schale in einen freien Zustand oberhalb der Fermienergie gehoben wird, zum anderen zur resonanten Röntgenstreuung. Bei dem kohärenten Prozess der Röntgenstreuung kommt es zu einer virtuellen Anregung eines Elektrons, wobei der so entstandene Elektron-Loch-Zustand unter Emission eines Photons rekombiniert [BLU85]. Die resonante Absorption sowie die resonante Streuung sind in der folgenden Abbildung schematisch dargestellt.

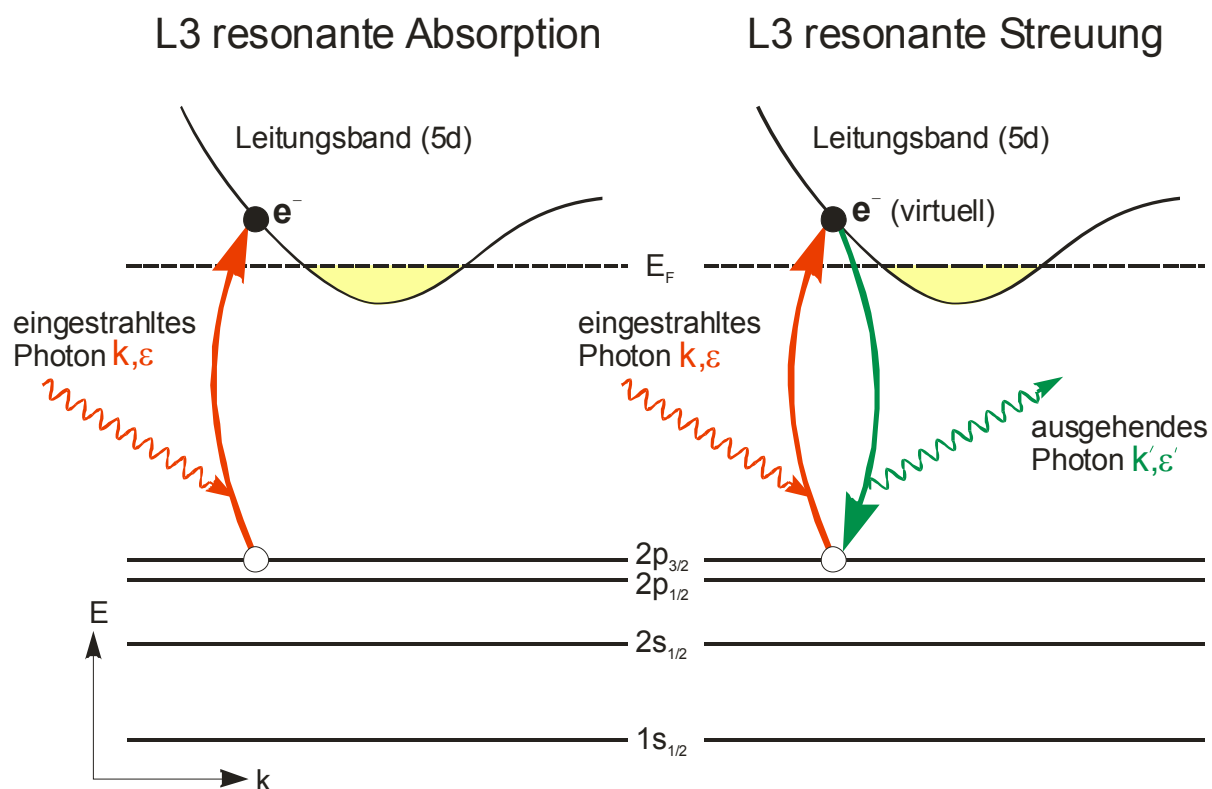


Abbildung 7: Schematische Darstellung der resonanten Streuung und Absorption eines seltenen Erd-Elements an der L_3 -Kante. Ein eingestrahktes Photon mit Wellenvektor k und Polarisation ε wird im Falle der Absorption vernichtet. Im Falle der resonanten Streuung wird ein virtuelles Elektron-Loch-Paar erzeugt, das unter Aussendung eines Photons mit dem Wellenvektor k' und der Polarisation ε' zerfällt [GEI03]. Der Betrag des Wellenvektors und der Polarisation bleiben bei der Streuung erhalten.

Beide Effekte geben aufgrund des stark lokalisierten Charakters der angeregten Elektronen Informationen über die Bandstruktur oberhalb der Fermienergie. Somit lassen sich mit ihnen elementselektive Messungen an Verbindungen und Legierungen durchführen. Tragen die Elektronen zudem ein magnetisches Moment, so können mit Hilfe zirkular polarisierter Röntgenstrahlung Informationen über magnetische Eigenschaften gewonnen werden.

Im Folgenden wird nun der zirkulare magnetische Röntgendiffraktions (XMCD) vorgestellt gefolgt von der Methode der resonanten magnetischen Röntgenreflektometrie (XRMR), welche wie bereits erwähnt eine Kombination aus nichtresonanter Reflektometrie sowie dem XMCD-Effekt darstellt. Dabei wird zudem auf die Einbindung der magnetischen Beiträge in den Brechungsindex sowie auf die magneto-optischen Konstanten im resonanten Falle eingegangen.

2.1.2.1 Zirkularer magnetischer Röntgendiffraktion (XMCD)

Durch die Entdeckung des XMCD-Effekts in den 80er Jahren durch Gisela Schütz wurde eine neue Methode zur elementselektiven Untersuchung magnetischer Eigenschaften von Festkörpern zur Verfügung gestellt [SCH87]. Mit Hilfe sog. Summenregeln lassen sich damit sogar Spin- und Bahnmoment separieren und quantitativ bestimmen [GOE01], [GOE02], [CHE95], [CAR93], [THO92], worauf jedoch nicht näher eingegangen werden soll.

Wird eine Probe der Dicke d mit Röntgenlicht durchstrahlt treten Photonen und Elektronen in Wechselwirkung, wobei Photonen absorbiert werden können. Die Beschreibung der transmittierten Intensität geschieht durch das Lambert-Beer'sche Gesetz

$$T = \frac{I_1}{I_0} = e^{-\mu(E)d} . \quad (2.10)$$

Hierbei ist $\mu(E)$ der energieabhängige Absorptionskoeffizient, I_0 die eingestrahlte und I_1 die transmittierte Intensität der Röntgenstrahlung. Der Wirkungsquerschnitt ist dabei abhängig von der Energie des Lichts E und von der Ordnungszahl des Absorberatoms Z , wobei der primäre Prozess der Absorption der Photoeffekt ist. Quantenmechanisch lässt sich dies in einatomarer Näherung nach Fermi's Goldener Regel mit Hilfe der Störungstheorie in erster Ordnung berechnen [SCW92]:

$$\mu(E) \propto \sum \left| \langle f | W(E) | i \rangle \right|^2 \cdot \delta \cdot (E + E_i - E_f) \cdot (1 - n(E_f)) \quad (2.11)$$

$\left| \langle f | W(E) | i \rangle \right|$ ist hier der Betrag des Übergangsmatrixelements, welches sich für einen Dipolübergang mit $W(E) = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}$ beschreiben lässt, wobei \mathbf{p} der kanonische Impuls des Elektrons im Anfangszustand i und $\boldsymbol{\varepsilon}$ der Polarisationsvektor der einfallenden Strahlung sind. E ist die Photonenergie und $n(E_f)$ die Besetzungswahrscheinlichkeit der Endzustände f .

Liegt die Energie der eingestrahnten zirkular polarisierten Photonen in der Nähe einer Absorptionskante des zu untersuchenden Probenmaterials und weist die Probe noch zusätzlich ein magnetisches Moment auf, so beobachtet man eine Änderung der Absorption, welche proportional zur Komponente des magnetischen Momentes zur Strahlrichtung ist:

$$\Delta\mu \propto \mathbf{P} \cdot \mathbf{M} = P_C \cdot M_p \cdot \cos(\Phi) \quad (2.12)$$

\mathbf{P} ist hierbei der Polarisationsfaktor des einfallenden Photons, dessen Betrag dem zirkularen Polarisationsgrad entspricht und \mathbf{M} der Magnetisierungsvektor.

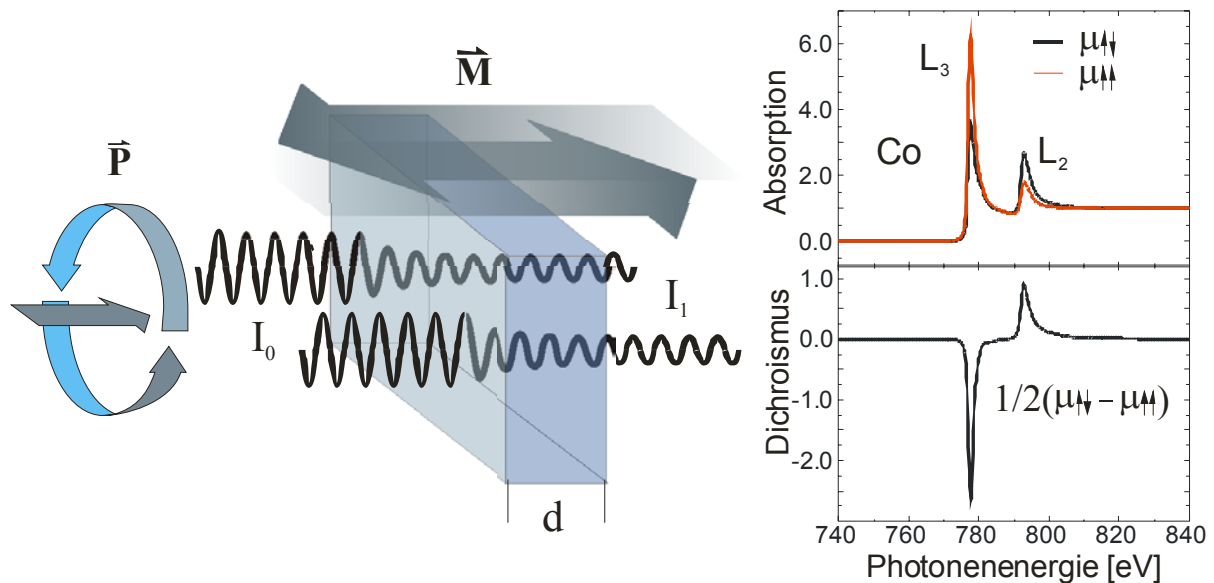


Abbildung 8: Links ist die schematische Darstellung eines XMCD-Experiments zu sehen. Rechts ist das normierte Absorptionssignal für parallele und antiparallele Stellung der Helizität zum Magnetfeld an der $\text{CoL}_{2,3}$ -Kante dargestellt sowie das dichroische Differenzsignal (rechts unten) [GOE06], [GEI03].

Die halbe Differenz der Absorption von paralleler und antiparalleler Geometrie des Magnetfeldes und der Photonenhelizität

$$\mu_c(E) = (\mu_{\uparrow\downarrow}(E) - \mu_{\uparrow\uparrow}(E)) / 2 \quad (2.13)$$

wird als XMCD- oder dichroisches Signal bezeichnet. Größenordnungen für dieses dichroische Signal liegen beispielsweise für die Übergangsmetalle Fe und Co bei der $2p \rightarrow 3d$ Absorption im Bereich von 40-50% bezogen auf den Kantenhub [CHE95]. Dieses Signal ist über das optische Theorem [MES61] mit dem Imaginärteil des Brechungsindex verknüpft und es gilt für dessen magnetischen Anteil auf den noch detaillierter in Kapitel 2.1.2.3 eingegangen wird:

$$\mu_c(E) = (\mu_{\downarrow\uparrow}(E) - \mu_{\uparrow\uparrow}(E)) / 2 = 2r_0\lambda \cdot n \cdot m''(E), \quad (2.14)$$

wobei n die Anzahl der Atome pro Einheitszelle, λ die Wellenlänge des eingestrahlten Lichts und r_0 der klassische Elektronenradius ist.

Anschaulich erklärt werden kann der unterschiedliche Absorptionsprozess durch ein vereinfachtes Zweistufenmodell [SCH90], [SCH94]. Dieses beschreibt die spinabhängige Absorption, wobei die Endzustände als Kontinuum betrachtet werden. In Abbildung 9 ist dies schematisch für ein magnetisches Übergangsmetall dargestellt.

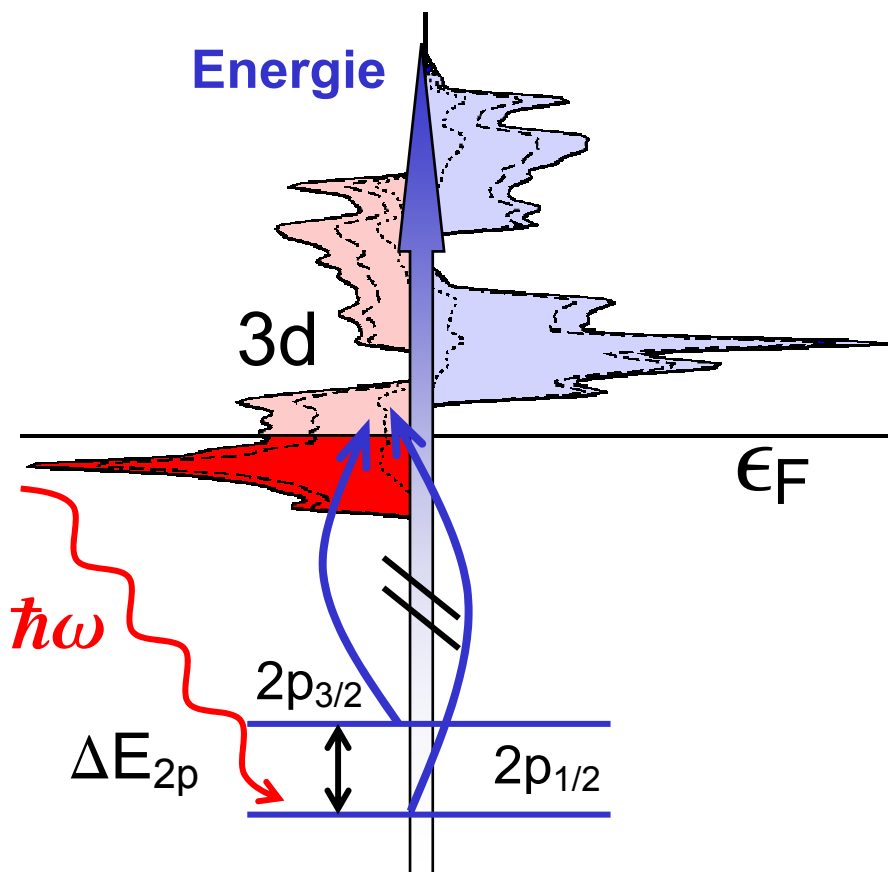


Abbildung 9: Schematische Darstellung der spinabhängigen Absorption für ein magnetisches Übergangsmetall [GOE06].

Hierbei wird in einem ersten Schritt ein zirkular polarisiertes Photon absorbiert, wobei das vom Absorberatom aus der 2p-Schale emittierte Photoelektron eine Spinpolarisation aufweist. Diese ist sofern die Spin-Bahn-Kopplungsenergie vergleichsweise groß ist gegenüber der Wechselwirkung mit dem Kristallfeld nur wenig von der Art des Absorberatoms bzw. von der Gitterstruktur des Kristalls abhängig. In einem zweiten Schritt wird nun das spinpolarisierte

Elektron in freie 3d-Zustände oberhalb der Fermikante angeregt. Aufgrund der 3d Austauschwechselwirkung sind diese Zustände bezüglich des Spins energetisch aufgespalten und es liegen nahe der Fermikante unterschiedliche Zustandsdichten für das Spin-up und Spin-down Band vor. Daraus und aufgrund der Aufspaltung der 2p-Zustände durch die Spin-Bahn-Kopplung resultiert der unterschiedliche Absorptionskoeffizient für parallele bzw. antiparallele Orientierung der Magnetisierung und des Polarisationsvektors. Insgesamt stellt dies eine sensitive Methode zur Untersuchung der Spincharakter der verschiedenen Übergangsmetalle und deren Legierungen dar, wobei das hier beschriebene Zweistufenmodell nur eine vereinfachte Veranschaulichung darstellt.

Quantenmechanisch kann der Prozess der spinabhängigen Absorption durch eine Erweiterung von Fermi's Goldener Regel beschrieben werden, wobei sich der Absorptionskoeffizient in einen spinunabhängigen und in einen spinabhängigen Teil separieren lässt [SCW92]:

$$\mu(E) \propto \int_{E_f}^{\infty} \left| \langle f | W_{\pm}(E_f) | i \rangle \right|^2 \cdot \delta \cdot (E + E_i - E_f) \cdot \rho_{\pm}(E_f) dE_f \quad (2.15)$$

$\rho_{\pm}(E_f)$ ist hier die Wahrscheinlichkeitsdichte der unbesetzten Zustände, wobei aufgrund der Verbreiterung der Endzustände im Festkörper, die in atomarer Näherung verwendete Summe zum Integral wird.

2.1.2.2 Magneto-optische Konstanten in Resonanz

Neben den bereits erwähnten optischen Konstanten aus dem Ladungsterm kommen aufgrund des XMCD Effektes bei magnetischen Atomen im Bereich der Resonanzen noch magnetische Beiträge hinzu. Um Reflexionsspektren korrekt simulieren zu können ist es notwendig den Gesamtbetrag für die optischen Konstanten von jeder Schicht zu kennen. Die Beiträge des Ladungsterms und die des magnetischen Terms setzen sich hierbei additiv zusammen, worauf im folgenden Kapitel eingegangen wird.

Insgesamt erhält man durch Messung der resonanten magnetischen und nichtmagnetischen Absorption die magnetischen sowie die nichtmagnetischen Anteile des Absorptionskoeffizienten, welche über das optische Theorem mit den energieabhängigen Imaginärteilen der Streuamplitude zusammenhängen:

$$f''(E, \theta = 0) = \frac{1}{2r_0 \lambda \cdot n} (\mu_{\downarrow\uparrow}(E) + \mu_{\uparrow\uparrow}(E)) / 2 \quad (2.16)$$

$$m''(E, \theta = 0) = \frac{1}{2r_0 \lambda \cdot n} (\mu_{\downarrow\uparrow}(E) - \mu_{\uparrow\uparrow}(E)) / 2 \quad (2.17)$$

Auch die absorptiven Anteile des magnetischen Terms sind dabei nicht unabhängig von den dispersiven Anteilen bzw. vom Realteil der Streuamplitude, sondern sind über einen linearen Antwortformalismus, die bereits erwähnte Kramers-Kronig-Relation, miteinander verknüpft. Somit lassen sich, sofern in den Imaginärteilen keine Singularitäten auftreten und für $E \rightarrow \infty$ f' bzw. m' gegen Null strebt, die Realteile der gesamten Streuamplitude berechnen [HOY84], [NEU98] zu:

$$f'(E_0) = \frac{2}{\pi} \oint \frac{E_0 f''(E)}{E_0^2 - E^2} dE \quad (2.18)$$

$$m'(E_0) = \frac{2E_0}{\pi} \oint \frac{m''(E)}{E_0^2 - E^2} dE \quad (2.19)$$

wobei der nicht dargestellte Hauptwert des Integrals, welcher durch Anpassung der gemessenen Werte an theoretische über eine freie Elektronennäherung gewonnene Werte normiert wird [CRO68]. Die Umrechnung in die optischen Konstanten für die magnetischen Anteile erfolgt analog zu denen der Anteile der Ladungsstreuung, wobei diese mit $\Delta\delta$ und $\Delta\beta$ bezeichnet werden.

In Abbildung 10 sind die nichtmagnetischen sowie die magnetischen Anteile der optischen Konstanten gezeigt.

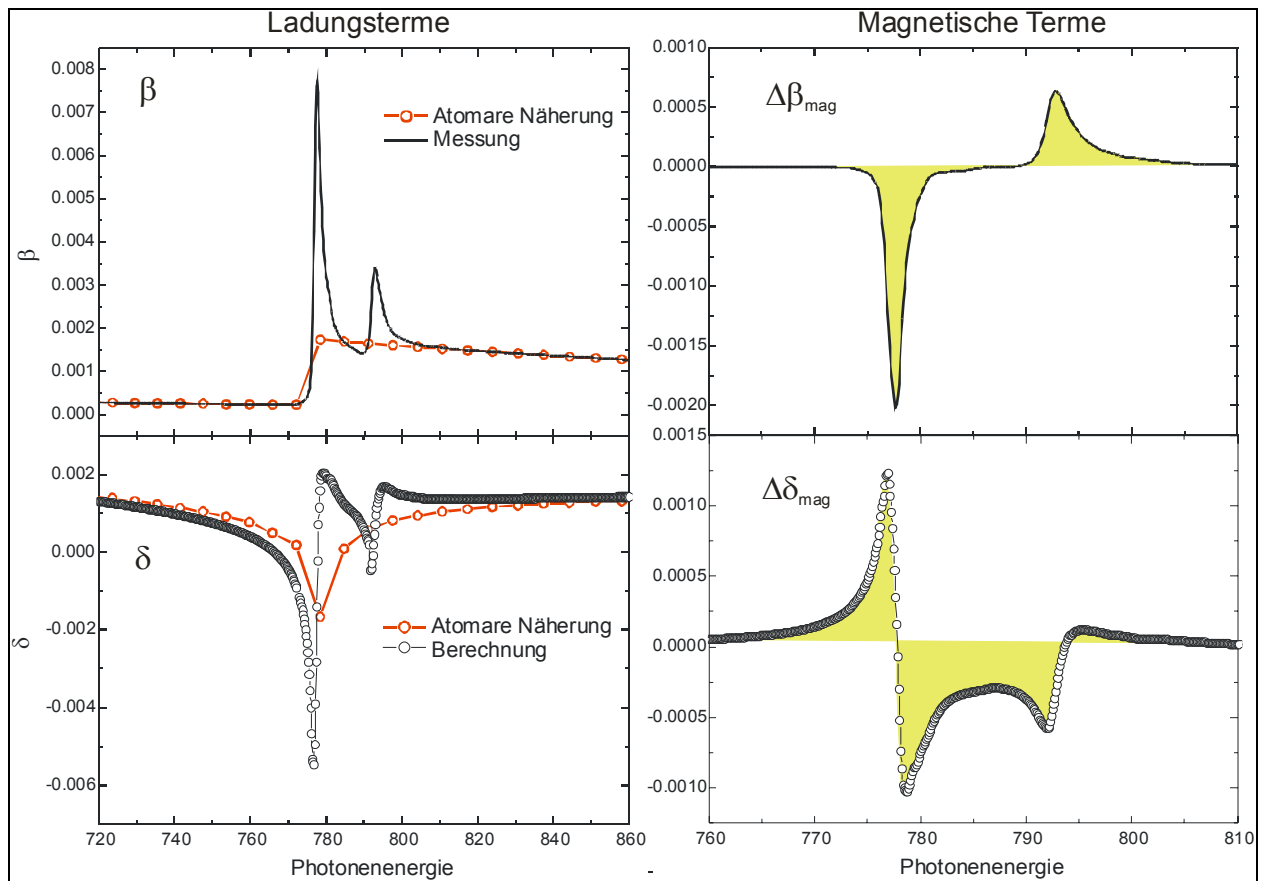


Abbildung 10: Optische Konstanten von Kobalt in Abhängigkeit von der Photonenergie. Links sind die Beiträge des Ladungsterms normiert auf Werte aus atomarer Rechnung dargestellt [HEN93], rechts die absorptiven und dispersiven Beiträge der magnetischen Terme.

Auffällig ist die durch die Resonanz bedingte wie bereits erwähnte starke Abweichung der tatsächlichen experimentell bestimmten Werte von denen aus der Eielektronennäherung im Bereich der $2p \rightarrow 3d$ Übergänge. Dies hat zur Folge, dass diese sorgfältig über ein Absorptionsexperiment bestimmt werden müssen.

2.1.2.3 Resonante magnetische Röntgenreflektometrie

2.1.2.3.1 Streuamplitude bei resonanter Streuung

Wie bereits in Kapitel 2.1.2 erwähnt, tritt resonante Streuung oder auch anormale Dispersion auf, wenn die Energie des einfallenden Photons im Bereich der Energiedifferenz der Anfangs- und Endzustände von Elektronenübergängen aus gebundenen Zuständen in unbesetzte Zustände oberhalb der Fermikante ist. Die Streuintensität kann dabei im Vergleich zur nichtresonanten Streuung um mehrere Größenordnungen verstärkt sein [MCW90].

Eine quantenmechanische Herleitung der Streuamplituden für den nichtresonanten als auch für den resonanten Fall sind bei Hannon und Trammel [HAN88] nachzulesen. Ausgehend von der Wechselwirkung eines Elektronensystems mit dem elektromagnetischen Feld, erhält man nach einigen Schritten durch Störungsrechnung für einen Dipolübergang den das System beschriebenen atomaren Streufaktor:

$$f_{res} = (\boldsymbol{\varepsilon}'^\dagger \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) [F_{11} + F_{1-1}] - i(\boldsymbol{\varepsilon}'^\dagger \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{x} [F_{11} + F_{1-1}] + (\boldsymbol{\varepsilon}'^\dagger \cdot \mathbf{x})(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{x}) [-F_{11} + 2F_{10} - F_{1-1}] \quad (2.20)$$

Die Faktoren F_{lm} in der Notation von Hannon sind proportional zum Übergangsmatrixelement und stellen somit die Wahrscheinlichkeit des Dipolübergangs dar. $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\boldsymbol{\varepsilon}'$ sind die Polarisationsfaktoren der einfallenden bzw. ausfallenden Lichtwelle und \mathbf{x} ist der Einheitsvektor einer beliebigen magnetischen Quantisierungsachse, welche in diesem Falle durch die Ausrichtung des Magnetfeldes definiert ist. Dieser ist eins im Falle vollständiger Sättigung der magnetischen Momente.

Der atomare Streufaktor setzt sich aus drei Teilen zusammen. Während der erste Term die Ladungsstreuung beschreibt und unabhängig von der Magnetisierung ist, zeigen der zweite und dritte Term eine lineare bzw. quadratische Abhängigkeit von \mathbf{x} . Um den nach Hannon beschriebenen atomaren Streufaktor korrekt interpretieren zu können, werden nach Detlefs zusätzlich die folgenden zwei Annahmen gemacht [DET97]:

- Die Quantenzahlen des Bahnmomentes l und m_l im magnetisch polarisierten Leitungsband werden als „gute“ Quantenzahlen angenommen, so dass sich Spin- und Bahnmoment als Summe aller besetzten Zustände ergeben.

- Die Radialmatrixelemente der Wellenfunktion sind in Einelektronennäherung für alle Übergänge identisch.

Somit ist der zweite Term, welcher linear in der Magnetisierung \mathbf{x} ist, proportional zur Differenz der Übergangswahrscheinlichkeiten der Übergänge $\Delta m_l = \pm 1$. Die Ursache dafür ist die Aufspaltung der Endzustände [DET97]. Dieser ist bis auf einen Vorfaktor identisch mit dem Wirkungsquerschnitt für den bereits beschriebenen magnetischen Röntgenzirkulardichroismus XMCD, welcher auf der Differenz des Imaginärteils der Streuamplitude ($F_{11} - F_{1-1}$) für rechts und links zirkular polarisierter Röntgenstrahlung beruht. Der dritte Term, quadratisch in z , ist verantwortlich für den linearen magnetischen Dichroismus XMLD [VAN86]. Da der XMLD-Effekt jedoch typischerweise um ein vielfaches kleiner ist als der zirkulare Dichroismus, wird dieser im Folgenden vernachlässigt. Unter Verwendung der in der Literatur gebräuchlichen energieabhängigen Konstanten $f'(E)$ und $f''(E)$ sowie unter Einbeziehung des Thomson-Streuquerschnittes f_0 , welcher die Anregung der schwächer gebundenen Elektronen in freie Elektronenzustände beschreibt, erhält man die in Dipolnäherung gebräuchliche Form des resonanten atomaren Streufaktors:

$$f_{res,E1} = -r_0 \left[(\boldsymbol{\varepsilon}'^\dagger \cdot \boldsymbol{\varepsilon})(f_0 + f' - if'') + i(\boldsymbol{\varepsilon}'^\dagger \times \boldsymbol{\varepsilon})(m' - im'') \right], \quad (2.21)$$

wobei die magnetischen Beiträge analog zu den Beiträgen der Ladungsstreuung komplex auftreten, also Real- und Imaginärteil benutzen. m'' beschreibt die magnetische Absorption, m' die magnetische Dispersion. Auch hier sind analog zur oben gezeigten Diskussion in Kapitel 2.1.2.1 beide Größen über das optische Theorem mit den magnetisch relevanten Beiträgen zum komplexen Brechungsindex n verknüpft.

2.1.2.3.2 Einbindung des magnetischen Dichroismus in die Streugeometrie

Um den atomaren Streufaktor über den komplexen Brechungsindex in den ursprünglich für linear polarisierten Lichts definierten Parratt-Formalismus einzubinden, müssen die Polarisationsvektoren von einfallender und ausfallender Strahlung durch geeignete Basisvektoren ausgedrückt werden. Eine Zerlegung in parallel und senkrecht bzw. in π - und σ -Komponenten hat sich hierbei als zweckmäßig erwiesen (vgl. Abbildung 11). Mit der so

gewählten Geometrie lassen sich beliebige linear polarisierte Lichtwellen als Linearkombination aus zwei orthogonalen Polarisationsvektoren ausdrücken. Eine solche Geometrie wird ebenfalls zur Herleitung des Parratt-Formalismus genutzt. Die in dieser Arbeit durchgeführten XRMR-Messungen werden, wie in Abbildung 11 nochmals schematisch dargestellt, in longitudinaler Messgeometrie vorgenommen.

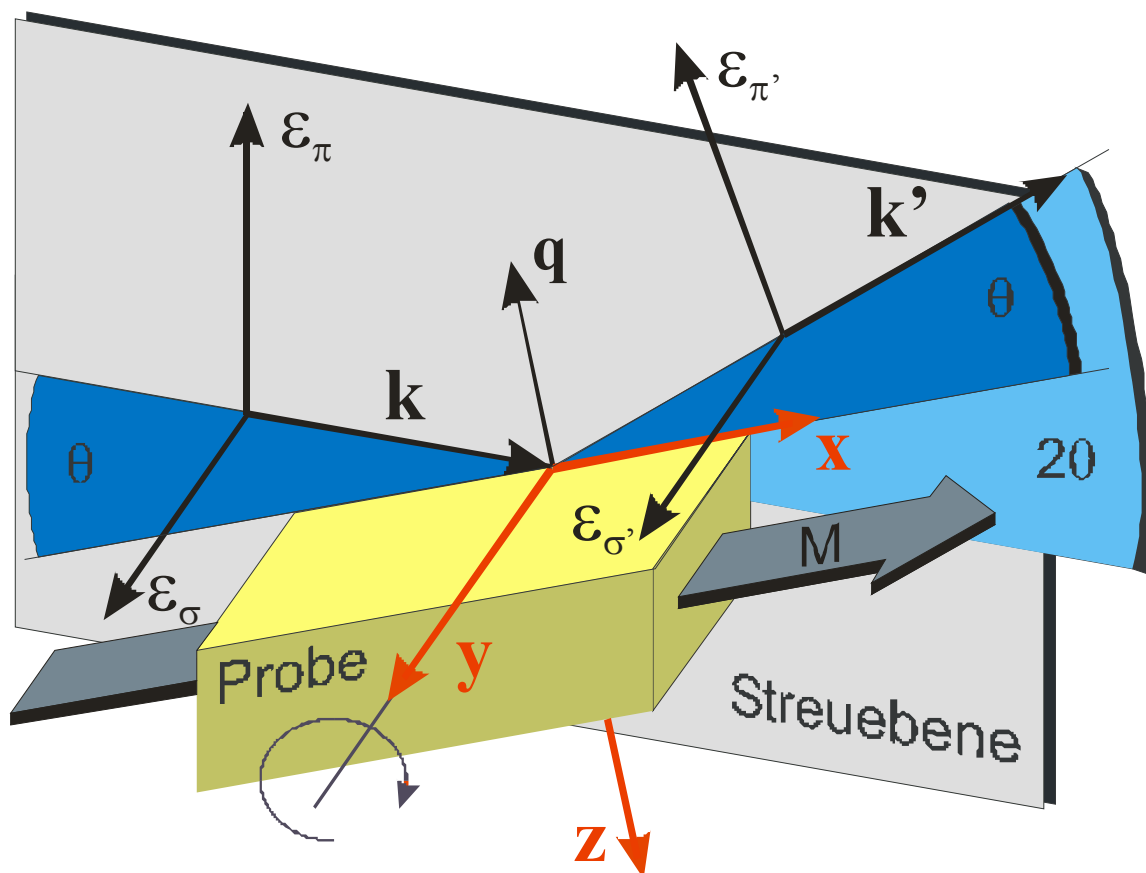


Abbildung 11: Schematische Darstellung der longitudinalen Messgeometrie für die spekulare Röntgenreflektometrie. Die Drehung der Probe erfolgt um die y-Achse (aus [GEI03]).

Im Folgenden sollen die Streupfade für die Pi- und Sigmastreuung allgemeingültig, für beliebige Magnetisierungsrichtungen hergeleitet werden, so dass jede beliebige Polarisation damit dargestellt werden kann. Alle bisherigen Modelle beschränkten sich auf eine der beiden Komponenten, was insbesondere bei großen Einfallswinkeln zu einem nicht vernachlässigbaren Fehler führte.

Ausgehend von einer Phasenverschiebung von φ erhält man für die einfallende Lichtwelle in kartesischen Koordinaten:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_\pi = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ 0 \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

und für die ausfallende Lichtwelle bei der spekularen Reflexion:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\sigma'} = \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{\pi'} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ 0 \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Daraus lassen sich die 2x2-Streumatrizen $\boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$ und $\boldsymbol{\varepsilon}' \times \boldsymbol{\varepsilon}$ berechnen zu:

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{\sigma'}^\dagger \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma & \boldsymbol{\varepsilon}_{\sigma'}^\dagger \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\pi \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\pi'}^\dagger \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma & \boldsymbol{\varepsilon}_{\pi'}^\dagger \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\pi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos 2\theta \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

für den Ladungsterm und zu

$$\boldsymbol{\varepsilon} \times \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{\sigma'}^\dagger \times \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma & \boldsymbol{\varepsilon}_{\sigma'}^\dagger \times \boldsymbol{\varepsilon}_\pi \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\pi'}^\dagger \times \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma & \boldsymbol{\varepsilon}_{\pi'}^\dagger \times \boldsymbol{\varepsilon}_\pi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ \sin \theta \end{pmatrix} \\ e^{i\varphi} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ -\sin \theta \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ -\sin 2\theta \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

für den magnetischen Term. Bei der Ladungstreuung finden daher nur Übergänge von π in π' und σ in σ' statt, so dass es zu keiner Drehung des Polarisationsvektors kommt. Setzt man nun (2.24) und (2.25) in (2.21) ein, erhält man die Streumatrix zu:

$$f_{res} = -r_0 \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos 2\theta \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \cdot (f_0 + f' - if'') \right] \\ \mp r_0 \left[\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \\ e^{i\varphi} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ -\sin 2\theta \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \cdot \vec{M} \cdot (m' - im'') \right] \quad (2.26)$$

\vec{M} ist hierbei der Magnetisierungsvektor und α und β die Amplituden der σ - bzw. π -polarisierten Lichtwellen, wobei die Gesamtamplitude durch die Wurzel der Quadrate auf 1 normiert ist.

Teilt man nun diesen allgemeinen Streufaktor in die beiden Basisvektoren σ und π mit einer festen Phasenverschiebung von $\varphi=90^\circ$ entsprechend für elliptisch polarisiertes Licht auf, so erhält man bei einer gesättigten Magnetisierung in x-Richtung die resonanten Streufaktoren für die beiden linearen Polarisationsrichtungen:

$$f_{res,\sigma} = -r_0 \frac{\alpha \cdot (f_0 + f' - if'') \mp i\beta \cdot \cos \theta \cdot M \cdot (m' - im'')}{(\alpha^2 + \beta^2)^{1/2}} \quad (2.27)$$

und

$$f_{res,\pi} = -r_0 \frac{\beta \cdot \cos 2\theta \cdot (f_0 + f' - if'') \pm i\alpha \cdot \cos \theta \cdot M \cdot (m' - im'')}{(\alpha^2 + \beta^2)^{1/2}}. \quad (2.28)$$

Die $\cos\theta$ -Terme ergeben sich aus dem Skalarprodukt des Polarisationsvektors und der Magnetisierungsrichtung. Der $\cos 2\theta$ -Term für den Streupfad parallel zur Streuebene ergibt sich aus der Reduktion des Impulsübertrags für größere Winkel und verschwindet für einen Einfallswinkel von 45° . Mit Hilfe Gleichung (2.27) und (2.28) kann der komplexe Brechungsindex für die XRMR-Methode erweitert werden zu:

$$n = 1 - (\delta \pm \cos \theta \cdot \Delta\delta) + i(\beta \pm \cos \theta \cdot \Delta\beta), \quad (2.29)$$

wobei $\Delta\delta$ und $\Delta\beta$ die bereits erwähnten magneto-optischen Konstanten sind, welche aus einem XMCD-Experiment gewonnen werden. Die Modifikationen entsprechen analog denen des zum nichtmagnetischen Absorptionskoeffizienten hinzukommenden magnetischen Anteils beim zirkularen Dichroismus, wobei im Falle der Reflexion Winkelabhängigkeiten über die verschiedenen Einfallswinkel mitberücksichtigt werden müssen.

2.1.3 Entwicklung einer Software zur Auswertung der XRMR

In diesem Kapitel soll die Entwicklung einer Software zur Auswertung von Reflektivitäten und Asymmetrien vorgestellt werden. Alle bisherigen Auswertungen erfolgten zu einem großen Anteil quasi manuell, was mit einem enormen zeitlichen Aufwand verbunden war und viele Systeme aufgrund ihrer Komplexität nicht auswertbar waren. Lediglich zur Auswertung der nichtmagnetischen Reflektivitäten standen Programme zur Verfügung, um Dicken und Rauigkeiten zu simulieren und an die gemessenen Daten zu „fitten“. Die Bestimmung und Anpassung an die Asymmetrieverhältnisse (vgl. Kapitel 2.2.1), in denen die magnetischen Informationen, insbesondere Änderungen der Magnetisierung an den Grenzflächen, enthalten sind, musste manuell durchgeführt werden. Dabei wurde der Schichtstapel künstlich in winzige Schichten zerlegt und die magneto-optischen Konstanten an den Grenzflächen mit angenommenen modellhaften Funktionen gefaltet. Die daraus entstandenen Änderungen in den Asymmetrieverhältnissen wurden mit der gemessenen Asymmetrie verglichen. Dieses Verfahren wurde solange durchgeführt bis gemessene und simulierte Asymmetrie übereinstimmten. Simulationen einer einzigen Grenzfläche sind mit dieser Methode noch durchführbar, jedoch schon bei zwei Grenzflächen, an denen es zu Änderungen der Magnetisierung kommt, stößt diese Vorgehensweise aufgrund der auftretenden Interferenzerscheinungen und der höheren freien Parameteranzahl an ihre Grenzen. Zudem sind in den damals verwendeten Simulationsalgorithmen keine Polarisationsabhängigkeiten einbezogen und es gilt die Kleinwinkelnäherung, so dass insbesondere im weichen Röntgenbereich bei großen Einfallswinkeln systematische Fehler in den Reflektivitäten auftreten (vgl. Abbildung 12).

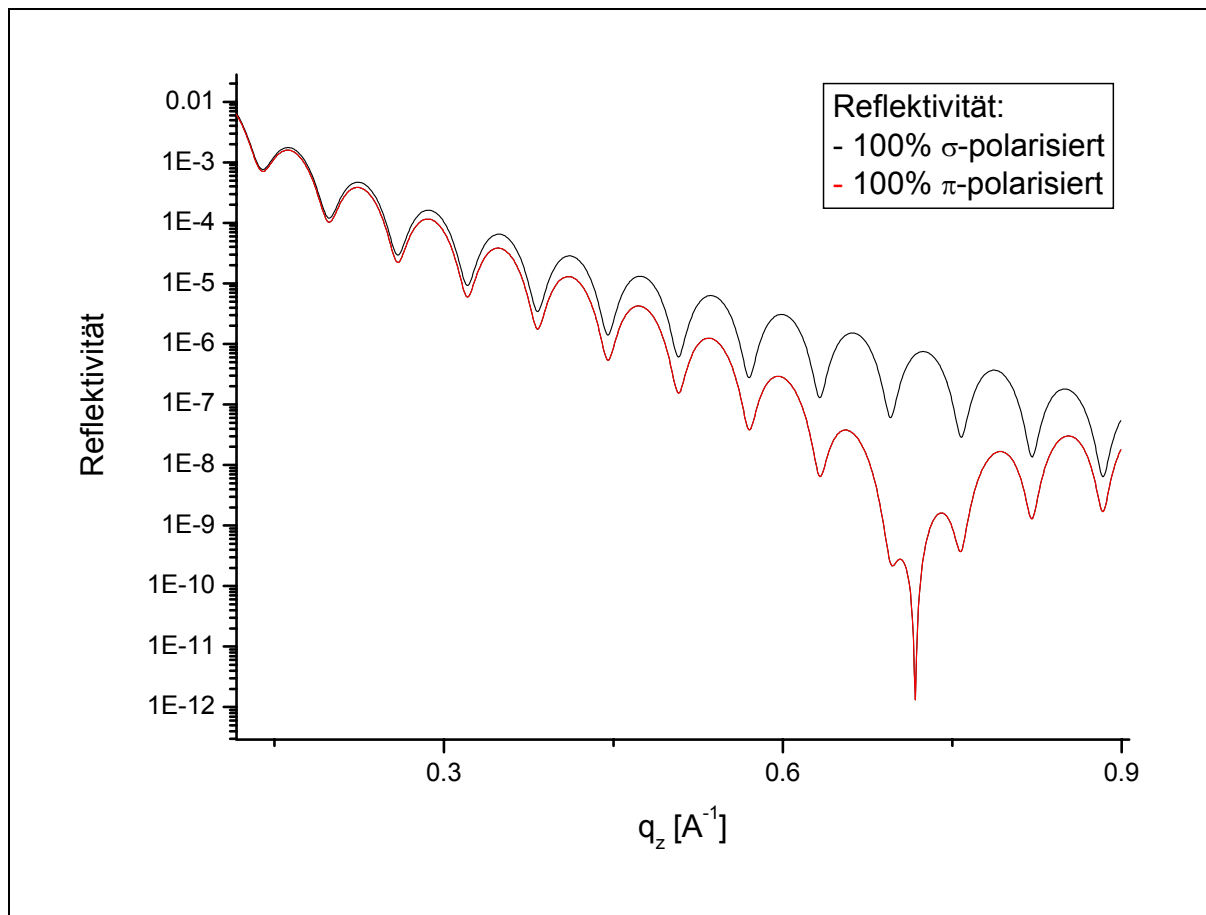


Abbildung 12: Simuliertes Reflexionsspektrum einer 10nm dicken Kobaltschicht bei einer Energie von $E = 1000\text{eV}$ mit vollständig σ - und vollständig π -polarisierter Strahlung zur Demonstration des möglichen Fehlers bei großen Einfallswinkeln.

Um Reflektivitäten und Asymmetrien interpretieren und simulieren zu können, wurde in Zusammenarbeit mit M. Harlander und S. Macke ein auf dem Parratt-Formalismus basierendes computergestütztes Verfahren entwickelt, in dem Polarisations- und Winkelabhängigkeiten in die magnetischen und nicht magnetischen Streuterme eingearbeitet und berücksichtigt sind. Ebenso lassen sich zusätzlich magnetische Profile durch „Fitten“ der Asymmetrieverhältnisse automatisch bestimmen.

Des Weiteren wurde ein Algorithmus implementiert, welcher es erlaubt, spektroskopische Messungen unter Reflexionsbedingungen zu simulieren. Hierbei können nichtmagnetische Energiespektren sowohl unter konstantem Winkel als auch unter konstantem Impulsübertrag modelliert werden. Damit kann in Zukunft auch Spektroskopie an vergrabenen Schichten durchgeführt werden. In Abbildung 13 ist exemplarisch ein simuliertes XAS-Spektrum (X-Ray Absorption Spektroskopie) eines Cr/Cu/Co-Schichtsystems zu sehen.

Die Benutzeroberfläche sowie die Funktionen und Möglichkeiten des Programms sind im Anhang (Anhang A) dargestellt.

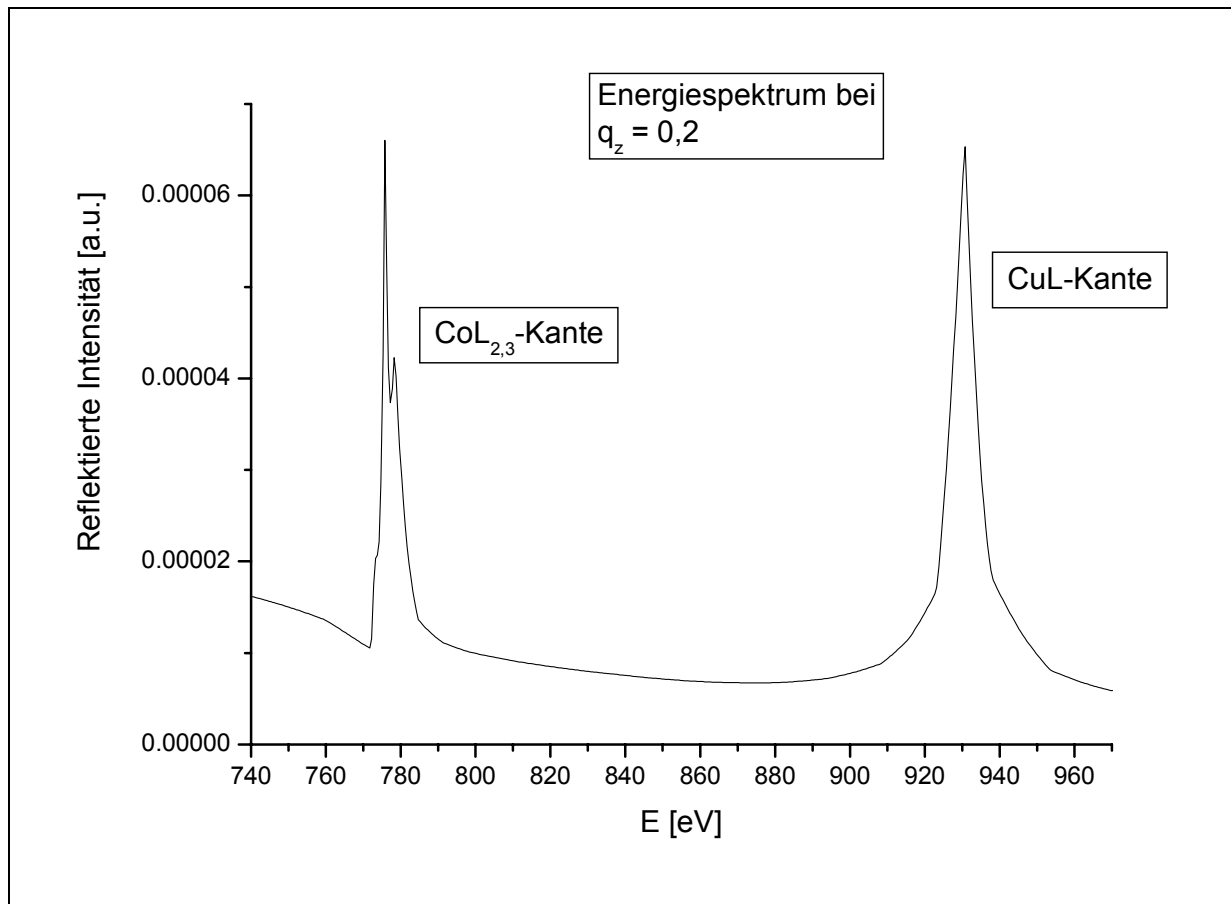


Abbildung 13: Simuliertes Energiespektrum in Reflexion eines Cr/Cu/Co-Schichtsystems bei einem konstanten Impulsübertrag von $q_z = 0,2\text{\AA}^{-1}$.

2.1.3.1 Simulation und Anpassung der Reflektivität

Die strukturellen Parameter eines Schichtstapels werden durch Anpassung an ein unmagnetisch gemessenes Reflexionsspektrum bestimmt. Dies kann sowohl fern ab von Absorptionskanten geschehen, um auf theoretisch berechnete Werte für die optischen Konstanten zurückgreifen zu können [HEN93], [HAM91], oder im Bereich der Absorptionskanten, um einen größeren Kontrast zwischen den einzelnen Schichten zu erhalten, insbesondere bei häufig vorkommenden Schichtstapeln im Periodensystem benachbarter Elemente (z.B. FeMn/Co/Cu/Co). Durch Anpassung aller unbekanntenen Größen lassen sich somit Dicken und Grenzflächenrauigkeiten mit Hilfe des entwickelten Programms bestimmen. Die Beschreibung der Übergänge der optischen Konstanten von einer Schicht in die andere erfolgt für die Auswertung der für diese Arbeit relevanten Messdaten nach dem Modell von Nevot und Croce [NEV80], dessen Vermischungsfunktion von δ und β wie bereits erwähnt einer Gaußfunktion entspricht, was zu einem Übergang in Form einer Error-Funktion führt.

Neben der Anpassung an ein unmagnetisches Reflexionsspektrum können auch dichroisch gemessene Spektren angepasst und simuliert werden. In Abbildung 14 sind exemplarisch die magnetischen Reflektivitäten R^+ und R^- (vgl. Kapitel 2.2.1) einer 20nm dicken Kobaltschicht, welche unter einer 5nm dicken Tantalschicht vergraben ist, zu sehen.

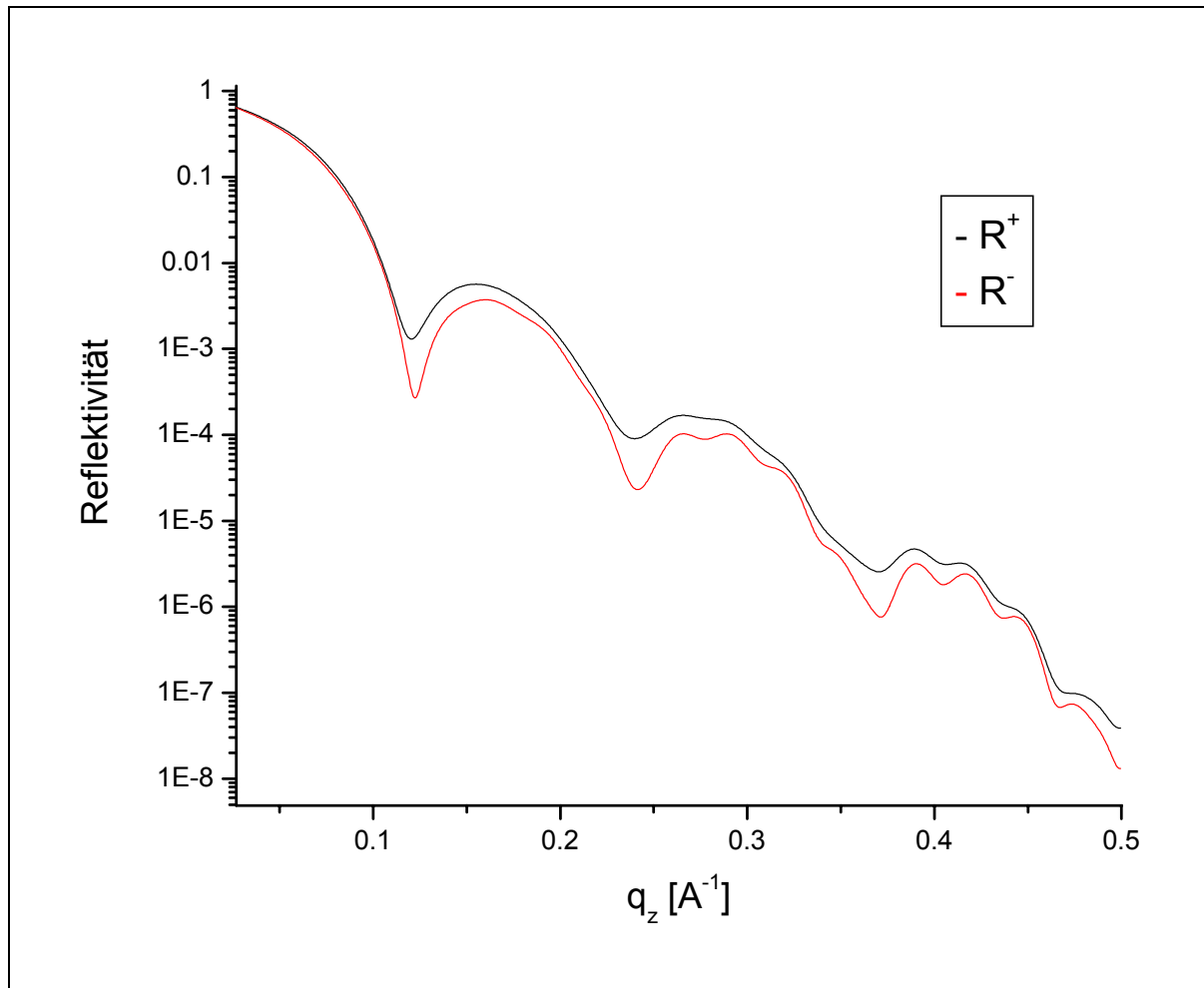


Abbildung 14: Magnetische Reflektivitäten R^+ und R^- einer 20nm dicken Kobaltschicht, welche unter einer 5nm dicken Tantschicht vergraben ist.

2.1.3.2 Simulation und Anpassung des Asymmetrieverhältnisses

An den Grenzflächen kann das magnetische Moment pro Atom vom Festkörperwert abweichen. Diese Abweichung spiegelt sich auch im Asymmetrieverhältnis (vgl. Kapitel 2.2.1) wieder. Um dieses zu modellieren und an gemessene Spektren anzupassen, wird das gesamte Schichtprofil, welches durch Schichtdicken, Rauigkeiten und die optischen Konstanten gegeben ist, in dünne Schichten zerlegt. Um in den Bereichen großer Änderungen der optischen Eigenschaften mögliche Fehler durch zu große Approximationsschritte zu vermeiden, werden die Schichten so unterteilt, dass deren Dicken sich umgekehrt proportional zu den Änderungen der optischen Konstanten verhalten. Für einen beliebigen Schichtstapel mit beliebigen optischen Konstanten ist dies in Abbildung 15 zu sehen. Eine extrem feine

Unterteilung durch den gesamten Stapel hindurch wäre ebenso möglich, jedoch wäre der Rechenaufwand um ein vielfaches vergrößert. Da es innerhalb des Festkörpers zu keinen Änderungen kommt, ist dies auch aus physikalischer Sicht nicht notwendig.

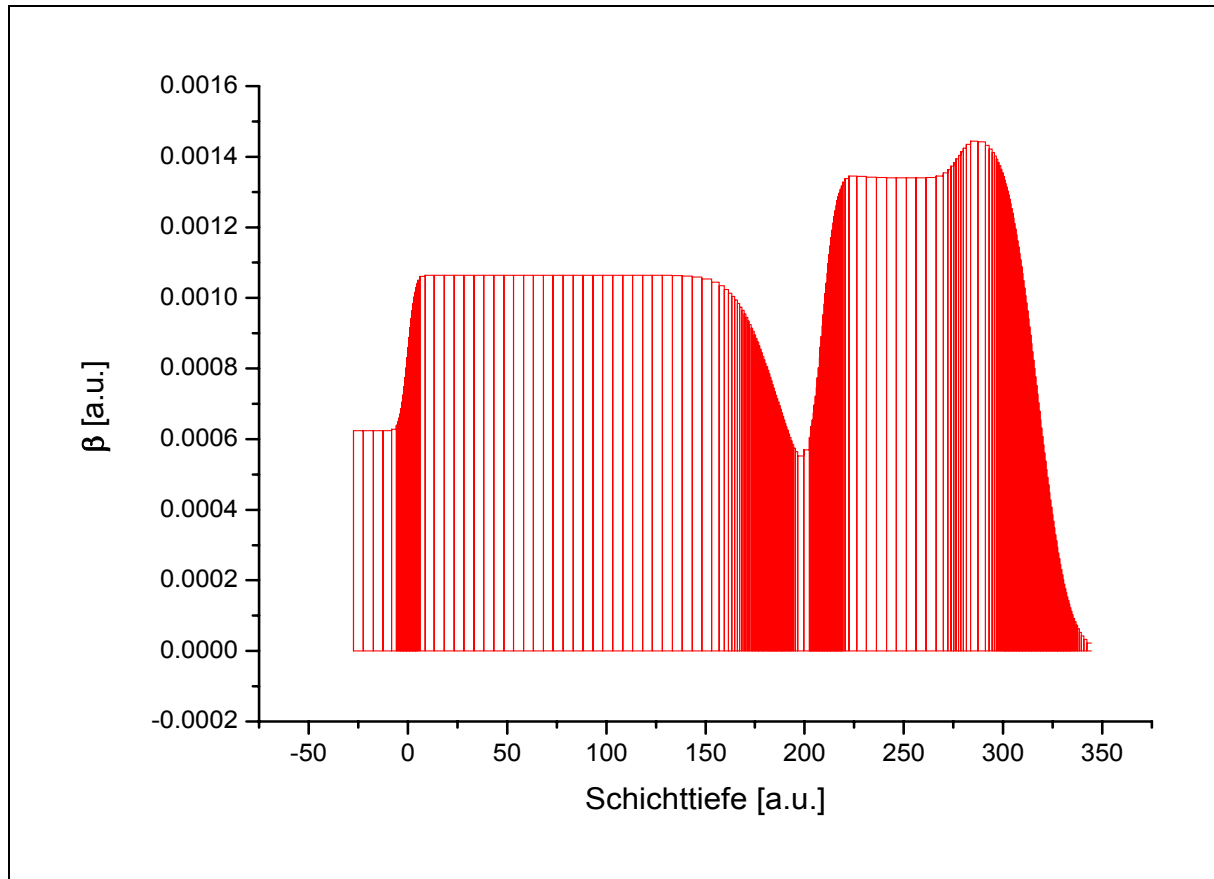


Abbildung 15: Darstellung des sog. „Multislicings“ zur Simulation der Asymmetrie, gezeigt an einem beliebigen Schichtstapel bestehend aus 5 verschiedenen Schichten anhand des absorptiven Anteils der optischen Konstanten.

Zu diesem unterteilten Schichtprofil werden die magneto-optischen Konstanten $\Delta\beta$ und $\Delta\delta$ hinzuaddiert. Über eine Variation der magnetischen Festkörperwerte an den Grenzflächen, durch Addieren und Subtrahieren von Gaußkurven wird das simulierte Asymmetrieverhältnis an das gemessene angepasst. Zusätzlich können weitere Parameter mit variiert werden, sofern diese nicht aus den Reflexionsspektren zufrieden stellend bestimmt werden konnten.

Zu erwähnen sei noch, dass der im Kapitel Simulation der Reflektivitäten beschriebene Übergang anhand einer Error-Funktion, welcher auch bei der Unterteilung zur Modellierung der Asymmetrie Anwendung findet, auch für Schichtstapel mit mehr als zwei Schichten legitim ist, solange die Rauigkeit merklich kleiner ist als die Dicke der einzelnen Schicht.

Kommt die Grenzflächenrauigkeit in die Größenordnung der Schichtdicke, so kommt es zu einer Verschmierung der optischen Konstanten und die eigentlichen nominellen Werte werden unter Umständen nicht erreicht, woraus Fehler resultieren können. Ist dies der Fall müssen andere Modelle zur Schichtprofilberechnung verwendet werden. Verschiedene Möglichkeiten dazu werden von Harlander [HAR05] diskutiert, worauf hier jedoch nicht näher eingegangen werden soll, da sie für die im Rahmen dieser Arbeit auszuwertenden Daten nicht von Bedeutung sind.

2.2 Experimentelles und Messmethodik der XRMR

Mittels zirkular polarisierter Synchrotronstrahlung lassen sich durch ein geeignetes Reflexionsexperiment die magnetischen Strukturen eines Schichtsystems untersuchen. Die resonante magnetische Röntgenreflektometrie ist dabei sensitiv auf die durch den Magnetismus induzierten Änderungen der optischen Eigenschaften. Aufgrund dieser Änderungen können grenzflächeninduzierte Effekte bestimmt werden und daraus durch Simulationen ein magnetisches Tiefenprofil erstellt werden.

Zu Beginn dieses Kapitels wird das Messprinzip der XRMR-Methode im Detail vorgestellt, dessen Prinzipien auf den im vorherigen Kapitel beschriebenen Grundlagen basieren. Danach wird auf die für solche Experimente notwendige Synchrotronstrahlung eingegangen, wobei neben der Erzeugung dieser auch der verwendete Strahlplatz und die modifizierte Messapparatur beschrieben werden. Zum Schluss dieses Kapitels erfolgt eine Beschreibung des Messverfahrens, der experimentellen Probleme sowie eine Betrachtung möglicher systematischer Fehler.

2.2.1 Messprinzip der XRMR

In diesem Kapitel soll ein kurzer Überblick über das Messprinzip der XRMR und über zusätzliche weitere relevante Messmethoden gegeben werden. Ebenso wird das für die Auswertung und die späteren Simulationen magnetischer Messungen benötigte Asymmetrieverhältnis eingeführt.

Durch das Auftreten eines magnetischen Streutermes im Falle resonanter Energie, kommt es zu Änderungen im Verlauf des Reflexionsspektrums gegenüber dem nichtmagnetischen Fall. Diese Änderungen sind abhängig vom magnetischen Dichteprofil und von der parallelen bzw. antiparallelen Geometrie der Magnetisierung der Probe und dem einfallenden Polarisationsvektor und können unter Verwendung des modifizierten Parratt-Formalismus, wie bereits beschrieben, simuliert werden. Da die durch den Magnetismus hervorgerufenen Änderungen in der Reflektivität, besonders bei nicht ferromagnetischen und nur durch induzierte Effekte magnetisch gewordenen Elementen und Legierungen extrem klein sein können, sind diese von den nichtmagnetischen Reflexionsspektren nicht oder nur kaum noch zu unterscheiden. Daher wird als eigentliche Messgröße die Differenz der Reflexionsspektren

bei Umkehr des Magnetfeldes oder bei Umkehr der Helizität, normiert auf die Summe der beiden Spektren, verwendet, das sog. Asymmetrieverhältnis:

$$A(\theta) = \frac{R^+(\theta) - R^-(\theta)}{R^+(\theta) + R^-(\theta)} \quad (2.30)$$

In den hier vorgestellten Messungen wird die Variante verwendet bei der die Helizität konstant bleibt, jedoch das Magnetfeld an jedem Punkt umgepolt wird. Die Asymmetrie kann, abhängig von Interferenzerscheinungen, von der Größe der magnetischen optischen Konstanten und von dem chemischen Profil des Schichtstapels Werte bis zu 1 erreichen. In Abbildung 16 ist exemplarisch das Asymmetrieverhältnis des im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Cr-Co/Fe-Cu-Co/Fe-SiO₂-Schichtstapels, gemessen an der CoL₃-Kante, gezeigt.

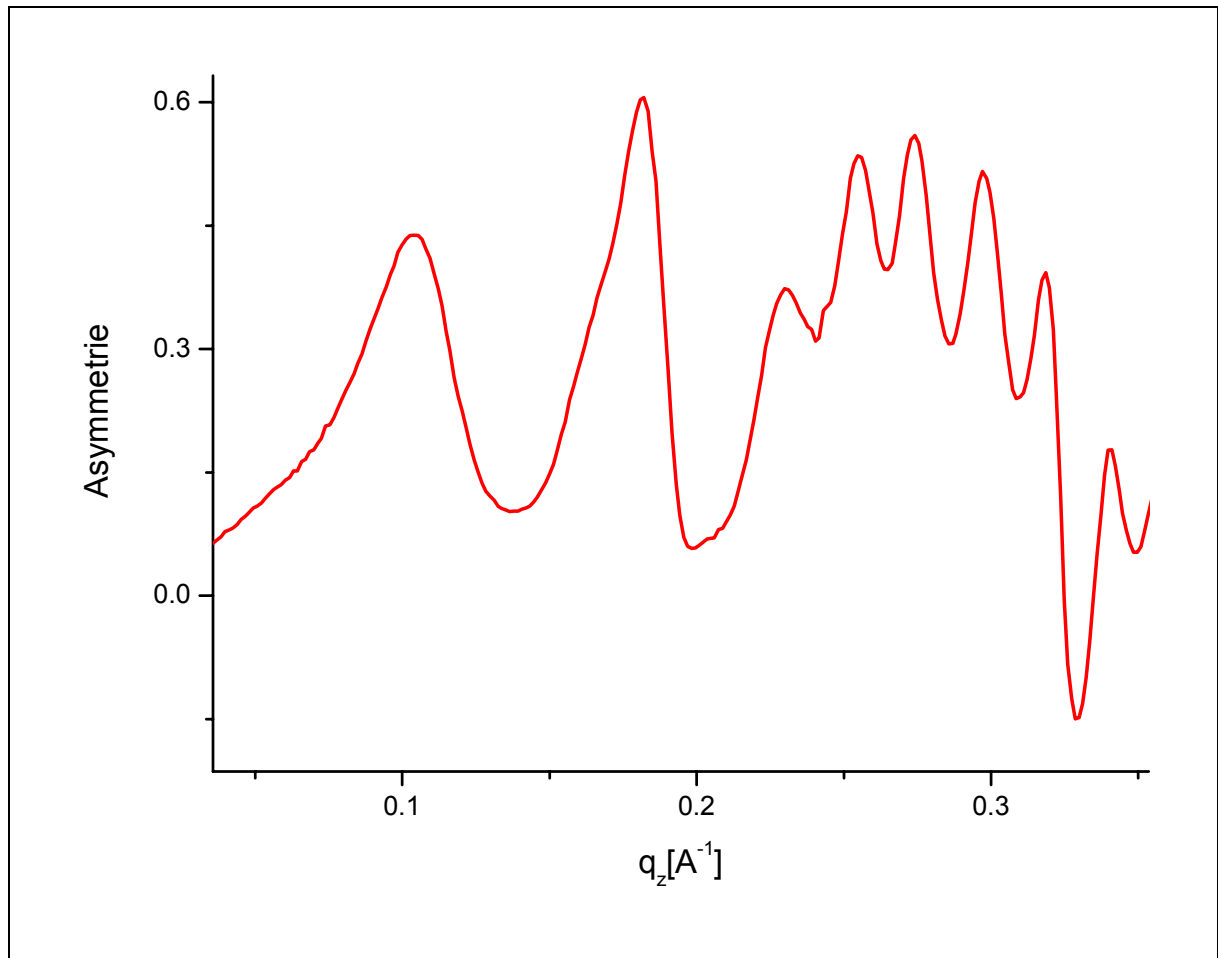


Abbildung 16: Darstellung der Asymmetrie in Abhängigkeit vom Wellenvektorübertrag q_z an dem im Rahmen dieser Arbeit untersuchten „Co/Cu/Co-Schichtsystems“ bei einer Energie von $E = 776\text{eV}$.

Die experimentelle Anordnung ist in Abbildung 17 zu sehen, wobei die XRMR-Methode wie bereits erwähnt in longitudinaler Messgeometrie durchgeführt wird.

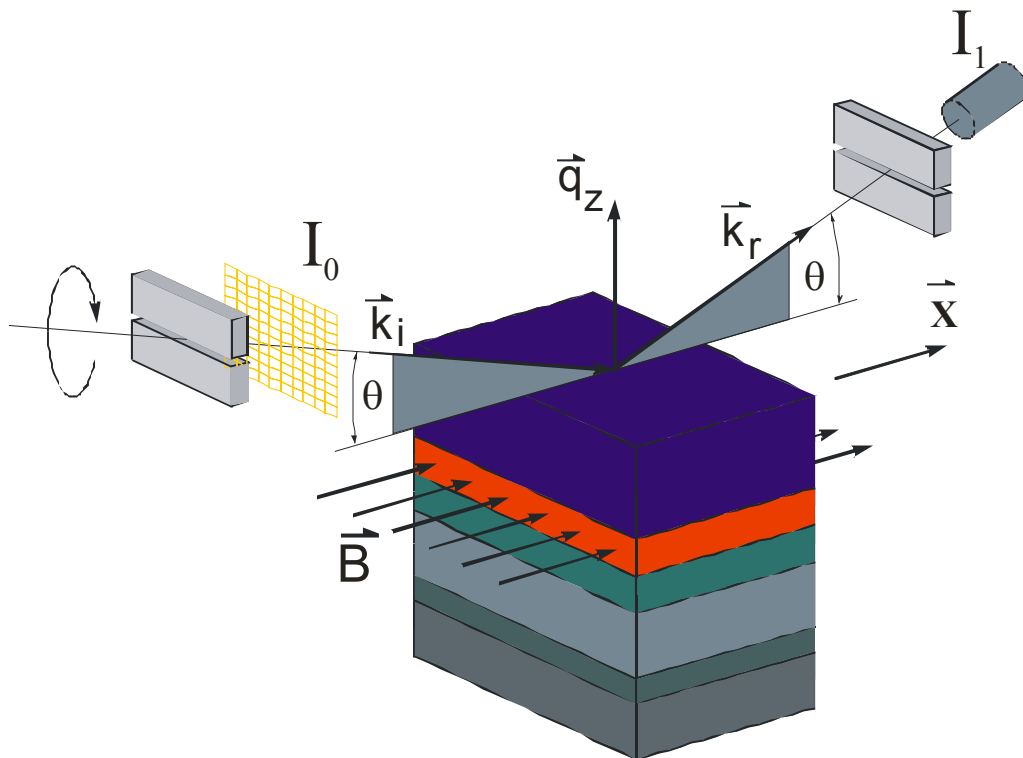


Abbildung 17: Schematischer Aufbau eines XRMR-Experiments.

Das Reflexionsexperiment wird mit zirkular polarisierter Röntgenstrahlung bei einer konstanten Energie, die im Bereich der zu untersuchenden Absorptionskante liegt, durchgeführt. Um einen großen Kontrast von R^+ und R^- zu bekommen, wird das Experiment möglichst bei der Energie durchgeführt an der die magnetischen Effekte am größten sind. Dies kann von der eigentlichen Absorptionskante in der Energie etwas abweichen. Detektiert wird die Eingangsintensität I_0 mit einem Goldgitter, der specular gestreute Reflex I_1 mit einer GaAsP-Photodiode der Firma Hamamatsu (Hamamatsu G1116 SPL 3890).

Neben der XRMR-Methode werden in gleicher Messgeometrie auch im „ θ - 2θ -Modus“ nichtmagnetische Reflexionsmessungen mit linear polarisierter Röntgenstrahlung durchgeführt. Dies geschieht hauptsächlich fern ab von Absorptionskanten, um auf errechnete Werte für die optischen Konstanten zurückgreifen zu können und dient zur Bestimmung der Dicken und Rauigkeiten des Schichtstapels.

Um die optischen Konstanten im Bereich der für magnetische Messungen interessanten Absorptionskanten zu bestimmen, werden zusätzlich XMCD- und XAS-Experimente

durchgeführt. Dabei wird unter konstantem Einfallswinkel θ die Photonenenergie variiert und der dichroische Absorptionskoeffizient durch Umpolen eines äußeren Magnetfeldes gemessen. Daraus lassen sich über das optische Theorem und die Kramers-Kronig-Relation die atomaren Streufaktoren bzw. die resonanten optischen Konstanten einer jeden Schicht bestimmen. Aufgenommen werden die Messdaten des XMCD-Experiments über eine in der Nähe der Probe angebrachte Fluoreszenzdiode, mit welcher die Fluoreszenzstrahlung gemessen wird. Zusätzlich wird das dichroische Signal über das sog. Total Electron Yield (TEY) ermittelt. Dabei wird der totale Photostrom mit Hilfe eines Elektrometers gemessen. Auf beide Methoden wird im Kapitel Messverfahren genauer eingegangen.

2.2.2 Synchrotronstrahlung

Zur Messung der magnetischen Reflektivitäten und insbesondere der Asymmetrien von Schichtsystemen benötigt man energetisch durchstimmbares, zirkular polarisiertes Röntgenlicht von großer Güte. Zusätzlich sollte die Quelle eine hohe Brillianz bei großer Energieauflösung aufweisen. Solche Eigenschaften können heutzutage nur mittels Synchrotronstrahlung erreicht werden.

2.2.2.1 Erzeugung von Synchrotronstrahlung

Zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung werden geladene Teilchen, welche mit beinahe Lichtgeschwindigkeit in Paketen, sog. „brackets“, einen Speicherring durchlaufen, durch Magnetfelder abgelenkt. Die dazu benötigten Magnetfelder können durch Dipol-Ablenkmagnete, sog. „bending-magnets“, oder durch speziell angeordnete Magnetstrukturen, wie „Wiggler“ und „Undulatoren“, erzeugt werden (Abbildung 18).

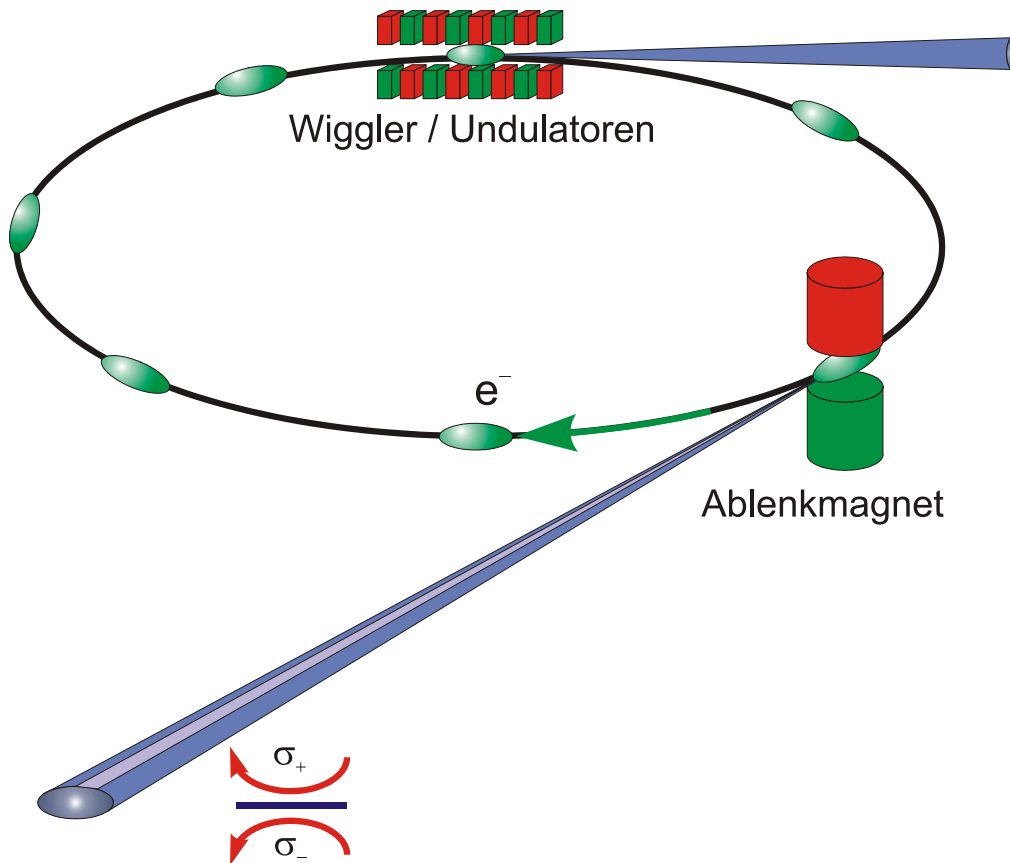


Abbildung 18: Durch Ablenken der Elektronen bzw. Positronen in periodisch angeordneten Magnetstrukturen oder an Dipolmagneten strahlen diese in einem engen Kegel in Vorwärtsrichtung Synchrotronstrahlung ab (aus [GEI03]).

Die typische Energie der durchlaufenden Teilchen liegt im Bereich von einigen GeV. Durch die dadurch bedingte Lorenzkontraktion strahlen die geladenen Teilchen in einem engen Kegel aufgrund der radialen Beschleunigung tangential zur Flugrichtung das Synchrotronlicht aus. Der Öffnungswinkel liegt im Bereich von einigen mrad. Die abgestrahlte Leistung ist umgekehrt proportional zur Ruhemasse der geladenen Teilchen, so dass in den Synchrotron-Speicherringen praktisch nur Elektronen und Positronen zum Einsatz kommen. Über die Maxwell-Gleichungen kann die Entstehung von Synchrotronstrahlung mathematisch hergeleitet werden, worauf hier jedoch verzichtet werden soll [JAC75].

Für XMCD-Experimente benötigt man zirkular polarisiertes Röntgenlicht bzw. elliptisch polarisierte Röntgenstrahlung mit hohem zirkularem Polarisationsgrad. Neben helischen Undulatoren bzw. Wiggler stehen an Ablenkmagneten zwei Möglichkeiten zur Verfügung dies zu erzeugen.

2.2.2.2 Ablenkmagnete

Die erste Möglichkeit zirkulares Licht zu erzeugen besteht darin, durch Austrittsblenden nur den Strahl oberhalb bzw. unterhalb der Ablenkebene der geladenen Teilchen zu nutzen. Im oberen Bereich der Abstrahlkeule, welche in Abbildung 18 zu sehen ist, ist das Licht rechts elliptisch polarisiert im unteren Bereich links elliptisch. In der Mitte der Ablenkebene herrscht vollständig linear polarisiertes Licht vor. Um einen der mit zirkularem Anteil versehenen Bereiche des Strahls zu nutzen muss der Rest durch Blenden abgeschirmt werden. Da jedoch die Intensität der Randstrahlen sehr gering ist, ist diese Variante für die XRMR-Methode eher ungeeignet. Da wie bereits erwähnt die Reflektivität mit q_z^{-4} abnimmt und auch in Bereichen von großen Einfallswinkeln noch kleine Änderungen aufgelöst werden sollen, benötigt man einen hohen Photonenfluss bei monochromatischem Licht, welcher mit dieser Variante praktisch nicht erreicht werden kann.

Die zweite Möglichkeit Röntgenstrahlung mit einem hohen zirkularen Polarisationsgrad zu erzeugen besteht darin, mittels eines Phasenschiebers zirkulares Röntgenlicht aus linear polarisierter Strahlung zu erzeugen. Dies ist eine gute Methode für Anwendungen im harten Röntgenbereich, da bei hohen Energien die Transmission durch den Phasenschieberkristall recht hoch ist und somit wenig Intensität verloren geht. Auf diese Variante wird im zweiten Teil der Arbeit noch im Speziellen eingegangen (vgl. Kapitel 3.1.2).

2.2.2.3 Wiggler und Undulatoren

Wiggler und Undulatoren zeichnen sich durch ihre geringe Winkeldivergenz bei gleichzeitig hoher Intensität aus. Streuexperimente im weichen Röntgenbereich werden daher nahezu immer an solchen durchgeführt. Eine schematische Abbildung eines helischen Undulators zeigt Abbildung 19.

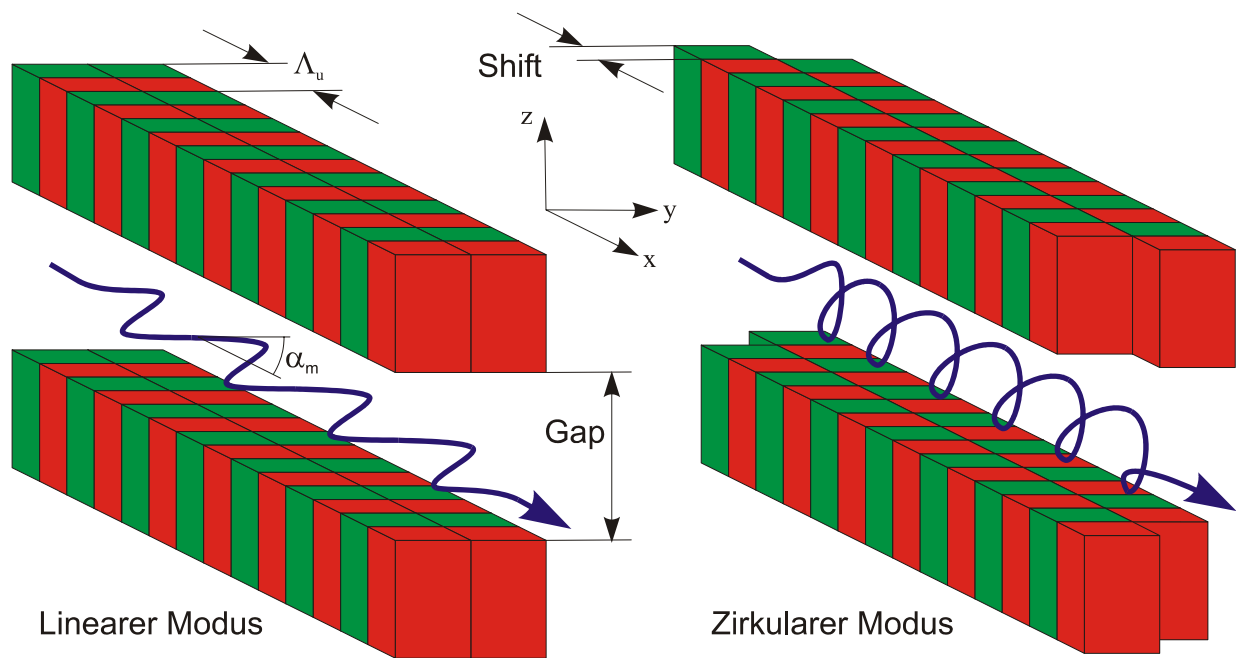


Abbildung 19: Schematische Darstellung eines helischen Undulators zur Erzeugung von linear polarisierter Röntgenstrahlung (links) und zirkular polarisierter Strahlung (rechts) [GEI03].

Im Beispiel des helischen Undulators wird im Unterschied zu planaren Undulatoren zum Magnetpolpaarabstand, dem sog. „Gap“, zusätzlich der „Shift“ verändert (Abbildung 19), so dass die geladenen Teilchen aufgrund des helischen Feldes am Ort des Teilchenstrahles auf Spiralbahnen gezwungen werden. Dadurch kommt es zum Abstrahlen von elliptisch polarisiertem Röntgenlicht, wobei durch Kopplung von Transversal- und Longitudinal-Oszillationen der Teilchen verschiedene harmonische Oberschwingungen im Undulatorspektrum erzeugt werden. Die Intensität sowie der Grad der zirkularen Polarisation hängen von den Werten des eingestellten „Gaps“ und „Shifts“ ab. Diese beschreiben den vertikalen und den horizontalen Abstand der Magnetpolpaare zueinander (vgl. Abbildung 19). Da bei einem Wiggler keine feste Phasenbeziehung zwischen der von jedem einzelnen Dipol emittierten Strahlung besteht, kommt es durch die Anordnung von N Dipolpaaren zu einer N -fachen Verstärkung der Intensität. Der Aufbau eines Wignlers ähnelt dem eines Undulators, wobei bei Undulatoren das Verhältnis zwischen Strahlungskegel und maximalem Ablenkwinkel um Größenordnungen kleiner ist, so dass es zu einer kohärenten Überlagerung der emittierten Strahlung kommt, was mit einer N^2 -fachen Verstärkung einhergeht. Durch eine solche alternierende Anordnung von Dipolmagneten wird ein kontinuierliches Energiespektrum über mehrere hundert bis tausend Elektronenvolt erzielt. Um aus dieser polychromatischen Strahlung monochromatische Röntgenstrahlung zu bekommen, werden

Monochromatoren eingesetzt, wobei meistens Si-Doppelkristallmonochromatoren verwendet werden.

2.2.2.4 Die Beamline UE46-PGM

Die Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurden bei BESSY (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft mbH) am helischen Undulator UE46-PGM durchgeführt. Abbildung 20 zeigt schematisch den Aufbau der „Beamline“.

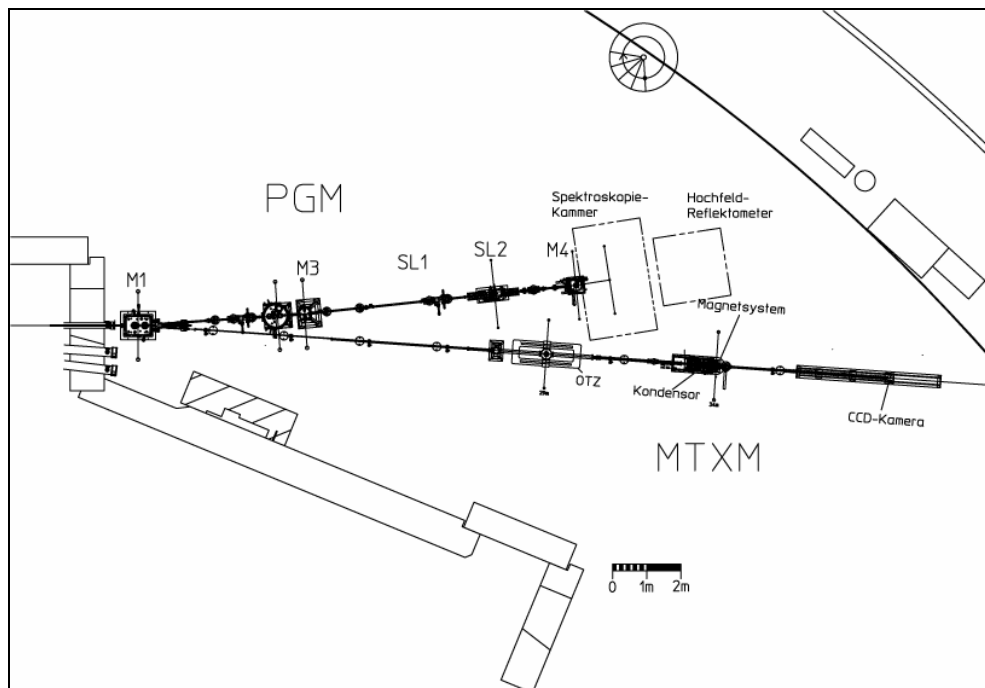


Abbildung 20: Skizze der Beamline UE46-PGM und -MTXM [HMI web].

Alle Experimente wurden mit der dritten Harmonischen des Undulators durchgeführt. Neben Messungen mit linearem Licht wurden Messungen mit elliptisch polarisierter Strahlung durchgeführt, wobei bei diesen der zirkulare Polarisationsgrad bei 90% lag. Der Photonenfluss lag bei maximal gefülltem Speicherring bei einigen 10^{12} Photonen/sec/0.1A/ ΔE . Der Austrittsspalt wurde konstant auf $50\mu\text{m}$ gehalten, um einen guten Kompromiss zwischen Intensität und Energieauflösung zu erhalten.

2.2.3 Erweiterung einer Messapparatur für den weichen Röntgenbereich

Röntgenbereich

Wegen des dramatischen Abfalls der mittleren freien Weglänge der Photonen im Energiebereich unterhalb von 3000eV und des damit verbundenen drastischen Abfalls an Intensität müssen alle Experimente im weichen Röntgenbereich unter Ultrahochvakuumbedingungen ($p \sim 10^{-9}$ mbar) durchgeführt werden. Dazu steht eine von Jochen Geißler [GEI03] entwickelte und im Rahmen dieser Arbeit überarbeitete Reflexionsapparatur zur Verfügung, bei der insbesondere die vorhandenen Polschuhe durch größere ersetzt wurden, um ein fünffach stärkeres Magnetfeld zu erreichen. Inzwischen sind noch weitere Änderungen vorgenommen worden, wobei jedoch der Entwicklungsstand der UHV-Kammer, an der die für diese Arbeit relevanten Messungen durchgeführt wurden, beschrieben werden soll. Die wesentlichen Elemente der Reflexionsapparatur sind schematisch in Abbildung 21 von oben zu sehen.

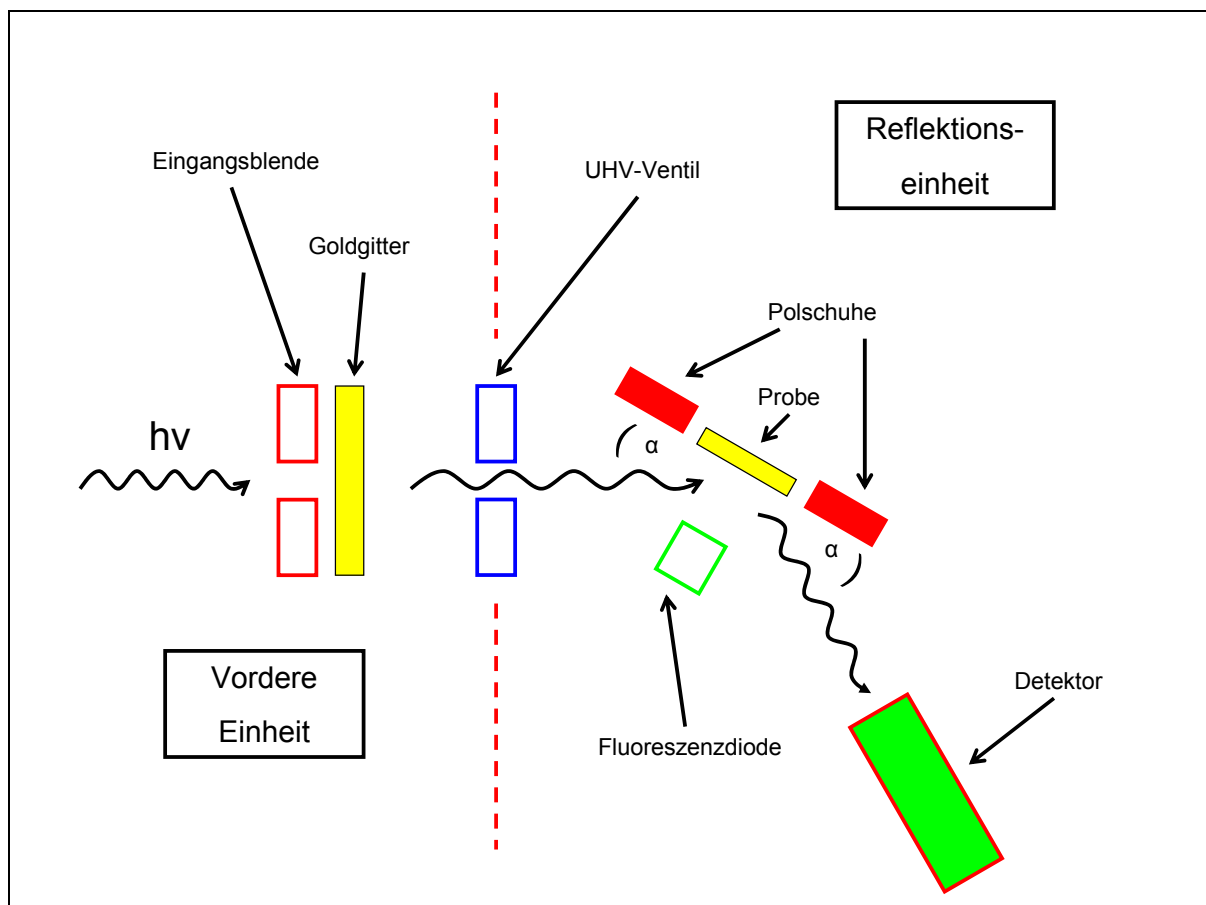


Abbildung 21: Schematischer Aufbau der Reflexionsapparatur für den weichen Röntgenbereich.

Die differenziell gepumpte, aus zwei Einheiten bestehende UHV-Kammer ist auf einem höhenverstellbaren Tisch angebracht, so dass sie an verschiedenen Messplätzen einsetzbar ist. Die vordere Einheit besteht aus einer Eingangsblende und einem feinmaschigen Goldgitter zur Bestimmung der Eingangsintensität und ist durch ein UHV-Ventil von der eigentlichen, aus einem Cu150 Doppelkreuz bestehenden Reflexionseinheit getrennt. An den vertikal angebrachten Flanschen des Doppelkreuzes befinden sich von oben die Drehdurchführung für die Probeneinheit mit integriertem Elektromagnet und von unten, unabhängig davon die Drehdurchführung für den Detektor. Der Antrieb der Drehdurchführungen erfolgt über Schrittmotoren. Der Elektromagnet ist starr mit der Probenachse verbunden und kann über dünne Wellschläuche wahlweise mit Wasser oder flüssigem Stickstoff gekühlt werden, wobei die gesamte Probeneinheit durch thermischen Kontakt mitgekühlt wird. Der gesamte obere Komplex ist an einem XYZ-Manipulator aufgehängt welcher in Abbildung 21 nicht zu sehen ist. Durch den Einbau neuer, massiverer Permaloy-Polschuhe können Felder bis zu $B = 25\text{mT}$ erreicht werden. Die Probe befindet sich auf einem senkrecht zur Drehachse angeordneten Schlitten, der es erlaubt diese weiter in bzw. aus dem Strahl zu fahren. Der Detektor, eine GaAsP-Photodiode der Firma Hamamatsu mit einem Dunkelstrom von $I_D < 10\text{fA}$, besitzt eine zusätzliche Blende und ist im Abstand von 7cm von der Probe angebracht. Dieser ist über die untere Drehdurchführung separat steuerbar und dient zur Durchführung winkelabhängiger Experimente. Zur Messung energieabhängiger Absorptionsspektren, welche wie bereits erwähnt zur Bestimmung der optischen Konstanten im resonanten Fall benötigt werden, stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung. Zum einen geschieht dies durch eine zusätzliche im Abstand von 2cm senkrecht zur Probe angebrachte Photodiode durch Messung des Fluoreszenzstroms, zum anderen durch Messung des totalen Photoabsorptions-Wirkungsquerschnittes (Total Electron Yield) über den durch die Strahlung erzeugten Probenstrom. Alle Strommessungen werden mit Präzisionsselektrometern der Firma Keithley (Modell 6517A) durchgeführt.

Mit Hilfe einer Vorpumpe und zweier Turbomolekularpumpen wird ein Basisdruck von weniger als $2 \cdot 10^{-9}\text{mbar}$ erzielt. Die Steuerung des gesamten Experimentes geschieht mittels eines Testpoint-Programms über den Messrechner. Über diesen lässt sich auch der Undulator und der Monochromator steuern.

2.2.4 Messverfahren

Der gesamte Messverlauf gliedert sich in drei Abschnitte. Als erstes erfolgt die Justage der Messkammer. Diese muss mit großer Sorgfalt durchgeführt werden, um Winkelfehler bei den folgenden Messungen möglichst klein zu halten. Im zweiten Teil werden XAS- und XMCD-Messungen zur Bestimmung der optischen Konstanten vorgenommen. Diese erfolgen bei konstantem Einfallswinkel θ , sollten allerdings um Selbstabsorptionseffekte auszugleichen bei zwei verschiedenen Winkeln erfolgen. Im dritten Abschnitt werden schließlich die eigentlichen resonanten sowie nichtresonanten Reflexionsmessungen durchgeführt.

2.2.4.1 Durchführung der Justage

Da der Detektor nicht höhenverstellbar ist, wird als erstes die Kammer mittels Elektromotoren auf die richtige Höhe eingestellt. Durch Höhenmarkierungen an der Wand und Markierungen am Boden lässt sich die exakte Höhe sowie die Lage des Drehpunktes des Detektors mit Hilfe einer Nivellieroptik genau in den Strahl setzen.

Um einen möglichst optimalen Strahl für die folgenden XRMR- und XMCD-Messungen zu bekommen, wird als nächstes der Eingangsspalt iterativ so eingestellt, dass das Maximum des Strahls in der Mitte des gaußförmigen Strahlprofils liegt und die Außenflanken durch Schließen der Blende abgeschnitten werden. Optimale Blendenöffnung ist erreicht, wenn nur noch die halbe Intensität hindurch gelangt. Um den Detektor auf 0° zu eichen wird der Probenkomplex mit Hilfe des XYZ-Manipulators aus dem Strahl gefahren und mit einem „ 2θ -Scan“ das Intensitätsmaximum gesucht. Anschließend wird die Probenachse so eingestellt, dass sie exakt mit der Detektorachse übereinstimmt. Zur Eichung des Probenwinkels θ wird die Probe auf mehrere fixe Winkel gesetzt und mit „ 2θ -Scans“ die Intensitätsmaxima gesucht. Die gleiche Eichung ist auch durch „ θ -Scans“ der Probe bei fixem Detektorwinkel 2θ möglich. Diese sog. „Rockingscans“ erweisen sich in der Praxis jedoch als ungeeigneter.

Da ein Einblick in die Kammer nur über ein Fenster möglich ist, gestaltet sich die gesamte Justage in der praktischen Durchführung als sehr komplex, da zudem zur Kontrolle der Proben- und Detektorwinkel sowie der Probenposition mehrere, bei verschiedenen Winkeln durchgeführte „Scans“ nötig sind.

2.2.4.2 XAS- und XMCD-Experimente

Diese bereits erwähnten XAS- und XMCD-Experimente dienen neben der Bestimmung der optischen Konstanten zur Energieeichung. Mit Hilfe der gemessenen und der Position der bekannten Resonanzen der einzelnen Elemente lassen sich auftretende „Energieshifts“ eliminieren.

Die klassische XMCD-Methode, bei der das Verhältnis von einfallender und transmittierter Intensität gemessen wird, lässt sich wegen der geringen mittleren freien Weglänge der Photonen im weichen Röntgenbereich nur in Ausnahmefällen anwenden. Indirekt können solche Spektren jedoch durch Messungen des Probenstromes (TEY) und durch Messungen der Fluoreszenzintensität ermittelt werden. Beide Methoden und deren Probleme sollen im Folgenden kurz erörtert werden.

Bei der Absorption von Röntgenstrahlung treten neben den durch den Photoeffekt erzeugten Elektronen auch über Auger-Prozesse erzeugte Sekundärelektronen mit der mittleren freien Weglänge ξ auf [BRA83]. Haben diese genügend Energie, gelangen sie an die Probenoberfläche und können die Probe verlassen. Das Verhältnis von Probenstrom und der Eingangintensität ist proportional zum Absorptionskoeffizienten. Um dabei eine größere Ausbeute an Elektronen zu erzielen wird die Probe auf ein negatives Potential gesetzt. In Abbildung 22 ist der schematische Aufbau des TEY-Messverfahrens gezeigt.

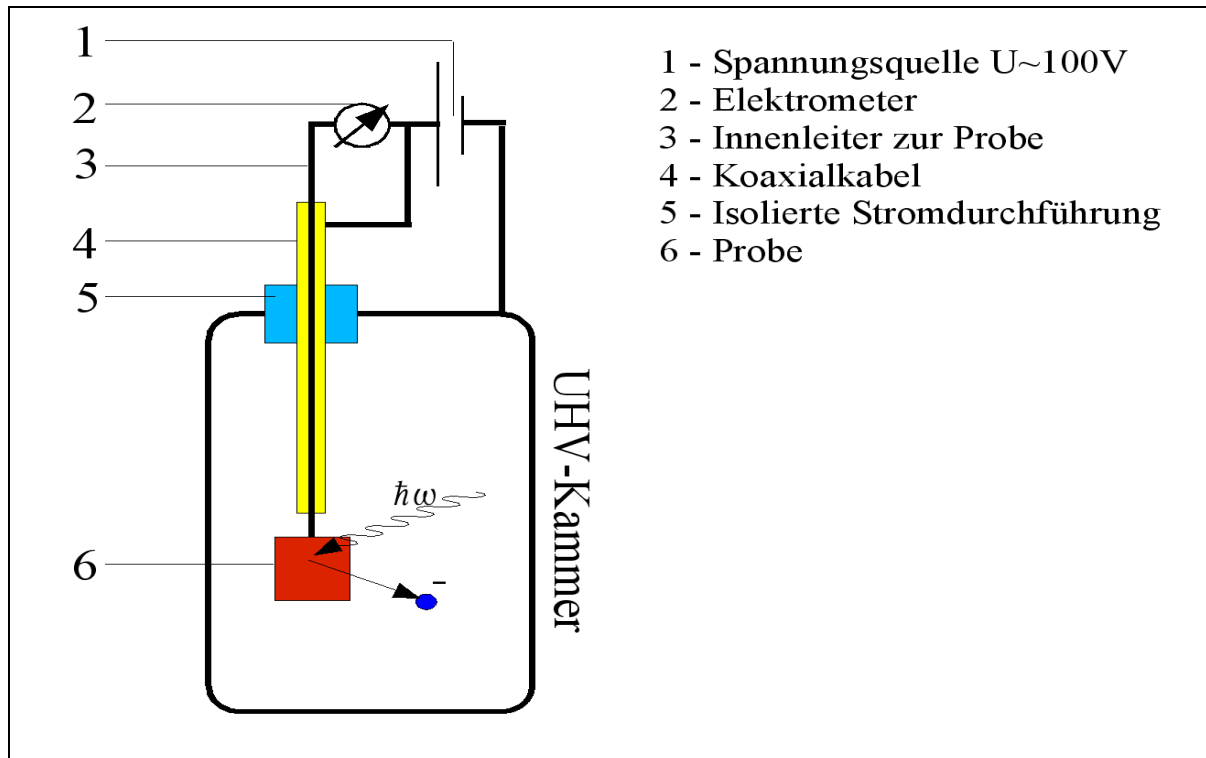


Abbildung 22: Schematischer Aufbau der TEY-Messmethode zur Messung von Strömen im Femtoamperebereich. Zur Abschirmung sind der Außen- und Innenleiter des Koaxialkabels auf das gleiche Potential gesetzt (aus [HAR05]).

Der Nachteil dieser Methode ist, dass nur Elektronen, welche aus einer Tiefe von ca. $d < 3\xi$ erzeugt wurden, die Probenoberfläche erreichen und detektiert werden können. Da ξ in der Größenordnung von einigen nm liegt [CHA98], [NAK99], [HUN95], ist diese Methode nur empfindlich auf wenige Atomlagen, so dass tiefer vergrabene Schichten mit ihr nicht vermessen werden können.

Liegen die zu untersuchenden Schichten unter anderen Schichten vergraben, besteht die Möglichkeit die durch den Absorptionsprozess entstehende Fluoreszenzstrahlung mit Hilfe einer Photodiode zu messen. Der Quotient aus dem Diodenstrom und der Eingangsintensität ist proportional zum Absorptionskoeffizienten. Mit dieser Methode lassen sich Schichten bis zu einer Tiefe von 100nm untersuchen. Sind die Schichten jedoch zu sehr vergraben, so dass die Messgenauigkeit nicht mehr ausreicht um derartige Signale aufzulösen, müssen Referenzdaten aus aufgenommenen Spektren verwendet werden [CHE95], welche ebenfalls auf die theoretischen Werte aus einatomarer Rechnung normiert werden können [HEN93].

Mit beiden Methoden lassen sich neben XAS-Spektren, durch Anlegen eines Magnetfeldes und unter Verwendung von zirkular polarisierter Strahlung, dichroische Energiespektren aufnehmen, aus denen die magnetischen optischen Konstanten bestimmt werden können.

2.2.4.3 Systematische Fehler bei XAS- und XMCD-Messungen

Auf zwei wesentliche Fehlerquellen bei der Bestimmung der optischen Konstanten soll im Folgenden kurz eingegangen werden. Diese sind die Selbstabsorption und die Beeinflussung durch das angelegte Magnetfeld.

1. Selbstabsorption

Besonders im Bereich der „Weißen Linien“ werden sowohl das TEY als auch Fluoreszenzmessungen durch die sog. Selbstabsorption beeinflusst. Da der Absorptionskoeffizient in diesen Energiebereichen drastisch zunimmt, verringert sich die Eindringtiefe der Photonen derart, dass diese im Bereich der mittleren freien Weglänge der Sekundärelektronen ξ liegt. Dies hat zur Folge, dass der gemessene Proben- bzw. Photostrom nicht mehr proportional zum Absorptionskoeffizienten ist und im Bereich der Resonanz verkleinert ist. Durch Messungen unter mindestens zwei verschiedenen Einfallswinkeln kann der durch diesen Effekt auftretende Fehler durch eine Selbstabsorptionskorrektur eliminiert werden [CHA98].

2. Beeinflussung durch das Magnetfeld

Insbesondere bei Messungen des Probenstroms (TEY) kann es zu einer nicht auf den XMCD-Effekt zurückführbaren Differenz im Bereich der magnetischen Spektren kommen [GOE01]. Dieser entsteht durch den Einfluss des Magnetfeldes auf die Flugbahn der aus der Probe austretenden Photoelektronen, welche durch die Lorentzkraft auf Kreis- bzw. Spiralbahnen gezwungen werden. Dadurch kann es fälschlicherweise auch bei nichtresonanten Energien zum Auftreten eines „Pseudo-XMCD-Effekts“ kommen. Die Größenordnung dieser Fehlerquelle lässt sich abschätzen und korrigieren, z.B. durch Messungen mit entgegengesetzter Photonenhelizität [GOE01].

Neben der TEY-Messung ist insbesondere auch die Fluoreszenzmessung durch diesen Effekt betroffen, da auf die Photodiode neben Fluoreszenzstrahlung auch Photoelektronen fallen, welche von dieser registriert werden. Durch Anlegen eines negativen Potentials lässt sich dieser Effekt jedoch minimieren [GOE06].

2.2.4.4 Reflexionsmessungen

Reflexionsspektren werden bei konstanter Energie in θ - 2θ -Geometrie durchgeführt. Die Winkelschritte im weichen Röntgenbereich liegen dabei typischerweise im Bereich von $0,05^\circ$ bis $0,2^\circ$. Dies stellt hohe Anforderungen an die Winkelgenauigkeit der Schrittmotoren der Probeneinheit und des Detektors. Die winkelabhängige Reflektivität ist gegeben durch $R = I_1/I_0$, wobei I_1 das Detektorsignal und I_0 das Signal der Eingangsintensität ist. Die Eingangsintensität wird in den meisten Fällen mit dem im vorderen Teil der Apparatur angebrachten Goldgitter gemessen. Lediglich bei Messungen in Energiebereichen, die derjenigen einer Goldresonanz entsprechen, wird für das I_0 -Signal der Spiegelstrom der „Beamline“ zur Auswertung genommen. Zur Bestimmung der Reflektivitäten wird als erstes die gewünschte Energie und die gewünschte Helizität eingestellt. Anschließend wird für jeden Winkel θ die Reflektivität gemessen. Bei dichroischen Messungen wird bei jedem Messpunkt die Magnetisierungsrichtung durch den Elektromagneten gewechselt. Eine Variante wäre bei konstantem Magnetfeld die Helizität für jeden Messpunkt zu wechseln. Dies wird allerdings aufgrund des enormen Zeitverlustes in der Praxis nicht durchgeführt. Die Methode mit dem Wechsel der Magnetisierung hat durch die Zeitersparnis zusätzlich den Vorteil, dass eventuelle „Drifts“ der Energie durch die kürzere Dauer des Experiments minimiert werden. Um etwaige „Offsets“ zu eliminieren wird das dichroische Reflexionsexperiment mit umgekehrter Helizität wiederholt.

2.2.4.5 Systematische Fehler bei Reflexionsexperimenten

Auf zwei mögliche, systematische Fehlerquellen, welche insbesondere bei den Reflexionsexperimenten auftreten und für die Auswertung der Messdaten von Bedeutung sein können soll im Folgenden kurz eingegangen werden.

- Aufgrund von eventuellen Nichtlinearitäten des Detektors können die einzelnen Reflexionsspektren mit einem nichtkonstanten „Offset“ versehen sein. Da dieser „Offset“ mit einer Funktion im Reflexionsspektrum dargestellt werden kann und auf R^0 , R^+ und R^- in gleicher Weise wirkt, kürzt sich dieser sofern magnetische Messungen durchgeführt werden bei der Bildung des Asymmetrieverhältnisses heraus.

- Ist die Probenachse etwas in Strahlrichtung verschoben kann der Strahl für gewisse Winkelbereiche teils aus dem Detektor wandern. Dieser Effekt hat die gleichen Auswirkungen wie die Nichtlinearitäten des Detektors und lässt sich bei magnetischen Messungen ebenfalls über die Bildung der Asymmetrie herauskürzen.

2.2.4.6 Winkelauflösung eines Reflexionsexperimentes

Durch die Blendenöffnung, die Strahldivergenz und die limitierte Energieauflösung ist die Winkelauflösung eines Reflexionsexperiments begrenzt. Aus dem theoretischen Wert der Reflektivität $R(q_z)$ ohne Winkeldivergenz wird ein integraler Wert $R(q_z+dq_z)$. Wegen der daraus resultierenden Verschmierung der Interferenzbedingungen durch Überlagerung verschiedener, unter minimal anderem Winkel einfallenden Strahlen sind die Maxima und insbesondere die Minima in der Reflexionskurve gedämpft (vgl. Abbildung 23).

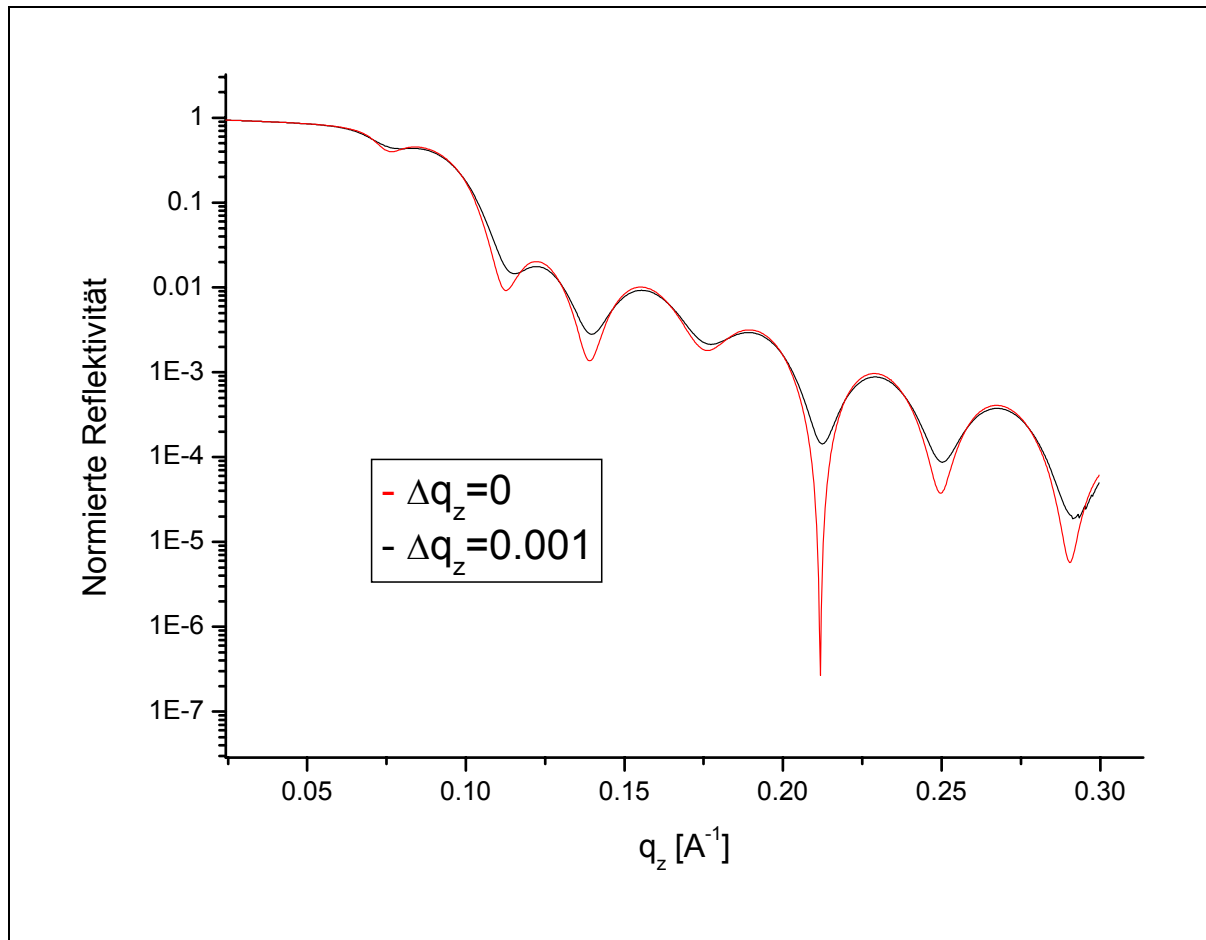


Abbildung 23: Darstellung zweier simulierter Reflektivitäten eines beliebigen Schichtstapels mit unterschiedlicher Winkelauflösung Δq_z . Auffällig ist die Ausprägung im Bereich der Minima.

Zur Auswertung und zur Simulation der Reflektivitäten und der Asymmetrien ist daher die Kenntnis der Auflösung essentiell. Für die Simulation wird das gemessene Strahlprofil angenähert, indem die Reflektivität an jedem Punkt $R(q_z)$ über die Summe der einzelnen Reflektivitäten, welche mit einer auf 1 normierten Gaußfunktion $G(i)$ gewichtet werden, berechnet.

$$R(q_z) = \sum_{i=0-k}^k R_i(q_z + i/k\Delta q_z) \cdot G(i) \quad (2.31)$$

Nach de Jeu [JEU96] kann man die Auflösung für den harten Röntgenbereich, in welchem die Kleinwinkelnäherung gilt, über die Fläche $A_E = \Delta q_x \cdot \Delta q_z$ im reziproken Raum abschätzen. Die Komponenten des Wellenvektorübertrages sind dabei, wie in Abbildung 24 zu sehen ist, gegeben durch:

$$q_z = k(\sin \alpha_i + \sin \alpha_f) \quad (2.32)$$

$$q_x = k(\cos \alpha_f + \cos \alpha_i) \quad (2.33)$$

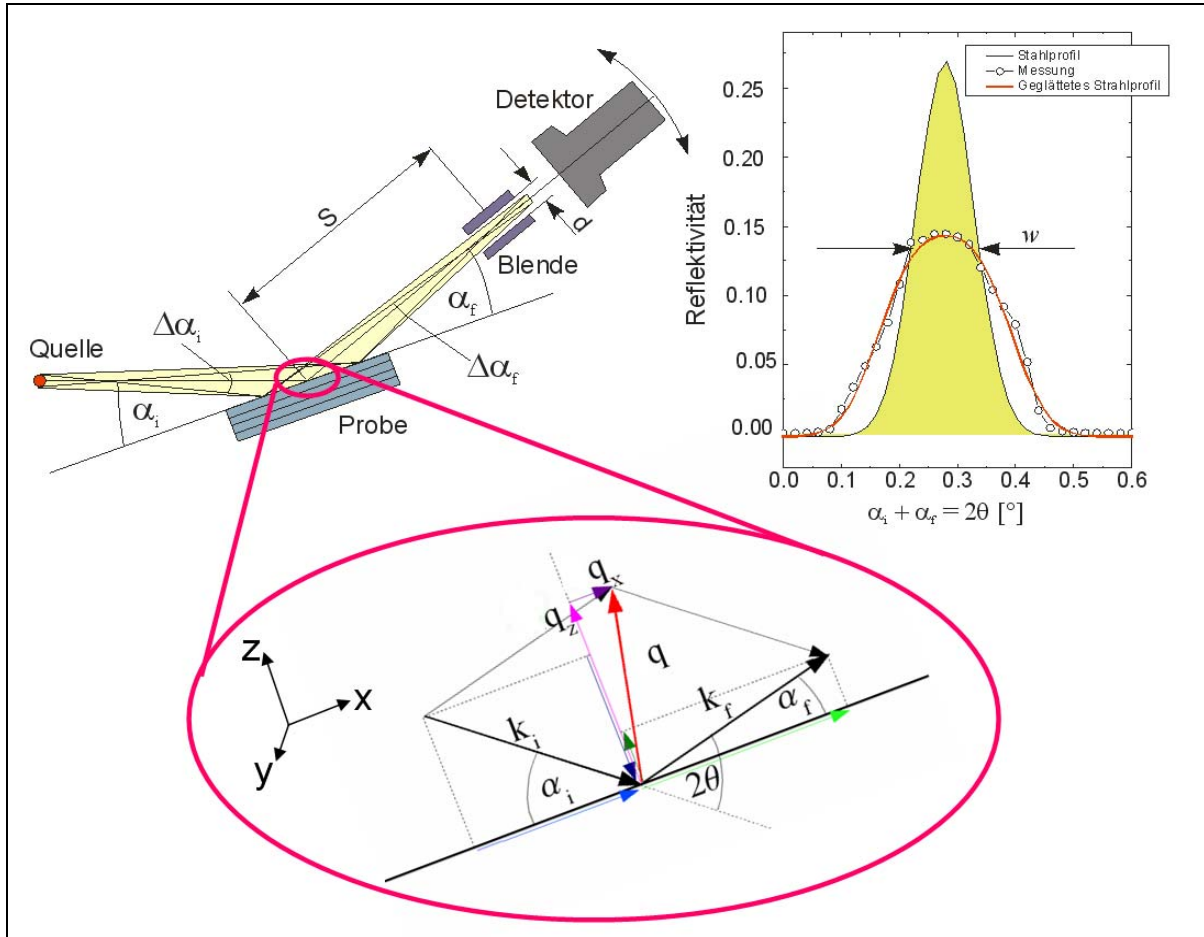


Abbildung 24: Links: Schematische Darstellung des Strahlengangs zur Herleitung der Winkeldivergenz. Rechts: Vergleich des wirklichen und des gemessenen Strahlprofils [HAR05].

Bildet man daraus das Differenzial, so erhält man für die beiden Komponenten:

$$\Delta q_z = k(\Delta\alpha_i \sin \alpha_i - \Delta\alpha_f \sin \alpha_f) + \Delta k(\cos \alpha_f - \cos \alpha_i) \quad (2.34)$$

$$\Delta q_x = k(\Delta\alpha_i \cos \alpha_i + \Delta\alpha_f \cos \alpha_f) + \Delta k(\sin \alpha_i + \sin \alpha_f), \quad (2.35)$$

wobei Δk ein Maß für die Energieauflösung ist. Diese führt ebenfalls zu einer Verbreiterung des Strahlprofils und ist im Allgemeinen um Größenordnungen kleiner als die

Winkelauflösung, so dass diese vernachlässigt werden kann. Unter der Annahme einer Gaußverteilung folgt für kleine Winkel für die Komponenten der Differenzbeträge der einzelnen Wellenvektoren:

$$\Delta q_z = k \sqrt{\Delta \alpha_i^2 + \Delta \alpha_f^2} \quad (2.36)$$

$$\Delta q_x = k \sqrt{\Delta \alpha_i^2 \alpha_i^2 + \Delta \alpha_f^2 \alpha_f^2} \quad (2.37)$$

Während Δq_x Einfluss auf die diffuse Streuung hat und für die spekulare Reflektometrie von untergeordneter Bedeutung ist, ist die Auflösung in Δq_z die für die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Messmethodik die relevante Größe. Diese kann näherungsweise auch im weichen Röntgenbereich als winkelunabhängige Konstante behandelt werden und ist notwendig für die Simulation der Reflektivitäten und Asymmetrien.

2.3 Auswertung und Diskussion der Messergebnisse

In diesem Kapitel soll zuerst das Probensystem vorgestellt werden, gefolgt von XMCD-Messungen zur Bestimmung der optischen Konstanten der relevanten Absorptionskanten. Anschließend werden die eigentlichen XRMR-Experimente dargestellt und diskutiert, wobei auf verschiedene Magnetisierungsverläufe eingegangen wird. Den Schluss dieses Kapitels bildet eine Fehlerbetrachtung und eine Diskussion.

2.3.1 Das Probensystem

Bei der Probe handelt es sich um einen „Co₉₀Fe₁₀/Cu/Co₉₀Fe₁₀-Trilayer“, aufgewachsen auf einem Siliziumsubstrat mit einer dünnen SiO₂-Zwischenschicht. Das Schichtsystem ist mit einer Cr-Schicht abgedeckt, um sie vor Korrosion zu schützen. Die Probe wurde mittels „Magnetron-Sputtern“ [LAN98] von der Firma Robert Bosch GmbH hergestellt. In Abbildung 25 ist der schematische Aufbau des Schichtstapels zu sehen. Die Probe wird im Folgenden als „MPI2“ bezeichnet.

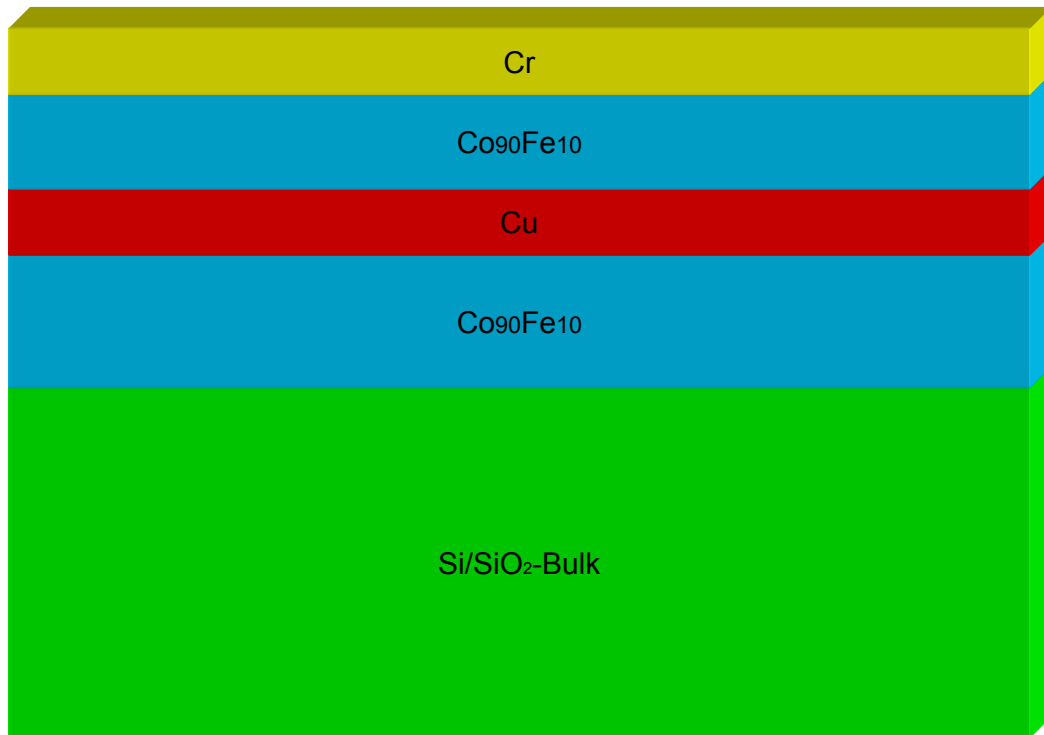


Abbildung 25: Schematischer Aufbau der Probe MPI2.

Eine detaillierte Beschreibung der Dicken und Grenzflächenrauigkeiten erfolgt bei der Auswertung der Reflexionsspektren in Kapitel 2.3.3.

2.3.1.1 Makroskopische Magnetisierung des Probensystems

Um Aussagen über das makroskopische Magnetisierungsverhalten des Schichtstapels machen zu können, wurden SQUID-Messungen (Superconducting Quantum Interference Device) durchgeführt. Bei dem Probensystem kommt es aufgrund von Anisotropieeffekten zur Ausbildung unterschiedlicher Magnetisierungsrichtungen, wobei beide Achsen wie auch alle folgenden Messungen am Synchrotron bei einer Temperatur von $T = 300\text{K}$ gemessen wurden. Beide Richtungen sind in Abbildung 26 dargestellt.

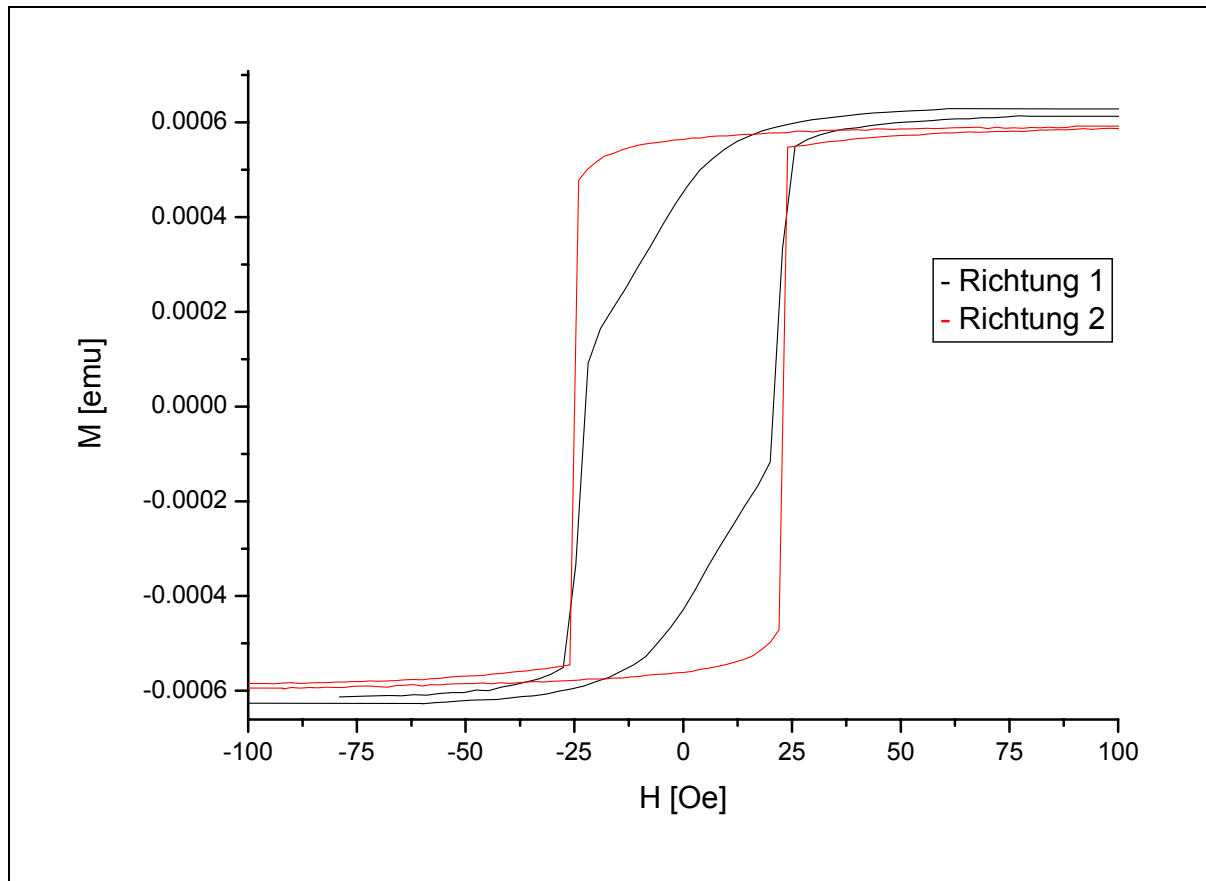


Abbildung 26: SQUID-Hysterese der Probe MPI2. Auffallend ist die vorhandene „in-plane“ orientierte Anisotropie.

Beide Richtungen weisen ein Koerzitivfeld von ca. $H_c \sim 23\text{Oe}$ auf, wobei ein geringer Unterschied von Richtung 1 zu Richtung 2 zu erkennen ist.

Vorweg ist zu bemerken, dass die untere Co/Fe-Schicht etwa dreimal so dick ist wie die durch die Cu-Zwischenschicht getrennte Obere. Auffallend ist nun, dass in Richtung 1 das System an Gesamtmoment verliert noch bevor das externe Feld umschaltet. Dies könnte so gedeutet werden, dass das System versucht sein Streufeld zu minimieren indem die obere dünne Schicht langsam seine Magnetisierung dreht, so dass eine energetisch günstigere antiparallele Anordnung entsteht. Dies könnte auch quantitativ mit der Schichtdickenverteilung (vgl. Kapitel 2.3.3) der beiden Co/Fe-Schichten in Einklang gebracht werden.

Kerr-Messungen an dem Schichtsystem zeigten jedoch, dass es nicht zu einer schrittweisen tiefenabhängigen Änderung der Magnetisierung und schließlich zu einer antiparallelen Geometrie sondern zur Ausbildung einzelner Domänen kommt, wodurch eine XRMR-Messung in dieser Geometrie leider nicht möglich war (vgl. Abbildung 27).

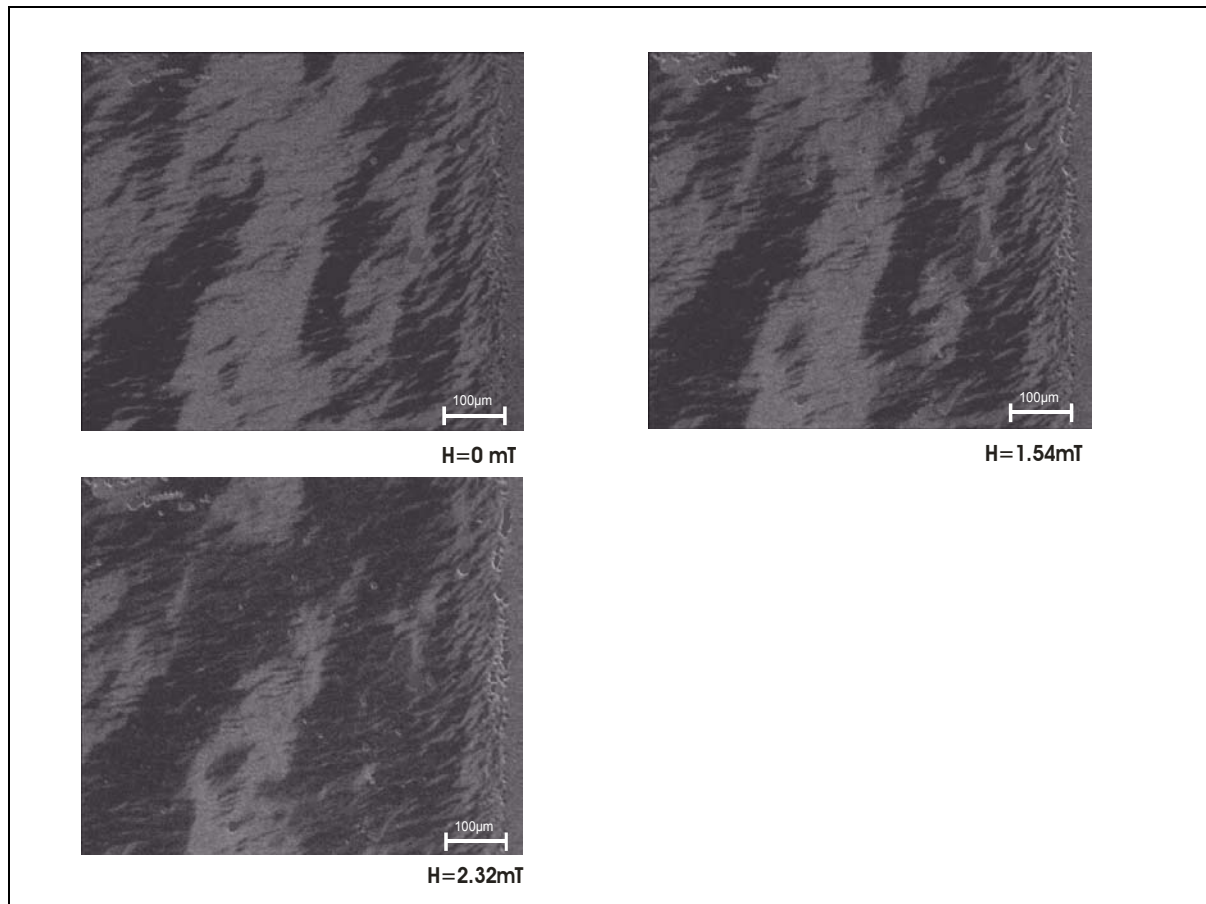


Abbildung 27: Kerr-Aufnahmen der Probe MPI2 bei verschiedenen äußeren Magnetfeldern. Deutlich zu erkennen sind die Ausbildungen von Domänen.

Um dies nochmals zu verdeutlichen ist in Abbildung 28 eine am Synchrotron an der CoL_3 -Kante bei Raumtemperatur im TEY-Modus gemessene Hysterese dargestellt.

Dabei ist zu beachten, dass die Hysterese im Total Electron Yield Modus aufgenommen wurde, welcher aufgrund der geringen Austrittstiefe der Elektronen in erster Linie auf die obersten Monolagen sensitiv ist. Dies bestätigt jedoch die mittels Kerr-Messungen ermittelte Domänenbildung.

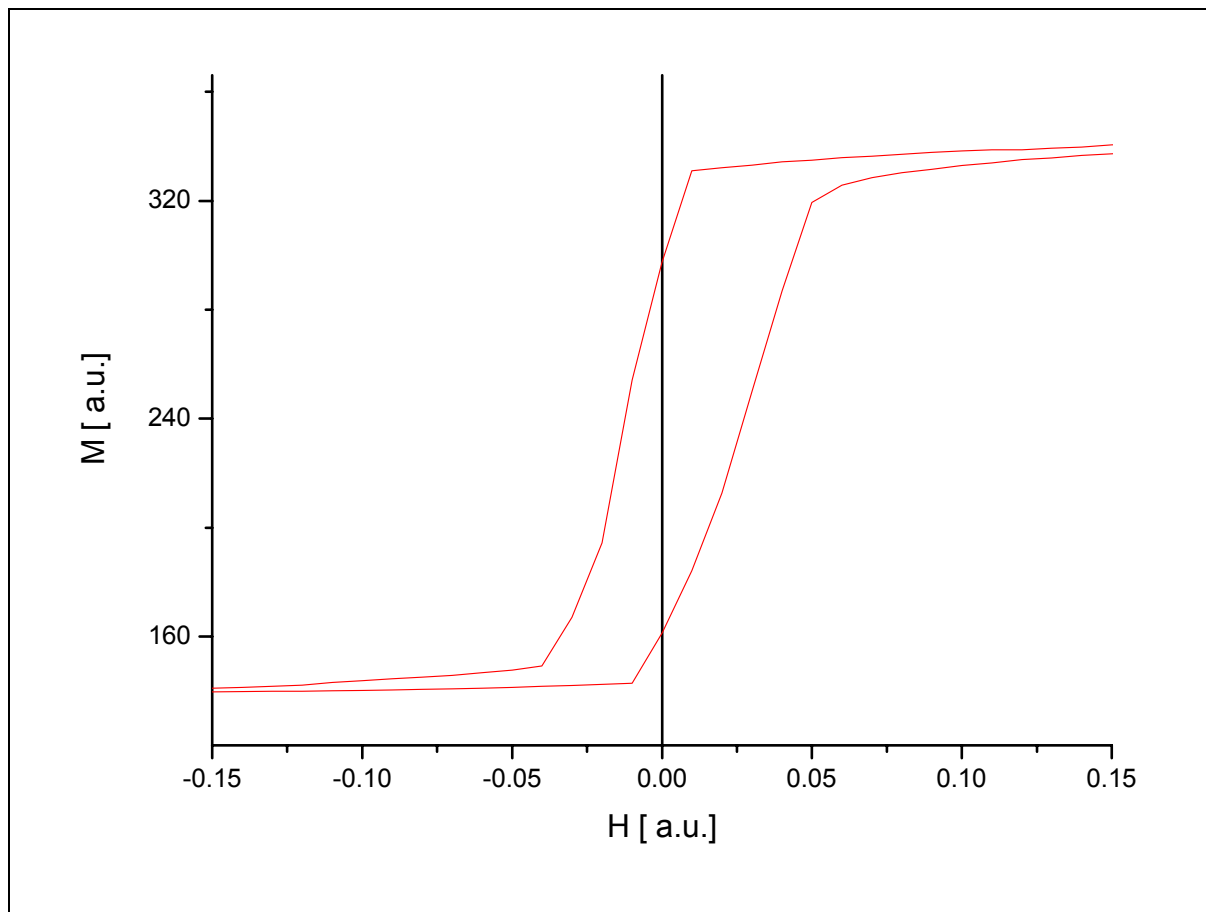


Abbildung 28: Hysteresis aufgenommen an der CoL_3 -Kante bei BESSY II mittels TEY in Richtung 1 zur Veranschaulichung des qualitativen Verlaufs der Magnetisierung.

2.3.2 Bestimmung der optischen Konstanten

Wegen der starken Abweichung der optischen Konstanten im Bereich der Absorptionskanten von den aus atomaren Rechnungen stammenden Werten, ist es wie bereits erwähnt besonders wichtig diese über ein separates XAS- bzw. XMCD-Experiment zu bestimmen. Besonders ausgeprägt sind die Unterschiede bei Elementen mit großen „weißen Linien“ wie in diesem Fall an der CoL_3 - und der CoL_2 -Kante.

Die Bestimmung der optischen Konstanten wurde mit dem in Kapitel 2.2.4.2 beschriebenen Verfahren durchgeführt. Die klassische Bestimmung dieser über ein Transmissionsexperiment ist jedoch wegen der zu großen Absorption der Strahlung im weichen Röntgenbereich nicht möglich, weshalb die Messungen an der für weitere Messungen relevanten CoL_3 - und CuL_3 -Kante im TEY-Modus und/oder mit Hilfe einer Fluoreszenzdiode durchgeführt wurden.

2.3.2.1 Bestimmung der optischen Konstanten von Kobalt

Zur Bestimmung der optischen Konstanten an der CoL_3 - und an der CoL_2 -Kante wurden Messungen im TEY und mit einer Fluoreszenzdiode durchgeführt. Zur weiteren Auswertung wurden jedoch nur diejenigen, welche im TEY-Modus durchgeführt wurden, weiter verwendet, da diese um ein Vielfaches rauschärmer waren. Die gemessenen Spektren wurden wie in Kapitel 2.1.1.2 beschrieben auf die tabellierten, aus atomaren Rechnungen stammenden Werte [HEN93] normiert. Dazu wurden die gemessenen, bereits auf die Eingangsintensität normierten Daten mit einer in der Energie linearen Funktion multipliziert und anschließend zu einer Konstanten addiert.

2.3.2.1.1 Beiträge aus dem Ladungsterm

In Abbildung 29 sind der absorptive und der dispersive Anteil des Ladungsterms im Bereich der $\text{CoL}_{2,3}$ -Kante dargestellt. Der dispersive Anteil wurde mittels der in Kapitel 2.1.1.2 beschriebenen Kramers-Kronig-Relation durch Integration über einen Energiebereich von $E = 30\text{eV}$ bis $E = 30000\text{eV}$ bestimmt. Eine darauf folgende Rückrechnung bestätigte das Ergebnis, wobei nach jeder Integration die neu gewonnenen Daten mit einer Integrationskonstante versehen werden müssen, so dass die bestimmten und tabellierten Werte im Bereich fern ab der Absorptionskanten deckungsgleich sind.

Noch zu erwähnen sei, dass neben der Bestimmung der optischen Konstanten über ein XAS-Experiment dies auch zur Energieeichung des Undulators dient. Da jedoch keine Korrekturen vorgenommen werden mussten, da die Abweichungen minimal waren und für die weiteren XRMR-Experimente nicht relevant waren, soll auf eine ausführliche Darstellung dieses Vorganges verzichtet werden. Zusätzlich kann es aufgrund der Legierung zu minimalen Verschiebungen der Kante kommen. Auf diesen Effekt soll jedoch nicht weiter eingegangen werden, da er für die hier relevanten Messungen ebenfalls nicht von Bedeutung ist.

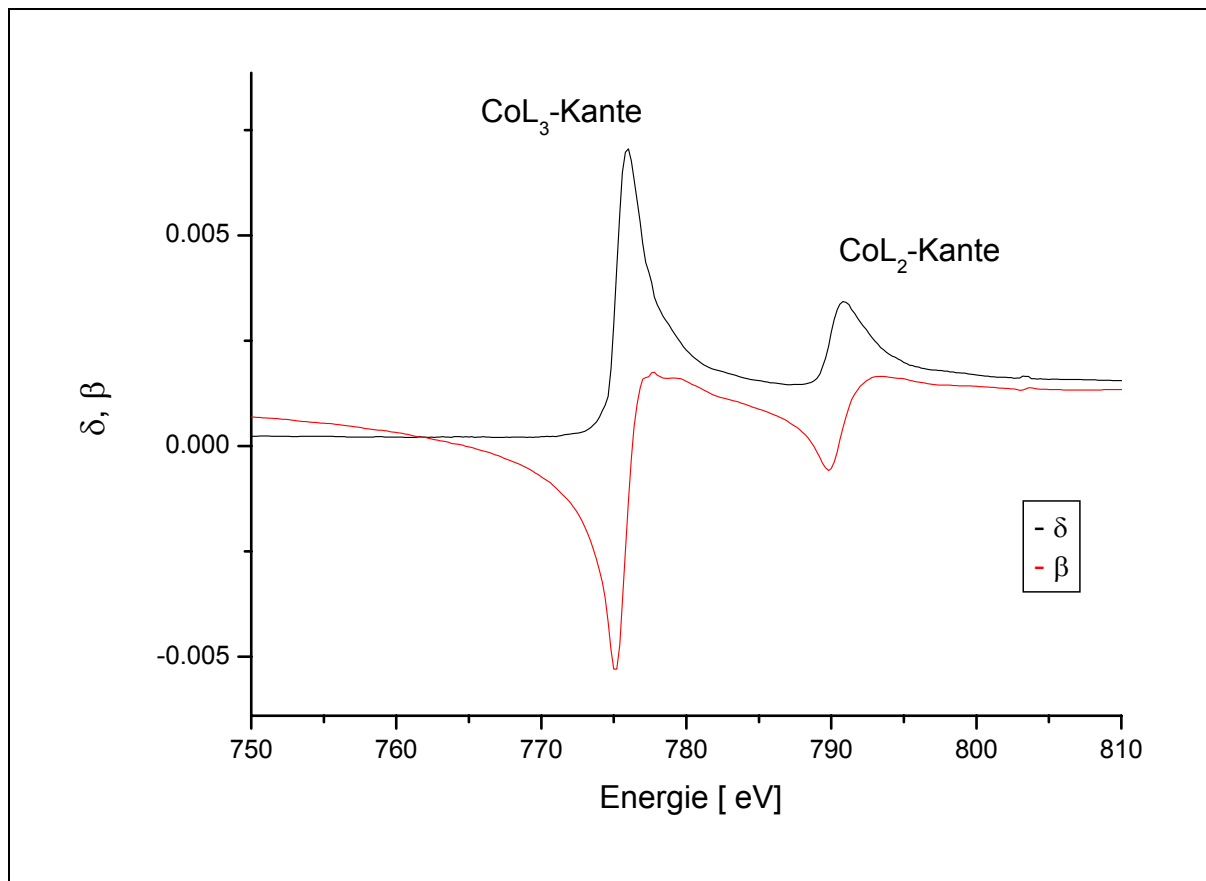


Abbildung 29: Auf atomare Rechnungen normierte mittels TEY gemessene optische Konstanten des Ladungsterms an der $\text{CoL}_{2,3}$ -Kante. Schwarz dargestellt der absorptive Anteil, rot der dispersive.

Die gemessenen und mit Hilfe der Kramers-Kronig-Relation berechneten Werte wurden mit denen von Geißler [GEI03] und von Chen et al. [CHE95] verglichen, um auf den Einfluss von Selbstabsorptionseffekten hinzu überprüfen. Dazu wurden sie an die Breite der einzelnen Absorptionskanten, hervorgerufen durch unterschiedliche Energieauflösungen im Experiment, angepasst. Bestimmt wurden die Werte von Delta und Beta bei der Energie von $E = 775,8\text{eV}$ zu $\beta = 6,96^{-3}$ und $\delta = -2,61^{-3}$, welche anschließend noch auf eine Kobaltkonzentration von 90% in der vorhandenen $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ -Legierung normiert wurden. Eine einfache 9:1-Mittelung ist dabei legitim, da beide Elemente die gleiche Kristallstruktur sowohl in elementarer Form als auch in Form dieser Legierung besitzen und die Gitterkonstanten beider Elemente annähernd gleich sind. Ein Vergleich mit theoretischen Rechnungen [HEN93] bestätigt ebenfalls die Korrektheit diese Vorgehensweise.

2.3.2.1.2 Beiträge aus dem magnetischen Term

Die magnetischen Beiträge $\Delta\beta$ und $\Delta\delta$ wurden nach dem gleichen Verfahren wie die Beiträge des Ladungsterms bestimmt, nur dass in diesem Fall die Probe aufmagnetisiert und mit zirkularem Licht gemessen wurde. Bestimmt wurde über ein XMCD-Experiment der absorptive Anteil $\Delta\beta$ und in einer anschließenden Kramers-Kronig-Rechnung der dispersive Anteil $\Delta\delta$ bestimmt, wobei im magnetischen Fall nur über den Kantenbereich und nicht über den gesamten Energiebereich integriert werden muss.

Um eventuelle Fehler im TEY aufgrund des Magnetfeldes zu eliminieren, wurde der Mittelwert aus Messungen mit umgepoltem Magnetfeld sowohl mit positiver als auch mit negativer Helizität durchgeführt. Da der zirkulare Polarisationsgrad bei allen XMCD-Messungen bei 90% lag, wurden die ermittelten Werte, auf 100% zirkulare Strahlung normiert. In Abbildung 30 sind die magnetischen optischen Konstanten für die $\text{CoL}_{2,3}$ -Kante dargestellt.

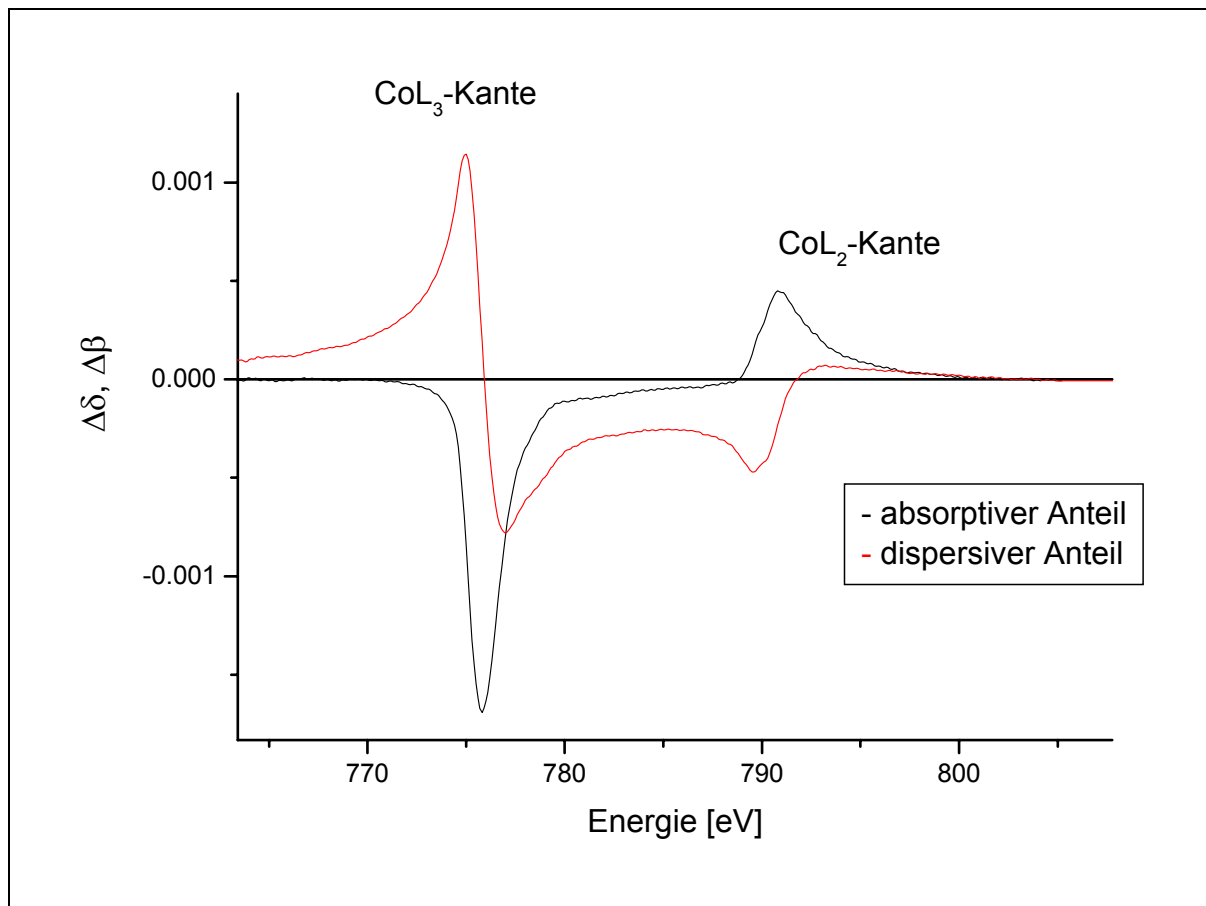


Abbildung 30: Magnetische optische Konstanten von Kobalt. Schwarz dargestellt der absorptive Anteil $\Delta\beta$, rot der dispersive Anteil $\Delta\delta$, welcher mittels Kramers-Kronig-Relation aus dem absorptiven Anteil errechnet wurde.

Der größte magnetische Effekt tritt bei einer Energie von $E = 775,8\text{eV}$ auf, wobei die Werte zu $\Delta\beta = -1,69^{-3}$ und $\Delta\delta = 1,93^{-4}$ bestimmt wurden. Eine Rückrechnung von $\Delta\delta$ auf $\Delta\beta$ bestätigt die Korrektheit der Ergebnisse. Diese wurden zudem mit den an einem Pt/Co/Cu-Schichtsystem experimentell bestimmten Werten von Geißler [GEI03] und mit Referenzdaten von Chen [CHE95] verglichen und bestätigt. Für die weiteren Auswertungen der XRMR-Spektren wurden die gewonnenen Werte wegen der $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ -Legierung mit 0,9 multipliziert, da Eisen bei dieser Energie keinen magnetischen Effekt zeigt.

Alle hier durchgeführten Kramers-Kronig-Rechnungen wurden mittels einem in Microcal Origin eingebundenen Programm durchgeführt. Da es sich bei der verwendeten TEY-Methode um eine eher oberflächensensitive Methode handelt, kann es aufgrund von Erhöhungen bzw. Erniedrigungen der magnetischen Momente an der obersten Grenzfläche zu Änderungen von $\Delta\beta$ und $\Delta\delta$ kommen. Diese müssen bei der Simulation der Asymmetrien dementsprechend korrigiert werden.

2.3.2.2 Bestimmung der optischen Konstanten von Kupfer

Zur Bestimmung der optischen Konstanten von Kupfer wurden analog zur Bestimmung derjenigen von Kobalt TEY-Messungen und Messungen mit der Fluoreszenzdiode durchgeführt. Da die zu untersuchende Kupferschicht unter der Chrom- und Kobalt/Eisen-Schicht vergraben ist, war im TEY kein brauchbares Absorptionssignal zu sehen, so dass lediglich die Spektren aus der Fluoreszenzmessung zur weiteren Auswertung verwendet werden konnten. Analog zu denen an der CoL-Kante wurden die gemessenen Spektren wie in Kapitel 2.1.1.2 beschrieben auf die tabellierten, aus atomaren Rechnungen bestimmten Werte [HEN93] normiert. Dazu wurden diese, welche bereits auf die Eingangsintensität normiert wurden, mit einer in der Energie linearen Funktion multipliziert und anschließend zu einer Konstanten addiert. Selbstabsorptionseffekte spielen hierbei aufgrund der viel größeren Austrittslänge im Vergleich zur Schichtdicke keine Rolle, so dass auf weitere Vergleiche mit Referenzmessungen verzichtet werden konnte.

2.3.2.2.1 Beiträge aus dem Ladungsterm

In Abbildung 31 sind der absorptive und der dispersive Anteil des Ladungsterms im Bereich der CuL₃-Kante dargestellt. Analog zur Bestimmung an der CoL₃-Kante wurde der dispersive Anteil mittels der in Kapitel 2.1.1.2 beschriebenen Kramers-Kronig-Relation durch Integration über einen Energiebereich von $E = 30\text{eV}$ bis $E = 30000\text{eV}$ bestimmt. Eine darauf folgende Rückrechnung bestätigte wiederum das ermittelte Ergebnis.

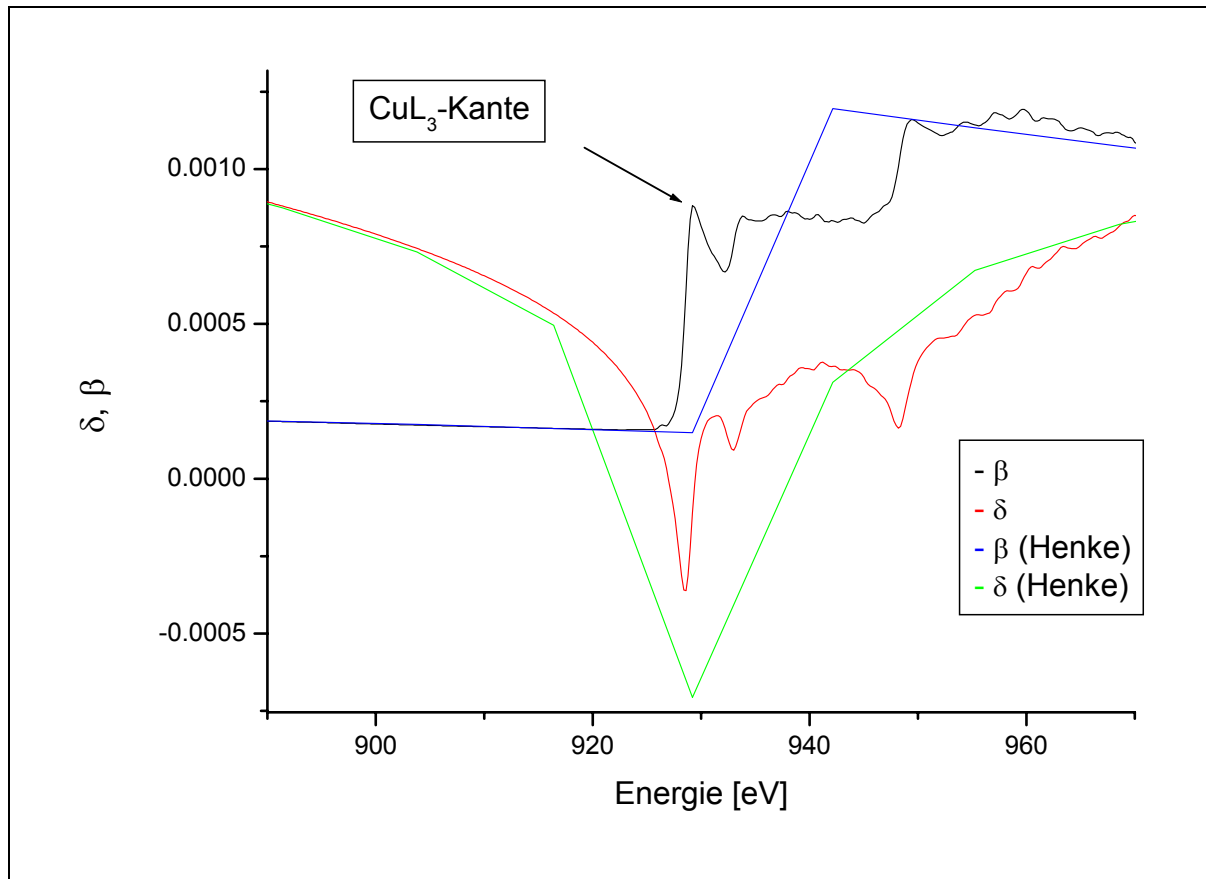


Abbildung 31: Auf atomare Rechnungen normierte optische Konstanten des Ladungsterms von Kupfer. Schwarz dargestellt der absorptive Anteil, rot der über die Kramers-Kronig-Relation berechnete dispersive Anteil. Blau und grün dargestellt die Werte für δ und β aus atomarer Rechnung [HEN93].

Da es sich wie bereits erwähnt um eine tiefer unten liegende Schicht handelt, ist dieses Spektrum mit mehr Rauschen versehen als die Spektren an der CoL-Kante. Die späteren XRMR-Messungen wurden bei einer Energie von $E = 929,2\text{eV}$ durchgeführt. Dort wurden die Werte für die optischen Konstanten zu $\beta = 8,8^{-4}$ und $\delta = -9,8^{-5}$ bestimmt.

2.3.2.2.2 Beiträge aus dem magnetischen Term

Die magnetischen Beiträge $\Delta\beta$ und $\Delta\delta$ konnten aufgrund der extrem kleinen magnetischen Effekte von Kupfer, welche durch die 3d-3d-Hybridisierungen [SAM94] an der Grenzfläche zum Kobalt hervorgerufen werden, experimentell nicht bestimmt werden, da das Signal-Rausch-Verhältnis zu schlecht war. Deshalb wurde in diesem Fall auf experimentell bestimmte Referenzwerte von Samant zurückgegriffen [SAM94], wobei direkt auf der CuL₃-

Kante, an der auch die folgenden XRMR-Messungen durchgeführt wurden, der absorptive Anteil zu $\Delta\beta = -6,6E-5$ bestimmt wurde. Der dispersive Anteil verschwindet bei dieser Energie.

2.3.3 Bestimmung der Schichtdicken und Rauigkeiten

Zur Bestimmung der Schichtdicken und Grenzflächenrauigkeiten wurden Reflexionsspektren bei verschiedenen Energien durchgeführt und mit dem neu entwickelten Programm ausgewertet.

Bevor jedoch auf die eigentlichen Reflexionsspektren eingegangen wird, soll kurz die Winkeldivergenz erwähnt werden. Diese wurde experimentell von den Beamline-Betreuern bei einer Energie von $E = 1000\text{eV}$ bestimmt zu $\Delta\alpha/\alpha = 0,009$. Wie auch bei den folgenden Messungen mit verschiedener Energie handelte es sich dabei um einen fokussierten Strahl. Dieser ermittelte Wert kann für andere Energien etwas abweichen, wobei eine minimale Verschlechterung der Auflösung für kleinere Energien beobachtet wird, so dass diese Größe bei der Simulation der Reflektivitäten und Asymmetrien in geringem Maße mit variiert werden muss.

Wegen den großen Änderungen der optischen Konstanten und dem daher verbundenen großen Kontrast zwischen den einzelnen Schichten, wurden neben nichtresonanten Reflexionsmessungen bei einer Energie von $E = 1100\text{eV}$ auch resonante Reflexionsspektren aufgenommen und mit dem in Kapitel 2.1.3 beschriebenen, neu entwickelten Programm simuliert. Die gemessenen Spektren sowie die simulierten Reflektivitäten und die ermittelten Parameter sind in Abbildung 32 dargestellt.

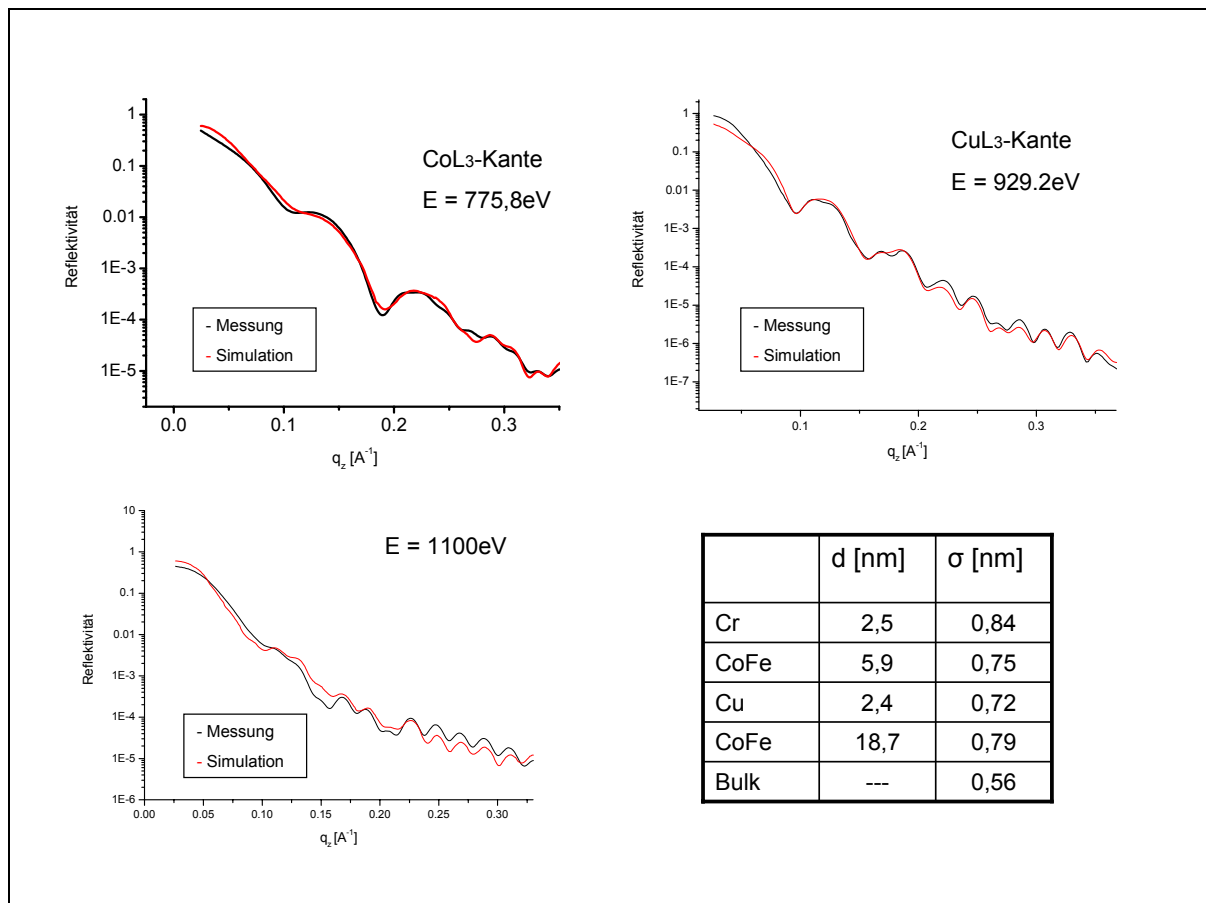


Abbildung 32: Gemessene und simulierte Reflexionsspektren der Probe MPI2 an der CoL₃-Kante, an der CuL₃-Kante sowie bei einer Energie von E = 1100eV zur Bestimmung des chemischen Profils. In der Tabelle rechts unten sind die Werte für die Dicken d und Rauigkeiten σ der einzelnen Schichten dargestellt.

2.3.4 Bestimmung des Magnetisierungsverlaufes des Schichtsystems

Zur Bestimmung des Magnetisierungsverlaufes des CoFe/Cu/CoFe-Schichtsystems wurden dichroische Reflexionsspektren an der CoL₃- und an der CuL₃-Kante durchgeführt bei denen ein äußeres Magnetfeld von $B = \pm 25\text{mT}$ angelegt wurde, sodass die Probe vollständig gesättigt war. Aus den dabei gemessenen Asymmetrieverhältnissen wurden verschiedene Modelle zur Beschreibung der Grenzflächenmagnetisierung der Kobaltschichten und der induzierten Magnetisierung im Kupfer simuliert. Nach der Beschreibung der Messung der Asymmetrieverhältnisse sollen verschiedene Magnetisierungsmodelle vorgestellt und

diskutiert werden. Dazu werden die magnetischen Beiträge der Kobalt-Eisen-Legierungen und der Kupferschicht in zwei aufeinander folgenden Kapiteln dargestellt.

2.3.4.1 Messung des Asymmetrieverlaufes

Die Messung der Asymmetrieverläufe wurde wie in Kapitel 2.2.4 beschrieben am helischen Undulator UE46-PGM bei BESSY durchgeführt. Messungen zur Bestimmung des Magnetisierungsprofils der Kobalt-Eisen-Legierungen wurden an der CoL_3 -Kante bei einer Energie von $E = 775,8\text{eV}$ durchgeführt. Die Untersuchung induzierter magnetischer Effekte im Kupfer, wurden an der CuL_3 -Kante bei einer Energie von $E = 929,2\text{eV}$ durchgeführt. An beiden Energien wurden Messungen mit unterschiedlicher Helizität durchgeführt und anschließend der Mittelwert gebildet. Eine Messung mit unterschiedlicher Helizität dient zum einen zur Kontrolle und zum anderen zur Eliminierung eventuell auftretender „Drifts“ in den Spektren. Da an beiden Energien mit der dritten Harmonischen gemessen wurde und der zirkulare Polarisationsgrad bei 90% lag, wurden anschließend beide Asymmetrien auf 100% zirkuläres Licht normiert. Beide Asymmetriespektren sind in Abbildung 33 dargestellt.

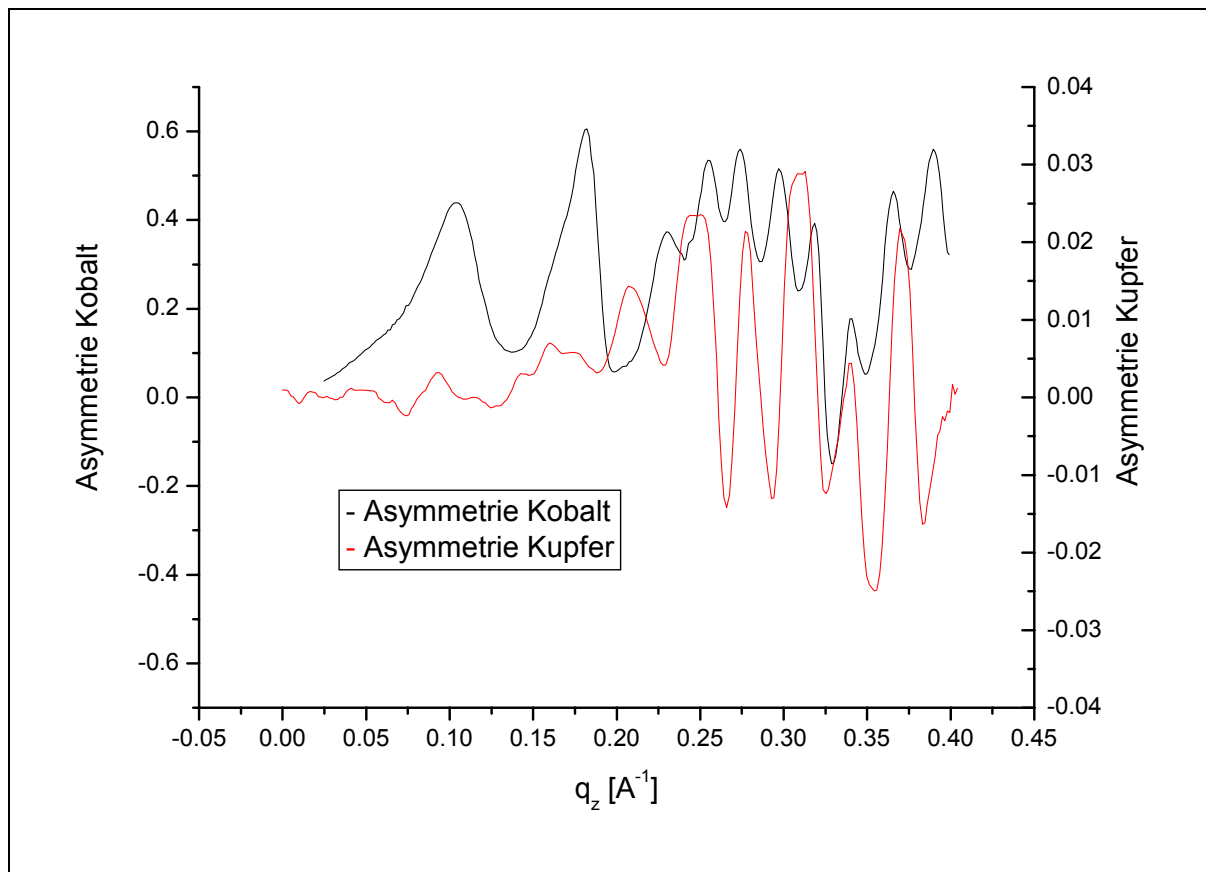


Abbildung 33: Gemessene Asymmetriespektren an der CoL_3 - und an der CuL_3 -Kante.

Im Vergleich zu Messungen an der CuL_3 -Kante tritt an der CoL_3 -Kante ein etwa 20 mal so großes Asymmetrieverhältnis auf. Dort ist bereits in den resonanten Reflexionsspektren R^+ und R^- ein deutlich unterschiedlicher Verlauf zu erkennen.

2.3.4.2 Modellierung der induzierten Magnetisierung von Kupfer

Zur Anpassung an das gemessene Asymmetriesignal war die Modellierung an beiden Grenzflächen erforderlich. Da wie bereits erwähnt eventuelle Offsets, welche in Kapitel 2.2.4.5 beschrieben werden, sowohl auf den resonanten als auch auf den nichtresonanten Reflexionsspektren liegen können, wurden zur Simulation des Asymmetrieverhältnisses die Dicken und Rauigkeiten in geringem Maße mitvariiert und anschließend die neu gewonnen simulierten Reflexionsspektren überprüft.

Begonnen wurde mit zwei gaußförmigen Verteilungen gleicher Amplitude und Varianz an beiden Grenzflächen mit gleichem Abstand von der Mitte der Kupferschicht. Da jedoch die Rauigkeiten an beiden Kupfergrenzflächen annähernd gleich waren, wurden zur weiteren Simulation des Asymmetrieverhältnisses die Amplituden der Gaußfunktionen, welche proportional zur induzierten Magnetisierung sind, aneinander gekoppelt, so dass lediglich die z-Koordinate sowie die Varianzen variiert wurden. Die gemessene sowie die aus dem „Best-Fit“ simulierte Asymmetrie sind in Abbildung 34 zu sehen.

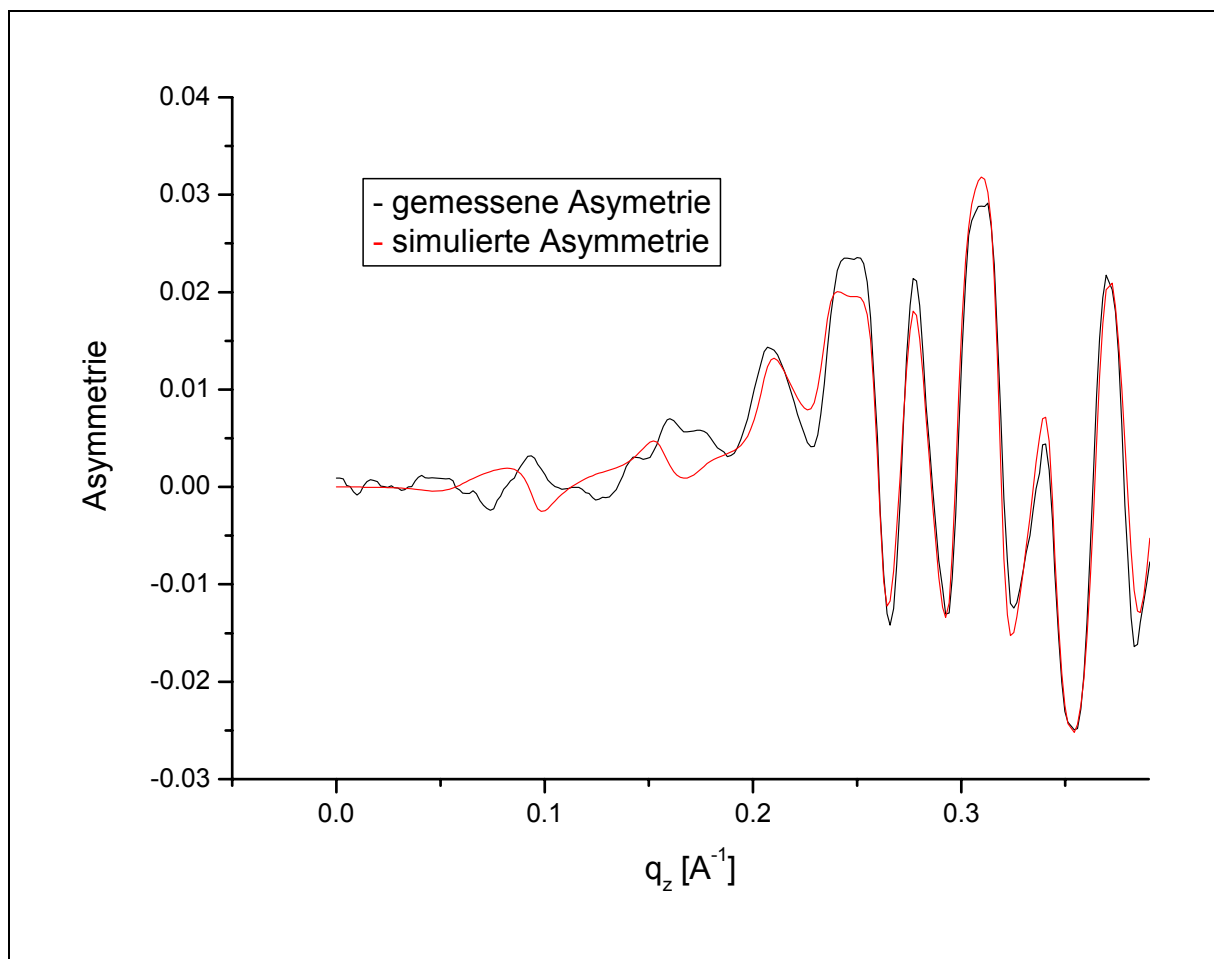


Abbildung 34: Gemessene und simulierte Asymmetrie an der CuL_3 -Kante bei einer Energie von $E = 929\text{eV}$.

Zu beachten ist, dass im Vergleich zu Messungen an den L-Kanten ferromagnetischer Elemente, die Asymmetrieverhältnisse um vieles kleiner sind und daher Messungenauigkeiten eine wesentlich größere Rolle spielen. Daher rührt auch die Diskrepanz zwischen gemessener und simulierter Kurve im Bereich bis $q_z = 0,2\text{\AA}^{-1}$, da in diesem Bereich die Asymmetrie nahe

Null ist. Eine genauere Betrachtung dieser Abweichung und anderer Fehlerquellen sowie ein Literaturvergleich erfolgt im Kapitel 2.3.5.

Versuche, das gemessene Asymmetriespektrum mit Hilfe des Einsatzes von „Splines“ exakter zu „fitten“ führten zu besseren Übereinstimmungen. Diese waren allerdings physikalisch nicht sinnvoll, da das magnetische Profil innerhalb einer Atomlage mehrmals sein Vorzeichen änderte.

Dem in Abbildung 34 mit zwei Gaußfunktionen simulierten Asymmetriespektrum liegt folgender, in Abbildung 35 gezeigter Magnetisierungsverlauf zugrunde. Diese auftretende Magnetisierung ist wie bereits erwähnt in der 3d-3d-Hybridisierung des Kupfers durch das Kobalt begründet [SAM94], wobei es sich dabei um reinen Spinnmagnetismus handelt.

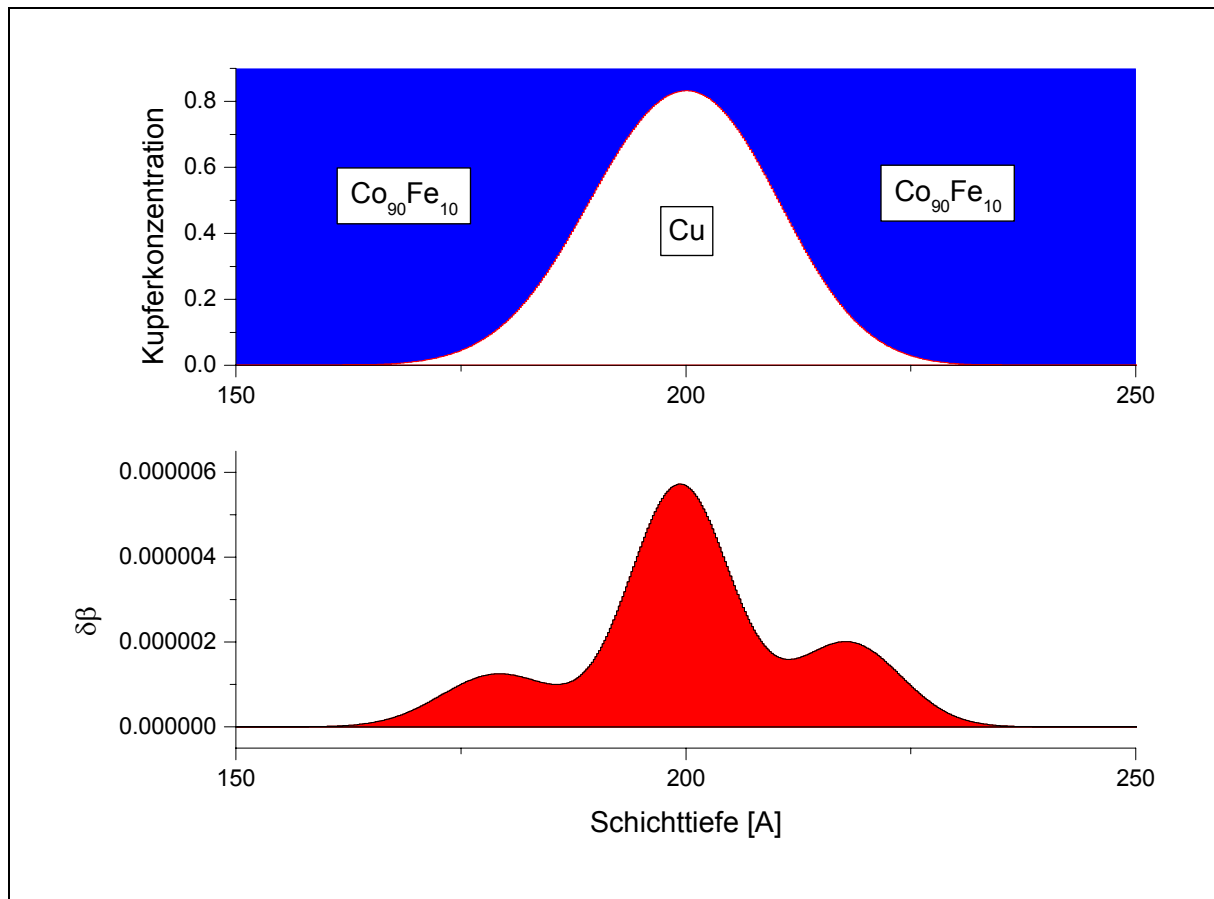


Abbildung 35: Oben: Kupferkonzentration über der Schichttiefe. Unten: Absolute Magnetisierung des Kupfers, anhand des Imaginärteils der magneto-optischen Konstanten $\delta\beta$ dargestellt.

Die Magnetisierung bzw. die Werte der magneto-optischen Konstanten sind dabei aufgrund der Kopplung der Amplituden der beiden Gaußfunktionen konstant. Durch minimale Verschiebung beider in z-Richtung sowie aufgrund minimaler Unterschiede der Grenzflächenrauigkeiten im Subangströmbereich (vgl. Kapitel 2.3.3) erscheint das Magnetisierungsprofil jedoch etwas asymmetrisch. Aus diesem simulierten magneto-optischen Dichteprofil lassen sich über Analogien zu Referenzdaten von Samant [SAM94] die magnetischen Momente pro Kupferatom bestimmen. Dabei entspricht ein absorptiver Anteil der magneto-optischen Konstanten von $\Delta\beta = 5,08E-5$ einem magnetischen Moment pro Kupferatom von $0,1\mu_B$. In Abbildung 36 sind die magnetischen Momente pro Kupferatom in Abhängigkeit von der Schichttiefe dargestellt.

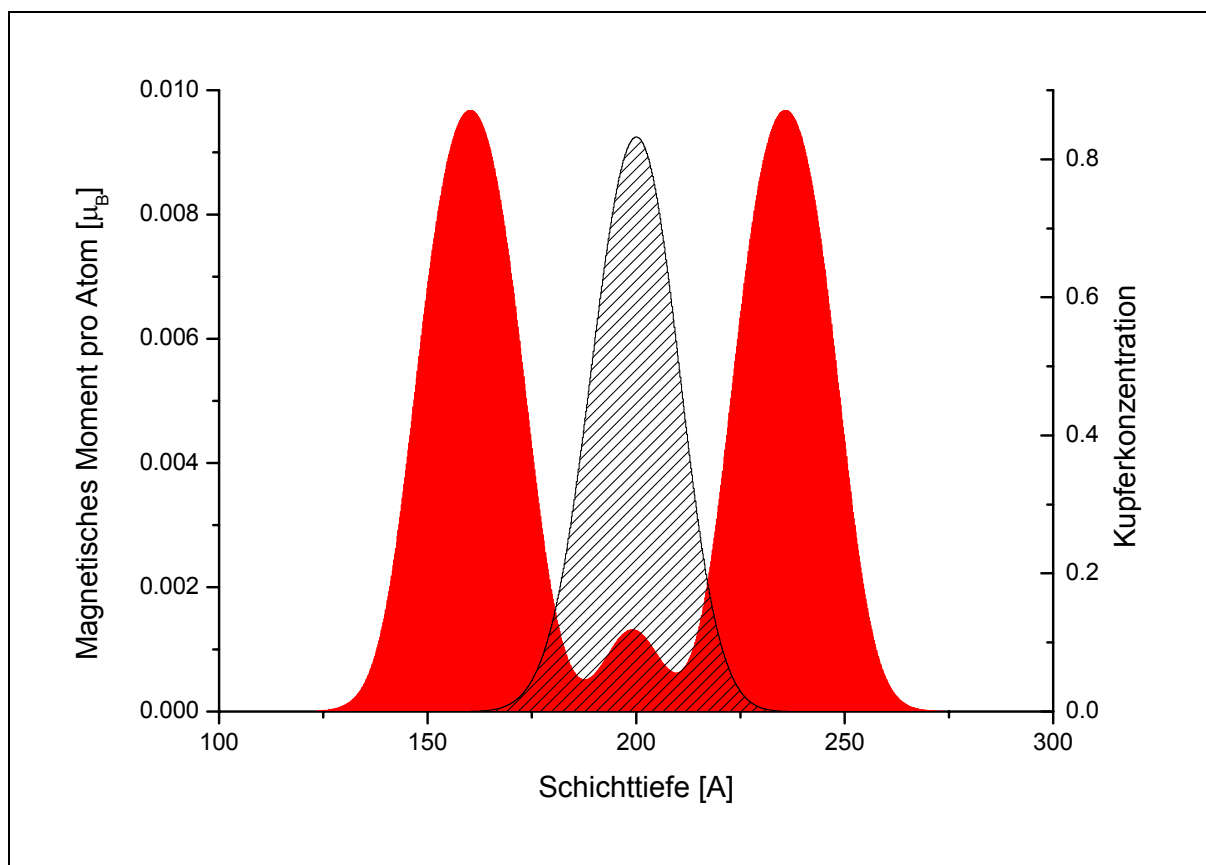


Abbildung 36: Magnetisches Moment pro Kupferatom über der Schichttiefe.

Die maximale Magnetisierung des Kupfers wurde ermittelt zu $0,01\mu_B$. Dieser maximale Wert wird bei einer Konzentration von lediglich noch 0,1% Kupfer erreicht. Der Mittelwert liegt bei $0,004\mu_B$ pro Kupferatom. Da es sich bei dem gesamten Auswerteverfahren um eine Kontinuumsmethode handelt, macht eine Darstellung der Magnetisierung, aufgetragen über die einzelnen Atomlagen, keinen Sinn.

2.3.4.3 Modellierung des Magnetisierungsverlaufs der Kobaltschichten

Zur Bestimmung des Magnetisierungsverlaufs der Kobaltschichten müssen gleichzeitig alle vier Grenzschichten modelliert werden. Begonnen wurde die Simulation mit einer Überlagerung von Gaußkurven an jeder einzelnen Grenzfläche. Ein iteratives Vorgehen durch Modellierung der verschiedenen Grenzflächen der Reihe nach ist in diesem Falle, da vier Grenzschichten modelliert werden müssen, aufgrund der bei den Reflektivitäten auftretenden Interferenzeffekten nicht möglich.

Zu Beginn der Simulation wurde an der Grenzschicht Substrat/CoFe und an der Grenzschicht CoFe/Cr eine Erhöhung der Magnetisierung bzw. eine Vergrößerung der magneto-optischen Konstanten angenommen. An den Grenzflächen zum Kupfer wurde mit einer um 17% erniedrigten Magnetisierung [NEY01] gestartet. Analog zu den Simulationen an der CuL₃-Kante wurden die Dicken und Rauigkeiten minimal mitvariiert. Da eine Variation der Dicken der einzelnen Schichten keinen Einfluss auf die Grenzflächenmagnetisierung hat, ist diese Vorgehensweise besonders für Dickenänderungen von weniger als einer Monolage legitim. Das gleiche gilt für Variationen der Rauigkeiten sofern sich diese im Bereich der magnetisch aktiven Schichten wie in diesem Fall im Subangströmbereich bewegen. Bei Rauigkeiten magnetisch nicht aktiver Schichten wären auch größere Modifikationen möglich ohne dass die physikalische Aussagekraft im Hinblick auf die Magnetisierung verfälscht werden würde. Alle Änderungen im Bereich der Schichtdicken und Rauigkeiten wurden anschließend an den gemessenen Reflexionsspektren überprüft.

Bevor nun die eigentlichen Ergebnisse dargestellt werden, soll die gemessene und die ohne zusätzliche Modifikationen an den Grenzflächen simulierte Asymmetrie dargestellt werden (Abbildung 37). Dies soll insbesondere die Schwierigkeit verdeutlichen, welche bei der Simulation von gleichzeitig mehreren Grenzflächen auftreten können. Hierbei können schon geringe Änderungen an den Grenzflächen, d.h. eine Zu- bzw. Abnahme der magnetischen Momente drastische Auswirkungen auf das Asymmetrieverhältnis haben.

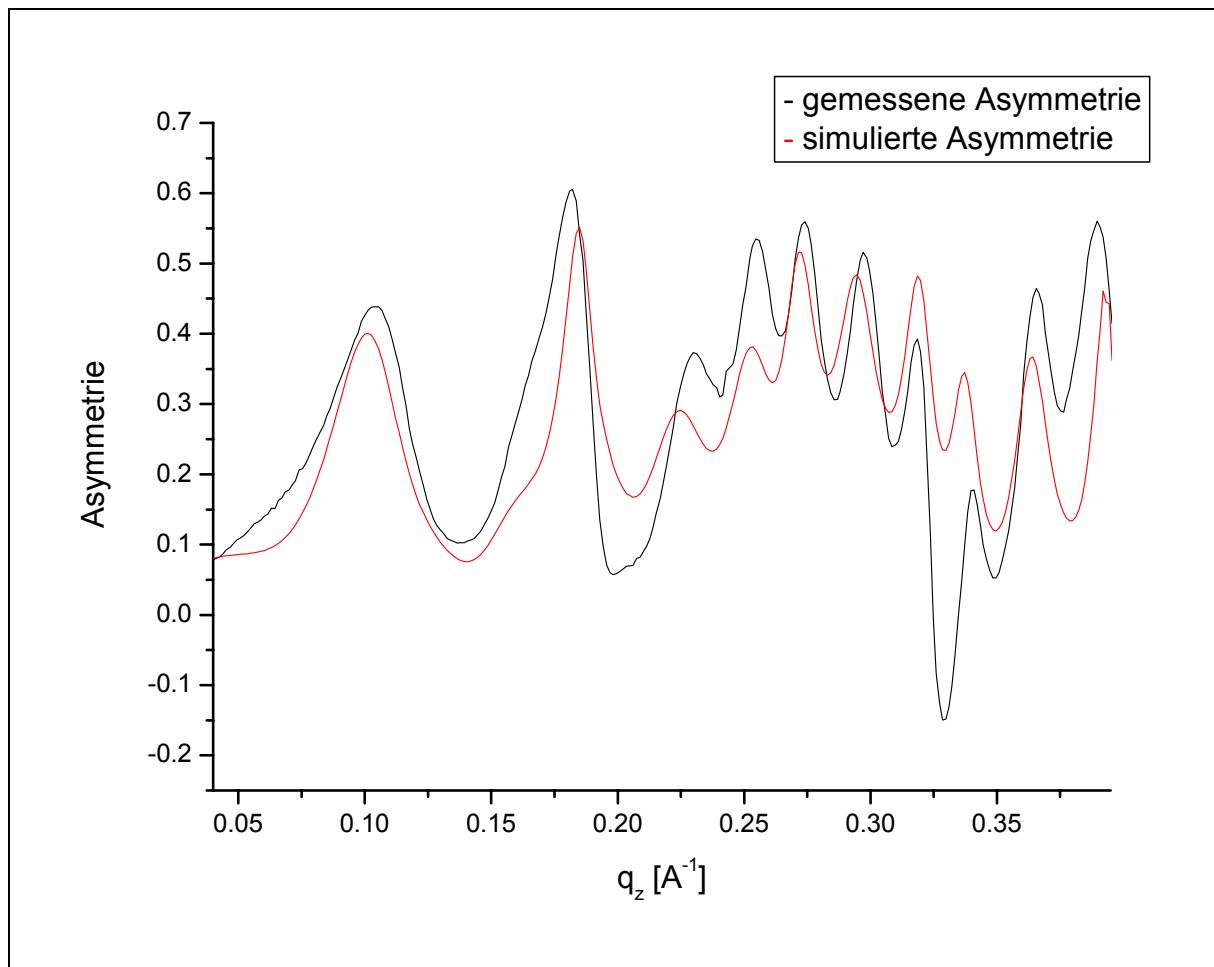


Abbildung 37: Gemessene und simulierte Asymmetrie ohne Grenzflächenmodulation.

Im Laufe der Modellierung des magneto-optischen Tiefenprofils stellte sich heraus, dass die magneto-optischen Konstanten der CoL_3 -Kante als zu groß bestimmt wurden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass diese mittels der eher oberflächensensitiven TEY-Methode gewonnen wurden, wobei an der obersten Grenzschicht zum Chrom eine tendenzielle Erhöhung der Magnetisierung feststellbar ist. Um diese scheinbare Vergrößerung auszugleichen wurden die magneto-optischen Konstanten, d.h. der „Bulkwert“ der CoFe-Legierungen schrittweise von 0% bis 25% verkleinert und die Spektren jeweils erneut „gefittet“.

Dazu wurde in einer ersten Simulationsreihe das gemessene Asymmetriespektrum gefittet, indem jede Grenzschicht mit einer Gaußkurve überlagert wurde. Die Ergebnisse der Auswertungen bei verschiedenen Festkörperwerten sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst. Die erste Spalte beschreibt hierbei die prozentuale Abnahme der Festkörperwerte der magneto-optischen Konstanten, die zweite Spalte die prozentuale Änderung der Magnetisierung an der CoFe/Cr-Grenzschicht, die dritte Spalte die prozentuale

Änderung der Magnetisierung zum Kupfer und die letzte Spalte die Änderung zum Substrat hin. Da die beiden Grenzflächen zum Kupfer hin mit einer Grenzflächenrauigkeit von $\sim 0,7\text{nm}$ nahezu identisch sind wurden beide gekoppelt miteinander variiert und so die simulierte Asymmetrie der gemessenen angepasst.

Tabelle 1: Änderungen der Magnetisierung an den einzelnen Grenzflächen bei verschiedener Reduktion der Festkörperwerte der magneto-optischen Konstanten

Reduktion des „Bulkwertes“	Änderungen an der CoFe/Cr-Grenzschicht	Änderungen zum Cu	Änderungen zum Substrat
0%	+13%	+3%	+12%
5%	+16%	+3%	+12%
10%	+17%	+3%	+12%
15%	+20%	+3%	+9%
20%	+26%	+4%	+10%
25%	+28%	+5%	+11%

Die Simulation mit einer Reduktion der Magnetisierung des Festkörperwertes um 10% kommt dabei zu der besten Lösung. Ebenso steht hierbei der zugehörige Festkörperwert von $1,64\mu_B$ in hervorragender Übereinstimmung zu Referenzmessungen von Chen [CHE95] und Samant [SAM94]. Auf diese soll daher im Folgenden näher eingegangen werden. Das zugehörige Asymmetriespektrum ist in Abbildung 38 zu sehen.

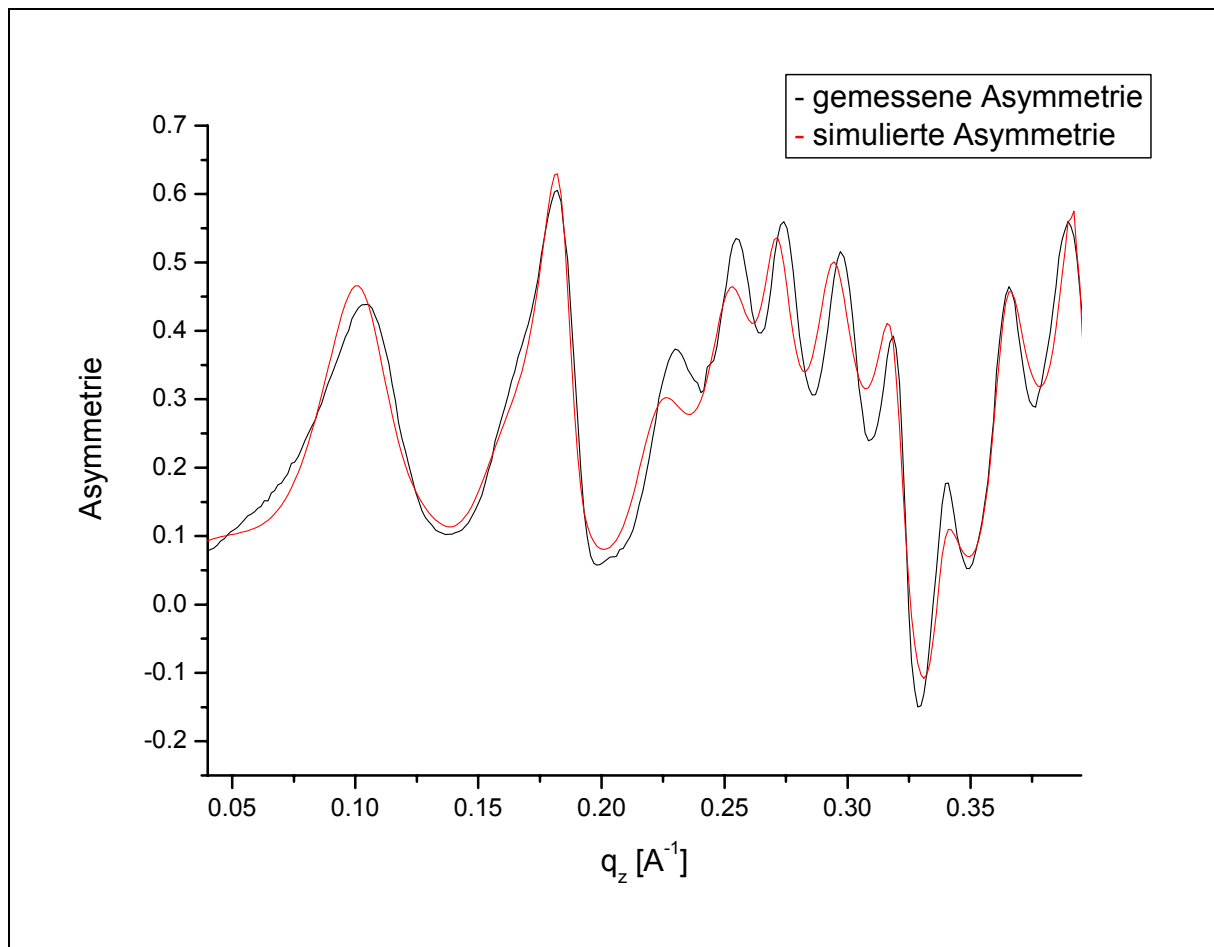


Abbildung 38: Gemessenes und simuliertes Asymmetrieverhältnis für eine Reduktion des Festkörperwertes um 10%.

Auffallend ist bei allen Simulationen eine drastische Erhöhung der Magnetisierung an der Grenzschicht zum Chrom. Bei der Grenzfläche zum Substrat ist in allen sechs Modellen eine Erhöhung um etwa zehn Prozent festzustellen. An den Grenzflächen zum Kupfer kommt es zu einer minimalen Erhöhung, wobei die Lage der beiden Überhöhungskurven nicht symmetrisch zur Kupferverteilung ist, was bei nahezu identischen Grenzflächen physikalisch keinen Sinn macht (vgl. Abb. 39).

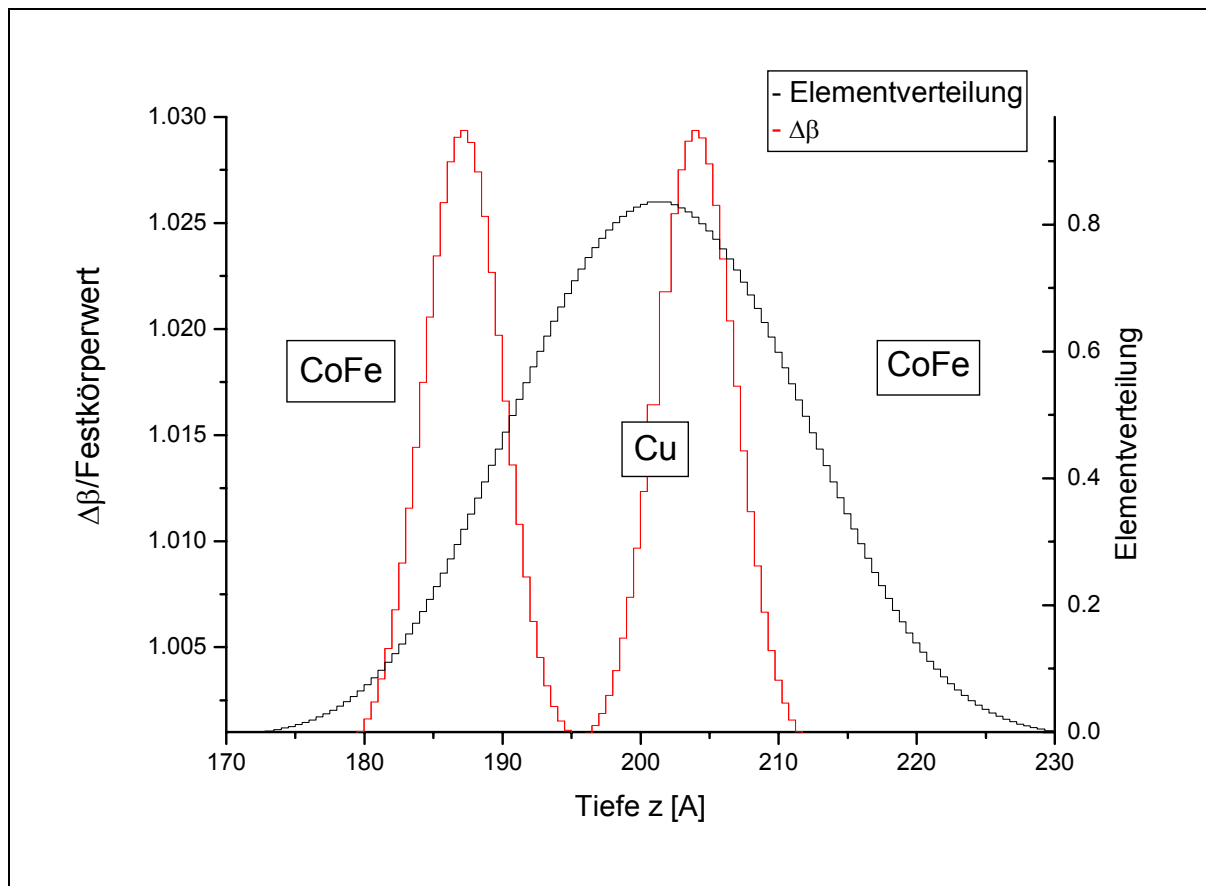


Abbildung 39: Relative Erhöhung der Kobaltmagnetisierung im Bereich der Kupferzwischenschicht. Auffallend ist die asymmetrische Verteilung der Erhöhung.

Aufgrund dieser asymmetrischen Verteilung im Bereich der Kupferzwischenschicht wurde in einer zweiten Simulationsreihe versucht das gemessene Asymmetriespektrum erneut zu simulieren, indem die gesamte Kupferschicht mit nur einer gemeinsamen Gaußkurve überlagert wurde. Hierbei wurde das Maximum der Gaußfunktion konstant in der Mitte der Kupferschicht gehalten. Wie in der ersten Simulationsreihe, bei dem das gemessene Asymmetrieverhältnis mittels zweier überlagerter Gaußkurven angepasst wurde, wurden hier aus den bereits erwähnten Gründen die Festkörperwerte der magneto-optischen Konstanten der CoFe-Legierung variiert und das gemessene Spektrum „gefittet“. Die Werte für die Erhöhungen bzw. Erniedrigungen der Magnetisierung an den Grenzflächen sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Tabelle 2: Änderungen der Magnetisierung an den einzelnen Grenzflächen bei verschiedener Reduktion der „Bulkwerte“ der magneto-optischen Konstanten

Reduktion des „Bulkwertes“	Änderungen an der CoFe/Cr-Grenzschicht	Änderungen zum Cu	Änderungen zum Substrat
0%	+22%	-45%	+15%
5%	+22%	-44%	+14%
10%	+23%	-43%	+13%
15%	+29%	-43%	+12%
20%	+30%	-51%	+14%
25%	+32%	-64%	+16%

Auffallend ist bei allen Simulationen wieder eine drastische Erhöhung der Magnetisierung an der Grenzschicht zum Chrom, welche mit einer Reduktion der „Bulkmagnetisierung“ zunimmt. Bei der Grenzfläche zum Substrat ist in allen sechs Modellen eine Erhöhung zwischen 12% und 16% festzustellen. Im Bereich des Kupfers kommt es zu einer Reduktion der Magnetisierung, welche für die verschiedenen Modelle zwischen 40% und 64% variiert. Über eine Abschätzung der Reduktion der „Bulkwerte“ kommt man zu dem Ergebnis, dass eine Reduktion um mehr als 15% physikalisch nicht sinnvoll ist, so dass eine Abnahme der relativen Magnetisierung im Bereich der Kupferschicht auf Werte zwischen 40% und 45% korrigiert werden kann.

Vergleicht man die Austrittstiefen der TEY-Messung mit denen der Erhöhungen der Magnetisierung an der obersten Grenzschicht, kommt man zu dem Ergebnis, dass eine Reduktion des „Bulkwertes“ von 10% am sinnvollsten ist. Diese erreichte auch bei den Simulationen die besten Werte für die mittlere quadratische Abweichung. Ebenso steht hierbei wie bereits erwähnt der zugehörige Festkörperwert von $1,64\mu_B$ in hervorragender Übereinstimmung zu Referenzmessungen von Chen [CHE95] und Samant [SAM94]. Daher soll im Folgenden dieses Modell weiter im Detail vorgestellt werden. In Abbildung 40 ist das gemessene und simulierte Asymmetriespektrum zu sehen.

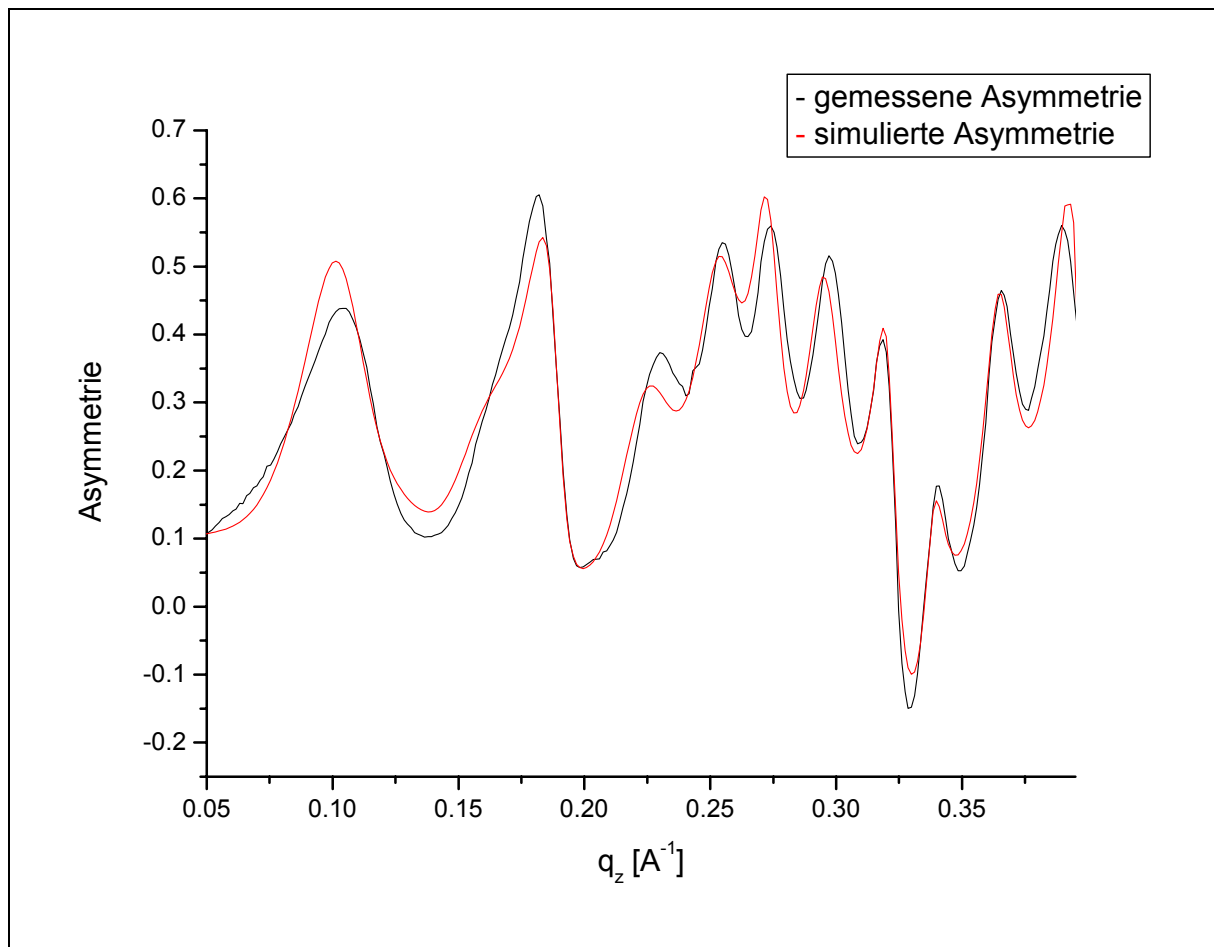


Abbildung 40: Gemessenes und simuliertes Asymmetrieverhältnis für eine Reduktion des Bulkwertes um 10% mit Überlagerung einer Gaußkurve für beide Kupfergrenzflächen.

In der folgenden Abbildung ist das zugehörige Magnetisierungsprofil dargestellt, wobei nur die Grenzschichten zum Kupfer und zum Chrom gezeigt werden.

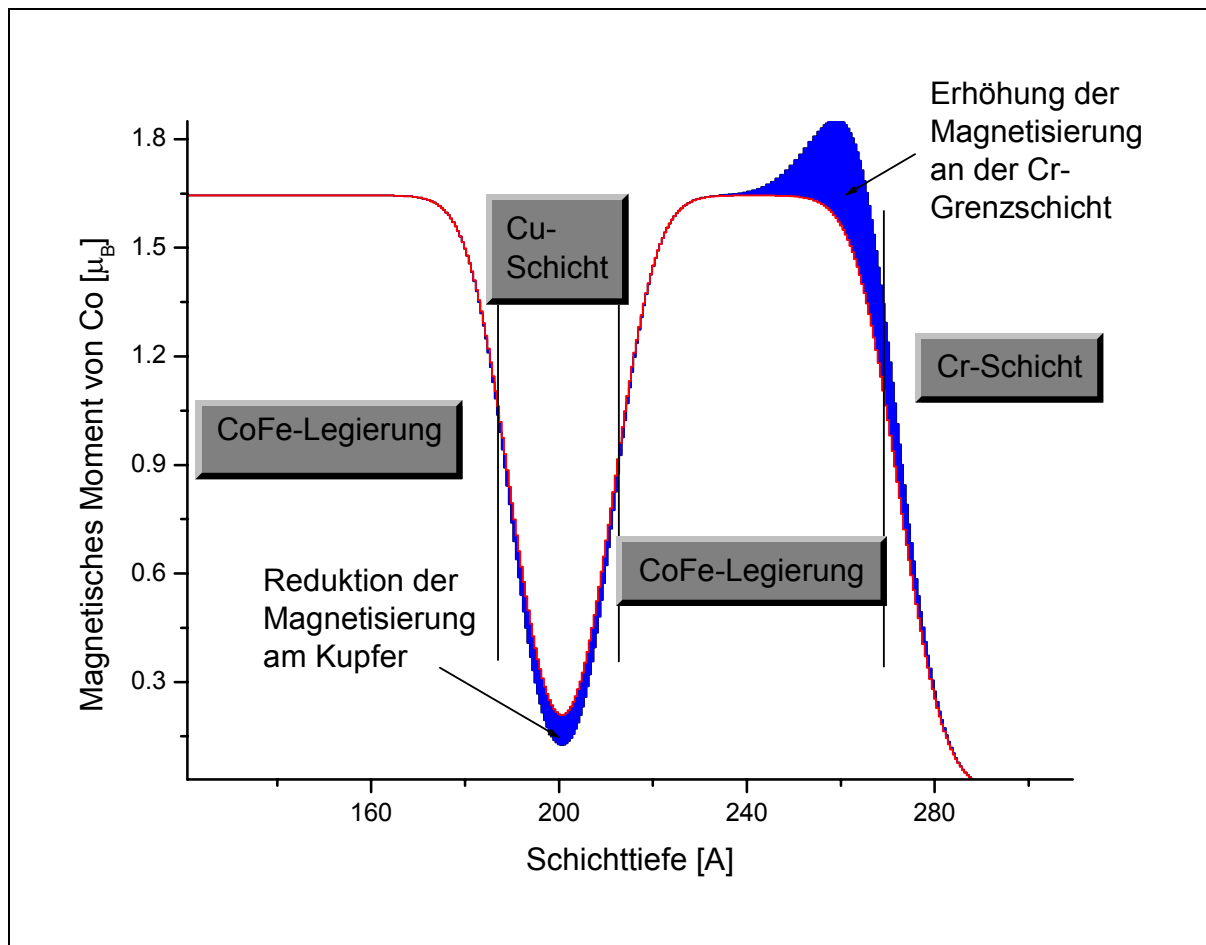


Abbildung 41: Änderungen der Magnetisierung von Kobalt im Bereich der Kupfergrenzschichten und an der Grenzschicht zu Chrom. Aufgetragen sind die magnetischen Momente pro Co-Atom über der Schichttiefe bezogen auf die Kobaltkonzentration im Schichtstapel. Die Reduktion im Bereich des Kupfers, sowie die Erhöhung im Vergleich zum „Bulkwert“ an der Grenzfläche zum Chrom ist blau eingefärbt.

Hierbei ist das magnetische Moment pro Co-Atom im Bereich größter Kupferkonzentration auf 57% des „Bulkwertes“ reduziert. An der Grenzschicht zum Chrom ist das magnetische Moment um 23% erhöht während es an der Grenzfläche zum Substrat hin zu einer Erhöhung um 13% kommt.

Insgesamt kommt die zweite Vorgehensweise mit einer Überlagerung von nur einer Gaußkurve im Bereich des Kupfers im Gegensatz zur ersten Vorgehensweise auf physikalisch konsistente Ergebnisse.

2.3.5 Diskussion der Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse der simulierten magnetischen Tiefenprofile diskutiert werden. Dazu werden zu Anfang dieses Kapitels allgemeingültige Fehlerquellen vorgestellt und diskutiert. Am Ende des Kapitels werden die Messungen und Simulationen an der CuL_3 - und an der CoL_3 -Kante getrennt voneinander auf speziell auftretende Phänomene und Fehler hin diskutiert. Ebenso sollen in diesem zweiten Teil die ermittelten Werte mit Literaturdaten verglichen werden. Vorneweg ist noch zu bemerken, dass eine Fehlerrechnung im eigentlichen Sinne nicht durchgeführt werden kann. Dies ist auf die quantitativ nicht trivial erfassbaren, sich möglicherweise aufsummierenden Fehler, welche durch Interferenzen bei Reflexionsexperimenten entstehen können, zurückzuführen. Daher soll an ihrer Stelle eine Fehlerbetrachtung und –Abschätzung durchgeführt werden.

Eine Abschätzung der Fehler, welche bei der Bestimmung der optischen Konstanten auftreten können, ist bereits in den entsprechenden Kapiteln durchgeführt worden. Kleine Abweichungen dieser haben jedoch keinen Einfluss auf die Auswertung der Reflexions- und Asymmetriespektren. Dies wurde durch zusätzliche Simulationen bestätigt, in denen die resonanten optischen Konstanten um bis zu 5% variiert wurden. Das gilt insbesondere für die Beiträge aus dem Ladungsterm der optischen Konstanten.

Für den Bereich der magneto-optischen Konstanten ist zu sagen, dass die Amplitude im Asymmetriespektrum mit der Größe von $\Delta\delta$ und $\Delta\beta$ skaliert und somit ggf. korrigiert werden müsste.

Ähnlich verhält es sich bei der Bestimmung der optischen Konstanten von den hier verwendeten Legierungen. Eine gewichtete Mittelung der optischen Konstanten für Energien fern ab der Absorptionskanten wie bei der hier verwendeten CoFe-Legierung ist wie bereits erwähnt legitim und führt zu keinem oder nur äußerst geringen, vernachlässigbaren Fehlern, da beide Elemente annähernd gleich groß sind und wie auch die Legierung die selbe Gitterstruktur besitzen.

Wie alle Experimente welche Synchrotronstrahlung ausnützen, ist auch die Röntgenreflektometrie mit einem statistischen Fehler behaftet. Dabei gehorcht der Photonenfluss einer Poissonverteilung, dessen statistischer Fehler die Wurzel aus der Anzahl der Photonen ist. Dieser Fehler macht sich allerdings erst bei Reflexionsmessungen im großen

Winkelbereich durch ein schlechtes Signal-Rausch-Verhältnis bemerkbar, da dort die reflektierte Intensität typischerweise um 5 bis 6 Größenordnungen sinkt.

2.3.5.1 Diskussion der Ergebnisse der Messung an der CuL₃-Kante

Die Simulation der induzierten Magnetisierung des Kupfers erfolgte durch Hinzufügen von je einer Gaußkurve im Bereich der Grenzflächen zur CoFe-Legierung. Da es sich mit Rauigkeiten von $\sigma = 0,7\text{nm}$ ($\sigma = 0,79\text{nm}$ und $\sigma = 0,72\text{nm}$) an beiden Grenzflächen um beinahe identische Übergänge handelt, wurden die Amplituden der verwendeten Gaußfunktionen wie in Kapitel 2.3.4.2 beschrieben aneinander gekoppelt. Andere Simulationsversuche, bei denen beide Gaußkurven getrennt von einander gefittet wurden, kamen zu kleineren quadratischen Abweichungen. Diese waren jedoch physikalisch nicht sinnvoll. Versuche mit nur einer Gaußkurve mit großer Varianz kamen ebenfalls nicht zu brauchbaren Ergebnissen.

Betrachtet man in Abbildung 34 die gemessene und simulierte Asymmetrie, stellt man fest, dass im Bereich bis $q_z = 0,2\text{\AA}^{-1}$ Diskrepanzen vorhanden sind. Da beide Reflektivitäten R^+ und R^- in diesem Bereich jedoch nahezu identisch und die daraus resultierenden Asymmetriesignale sowohl theoretisch als auch experimentell bestimmt extrem klein sind, sind diese Abweichungen in Messungenauigkeiten zu begründen.

Das in Abbildung 35 dargestellte magnetische Tiefenprofil ist annähernd symmetrisch zur Verteilung des Kupfers im Schichtstapel, wobei die Varianz der oberen Gaußfunktion minimal größer ist, was in der um wenige Prozent größeren Grenzflächenrauigkeit begründet ist. Betrachtet man jedoch die Magnetisierung pro Kupferatom in Abbildung 36 ist diese Asymmetrie nicht mehr festzustellen.

Die Größe der induzierten magnetischen Momente ist proportional zum Asymmetrieverhältnis. Dieses ist wiederum davon abhängig wie exakt die Reflektivitäten R^+ und R^- normiert sind. Da es beim Normieren der beiden Reflexionsspektren R^+ und R^- auf 1 für $q_z = 0\text{\AA}^{-1}$ jedoch zu Fehlern kommen kann, lässt sich aufgrund der kleinen Asymmetrie an der CuL₃-Kante ein Fehler von 20% abschätzen. Das führt zu Maximalwerten für das magnetische Moment von $0,01\mu_B \pm 0,002\mu_B$ pro Kupferatom. Gemittelt über die gesamte Kupferschicht ergibt sich ein Wert von $0,004\mu_B \pm 0,0008\mu_B$.

Verschiedene Referenzmessungen kamen zu vergleichbaren Ergebnissen. So stellten Held et al. [HEL96] sowie Samant et al. [SAM94] bei Messungen an Cu/Co-Grenzflächen induzierte magnetische Effekte am Kupfer fest, dessen magnetische Momente pro Atom jedoch kleiner als $0,05 \mu_B$ sind. Pizzini et al. [PIZ94] konnten ebenfalls schwache magnetische Momente derselben Größenordnung an der CuL_3 -Kante feststellen. Zu etwas anderen Ergebnissen kamen XMCD-Experimente von Requian et al. [REQ96]. Diese konnten ein magnetisches Moment von $0,074 \mu_B$ feststellen. Insgesamt ergeben die mittels der XRMR-Methode ermittelten induzierten magnetischen Momente jedoch eine gute Übereinstimmung mit den dargestellten Referenzwerten.

2.3.5.2 Diskussion der Ergebnisse der Messungen an der CoL_3 -Kante

Im Gegensatz zu den Messungen an der CuL_3 -Kante, bei der gleichzeitig zwei gekoppelte Grenzflächen simuliert und gefittet werden mussten, war es nötig, an der CoL_3 -Kante vier Grenzflächen simultan zu modellieren. Dabei stößt man, wie schon in Kapitel 2.3.4.3 gezeigt, auf größere Probleme. So konnten über verschiedene Ansätze mit unterschiedlichen Modellierungen der Grenzflächen die Asymmetrien gefittet werden, was die Eindeutigkeit der Ergebnisse in Frage stellen könnte. Daher müssen die aus den Simulationen gewonnenen Ergebnisse streng auf ihre physikalische Aussagekraft hin überprüft werden. Durch die in Kapitel 2.3.4.3 eingeführte Überlagerung von nur einer Gaußkurve im Bereich der beiden Kupfergrenzflächen konnten diese Unstimmigkeiten jedoch umgangen werden. Lediglich die Größe der magneto-optischen Konstanten, welche durch die beschriebene Erhöhung der Magnetisierung an der obersten Grenzfläche als zu groß bestimmt und angepasst werden musste, kann mit einem gewissen Fehler behaftet sein. Jedoch kann eine klare Aussage über die Änderungen der Magnetisierungen an den Grenzflächen getroffen werden, da die in Kapitel 2.3.4.3 beschriebenen Variationen der „Bulkwerte“ der Co/Fe-Legierung zu übereinstimmenden Ergebnissen im Bereich der Grenzflächenmodifikationen kommen. Ein im Folgenden dargestellter Vergleich mit Referenzmessungen soll die ermittelten Größen der Änderungen an den Grenzflächen unterstützen.

So ergaben Untersuchungen von Ney et al. [NEY01] an einem „Co/Cu/Co-Trilayer“ ein um 17% reduziertes magnetisches Moment der Kobaltschicht welche mittels SQUID-

Magnetometrie gemessen wurden. Zu einem ebenfalls um 17% erniedrigten Moment kamen XMCD-Messungen von Wilhelm et al. [WIL00]. XRMR-Messungen von Geißler [GEI03] zeigten ein um 30% erniedrigtes magnetisches Moment an der Grenzfläche zum Kupfer an einem „Cu/Co/Pt-Trilayer“. Eine ähnliche Reduktion (29%) konnte von Lindner et al. mittels XMCD-Messungen festgestellt werden [LIN00]. Mittels polarisierter Neutronenreflektometrie konnten Bland et al. [BLA98] einen Wert von $1,57 \mu_B$ ermitteln, was einem um nur 8% reduzierten magnetischen Moment entspricht. Die um 43% im Rahmen dieser Arbeit ermittelte Reduktion der Momente pro Kobaltatom spiegelt somit die Größe der auch in der Literatur recht unterschiedlich beschriebenen Referenzen wider.

Im Bereich der Grenzfläche zum Chrom stehen zwei Effekte in Konkurrenz [VEG97]. Zum einen bewirkt eine Hybridisierung eine Reduktion der magnetischen Momente, zum anderen führt eine weniger koordinierte Anordnung der Atome zu einer Erhöhung des Nettomoments. Durch die Herstellung der Probe mittels Sputtern kann es zu Stufen, Versetzungen und Verzerrungen an der Grenzfläche kommen, was insgesamt zu einer größeren Unordnung der Kobaltatome führt. Obwohl in diesem Falle keine quantitative Aussage über die Konfiguration der Atome im Bereich der Grenzfläche getroffen werden kann, ist die ermittelte Erhöhung der magnetischen Momente pro Kobaltatom um 23% damit zu erklären.

Die Erhöhung um 12% an der Grenzfläche zum Substrat ist auf den gleichen Effekt zurückzuführen. Referenzmessungen liegen jedoch für diesen Fall lediglich für Cluster oder Schichten von einigen Monolagen vor [XIE04]. Auf einen Vergleich mit diesen soll daher verzichtet werden.

3 XMCD-Experimente an Platinlegierungen mit digitaler Lock-In-Technik

3.1 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen für die Erzeugung zirkular polarisierter Röntgenstrahlung mittels eines Phasenschiebers erläutert werden. Nach einer Einführung in die Theorie der Röntgenbeugung wird die Realisierung eines Diamantphasenschiebers in Bragg-Transmissions-Geometrie beschrieben, wobei ebenso auf andere Realisierungsmöglichkeiten und deren Polarisationserscheinungen eingegangen wird. Am Ende dieses Kapitels erfolgt eine kurze Einführung in die Lock-In-Technik, welche in digitaler Form im Rahmen dieser Arbeit zur Anwendung kommt.

3.1.1 Grundlagen der Röntgenbeugung

3.1.1.1 Vorbemerkungen zur geometrischen Beugung von Röntgenstrahlung

Die elastische Streuung einer Röntgenwelle findet im Wesentlichen an den Elektronen in der Atomhülle statt, wobei Elektronen im Festkörper durch das elektromagnetische Wechselfeld zu Schwingungen angeregt werden und daraufhin selbst wie ein Hertzscher Dipol Wellen der gleichen Frequenz abstrahlen. Dies stellt den grundlegenden Wechselwirkungsmechanismus zur Beschreibung von Röntgeninterferenzen in Kristallen dar, welcher in geometrischer Näherung beschrieben werden kann. Die gesamte Streuung der Atome wird dabei durch die atomaren Streufaktoren f beschrieben [BRA93].

Durch eine kohärente Überlagerung der gestreuten Strahlung von den einzelnen im Kristall periodisch angeordneten Atomen bildet sich ein Wellenfeld aus. Mit Hilfe der

Ewaldkonstruktion [KOP93] lässt sich konstruieren in welche Richtungen sich das Wellenfeld konstruktiv überlagert.

Bei dieser geometrischen Beschreibung der Röntgenbeugung werden jedoch folgende Größen nicht berücksichtigt [LEI97]:

- Extinktion: Die Welle erfährt eine Schwächung im Kristall, so dass nicht alle Streuzentren im Kristall von gleich großer Intensität getroffen werden.
- Mehrfachstreuung: Es kommt zu zusätzlicher Beugung von Sekundärwellen am Kristallgitter.
- Brechungsindex: Dieser ist polarisationsabhängig.

Für eine exakte Beschreibung von Interferenzerscheinungen des Wellenfeldes in Kristallen müssen diese Größen jedoch mitberücksichtigt werden. Dies geschieht im Rahmen der dynamischen Streutheorie, welche zum ersten Mal von Ewald beschrieben wurde [EWA17]. Dabei werden Lösungen der Maxwellgleichungen für eine dreidimensionale periodische Ladungsverteilung, wie sie in einem Einkristall vorliegt, gesucht.

3.1.1.2 Grundgedanken zur dynamischen Streutheorie

In diesem Kapitel sollen in Kürze die wesentlichen Gedanken zur dynamischen Streutheorie dargestellt werden. Insbesondere wird auf diejenigen eingegangen, welche die Grundlagen zur Realisierung eines Phasenschiebers in Bragg-Transmissions-Geometrie darstellen, wie sie auch im Rahmen dieser Arbeit zur Anwendung kommt. Eine ausführliche Herleitung dieser ist nachzulesen bei Leitenberger [LEI97] und Justen [JUS00], welche beide auf Arbeiten von Laue [LAU60] zurückgehen.

Ausgehend von den Maxwellgleichungen kommt man durch Verknüpfung der Wellengleichungen mit der polarisationsabhängigen dielektrischen Verschiebung und der polarisationsabhängigen Suszeptibilität zu den Grundgleichungen der dynamischen Streutheorie. Die Lösungen dieser Vektorgleichungen beschreiben die Ausbreitung einer Welle in einem Kristall, wobei für eine nichttriviale Lösung Hyperbelgleichungen für die verschiedenen Anregungsfelder der π - und σ -polarisierten Welle entstehen. Die beiden Hyperbeläste beschreiben dabei den Ort aller möglichen Anregungspunkte von Wellenvektoren und werden als Dispersionsflächen bezeichnet. Auf diese unterschiedlichen

Dispersionsflächen für π - und σ -polarisierte Strahlung ist die gewünschte Phasenverschiebung zurückzuführen.

3.1.2 Phasenschieber in Bragg-Transmissions-Geometrie

Neben der Bragg-Transmissions-Geometrie stehen weitere Geometrien zur Erzeugung zirkular polarisierter Röntgenstrahlung zur Verfügung [LEI97]. Die verschiedenen Möglichkeiten sind in Abbildung 42 zu sehen. Bei allen drei Verfahren kommt es durch Zerlegung der einfallenden linear polarisierten Lichtwelle in ihre π - und σ -Komponenten zu einer Phasenverschiebung, bei denen unter entsprechend günstig gewählten Einfallswinkeln ein zirkularer Polarisationsgrad von nahezu 100% erreicht werden kann.

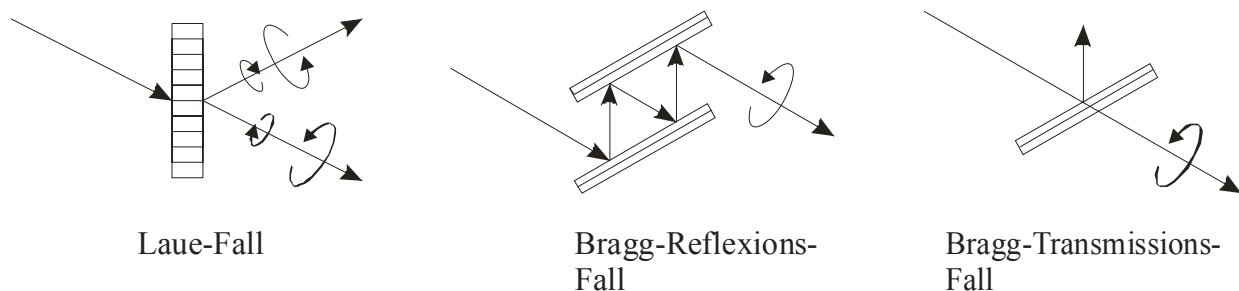


Abbildung 42: Verschiedene Möglichkeiten zur Erzeugung zirkular polarisierter Strahlung [JUS00].

Beim Laue-Fall entsteht die Konvertierung durch anomale Absorption, wobei ein großer zirkularer Polarisationsgrad erst bei großen Kristalldicken entsteht. Dies führt jedoch zu hohen Intensitätsverlusten [PIZ98]. Ebenso ist die Intensitätsausbeute im Falle der Bragg-Reflexionsgeometrie sehr gering, so dass für den hier beabsichtigten Zweck lediglich die Bragg-Transmissions-Geometrie in Frage kommt. Erste Vorschläge zur Realisierung eines Phasenschiebers in dieser Geometrie stammen von Beljakov und Dmitrienko aus dem Jahre 1989 [BEL89].

3.1.2.1 Phasendifferenz beim Bragg-Transmissions-Fall

Bevor auf die Bestimmung der Phasendifferenz eingegangen wird, soll zum besseren Verständnis kurz eine mögliche experimentelle Anordnung für den Bragg-Transmissions-Fall vorgestellt werden. In Abbildung 43 ist eine solche Anordnung, wie sie auch im Rahmen dieser Arbeit zur Anwendung kommt, zu sehen.

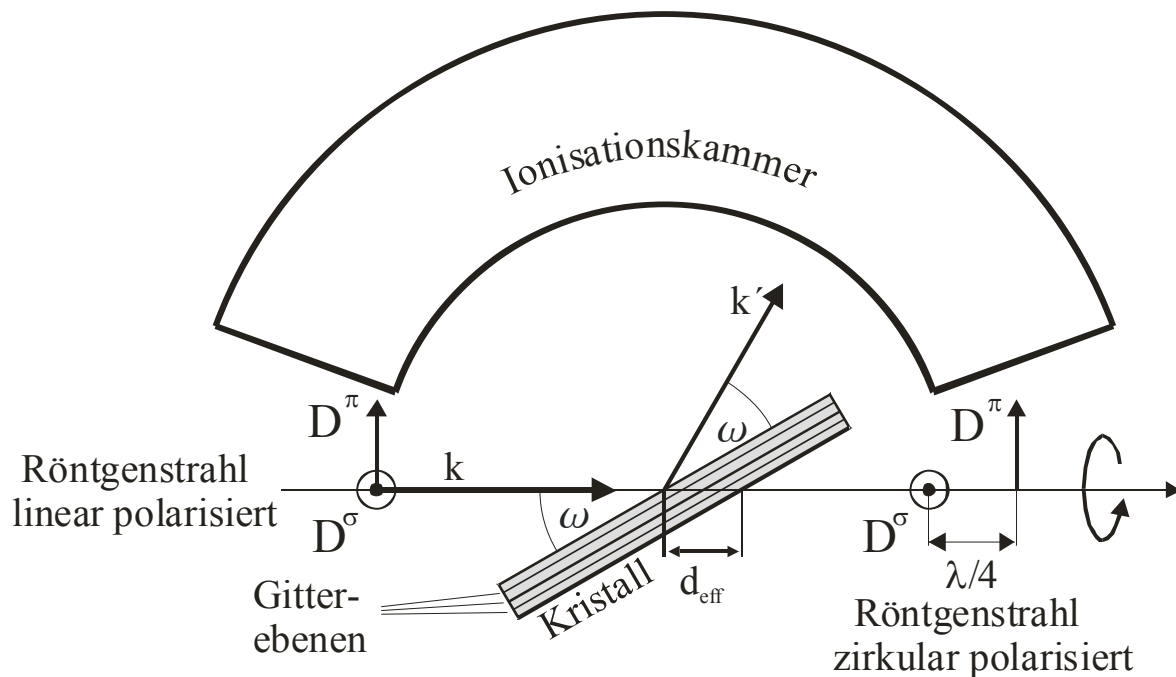


Abbildung 43: Schematische Darstellung des Phasenschiebers in der Bragg-Transmissionsgeometrie. Beim Durchlaufen des Lichts durch den Kristall kommt es zu einer Phasenverschiebung der senkrecht zueinander polarisierten Feldstärkekomponenten D^σ und D^π [WEI03].

Bei dieser wird ein dünnes Kristallplättchen mit monochromatischer, linear polarisierter Röntgenstrahlung durchleuchtet, wobei der Kristall um den Winkel ω gedreht wird, so dass die Braggbedingung

$$\lambda = 2d_h \cdot \sin \omega \quad (3.1)$$

erfüllt ist. Hierbei ist d_h der Netzebenenabstand, λ die Wellenlänge des einfallenden Lichts und ω der Drehwinkel. Zusätzlich wird der Kristall so gedreht, dass die Polarisationsebene der Röntgenstrahlung und die Streuebene einen Winkel von ca. 45° einschließen, so dass die Feldstärkekomponenten des linear polarisierten Lichts parallel und senkrecht zur Streuebene

gleich groß sind. Aufgrund der unterschiedlichen Brechungsindizes der σ - und π -Anteile bei kleinen Abweichungen $\Delta\omega$ aus der Braggbedingung kommt es zu einer Phasenverschiebung $\Delta\Phi$ zwischen den beiden Teilwellen.

Die Phasendifferenz $\Delta\Phi$ in Abhängigkeit vom Abweichungswinkel $\Delta\omega$ lässt sich nach Leitenberger [LEI97] berechnen zu:

$$\Delta\Phi(\Delta\omega) = \frac{k \cdot |X_h|^2 \sin(2\omega)}{4} \cdot \frac{1}{\Delta\omega} \cdot d_{\text{eff}} \quad (3.2)$$

Hier ist k der Betrag des Wellenvektors und d_{eff} die Wegstrecke, welche die Welle im Kristall durchläuft (vgl. Abbildung 43). Diese ist über $d_{\text{eff}} = d/\sin(\omega)$ mit der Kristalldicke verknüpft. $|X|^2$ ist das Betragsquadrat der komplexen dielektrischen Suszeptibilität, welche aus den Strukturfaktoren berechnet werden kann [JAC81]:

$$X_h = \frac{r_e \lambda^2}{\pi V_{\text{ez}}} \cdot F_h \quad (3.3)$$

V_{ez} ist das Volumen der Einheitszelle des Kristalls, r_e der klassische Elektronenradius und F_h der energieabhängige Strukturfaktor des Kristalls. Über die Poincaré-Parameter lässt sich, sofern die Amplituden der σ - und π -Wellen gleich groß sind, der zirkulare Polarisationsgrad berechnen zu:

$$p_2 = \sin(\Delta\Phi) \quad (3.4)$$

Löst man nun Gleichung (3.2) nach $\Delta\omega$ auf, so erhält man für den Abweichungswinkel, welcher den gewünschten Gangunterschied von $\Delta\Phi = \pi/2$ erzeugt, folgenden Zusammenhang:

$$\Delta\omega_{\lambda/4} = \frac{|X_h|^2 \sin(2\omega(E))}{\lambda(E)} \cdot \frac{d}{\sin(\omega(E))} \quad (3.5)$$

Der Ausdruck für den in Gleichung (3.4) eingeführten zirkularen Polarisationsgrad gilt jedoch nur für absolut divergenzfreies Licht. Für divergente Strahlung muss über den Winkelbereich des Strahlfächers, welcher über einen „Rockingscan“ bestimmt werden kann, gemittelt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein in Microsoft Origin implementiertes Programm zur Simulation des zirkularen Polarisationsgrades entwickelt. Abbildung 44 zeigt exemplarisch den realen (mit Strahldivergenz) und idealen (ohne Strahldivergenz) Polarisationsgrad für den (400)-Reflex an dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten 1,2mm dicken Diamantkristall bei einer Energie von $E = 11557\text{eV}$.

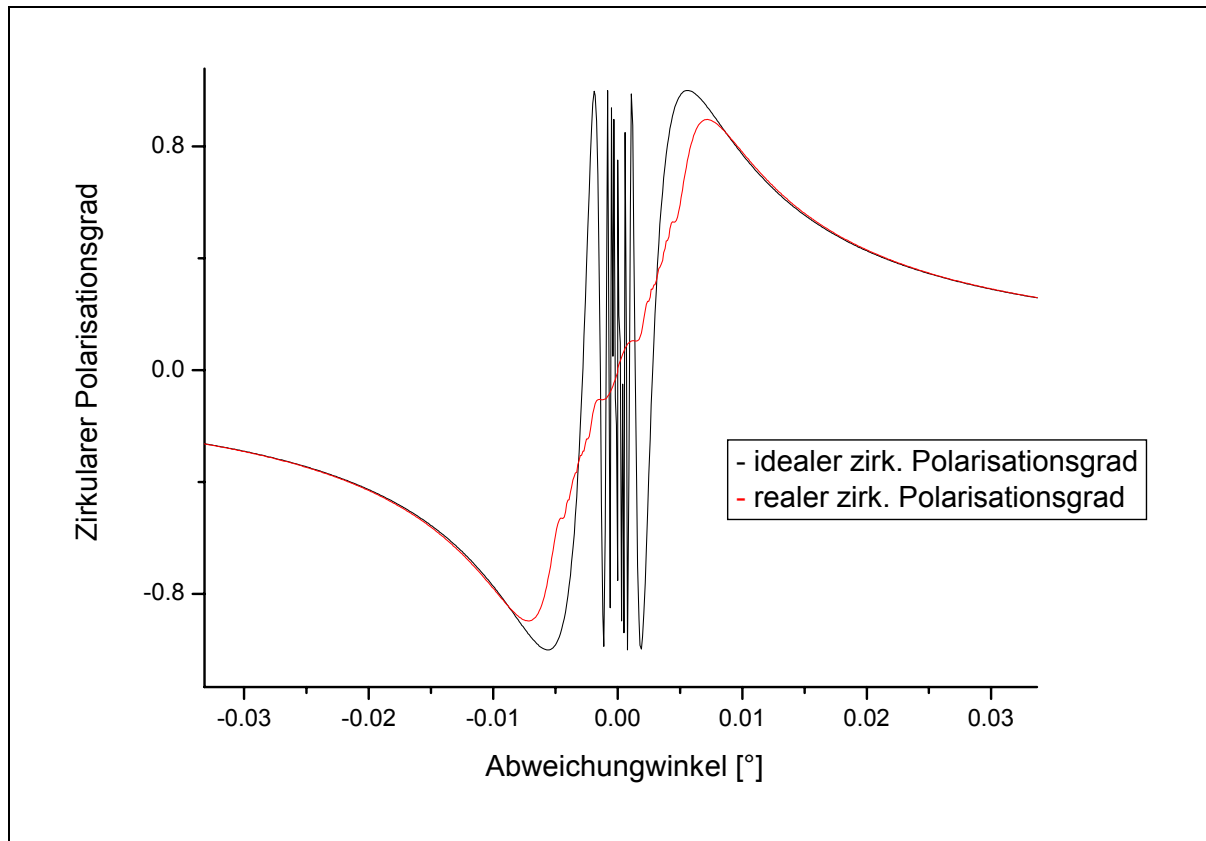


Abbildung 44: Simulierter realer und idealer zirkularer Polarisationsgrad des (400)-Reflexes bei einer Energie von $E = 11557\text{eV}$.

3.1.2.2 Auswahlkriterien für einen Transmissionsphasenschieber

Neben dem Kriterium der Phasenverschiebung sind noch weitere Bedingungen für die Auswahl eines Phasenschiebers zu berücksichtigen. Diese lassen sich nach Leitenberger [LEI97] wie folgt zusammenfassen:

- Damit es zu einer kohärenten Ausbreitung der Wellen im Kristall kommen kann, muss ein Einkristall oder ein Mosaikkristall mit guter Qualität verwendet werden.

- Je dicker der Kristall ist, desto größer ist der Abweichungswinkel für eine Phasenverschiebung um $\pi/2$ und desto unempfindlicher ist dieser gegenüber Strahlschwankungen oder Änderungen der Winkeldivergenz der einfallenden Strahlung.
- Kristalle mit kleinem Absorptionskoeffizienten ermöglichen eine größere Intensitätsausbeute bei gleicher Phasenverschiebung.

Um eine möglichst große Transmission zu gewährleisten kommen für die experimentelle Anwendung daher nur Materialien mit kleinem Absorptionskoeffizienten in Frage. Da dieser proportional zur fünften Potenz der Kernladungszahl ist [BRA83], stehen insbesondere Beryllium, Diamant und Lithiumfluorid für die Praxis zur Verfügung [LEI97]. Lediglich über den Einsatz von dünnen Siliziumscheiben wird noch in der Literatur berichtet [HIR91].

Die zwei im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Kristalle verschiedener Dicke bestehen aus künstlichen Diamanten, wobei beide in (100)-Richtung geschliffen sind. Untersuchungen von Justen [JUS00] haben gezeigt, dass es sich bei diesen um Kristalle mit ausgezeichneter Kristallqualität handelt.

3.1.3 Grundprinzip der Lock-In-Technik

Die Lock-In-Technik dient zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses. Dabei wird das Messsignal mit einem in Frequenz und Phase bekannten Referenzsignal moduliert. Der Vorteil gegenüber konventionellen Messmethoden liegt darin, dass bei der Lock-In-Technik Wechselspannungen anderer Frequenzen, überlagerte Gleichspannungen sowie Rauschen effizient weggefiltert werden können [HAM75]. Dadurch lässt sich das Signal-Rausch-Verhältnis um Größenordnungen verbessern, so dass selbst Signale, welche um einen Faktor 1000 kleiner sind als das von ihm überlagertem Rauschen, noch gut nachgewiesen werden können. Mit Hilfe der Lock-In-Technik lässt sich eine Signalaufbesserung von bis zu 70db und mehr erreichen.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurden mit digitaler Lock-In-Technik durchgeführt. Dadurch stehen die ermittelten Daten bereits von Anfang an in digitaler Form zur Weiterverarbeitung zur Verfügung. Eine genaue Beschreibung dieser Messmethode erfolgt in Kapitel 3.2.5.

3.2 Experimentelle Methoden

Zu Beginn dieses Kapitels soll ein kurzer Überblick über das Messprinzip sowie über den experimentellen Aufbau zur Erzeugung zirkular polarisierter Röntgenstrahlung gegeben werden, wobei diese auf den im vorherigen Kapitel beschriebenen Grundlagen basieren. Anschließend erfolgt eine Beschreibung des Strahlplatzes und der verwendeten Messapparatur, gefolgt von den Messverfahren der für XMCD-Experimente notwendigen Teilschritte. Den Schluss dieses Kapitels bildet eine detaillierte Beschreibung der digitalen Lock-In-Technik, wobei auf Vorarbeiten und im Speziellen auf die durchgeführten Änderungen und Optimierungen eingegangen wird. Dabei wird zusätzlich auf die Steuerung der einzelnen Komponenten und auf das Auslesen und Weiterverarbeiten der mit den Ionisationskammern detektierten Messdaten eingegangen.

3.2.1 Messprinzip

In diesem Kapitel soll ein Überblick über das Prinzip von XMCD-Experimenten mit einem Phasenschieber in Transmissionsgeometrie gegeben werden, wobei auf die Durchführung der einzelnen Messungen im Kapitel Messverfahren eingegangen wird. Der schematische Aufbau des verwendeten Experiments ist in Abbildung 45 zu sehen.

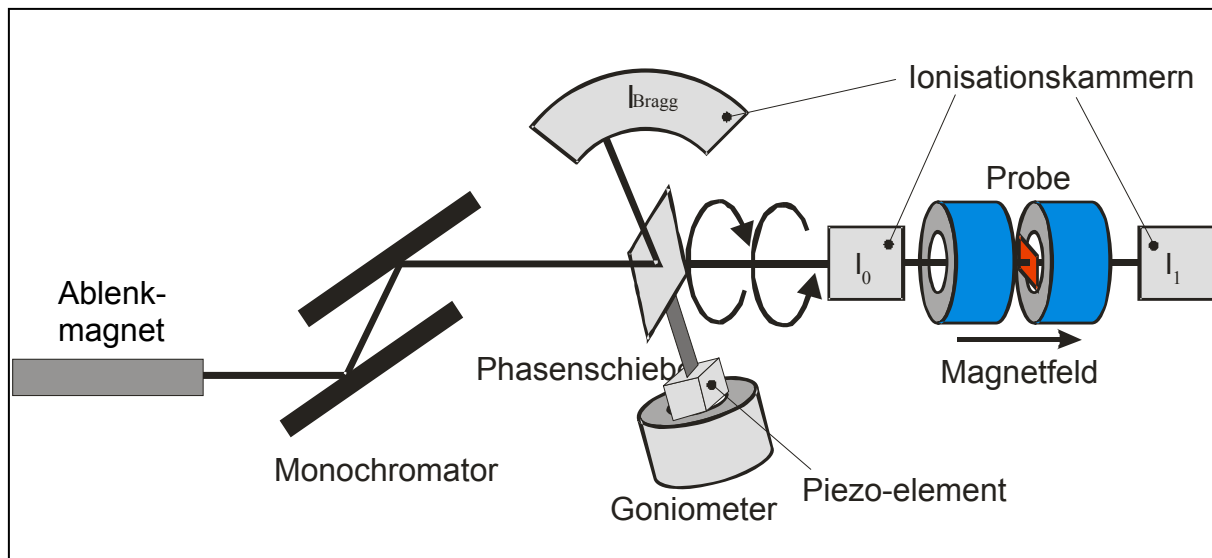


Abbildung 45: Schematischer Aufbau des XMCD-Experiments mit einem Phasenschieber.

Das von dem Ablenkmagneten kommende linear polarisierte Licht gelangt durch einen Diamantphasenschieber und wird dadurch zirkular polarisiert. Dieses geht durch eine luftgefüllte Ionisationskammer zur Messung der Eingangsintensität I_0 . Die durch den Kristall heraus gestreute Röntgenstrahlung wird mittels einer senkrecht zum Diamanten angebrachten Ionisationskammer I_{Bragg} gemessen. Die durch eine in einem Magnetfeld positionierte Probe transmittierte Intensität wird mit einer weiteren Ionisationskammer I_1 gemessen. Diese ist ebenfalls mit Luft gefüllt. Eine genauere Beschreibung der beiden Ionisationskammern I_1 und I_0 ist bei Brüggmann et al. [BRÜ98] nachzulesen.

Nun wird die transmittierte Intensität I_1 auf die Eingangsintensität I_0 normiert, so dass sich die relevante Messgröße des Absorptionskoeffizienten ergibt zu:

$$\mu = \ln \frac{I_1}{I_0} \quad (3.6)$$

Dieser setzt sich zusammen aus einem spingemittelten μ_0 und einem spinabhängigen Anteil μ_C , wobei der spinabhängige Teil proportional zur Magnetisierung der Probe und zum zirkularen Polarisationsgrad ist. Daraus ergibt sich für den Absorptionskoeffizienten:

$$\mu = \mu_0 \pm P_{\text{Photon}} \cdot M_{\text{Probe}} \cdot \mu_C \quad (3.7)$$

Bei der Methode zur Erzeugung zirkular polarisierter Röntgenstrahlung mittels eines Phasenschiebers bleibt das Magnetfeld konstant, dafür wird die Helizität hin und her „geflippt“. Dies hat den großen Vorteil, dass auch Systeme mit hoher Koerzitivfeldstärke in annehmbar kurzer Zeit mit gleichzeitig hohem Signal-Rausch-Verhältnis gemessen werden können, da ein Umpolen von supraleitenden Hochfeldmagneten mitunter 10 Minuten oder länger dauern kann. Ein weiterer Vorteil besteht in der Vermeidung von störenden magnetischen Wechselfeldern. Wegen des großen Absorptionsquerschnittes für weiche Röntgenstrahlung in Materie ist diese Methode in der Praxis nur anwendbar im harten Röntgenbereich.

3.2.2 Strahlungsquellen

Zur Durchführung von XMCD-Experimenten benötigt man energetisch durchstimmbares, zirkular polarisiertes Röntgenlicht von großer Güte. Die Quelle sollte eine hohe Brillanz bei großer Energieauflösung aufweisen. Solche Eigenschaften können heutzutage nur mittels Synchrotronstrahlung erreicht werden. Eine Beschreibung dieser ist bereits im ersten Teil der Arbeit in Kapitel 2.2.2 geschehen, so dass in diesem Abschnitt darauf verzichtet wird. Eine weitere wichtige Voraussetzung zur Erzeugung zirkular polarisierter Röntgenstrahlung mit einem Phasenschieber ist, dass bei der vom „Bendingmagneten“ ausgesendeten Strahlung Anteile, welche außerhalb der Ringebene liegen, ausgeblendet werden. Um zudem eine geringe Winkeldivergenz zu erzielen, müssen vorhandene Fokussierspiegel so eingestellt werden, dass das auf den Phasenschieber treffende Licht möglichst parallel ist.

3.2.2.1 Die MPI-MF-Beamline

Alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente im harten Röntgenbereich wurden bei ANKA (Angströmquelle Karlsruhe GmbH) an der MPI-MF-Beamline (Beamline des Max-Planck-Instituts) durchgeführt. Abbildung 46 zeigt schematisch den Aufbau der Beamline.

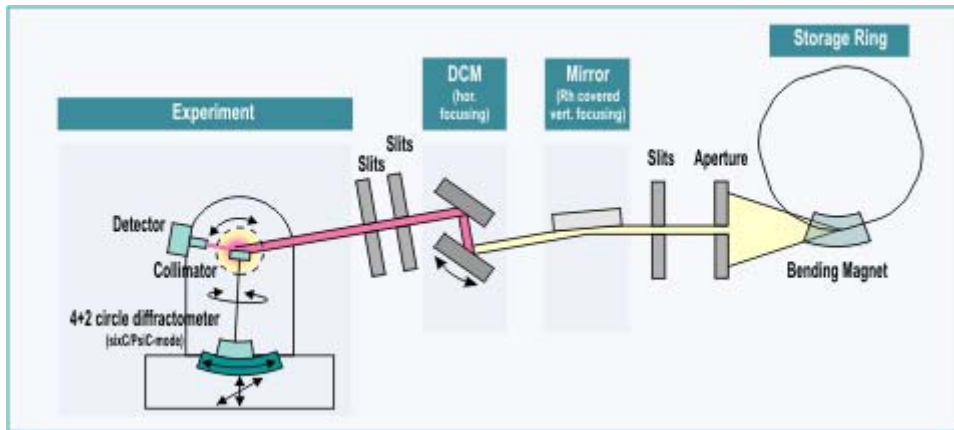


Abbildung 46: Schematischer Aufbau der MPI-MF-Beamline [ANKweb].

Für die meisten im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurde auf das Diffraktometer verzichtet und der gesamte Messaufbau auf einer an der Beamline nach dem Austrittsfenster angebrachten Reiterschiene platziert. Die Einstellungen der einzelnen Spalte und Blenden sind variabel gehalten und werden so eingestellt, dass bei hoher Intensität ein möglichst paralleler Strahl zur Verfügung steht.

Bei gefülltem Ring erhält man an der MPI-MF-Beamline einen Photonenfluss von bis zu 10^{12} h/s/0.1%bw bei einem einstellbaren Energiebereich von $E = 6\text{keV}$ bis $E = 20\text{keV}$. Der Strahldurchmesser beträgt je nach Ausblendung und Fokussierung typischerweise $1\text{mm} \times 1\text{mm}$.

3.2.3 Aufbau des Phasenschiebers

Der Phasenschieber stellt quasi das Kernstück des gesamten Aufbaus des Experimentes dar. Er dient zur Umwandlung von der aus dem Ablenkmagneten kommenden und monochromatisierten linear polarisierten Strahlung in zirkular polarisierte. Der detaillierte Aufbau ist in Abbildung 47 zu sehen. Entwickelt wurde der Phasenschieber von M. Justen im Rahmen seiner Diplomarbeit [JUS00]. Dieser wurde seitdem etwas modifiziert, worauf im Folgenden noch eingegangen wird.

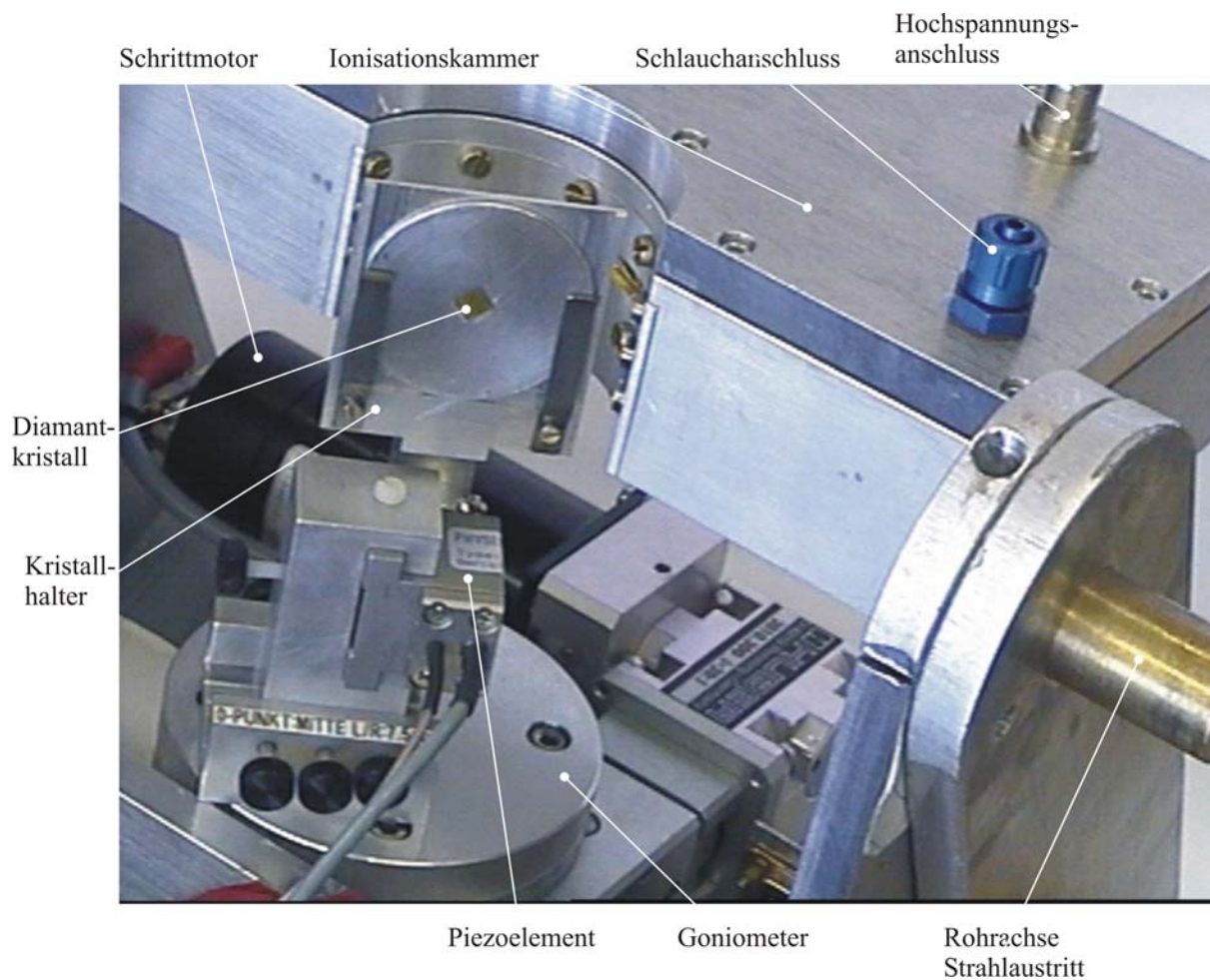


Abbildung 47: Detaillierter Aufbau des Phasenschiebers mit Diamantkristall (aus [JUS00]).

Mit Hilfe dieser Apparatur lassen sich durch die freie Wahl aller drei Eulerwinkel jede beliebige Orientierung des Kristalls in Bezug zum Strahl einstellen. Neben der bereits erwähnten Ionisationskammer zur Bestimmung der gestreuten Strahlung sind der Goniometer, das Piezoelement, die Drehachse zur Einstellung der Streuebene und die Diamantkristalle die entscheidenden Komponenten auf die im Folgenden genauer eingegangen wird.

3.2.3.1 Das Goniometer

Die Einstellung des Braggwinkels geschieht mit einem Einkreis-Goniometer (Typ 408) der Firma Huber. Im Halbschrittmodus betrieben ergibt sich eine Untersetzung von $1/8000^\circ$ pro Halbschritt. Zusätzlich können durch zwei an den Getriebeachsen angebrachte Lichtschranken

Referenzpositionen angefahren werden [JUS00]. Steuerbefehle gelangen über eine serielle Schnittstelle an den Schrittmotor des Goniometers.

3.2.3.2 Das Piezoelement

Dies dient zur feineren Einstellung des Braggpeaks und zum Wechsel der Helizität. Es ist koaxial auf der Goniometerachse angebracht und erlaubt ein „Flippen“ bis zu einem Abweichungswinkel von $\pm 37/1000^\circ$. Ein einzelner Piezoschritt entspricht einem Winkel von $5,86E-5^\circ$. Mit dem Piezoelement ist ein schneller Wechsel zwischen links- und rechtszirkular polarisierter Strahlung möglich. Das Piezoelement sowie der zugehörige Servo Controller stammen von der Firma Physik Instrumente [PI97]. Steuerbefehle werden ebenfalls über eine serielle Schnittstelle übertragen.

3.2.3.3 Drehachse zur Einstellung der Streuebene

Diese weitere Drehachse ist zum Strahl spielfrei über Messingrohre angeordnet und ist nötig, falls es aufgrund des Borrmann-Effekts [BOR55] zu einer vergrößerten anormalen Absorption kommt, so dass die σ -Komponente stärker als die π -Komponente absorbiert wird. Durch die Wahl eines Winkels der etwas von 45° abweicht lässt sich dieser Effekt ausgleichen, so dass π - und σ -Komponente nach der Transmission durch den Kristall wieder gleiche Intensität aufweisen und somit unter idealen Bedingungen 100% zirkular polarisiertes Licht austritt.

Da bei geringeren Photonenenergien der Absorptionsquerschnitt von Strahlung in Luft dramatisch zunimmt, stehen wahlweise zu den Messingrohren auch neu konstruierte Edelstahlrohre, welche evakuiert werden können, zur Verfügung. Diese führen zu einer Reduktion der Absorption und können in den freien Strahlengang eingeführt werden.

3.2.3.4 Diamanten

Für die Experimente stehen zwei Diamantkristalle mit einer Dicke von 0,5mm und 1,2mm mit einer Kantenlänge von 5mm und 3,5mm zur Verfügung. Die Oberflächen beider Kristalle sind in (100)-Richtung orientiert und stammen von der Firma Sumitomo Electric [SUM98]. Alle Experimente an der PtL₃-Kante wurden mit dem symmetrischen (400)-Reflex durchgeführt. Mit diesem Reflex lässt sich zirkular polarisierte Strahlung bis zu einer minimalen Energie von $E = 6950\text{eV}$ erzeugen. Beide verwendeten Kristalle sind in runde Aluminiumbleche eingearbeitet und dadurch in der Kristallhalterung drehbar, so dass der Kristall auch hinsichtlich des dritten Eulerwinkels variabel einstellbar ist.

Für Energien unterhalb von $E = 6950\text{eV}$ kann der asymmetrische (111)- bzw. der asymmetrische (220)-Reflex verwendet werden. Simulationen dieser Reflexe für verschiedene Energien wurden bereits durchgeführt und sind im Anhang dargestellt. Diese sind insbesondere zur Untersuchung weiterer hartmagnetischer Systeme im harten Röntgenbereich von großem Interesse.

Der gesamte Phasenschieber befindet sich auf einem neu konstruierten Aluminiumgestell, welches passend zur vorhandenen Reiterschiene der „MPI-MF-Beamline“ gefertigt wurde und dort montiert werden kann.

Die Steuerung des gesamten Experimentes geschieht über ein eigenes Testpoint-Programm eines separaten Messrechners, wodurch über den „Beamlinerechner“ auch der Monochromator gesteuert werden kann. Eine genauere Beschreibung der Steuerung erfolgt in Kapitel 3.2.5.1.

3.2.4 Messverfahren

Der gesamte Messverlauf gliedert sich in vier Bereiche. Als erstes erfolgt die Justage des Phasenschiebers, der Ionisationskammern, des Magneten und der Probe. Danach erfolgt die Suche und Einstellung des Braggreflexes für die gewünschte Energie. Im Zuge dieses Schrittes werden die Einstellungen an der „Beamline“ so verändert, dass ein möglichst paralleler Röntgenstrahl zur Verfügung steht. Dies ist anhand der Breite des Braggreflexes vom Phasenschieber abzulesen. Anschließend erfolgt eine Polarisationsanalyse, welche mit

den theoretisch berechneten und simulierten Werten verglichen wird. Der vierte Teil des Messverfahrens stellt das eigentliche XMCD-Experiment dar. Alle vier Teilschritte werden im Folgenden ausführlich diskutiert.

3.2.4.1 Durchführung der Justage

Bevor mit der eigentlichen Justage begonnen wird, werden Spiegel und Monochromator des Strahlplatzes sowie die vorhandenen Streublenden und Spalte so eingestellt, dass der Strahl nominell eine geringe Winkeldivergenz aufweist. Da es durch diese Veränderungen zum Erreichen eines parallelen Röntgenstrahles zu leichten Änderungen in der Strahllage kommen kann, kann die relative Lage zu dem vorhandenen Reiterprofil etwas abweichen. Um nun die notwendigen Komponenten in den Strahl zu justieren, werden diese der Reihe nach mit möglichst geringem Abstand auf das Reiterprofil montiert, um Intensitätsverluste an Luft möglichst gering zu halten. Anschließend wird, begonnen mit dem Phasenschieber die Position der einzelnen Elemente überprüft, indem Schritt für Schritt mit „Brennpapier“ die Lage des Strahls ermittelt wird. Dazu wird das „Brennpapier“ einige Minuten mit Röntgenlicht bestrahlt und anschließend mit einer Taschenlampe entwickelt, so dass die Lage des Strahls als Fleck erkennbar wird. Eventuelle Abweichungen werden in vertikaler Richtung durch geeignete Abstandshalter, bzw. in horizontaler Richtung durch Verschieben korrigiert.

3.2.4.2 Suche und Einstellung des Braggreflexes

Nachdem die Streuebene des Phasenschiebers durch Drehung um die Strahlachse um 45° im Vergleich zur Polarisationssebene des einfallenden Strahl gebracht wurde, wird der Diamantkristall auf den für die gewünschte Energie zugehörigen Winkel der Braggbedingung gefahren. Um diesen errechneten Winkel werden sog. „Rockingscans“ durchgeführt, um eventuelle „Offsets“ im Winkel zu bestimmen und auszugleichen. Dazu wird die gestreute Intensität in einzelnen Schritten für jeden zugehörigen Winkel gemessen. Ebenfalls wird dabei die Breite des Braggpeaks bestimmt, welche ein Maß für die Divergenz der einfallenden Strahlung ist. Abbildung 48 zeigt einen solchen „Rockingscan“ gemessen mit der senkrecht

zum Strahl angebrachten Ionisationskammer I_{Bragg} bei einer Energie von $E = 11500\text{eV}$. Solche Messungen können selbstverständlich auch mit den anderen beiden Ionisationskammern durchgeführt werden, indem die transmittierte Intensität gemessen wird.

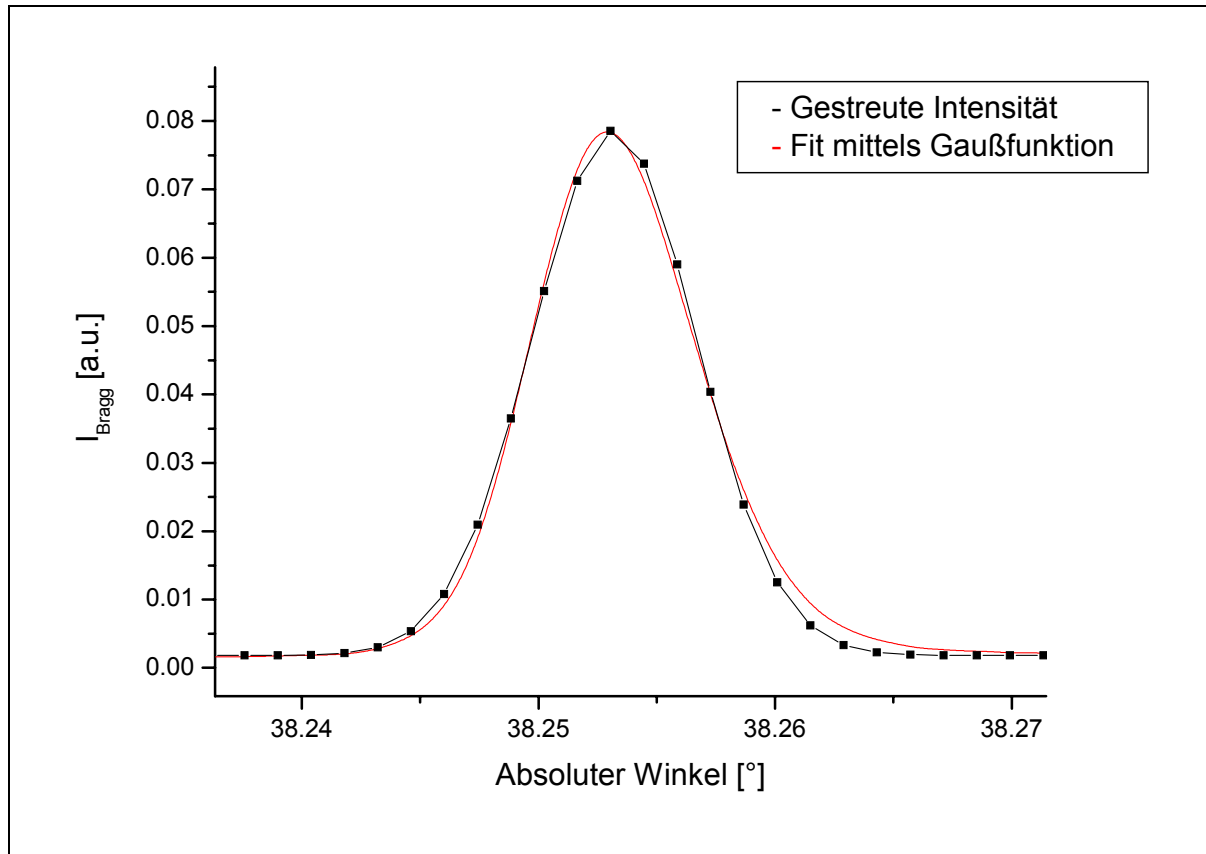


Abbildung 48: Gemessene gestreute Intensität und zugehöriger Fit mittels einer Gaußfunktion zur Bestimmung der Halbwertsbreite.

Für Messungen an der PtL_3 -Kante, wie sie im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, sollte die Halbwertsbreite der „Rockingkurven“ $8/1000^\circ$ nicht überschreiten, da es sonst zu Energieverschiebungen für rechts- und linkszirkularpolarisierter Strahlung kommen kann [WEI03]. Diese energetischen Verschiebungen führen zu einer Ableitungsstruktur in dem im vierten Teil dieses Kapitels beschriebenen XMCD-Signals, woraus ein „Pseudo-XMCD-Effekt“ resultiert.

Ist die gewünschte „Peakbreite“ nicht erreicht, müssen weitere Änderungen an den „Beamlineeinstellungen“ vorgenommen werden bis diese schließlich erreicht wird. Durch diese Änderungen kann es passieren, dass die einzelnen Komponenten neu einjustiert werden müssen, was eine erneute Überprüfung der Strahllage zwingend erforderlich macht.

Anhand der Breite der gemessenen Braggpeaks lassen sich im Vergleich mit den theoretisch berechneten Werten die Abweichungswinkel für die Erzeugung zirkular polarisierter Strahlung bestimmen, welche bei den folgenden XMCD-Experimenten zum Einsatz kommen.

3.2.4.3 Bestimmung des Polarisationsgrades

Zur Bestimmung des Polarisationsgrades stehen mehrere Möglichkeiten zur Verfügung. Dies kann zum einen geschehen durch Messung des XMCD-Effekts an einer bekannten Referenzprobe, bzw. durch einen „Rockingscan“ an solch einer Probe, zum anderen durch eine Polarisationsanalyse mittels Streulicht. Bei XMCD-Messungen sowie bei dichroischen „Rockingscans“ ist darauf zu achten, dass diese auch mit umgekehrtem Magnetfeld durchzuführen sind, da eventuell auftretende Nichtlinearitäten der Ionisationskammern [BOA66] erst dadurch rausgemittelt werden können.

Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Methode ist die Polarisationsanalyse mittels Streulicht. Dazu wird ein Streukörper in den Strahlengang gebracht, der in horizontaler und vertikaler Richtung jeweils um 45° zur Ausbreitungsrichtung des Strahles gekippt ist. In Abbildung 49 ist schematisch der Aufbau einer solchen Streugeometrie zu sehen.

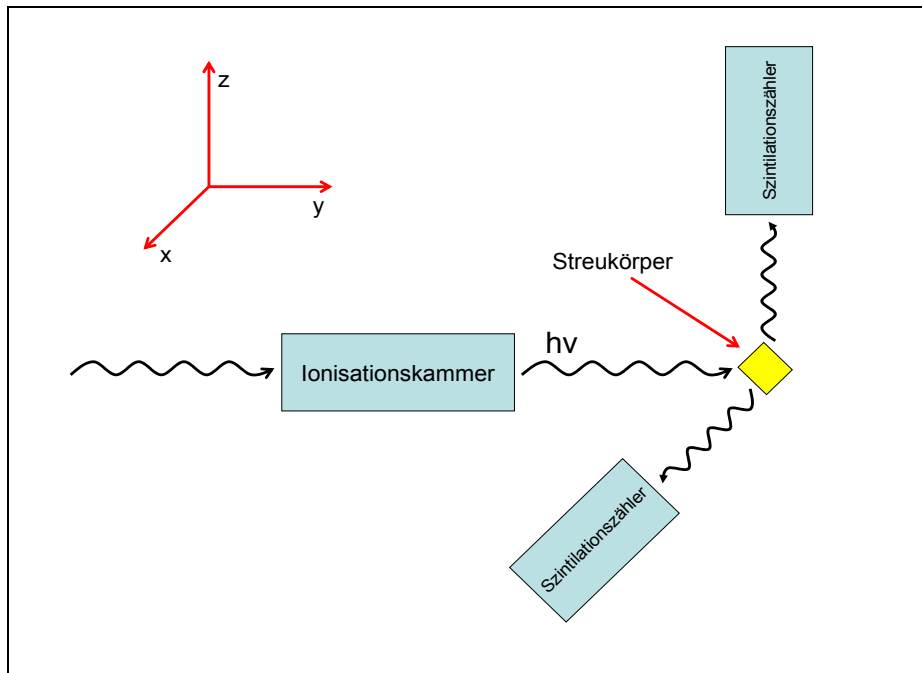


Abbildung 49: Schematischer Aufbau zur Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades mittels eines Streuers.

Das nach der Thomsonschen Streuformel senkrecht zum Strahl gestreute Licht weist dabei eine Richtungsabhängigkeit auf, so dass bei Licht mit vertikaler Polarisationssebene keine Streuung in vertikaler Richtung auftritt. Zirkular polarisierte Strahlung wird hingegen isotrop in alle Raumrichtungen gestreut [JUS00]. Der Unterschied beider Streukanäle lässt sich an der „MPI-MF-Beamline“ mittels eines auf einem Goniometer befestigten Szintillationszählers über einen „Rockingscan“ bestimmen. Zu beachten ist, dass dabei nicht zwischen unpolarisierter und zirkular polarisierter Strahlung unterschieden werden kann. Dies kann die Bestimmung direkt auf dem Braggpeak verfälschen. Für die praktische Anwendung hat dies jedoch keinen Einfluss, da die später genutzten Bereiche erst bei einer Abweichung von einigen tausendstel Grad beginnen. Aus den beiden um 90° verkippten, gemessenen Intensitäten lässt sich der zirkulare Polarisationsgrad P_c bestimmen, welcher über die Feldstärken der σ - und π -Komponenten wie folgt definiert ist [LEI97]:

$$P_c = \frac{2 \cdot E_\pi \cdot E_\sigma}{E_\pi^2 + E_\sigma^2} \quad (3.8)$$

Dabei wird von einer Phasenverschiebung von 90° ausgegangen. Neben der experimentellen Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades lässt sich dieser auch mit den in Kapitel 3.1.2 beschriebenen Formeln berechnen.

3.2.4.4 XMCD-Experimente

Das wichtigste Ziel dieses Teils der Arbeit war die Messung von dichroischen Energiespektren an der PtL_3 -Kante verschiedener Platinlegierungen. Zur Messung dieser wird für jeden Energiepunkt als erstes die Mittelposition des Braggreflexes angefahren. Eine grobe Einstellung erfolgt dabei über das Goniometer, der auf den für die gewünschte Energie berechneten Winkelwert zurückgreift. Eine darauf folgende feine Einstellung erfolgt über einen Regelmechanismus mit Hilfe des Piezoelements. Ist die exakte Position des Braggpeaks bei der jeweiligen Energie erreicht, beginnt die eigentliche Messung. Hierzu „flipp“ das Piezoelement symmetrisch mit einem festgelegten Abweichungswinkel zwischen rechts- und linkszirkular polarisierter Strahlung hin und her, wobei der ständig vorhandene Ionisationsstrom mit Hilfe der Ionisationskammern I_1 und I_0 gemessen wird. Beide Ionisationskammern werden mit einer Spannung von $U = 500V$ betrieben und über präzise Elektrometer der Firma Keithley (Modell 6517A) ausgelesen.

Als Anregungsfunktionen für das Flippen des Piezoelements stehen inzwischen eine Rechteck-, eine Sinus- und eine Dreieckfunktion zur Verfügung. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Rechteckfunktion in den digitalen Lock-In-Algorithmus implementiert und verwendet, um bei allen Zeiten eine maximalen zirkularen Polarisationsgrad und dadurch ein erhöhtes Signal-Rausch-Verhältnis zu erhalten. Bei den anderen beiden Anregungsmöglichkeiten variiert der zirkulare Polarisationsgrad. Auf eine detaillierte Beschreibung der Steuerung sowie des digitalen Lock-Ins mit einer Rechteckfunktion wird im folgenden Kapitel eingegangen.

3.2.5 Digitale Lock-In-Technik

Ein auf Lock-In-Technik basierendes XMCD-Experiment ist bereits seit längerem an der Undulator-Beamline am japanischen Synchrotron Spring-8 realisiert worden [MAR99], [SUZ99], wobei ebenfalls ein Diamantkristall als Phasenschieber verwendet wird [SUZ97]. Hierbei handelt es sich jedoch um einen stationären Aufbau, der nicht auf digitaler sondern auf analoger Lock-In-Technik beruht.

Ziel dieser bereits von Weigand [WEI03] entwickelten Methodik war es teure Lock-In-Verstärker zu umgehen und mit preisgünstiger PC-Messtechnik einen universell einsetzbaren Phasenschieber zu realisieren. Dieser wurde im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelt und für den Einsatz am Karlsruher Synchrotron ANKA optimiert. Dabei wurde neben apparativen Umbaumaßnahmen insbesondere die früher häufig verwendete Sinusfunktion als Anregungsfunktion des Phasenschiebers durch eine Rechteckfunktion ersetzt. Zusätzlich wurde der A/D-Wandlertkarte für jeden Eingangskanal ein Überspannungsschutz durch zwei entgegengesetzt angeordnete Zenerdioden vorangeschaltet. Weiterhin wurde, um lastfreier arbeiten zu können, ein Spannungsfolger mit integriertem, wahlweise einsetzbaren Inverter eingebaut.

3.2.5.1 Messprinzip der digitalen Lock-In-Technik

Neben der bereits zu Anfang dieses Kapitels beschriebenen konventionellen Messtechnik werden insbesondere die XMCD-Experimente mit der um Größenordnungen rauschärmeren digitalen Lock-In-Technik durchgeführt. In Abbildung 50 ist schematisch der Aufbau dieser Methodik zu sehen.

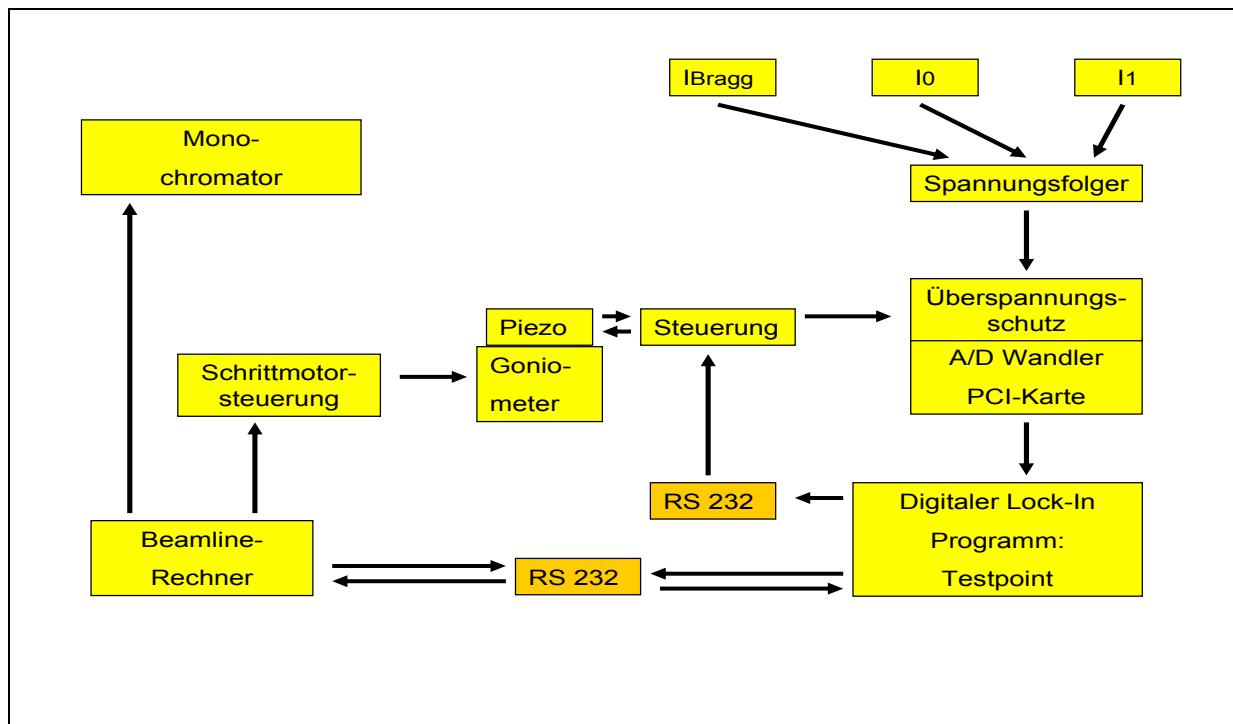


Abbildung 50: Flussdiagramm des digitalen Lock-In-Experiments.

Der gesamte Messzyklus läuft wie folgt ab: Das auf dem Messrechner erstellte Messprogramm (Testpoint der Firma Keithley) teilt dem Beamlinerechner über eine RS 232 Schnittstelle mit, welche Energie mit dem Monochromator angefahren werden soll. Nach Bestätigung der erreichten Energie erfolgt der Befehl das Goniometer auf den zu dieser Energie gehörenden Braggpeak zu fahren. Nach dieser groben Einstellung erfolgt eine feine Einstellung der Braggbedingung mittels des Piezoelements. Dies geschieht über die Piezosteuerung, welche ebenfalls über eine RS 232 Schnittstelle mit dem Messrechner verbunden ist. Anschließend erhält die Piezosteuerung Informationen über Amplitude, Signalform und Frequenz und es erfolgt der Befehl zum Start. Wie bereits beschrieben, werden die drei relevanten Strahlungsintensitäten mit den Ionisationskammern gemessen und über die Elektrometer ausgelesen. Zusätzlich zur Piezoposition, welche über einen Dehnungsmessstreifen gemessen wird, werden diese als analoge Spannungssignale vorliegenden Daten an eine 16 Bit A/D-PCI Wandlerkarte der Firma United Electronic Industries übergeben. Nun beginnt die eigentliche Messung, indem das Messprogramm der A/D Wandlerkarte die Abtastfrequenz und die Dauer der Messung mitteilt. Die Daten stehen nun in digitaler Form zur Weiterverarbeitung zur Verfügung, wobei alle relevanten Ergebnisse wie XMCD-Signal, XAS-Signal und Piezoregelsignal (vgl. Abbildung 50) durch das Messprogramm berechnet werden und auf dem PC abgespeichert werden.

3.2.5.2 Die Rechteckfunktion als digitale Lock-In-Funktion zur Ermittlung des XMCD-Signals

Um den effektiven Polarisationsgrad zu steigern wurde eine in Testpoint standardmäßig integrierte Rechteckfunktion in das Messprogramm implementiert. Dadurch sind Messungen mit ständig maximalem zirkularem Polarisationsgrad möglich und es muss nicht wie bei der früher verwendeten Sinusanregung über einen effektiven Polarisationsgrad gemittelt werden. Die gesamte Ansteuerung sowie die Ermittlung des dichroischen Signals verlaufen analog zu derjenigen der Sinusanregung. Diese wurde bereits detailliert von Weigand beschrieben [WEI03], so dass im Rahmen dieser Arbeit nur auf die Grundgedanken eingegangen werden soll.

Durch das Schwingen des Diamantkristalls mit einer bestimmten Amplitude folgt ein zeitabhängiger Absorptionskoeffizient, welcher sich aus dem zeitlichen Verlauf von $I_1(t)$ und $I_0(t)$ wie folgt darstellen lässt:

$$\mu(t) = \ln \frac{I_1(t)}{I_0(t)} \quad (3.9)$$

Dieser setzt sich zusammen aus einem zeitlich konstanten, spingemittelten und einem zeitabhängigen, spinabhängigen Anteil. Die Zeitabhängigkeit ergibt sich hierbei aus der Modulation des Polarisationsgrades mit der Piezofrequenz.

$$\mu(t) = \mu_0 \pm P_{\text{Photon}} \cdot M_{\text{Probe}} \cdot \mu_C(t) = \mu_0 + P_{\text{Photon}} \cdot M_{\text{Probe}} \cdot \text{Square}(2\pi ft + \varphi) \quad (3.10)$$

Hierbei ist P_{Photon} der zirkulare Polarisationsgrad der einfallenden Strahlung und M_{Probe} die Magnetisierung der Probe. Die Phasenverschiebung zwischen dem Piezosignal und I_1 bzw. I_0 wird durch den Winkel φ beschrieben. Aufgrund dieser Phasenverschiebung kann das Piezosignal nicht als Lock-In-Projektor dienen.

Zur Bestimmung des zeitunabhängigen Anteils des Absorptionskoeffizienten spielen die Phasenlagen jedoch noch keine Rolle. Dieser kann einfach über eine numerische Mittelwertbildung gewonnen werden. Zur Ermittlung des zeitabhängigen Absorptionskoeffizienten μ_C müssen allerdings zumindest die relativen Phasenlagen zueinander bekannt sein. Dazu werden die Absolutbeträge und Phasen von I_1 , I_0 und des

Piezosignals bezüglich einer künstlich eingeführten, normierten Rechteckfunktion bestimmt. Das eigentliche XMCD-Signal ergibt sich schließlich aus dem Absolutbetrag des zeitabhängigen Projektors des Absorptionskoeffizienten und seiner relativen Phasenlage zum Projektor des Piezosignals über eine numerische Interpolation. In Abbildung 51 sind die vier zeitabhängigen Rechteckfunktionen schematisch dargestellt.

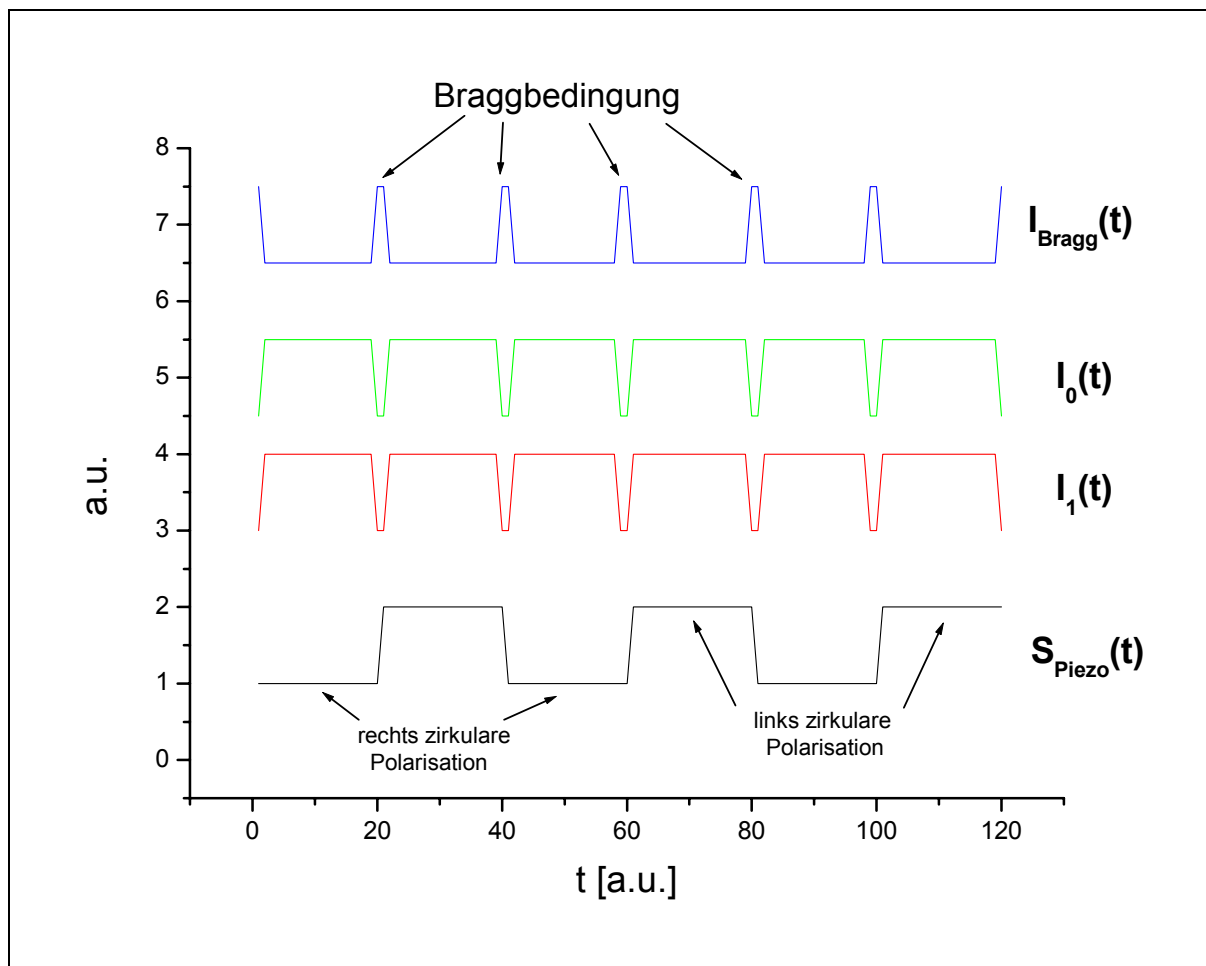


Abbildung 51: Schematische Darstellung der vier zeitabhängigen Rechteckfunktionen ohne Phasenverschiebung und ohne eventuelle Überschwinger.

Da es aufgrund der Trägheit des Phasenschiebers beim Wechsel der Helizität zu Überschwingern kommen kann und die Flanken nicht unendlich steil sind, werden diese Bereiche herausgeschnitten. Dadurch wird ein ideales, symmetrisches Rechtecksignal erreicht.

3.3 Auswertung und Diskussion der Messergebnisse

In diesem Kapitel werden die Messergebnisse vorgestellt und diskutiert. Dabei wird zuerst auf die durchgeführte Polarisationsanalyse und die zugehörigen Simulationen eingegangen. Anschließend erfolgt eine Analyse des Rauschens und eine Bestimmung der für die XMCD-Messungen optimalen Messparameter. Danach werden die XMCD-Experimente an den verschiedenen Platinlegierungen vorgestellt. Den Schluss dieses Kapitels bildet eine abschließende Diskussion.

3.3.1 Polarisationsanalyse

Die Polarisationsanalyse wurde mit der in Kapitel 3.2.4.3 vorgestellten Methode durchgeführt und dient der Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades. Die Kenntnis des zirkularen Polarisationsgrades ist dabei für die folgenden XMCD-Experimente von essentieller Bedeutung, da ohne diese keine quantitativen Aussagen über die dichroischen Effekte getroffen werden können.

Zur Bestimmung des Polarisationsgrades wurde die Energie mit Hilfe des Monochromators auf $E = 11557\text{eV}$ gefahren. Bei dieser Energie hat der XMCD-Effekt sein Maximum [JUS00]. Die Bestimmung der Eingangintensität erfolgte mittels einer luftgefüllten Ionisationskammer und dient lediglich zur Normierung bei eventuell auftretenden, durch die Strahlage bedingten, Intensitätsschwankungen. Als Streukörper diente ein planes Stück Plastik, welches um die Streuebene und um deren Senkrechte jeweils um 45° verkippt wurde, um ein möglichst gleiches Verhältnis der σ - und π -Komponente des Strahles zu erreichen. Beide Strahlkomponenten wurden mit dem an der MPI-MF-Beamline angebrachten Szintillationszähler gemessen, indem ein „Rockingscan“ um den Braggreflex durchgeführt wurde.

Bevor es zur eigentlichen Messung kam, wurde um einen möglichst großen zirkularen Polarisationsgrad zu erreichen die „Beamline“ so optimiert, dass ein möglichst paralleler Strahl mit geringer Winkeldivergenz zur Verfügung stand. Die Winkeldivergenz kann ebenfalls über einen „Rockingscan“ ermittelt und kontrolliert werden. Abbildung 52 zeigt den nach Abschluss der Optimierungsarbeiten durchgeführten „Rockingscan“, welcher durch eine Gaußfunktion gefittet wurde.

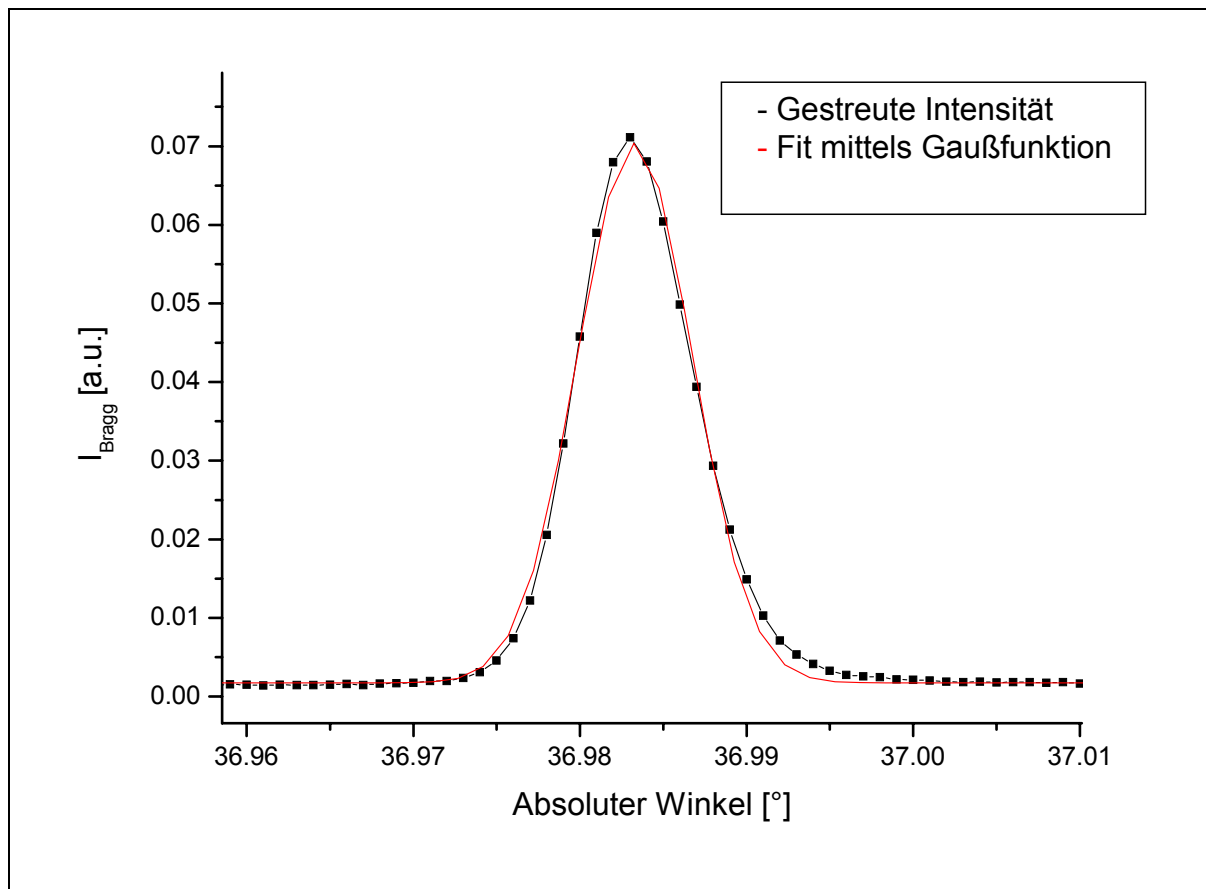


Abbildung 52: Bestimmung der Halbwertsbreite über die gestreute Intensität mit Hilfe eines Gaußfits.

Mittels des Gaußfits ließ sich eine Halbwertsbreite von $\text{HWB} = 0.0069^\circ$ bestimmen, was sich für die folgenden Experimente als optimal erwiesen hat. Weitere Messungen vor und nach der Kante haben gezeigt, dass sich die Winkeldivergenz nicht ändert, so dass von einem konstanten zirkularen Polarisationsgrad über einen großen Energiebereich ausgegangen werden konnte.

Die Ergebnisse der Messung mittels des Streukörpers sind in Abbildung 53 zu sehen, wobei bereits der Untergrund abgezogen ist. Dargestellt sind die Intensitäten der π - und σ -Komponente des Röntgenstrahls.

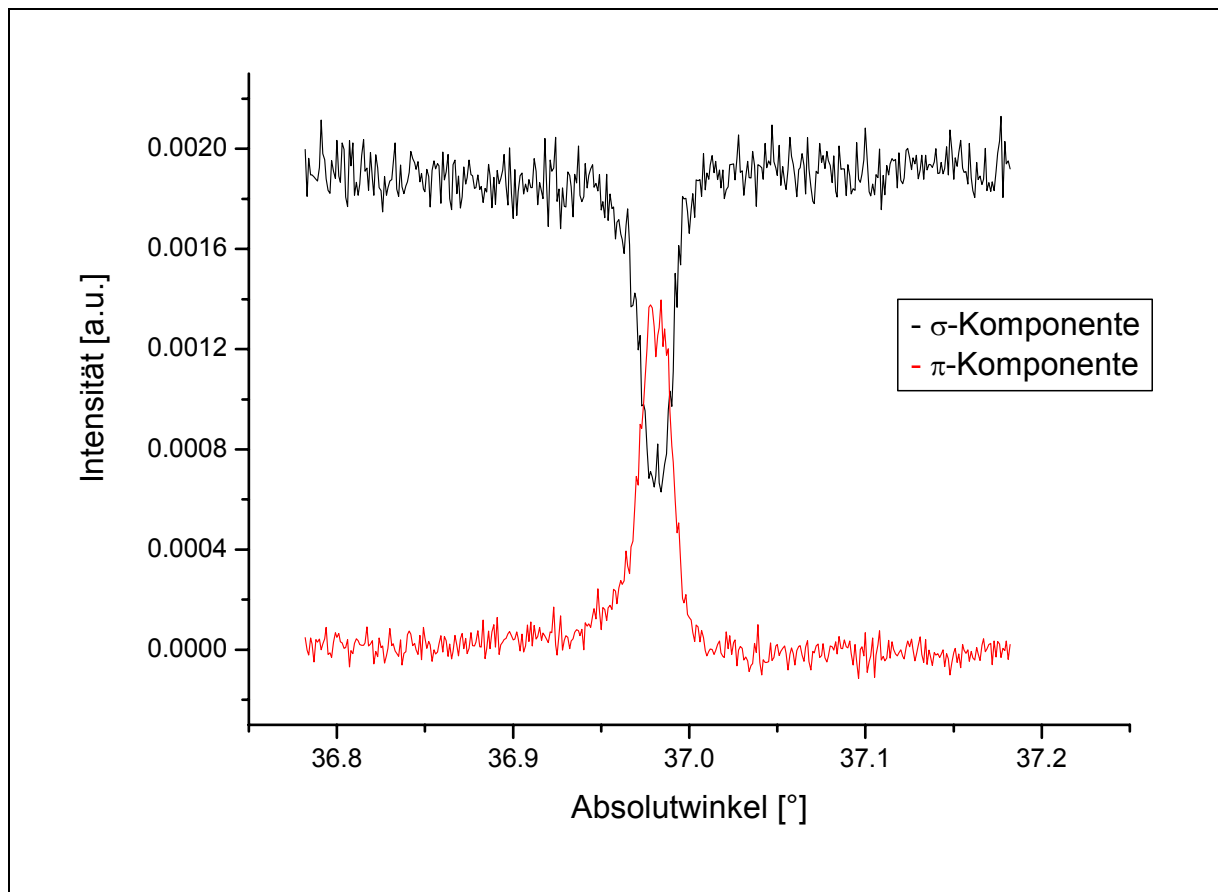


Abbildung 53: Darstellung der Intensitäten der π - und σ -Komponenten zur experimentellen Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades.

Auffallend ist das große Rauschen der Messung. Dies ist auf die mit drei Sekunden recht kurz gewählte Messzeit pro Messpunkt und den großen Abstand des Streukörpers zum Szintillationszähler sowie zum Austrittsfenster des Strahles zurückzuführen, was erhebliche Intensitätsverluste in Luft zur Folge hatte. Auf eine weitere rauschärmere, dafür erheblich längere Messung wurde jedoch verzichtet, da die bereits gemessene ausreichend war um die theoretischen Simulationen zu bestätigen.

Abbildung 54 zeigt den aus der Messung gewonnen und den in Kapitel 3.1.2 beschriebenen Formeln simulierten realen zirkularen Polarisationsgrad. Um bei der Simulation die Winkeldivergenz mit zu berücksichtigen, wurde über das gesamte Gaußprofil (vgl. Abb. 52) gemittelt. Ebenso wurde ein „Winkeloffset“ von 0.014° von den gemessenen Werten abgezogen, um den Braggpeak für die gemessenen und simulierten Werte auf den gleichen Abweichungswinkel zu legen. Dieser Offset ist auf die manuelle 0° -Eichung des Phasenschiebers zurückzuführen.

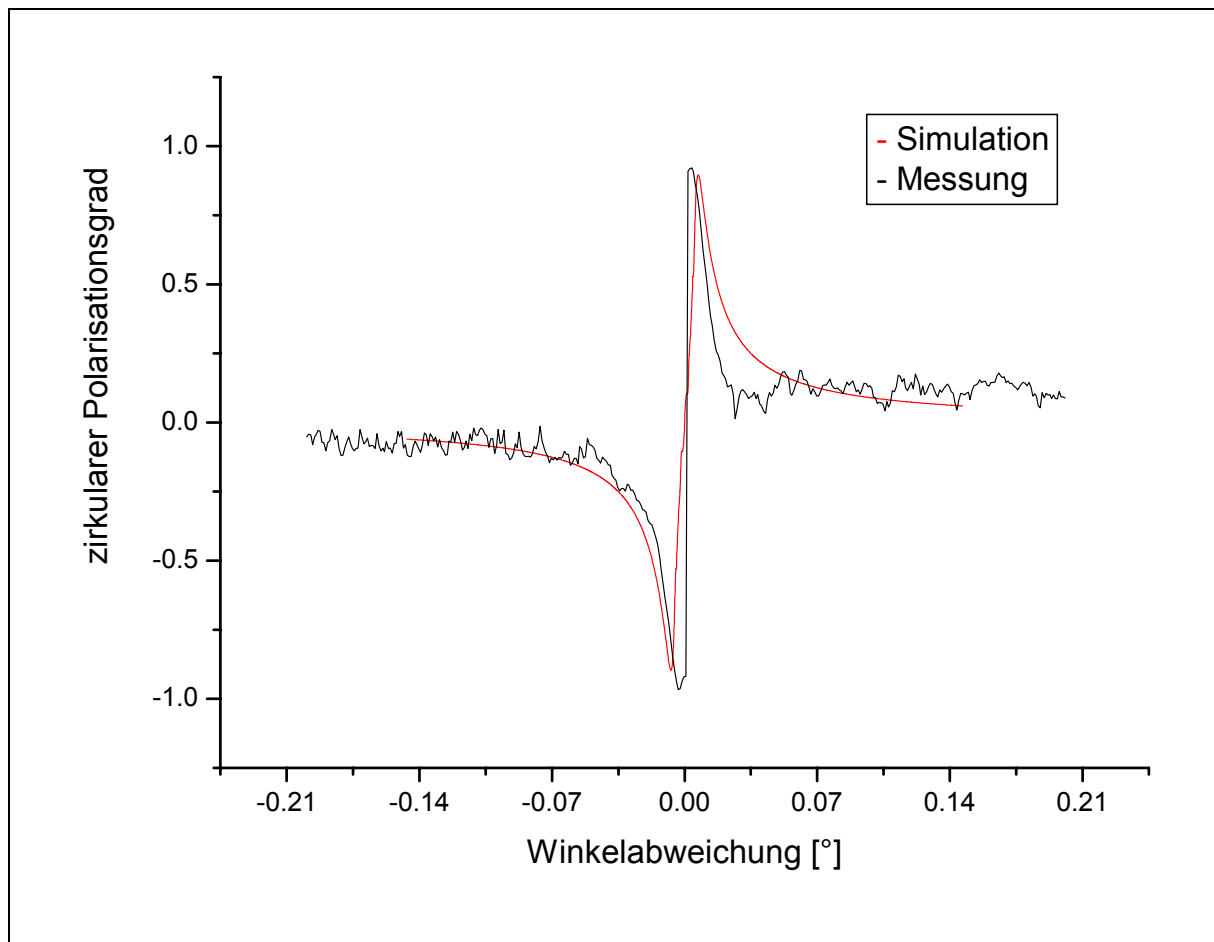


Abbildung 54: Experimentell bestimmter und simulierter zirkularer Polarisationsgrad bei einer Energie von $E = 11557\text{eV}$ zur Bestimmung des Abweichungswinkels und des zugehörigen zirkularen Polarisationsgrades.

Der maximale zirkulare Polarisationsgrad wurde anhand der Simulation zu 87% bei einem Abweichungswinkel von $7/1000^\circ$ bestimmt und wurde für die folgenden XMCD-Experimente so beibehalten. Bis auf im Bereich der Flanke bei positiven Abweichungswinkeln stimmt der gemessene Polarisationsgrad gut mit dem simulierten überein. Diese Abweichung im Bereich von 0.01° bis 0.05° könnte durch eine vergrößerte anormale Absorption in diesem Bereich erklärt werden. Dies wurde jedoch durch weiterführende Messungen nicht weiter untersucht, da es für die folgenden XMCD-Messungen nicht relevant ist.

3.3.2 Bestimmung der optimalen Lock-In-Frequenz

Wie bereits im vorigen Kapitel erwähnt, wurde, um lastfreier arbeiten zu können, jedem der vier Eingangskanäle der AD-Wandlerkarte ein Spannungsfolger vorangeschaltet. Um das Übertragungsverhalten dieser zu überprüfen, wurden mit Hilfe eines Frequenzgenerators Rechteckspannungen verschiedener Frequenzen erzeugt und die unterschiedlichen Messbereiche der auch am Synchrotron verwendeten Elektrometer der Firma Keithley getestet.

Dabei wurde festgestellt, dass es ab einer Frequenz von 10Hz zu nennenswerten Phasenverschiebungen und zu einer Verminderung des Spannungs- bzw. Stromsignals kommt. Um bei den folgenden Messungen am Synchrotron auf der sicheren Seite zu sein, wurde für die durchgeführten Experimente eine Frequenz von 5Hz gewählt. Für die Messbereiche der Keithleys wurde ein unterer „Range“ von 20nA ermittelt. Bei den Messbereichen unterhalb von 20nA werden die Elektrometer zu träge und integrieren zu stark, wodurch aus der eigentlichen Rechteckfunktion eine Dreieckfunktion entsteht.

Um Aussagen über das Rauschen des gesamten Messaufbaus und zur Überprüfung der gewählten 5Hz machen zu können, wurde bei ANKA eine I_0 -Messung durchgeführt bei der mit einer Abtastfrequenz (Sampling-Rate) von 20000Hz zwei Sekunden lang die Eingangsintensität gemessen wurde. Mit Hilfe einer Fast-Fourier-Transformation (FFT) wurde daraus ein Frequenz-Rauschspektrum ermittelt welches in Abbildung 55 zu sehen ist.

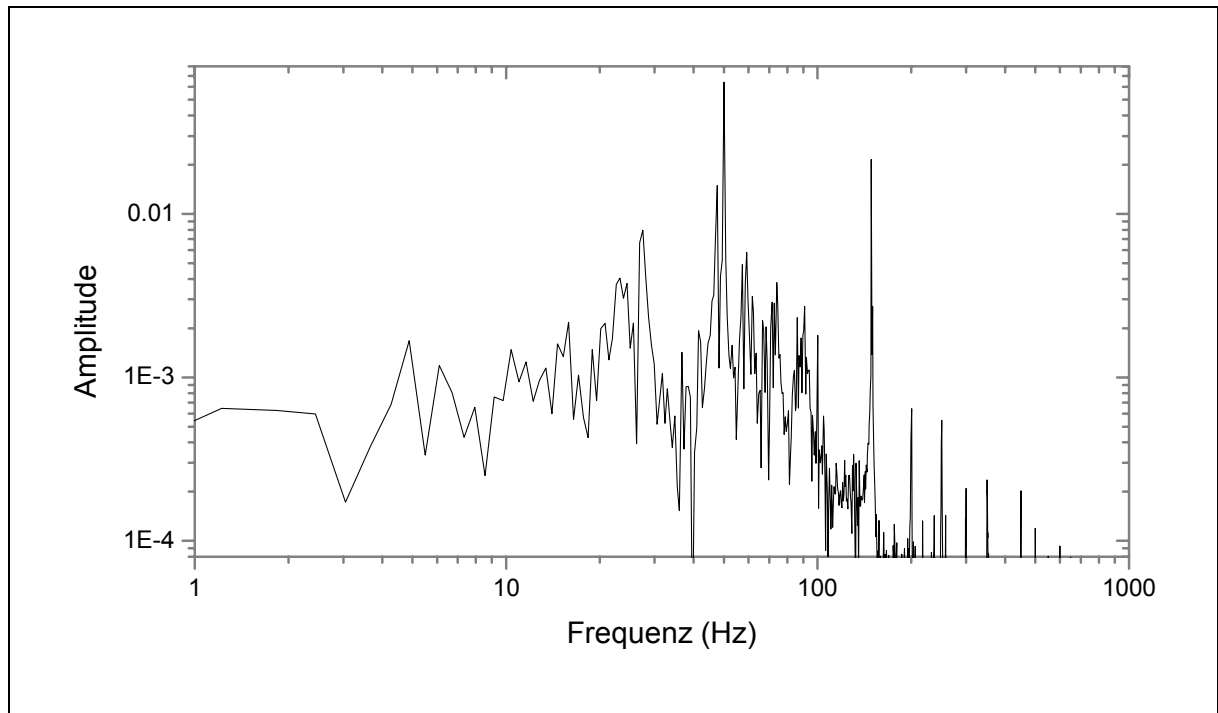


Abbildung 55: Frequenzspektrum von I_0 ermittelt über eine FFT (Fast-Fourier-Transformation).

Auffallend sind insbesondere das unvermeidliche Netzbrummen von $f = 50\text{Hz}$ und dessen dritte Oberwelle, welche sich beide stark vom Untergrundrauschen abheben. Insgesamt betrachtet kann das Rauschen jedoch als genügend klein eingestuft werden, so dass keine weiteren Maßnahmen zur Abschirmung durchgeführt werden müssen. Ebenso sind keine Auffälligkeiten bei der gewählten Frequenz von 5Hz erkennbar.

3.3.3 XMCD-Messungen an Platinlegierungen

Das primäre Ziel im Rahmen dieses Teils der Arbeit war die Messung von dichroischen Energiespektren verschiedener Platinlegierungen. Bevor jedoch auf die eigentlichen XMCD-Messungen und auf die dichroischen Effekte eingegangen wird, sollen kurz die Proben vorgestellt und die makroskopischen magnetischen Eigenschaften anhand von SQUID-Messungen dargestellt werden.

3.3.3.1 Aufbau und Charakterisierung der Proben

Insgesamt standen für die Messungen bei ANKA drei verschiedene Platinlegierungen zur Verfügung. Bei der mit P1 bezeichneten Probe handelt es sich um eine $\text{Fe}_{80}\text{Pt}_{20}$ -Legierung, welche auf eine Dicke von $d \sim 6\mu\text{m}$ gewalzt wurde. Da solche Legierungen eine „in-plane“-Magnetisierung aufweisen, wurde ein spezieller Probenhalter konstruiert, mit dessen Hilfe die Probe unter einem Winkel von 60° zum Strahl und zum äußeren Magnetfeld bei ANKA untersucht werden kann. Mit einer solchen Anordnung lassen sich die notwendigen Komponenten durch Vektorzerlegung bestimmen und die absolute Magnetisierung des Platins berechnen.

Die mit P2 bezeichnete Probe ist ein auf wenige μm ausgedünnter $\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Einkristall, die mit P3 bezeichnete ein ebenso ausgedünnter $\text{Co}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Einkristall. Beide Einkristalle weisen ebenfalls eine in-plane Magnetisierung auf und wurden deswegen unter demselben Winkel wie die Probe P1 zur Untersuchung am Synchrotron eingebaut.

Zur Veranschaulichung der starken Anisotropie durch die vorhandene „in-plane“-Magnetisierung ist exemplarisch eine SQUID-Messung der Probe P1, welche unter einem Winkel von 60° zwischen Magnetfeld und Probenachse im SQUID eingebaut war, in Abbildung 56 dargestellt.

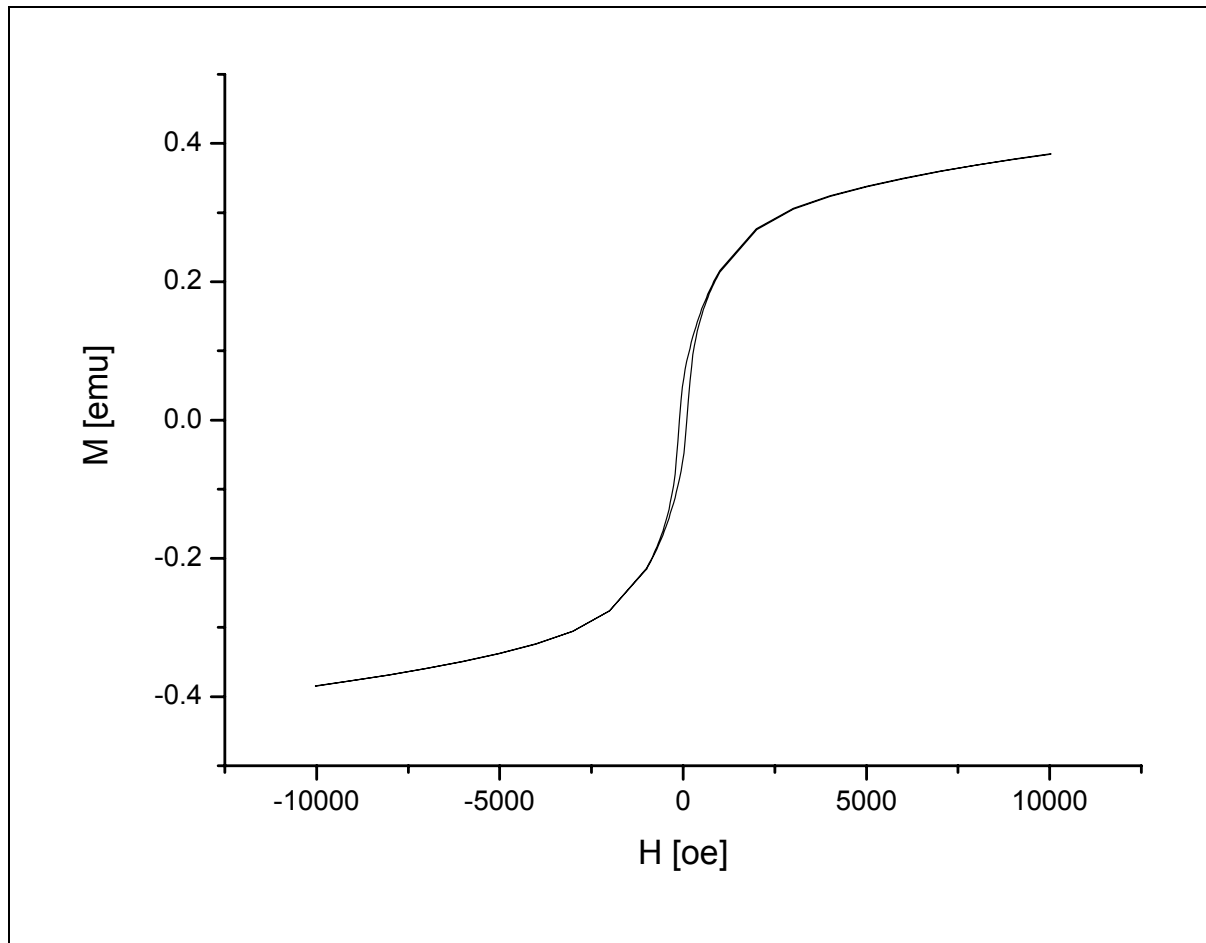


Abbildung 56: Hysterese der Probe P1 bei $T = 300\text{K}$ im SQUID unter einem Winkel von 30° zur Oberflächennormalen gemessen.

Die verwendeten Felder, welche bei ANKA zum Umpolen der Proben verwendet wurden, lagen bei $B = 200\text{mT}$, so dass lediglich die Magnetisierung „in-plane“ sich änderte, diese aber noch nicht aus der Probenebene herausgedreht wurde.

3.3.3.2 Darstellung der Ergebnisse der XMCD-Messungen

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse der XMCD-Messungen sowie ein Vergleich mit Referenzmessungen vorgestellt werden. Eine Diskussion der Ergebnisse sowie eine Fehlerbetrachtung erfolgen im folgenden Kapitel.

Alle Messungen der drei Proben wurden mit einem zirkularen Polarisationsgrad von 87% durchgeführt. Zudem wurde jede Messung mit entgegengesetztem Magnetfeld wiederholt und

der Mittelwert aus beiden gebildet. Alle im Folgenden dargestellten XMCD-Spektren sind bereits auf 100% zirkulares Licht normiert. Der aufgrund der bereits erwähnten nicht parallelen Orientierung der Probe zum Strahl entstandene Winkelfehler ist ebenfalls in den gezeigten Spektren korrigiert. An jedem einzelnen Energiepunkt wurde 30 Sekunden lang gemessen, wobei im Bereich der Kante eine Schrittweite von 0,33eV bis 0,5eV gewählt wurde. In den Bereichen vor und nach der Absorptionskante wurden die Abstände auf 1eV bis 2eV erhöht. Die folgenden drei Abbildungen zeigen die XMCD- und XAS-Spektren der drei untersuchten Proben.

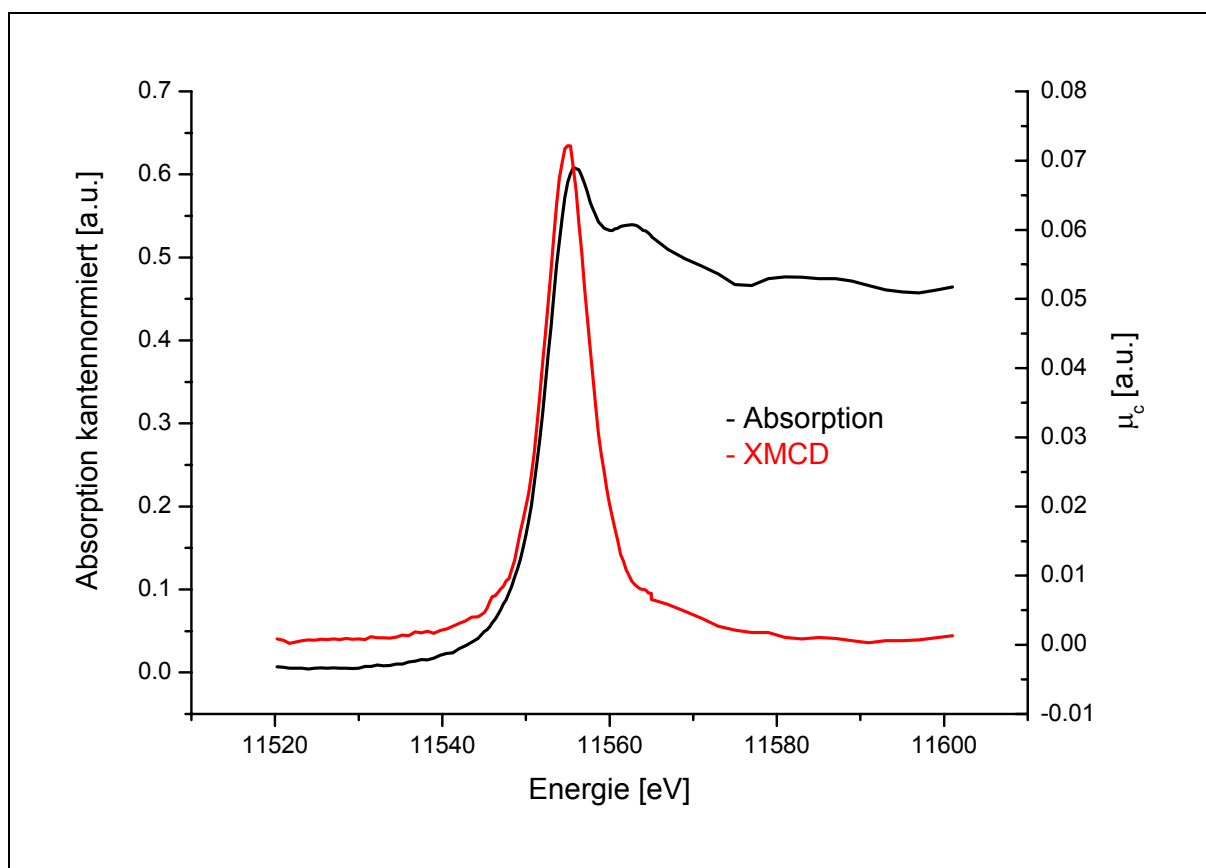


Abbildung 57: XAS- und XMCD-Spektrum der Fe₈₀Pt₂₀-Legierung bei Raumtemperatur.

Die Probe P1 zeigt einen maximalen XMCD-Effekt von 11,9% in Bezug auf den Kantenhub. Dieser liegt 1eV vor der PtL₃-Kante. Direkt auf der Kante liegt dieser noch bei 10,8%. Dies steht in guter Übereinstimmung mit Referenzmessungen von Gisela Schütz [SCH90].

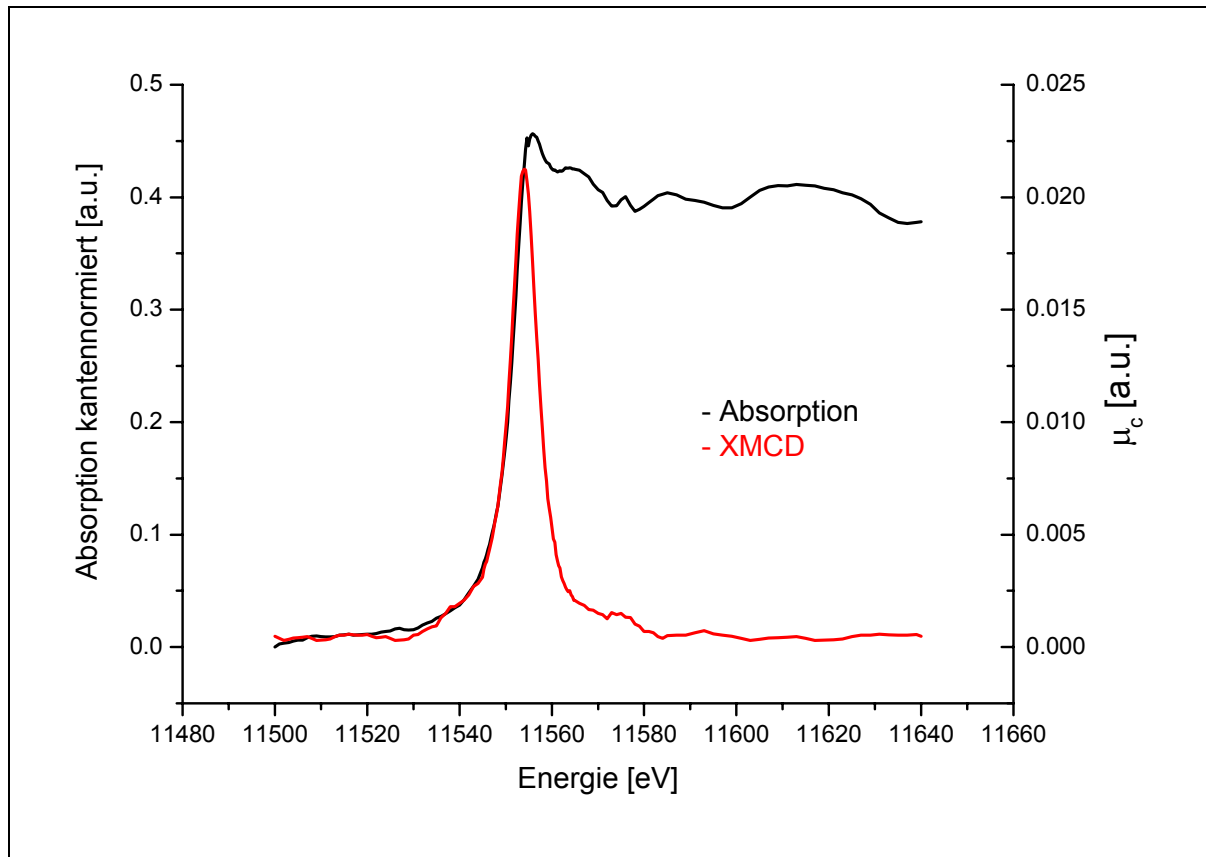


Abbildung 58: XAS- und XMCD-Spektrum der $\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Legierung bei Raumtemperatur.

Der in Probe P2 auftretende XMCD-Effekt beträgt 4,2% in Bezug auf den Kantenhub und liegt bei dieser Probe 2eV vor dem Maximum der Absorptionskante. Auf dem Maximum der Kante ist ein Effekt von 3,7% vorzufinden.

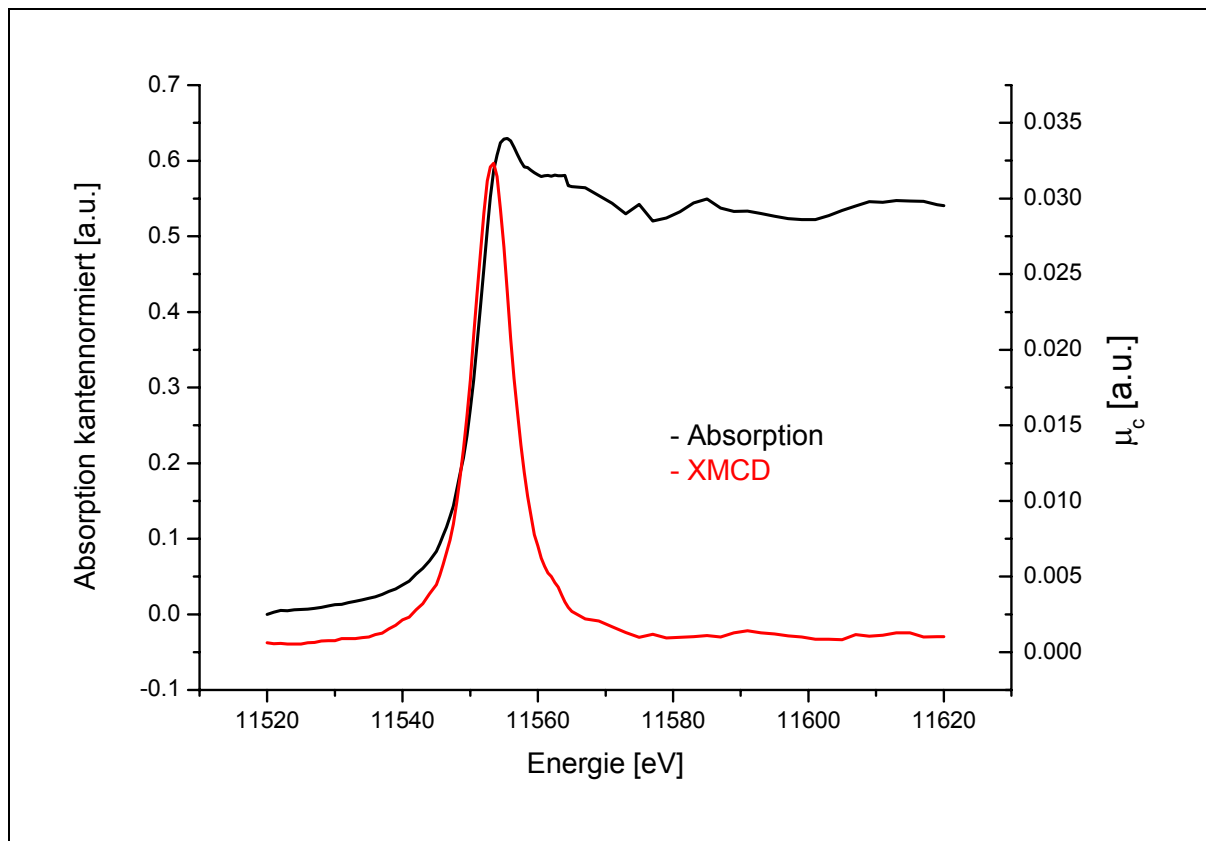


Abbildung 59: XAS- und XMCD-Spektrum der $\text{Co}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Legierung bei RT.

Der $\text{Co}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Einkristall (P3) zeigt einen XMCD-Effekt von 4,8% in Bezug zum Kantenhub. Das Maximum ist ebenfalls um 2eV zu kleineren Energien verschoben, wobei auf der Kante noch ein Effekt von 3,8% vorhanden ist. Vergleichsmessungen von Grange et al. [GRA00] zeigen an einer $\text{Co}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Legierung einen Effekt von etwa 9%. Dabei handelt es sich jedoch nicht wie bei der Probe P3 um einen Einkristall, sondern um einen gesputterten dünnen Film womit sich die Unterschiede erklären könnten.

Probe P1 hat ihre Kante bei $E = 11555,7\text{eV}$, die beiden anderen Proben bei $E = 11555,5\text{eV}$. Bei allen drei Proben ist festzustellen, dass der maximale XMCD-Effekt knapp vor der Kante zu finden ist. Dies wurde bereits von Justen [JUS00] nachgewiesen. Die Ursache der an der PtL_3 -Kante entstehenden dichroischen Effekte liegt in der 3d-5d-Hybridisierung [ODI99].

3.3.4 Diskussion der Ergebnisse und Fehlerbetrachtung

Eine exakte Fehlerrechnung ist aufgrund der zahlreichen Abweichungen nicht möglich, so dass an ihre Stelle eine Diskussion der möglichen Fehlerquellen treten soll. Vorweg ist noch zu bemerken, dass das Signal-Rausch-Verhältnis bei den durchgeführten XMCD-Experimenten aufgrund der verwendeten Lock-In-Technik im Bereich der Photonenstatistik liegt [WEI03] und daher die Elektronik nicht der limitierende Faktor ist.

- Wegen der relativ großen Wegstrecken des Lichtstrahls in Luft und der Absorption des Streukörpers bei der Ermittlung des Polarisationsgrades, was mit hohen Intensitätsverlusten einhergeht, kommt es zu einem großen Fehler im Bereich der Zählstatistik. Daher wurde zur Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades nicht das verrauschte gemessene sondern das simulierte Spektrum benutzt. Beide sind jedoch im Bereich des verwendeten Abweichungswinkel annähernd gleich, weshalb wie bereits in Kapitel 3.3.1 erwähnt eine erneute experimentelle Bestimmung auch aus Gründen der Zeitersparnis nicht mehr vorgenommen wurde.
- Da wegen des hohen linearen Polarisationsgrades für das bis zum Phasenschieber laufende Licht mit schmalen Spalten an der „Beamline“ gearbeitet werden musste, können Strahllagenänderungen, welche während einer Ringfüllung entstehen, zu Änderungen des Polarisationszustandes führen. Eine Berücksichtigung dieser konnte jedoch im Experiment nicht erfolgen. Ebenso ist es aufgrund der bereits justierten Elemente kaum möglich solche Änderungen, welche auch Auswirkungen auf die Strahldivergenz haben können, zum einen quantitativ zu erfassen und zum anderen zu korrigieren.

Der zuletzt aufgeführte Punkt stellt eine Fehlerquelle dar, dessen Größe wie bereits erwähnt nicht exakt abgeschätzt werden kann. Es kann lediglich gesagt werden, dass es bei verschiedenen zeitlich versetzten Messungen in denen auch Ringfüllungen stattfanden zu keinen erkennbaren Unterschieden in den Spektren kam, so dass der daraus resultierende Fehler als sehr gering eingestuft werden kann.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Die resonante magnetische Röntgenreflektometrie (XRMR) ist eine Kombination aus der konventionellen Röntgenreflektometrie und dem XMCD-Effekt. Diese erlaubt die Bestimmung von magnetischen Dichteprofilen in Schichtsystemen. Damit können über Veränderungen der magnetischen Momente an den Grenzflächen Einblicke in die magnetischen Wechselwirkungen gewonnen werden. Mit dieser einzigartigen Technik lassen sich neben der Bestimmung von Schichtdicken und vertikalen Grenzflächenrauigkeiten tiefenabhängige magneto-optische Profile erstellen, welche proportional zur lokalen Magnetisierung sind. Wegen der hohen Empfindlichkeit und der Elementselektivität können selbst nichtmagnetische Schichten, dessen Atome durch induzierte Effekte in den Grenzflächenbereichen magnetische Momente erfahren, detailliert untersucht werden.

Die zu untersuchende Messgröße ist hierbei das Asymmetrieverhältnis, welches durch Aufnahme zweier Messungen in der Nähe einer Absorptionskante mit invertierter Helizität oder umgekehrter Magnetisierungsrichtung der Probe gewonnen wird. Im Gegensatz zu den Reflexionsspektren ist dieses Messsignal frei von überlagerten Störgrößen, und es enthält Informationen über das tiefenabhängige Magnetisierungsprofil der untersuchten Schichten. Die Modellierung der magneto-optischen Konstanten geschieht mit Hilfe eines neu entwickelten Computerprogramms, welches eine künstliche Unterteilung des Schichtsystems in dünne Einzelschichten vornimmt. Um die Asymmetrien und Reflektivitäten auch bei niedrigen Energien ($E < 2\text{keV}$) simulieren und korrekt interpretieren zu können, sind im Rahmen dieser Arbeit sowohl Polarisations- als auch Winkelabhängigkeiten der magnetischen und nicht magnetischen Streutherme in den für die Reflektivitäten grundlegenden Parratt-Formalismus eingearbeitet worden. Bisherige Verfahren waren zum einen beschränkt auf kleine Einfallswinkel in denen die Kleinwinkelnäherung galt, zum anderen mussten magnetische Effekte manuell ausgewertet werden.

Wichtig für die Simulation der Asymmetrieverhältnisse sowie der Reflektivitäten ist die sorgfältige Bestimmung der optischen Konstanten. Dabei werden die absorptiven Anteile des Ladungsterms des komplexen Brechungsindex über ein gesondertes XAS-Experiment bestimmt. Die magnetischen absorptiven Konstanten werden mittels eines XMCD-Experiments ermittelt. Die Berechnung der Dispersion erfolgt über die Kramers-Kronig-Relation.

Über XRMR-Messungen an der CuL_3 -Kante an einem CoFe/Cu/CoFe/Cr -Schichtsystem ist es erstmals gelungen den Magnetisierungsverlauf einer Kupferschicht im Innern eines GMR-Elements orts aufgelöst zu bestimmen. Speziell zeigt hierbei die aufgrund der 3d-3d-Hybridisierung entstandene Kupferpolarisation ein gemittelttes magnetisches Moment von $0,004\mu_B$ pro Kupferatom. Der maximale Wert von $0,01\mu_B$ pro Atom wird bei einer Konzentration von lediglich noch 0,1% Kupfer erreicht.

Untersuchungen an der CoL_3 -Kante zeigten an der Grenzfläche zu Kupfer einen Abfall der Magnetisierung des Kobalts von 43%. An der Grenzfläche zur Chrom Deckschicht wurde ein Anstieg von 23% gemessen. An der Grenzschicht zum Substrat wurde ein Anstieg von 12% ermittelt.

Sowohl die Messungen an der CuL_3 - als auch an der CoL_3 -Kante wurden an der Undulatorbeamline UE46-PGM am Berliner Synchrotron BESSY durchgeführt und demonstrieren in eindeutiger Weise die Einzigartigkeit dieser Methode vergrabene Schichten zu untersuchen. So können mit diesem Verfahren zerstörungsfrei quantitative Untersuchungen an magneto-elektronischen Komponenten der viel versprechenden „Spintronic“ durchgeführt werden.

Weiterhin erlaubt die XRMR-Methode die Aufnahme elementselektiver Hysteresen vergrabener Schichten sowie die Durchführung spektroskopischer Untersuchungen unter Reflexionsbedingungen. Durch die Weiterentwicklung des computergestützten Auswerteverfahrens steht eine Software zur Simulation von unter Reflexionsbedingungen gewonnenen XAS-Spektren zur Verfügung. Zusätzlich besitzt die Software das Potential über eine Modifikation dichroische Energiespektren unter Reflexionsbedingungen sowohl für konstante Winkel als auch für konstante Impulsüberträge zu simulieren.

Durch die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Weiterentwicklung eines bereits bestehenden XMCD-Experiments für Photonenenergien höherer Energie steht eine Messmethodik mit großen Vorteilen gegenüber konventionellen Methoden zur Durchführung spektroskopischer Untersuchungen zur Verfügung. So sind durch den Einsatz eines Phasenschiebers dichroische Experimente jetzt auch mit linear polarisierter Röntgenstrahlung an Wiggler/ Undulator Strahlplätzen sowie in Zukunft an XFELs (X-Ray Free Electron Laser) durchführbar. Basierend auf digitaler Energieaufbereitung besitzt diese Methode ein Signal-Rausch-Verhältnis in der Nähe der Photonenstatistik und liefert durch den periodischen Wechsel der Helizität einen großen Zeitgewinn gegenüber Untersuchungsmethoden mit Magnetfeldwechsel. Durch den Einsatz einer Rechteckfunktion als Anregungsfunktion wird

ständig der maximale zirkulare Polarisationsgrad erreicht, welcher deutlich größer ist als der effektive Polarisationsgrad der früher verwendeten Sinusanregung.

Durch speziell auf die ANKA-MPI-MF-Beamline am Karlsruher Synchrotron zugeschnittene apparative Umbaumaßnahmen steht ein transportables XMCD-Experiment zur Verfügung, welches in kürzester Zeit aufgebaut und justiert werden kann.

Für die magnetischen Untersuchungen an unterschiedlichen Platinlegierungen wurde der symmetrische (400)-Reflex zweier vorhandener Diamanten verwendet. Aufgrund dieses Gitterreflexes ist die Anwendbarkeit des Phasenschiebers jedoch beschränkt auf Photonenenergien von $E > 7\text{keV}$.

Zwingend erforderlich für eine quantitative Interpretation der XMCD-Spektren ist die exakte Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades. Dieser wurde für die Energie von $E = 11,56\text{keV}$, was der Energie der PtL_3 -Kante entspricht, bestimmt zu $P_C = 87\%$. Simulationen des zirkularen Polarisationsgrades mit einem neu dafür entwickelten Programm bestätigten dieses Ergebnis.

Über Messungen an drei verschiedenen Platinlegierungen mit Hilfe der digitalen Lock-In-Technik war es möglich extrem rauscharme XMCD- und XAS-Spektren aufzunehmen.

Hierbei zeigte eine gewalzte $\text{Fe}_{80}\text{Pt}_{20}$ -Legierung einen XMCD-Effekt an der PtL_3 -Kante von 11,9% bezogen auf den Kantenhub. Ursache für das Auftreten dieses magnetischen Effekts im Platin sind induzierte Momente aufgrund der 3d-5d-Hybridisierung.

Untersuchungen an ausgedünnten Platinlegierungen kamen zu folgenden Ergebnissen: Bei einem $\text{Co}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Einkristall wurde ein kantennormierter Effekt von 4,8% ermittelt. Ein ausgedünnter $\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$ -Einkristall zeigte einen XMCD-Effekt von 4,2%.

Alle Messungen wurden bei Raumtemperatur und unter normaler Atmosphäre durchgeführt und demonstrieren eindrucksvoll die Vorteile der digitalen Signalaufbereitung unter Verwendung der Lock-In-Technik.

Verschiedene Tests bei Energien von $E < 7\text{keV}$ unter Verwendung des asymmetrischen (111)- und (220)-Reflexes bestätigen bereits die Anwendbarkeit dieser Methode bei geringeren Energien. Um die unvermeidliche Absorption an Luftmolekülen zu reduzieren wurde eine Konstruktion entwickelt, welche es erlaubt einen Großteil des Aufbaus unter Heliumatmosphäre zu setzen bzw. zu evakuieren.

Die Neukonstruktion einer empfindlichen, mit Argon gefüllten Ionisationskammer sowie der Neubau von geeigneten Probenhaltern ermöglicht ebenfalls den Einsatz der XRMR-Methode bei höheren Energien bei ANKA. Damit lassen sich in Zukunft interessante Schichtsysteme,

welche auch heute schon als magneto-optische Speichermedien zum Einsatz kommen, auf ihre magnetischen Eigenschaften hin untersuchen.

Literaturverzeichnis

- [ANKweb] http://ankaweb.fzk.de/instrumentation_at_anka/beamlines.php?id=13&field=3
- [ALS01] Als-Nielsen, J.: "Modern X-ray Physics", London, 2001
- [AUT77] A. Authier: in „X-ray Optics“ (Topics of Applied Physics, Volume 22), Springer, Berlin, 1977
- [BAH93] Bahr D., Press W., Phys. Rev. B 47, 4385 (1993)
- [BAI88] Baibich, M. N., Broto, J. M., Fert, A., Petroff, F., Etienne, P., Creuzet, G., Friedrich, A, and Chazelas, J: "*Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*", Phys.Rev.Lett. 61, 2472 (1988)
- [BEL89] Beljakov V.A., Dmitrienko, V.E. Sov. Phys. Usp. 32, 697, 1989
- [BES73] Bergmann-Schäfer, Lehrbuch der Experimentalphysik III: Optik (1973)
- [BIN89] Binasch, G., Grünberg, P., Saurenbach, F., and Zinn, W.: "*Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange*", Phys.Rev.B 39, 4828 (1989)
- [BLA98] Bland, J. A. C., Daboo, C., Patel, M., and Fujimoto, T.: "*Interface selective vector magnetometry of FeNi/Cu/Co trilayer spin-valve structures*", Phys.Rev.B 57, 10 272 (1998)
- [BLU85] Blume, M., Journal of Applied Physics 57, 3615 (1985)
- [BOA66] J.W. Boag in „Radiation Dosimetry Vol. 2: Instrumentation“, edited by F.H. Attix, Academic Press, New York, 1966
- [BOR55] G. Borrmann, Z. f. Krist. 106, 109, 1955
- [BRA83] B. H. Bransden, C. J. Joachain, Physics of atoms and molecules, Addison Wesley Longman Limited, (1983)
- [BRA93] B.H. Bransden, C.J. Joachain: „Physics of Atoms and Molecules“, Longman, Essex, 1983
- [BRÜ98] U. Brüggmann, M. Tischer, K. Attenkofer, L. Tröger, „New Ionization Chambers for XAFS Beamlines“, HASYLAB Jahresbericht (1998)
- [BRY00] Bychkov, A. M., Yakimenko, I. I., und Berggren, K. F., Nanotechnology 11, 318 (2000)
- [CAR93] Carra P., Thole B.T., Altarelli M., Wang X., Physical Review Letters 70, 694 (1993)
- [CHA98] V. Chakarian, Y. U. Idzerda, C. T. Chen, Physical Review B 57, 5312 (1998)

- [CHE95] Chen, C. T., Idzerda, Y. U., Lin, H. J., Smith, N. V., Meigs, G., Chaban, E., Ho, G. H., Pellegrin, E., und Sette, F., *Physical Review Letters* 75, 152 (1995)
- [CRO68] Cromer, D. T. und Mann, J. B., *Acta Cryst.A* 24, 321 (1968)
- [CRO70] Cromer, D. T. und Liberman, D., LASL.Report LA-4403.Los Alamos Scientific Laboratory, New Mexico (1970)
- [CRO78] Croce, P., *Nouvelle Revue d'Optique* 9, 61-63 (1978)
- [CRO81] Cromer, D. T. und Liberman, D. A., *Acta Cryst.A* 37, 267 (1981)
- [DET97] Detlefs C., Dissertation (1997)
- [DOS86] Dosch, H., Buttermann, B. W., und Wack, D. C., *Physical Review Letters* 56, 1144 (1986)
- [EWA17] P.P. Ewald, *Ann. Phys.* 519, 1917
- [GEJ03] Geißler, J., Dissertation, Universität Würzburg (2003)
- [GOE01] Goering, E., Gold, S., und Schuetz, G., *Journal of Synchrotron Radiation* 8, 422 (2001)
- [GOE02] Goering, E., Bayer, A., Gold, S., Schuetz, G., Rabe, M., Rüdiger, U., und Güntherodt, G., *Physical Review Letters* 88, 203 (2002)
- [GOE06] Persönliche Mitteilung, E. Goering
- [GRA00] Grange, W. et al., *Phys.Rev.B* 62, (2000)
- [GRU01] Gruber, T., Keim, M., Fiederling, R., Reuscher, G., Ossau, W., Schmidt, G., Molenkamp, L. W., und Waag, A., *Applied Physics Letters* 78, 1101 (2001)
- [GRÜ02] Grünberg, P., Schreiber, R., Pang, Y, Brodsky, M. B., and Sowers, H.: *"Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers"*, *Phys.Rev.Lett.* 57, 2442 (2002)
- [HAM75] Hammer, D., *GIT* 5 (1975)
- [HAM91] Hamilton, W. A. und Pyan, R., *Physica B* 173, 71 (1991)
- [HAN88] Hannon J. P., Trammel G. T., *Physical Review Letters* 61, 1245 (1988)
- [HAR05] Harlander, M., Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2005)
- [HEL96] Held et al., *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter* 100 (3), (1996)
- [HEN93] Henke, B. L., Gullikson, E. M., und Davis, J. C., *Atomic Data and Nuclear Tables* 54, 181 (1993)
- [HMIweb] http://www.hmi.de/bensc/instrumentation/instrumente/v6/refl/parratt_en.htm

- [HOL99] Holy, V.: "High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers", Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999
- [HOY84] Hoyt, J. J., Warburton, W. K., und de Fontaine, D., J.Appl.Cryst. 17, 344 (1984)
- [HUN95] J. Hunter, Journal of Physics: Condensed Matter 7, 1111 (1995)
- [JAC75] Jackson, J. D., 2nd Edition, 281 (1975)
- [JEU96] De Jeu W. H., Shindler D., Mol E., Journal of Applied Crystallography 29, (1996)
- [JUS00] M. Justen, Diplomarbeit, Universität Würzburg (2000)
- [KOP93] K.Kopitzki: „Einführung in die Festkörperphysik“, Teubner, Stuttgart, 1993
- [KRO26] Kronig, R., J. opt. Soc., Am. 12, 47 (1926)
- [LAN98] Langer, J., Dissertation, Universität Jena (1998)
- [LAU60] Laue, M. v., Röntgenstrahlinterferenzen, Geest & Portig, Leipzig (1960)
- [LEE03] Lee, D. R. und Sinha, S. K., Physical Review B 68, 224409 (2003)
- [LEI97] W. Leitenberger. Polarisationserscheinungen bei der dynamischen Röntgenbeugung. Mathematisch- Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (1997).
- [LIB70] Cromer, D. T. und Liberman, D., Journal of Chemical Physics 53, 1891 (1970)
- [LIN00] Lindner, J., Pouloupoulos, P., Farle, M., and Baberschke, K.: Phys.Rev.B 62, 10431 (2000)
- [MAR99] H. Maruyama, M. Suzuki, N. Kawamura, M. Ito, E. Arakawa, J. Kokubun, K. Hirano, K. Horie, S. Uemura, K. Hagiwara, M. Mizumaki, S. Goto, H. Kitamura, K. Namikawa, T. Ishikawa, J. Sync. Rad. 6, 1133 (1999)
- [MCW90] McWhan, D. B., Vettier, C., Isaacs, E. D., Ice, G. E., Siddons, D. P., Hastings, J. B., Peters, C., und Vogt, O., Physical Review B 42, 6007 (1990)
- [MES61] Messiah, A.: "Quantum mechanics, Vol. 2", North-Holland Publishing Company, Amsterdam, Oxford, 1961
- [MOO95] Moodera, J. S., Kinder, L. R., Wong, T. M., and Meservey, R.: "*Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions*", Phys.Rev.Lett. 74, 3273 (1995)
- [NAK99] R. Nakajima, J. Stöhr, Y. U. Idzerda, Physical Review B 59(9), 6421 (1999)
- [NEU98] Neumann, C, Rogalev, A., Goulon, J., Lingham, M., und Ziegler, E., Journal of Synchrotron Radiation 5, 998 (1998)
- [NEV80] Névot, L. und Croce, P., Revue de Physique de Appliquée 15, 761 (1980)
- [NEY01] Ney, A., Pouloupoulos, P., und Baberschke, K., Europhys.Lett. 54, 820 (2001)

- [NRA00] http://www.ncnr.nist.gov/programs/reflect/NR_article/ (2000)
- [PAR54] L.G. Paratt, Phys. Rev. 95, 359, (1954)
- [PAR90] Parkin, S. S. P., More, N., and Roche, K. P.: "*Oscillations in exchange coupling and magnetoresistance in metallic superlattice structures: Co/Ru, Co/Cr, and Fe/Cr*", Phys.Rev.Lett. 64, 2304 (1990)
- [PI97] Physik Instrumente GmbH: „Operating Manual PZ 73E, E662, LVPZT Position Servo Controller“, Waldbronn, 1997
- [PIZ95] Pizzini, S., Fontaine, A., Giorgetti, C., Dartyge, E., Phys.Rev.B 74, (1995)
- [PIZ98] S. Pizzini, M. Bonfim, F. Baudelet, H. Tolentino, A. san Miguel, K. Mackay, C. Malgrange, M. Hagelstein, A, Fontaine: „Quater-Wave Plates and X-ray Magnetic Circular Dichroism ID24 at the ESRF“, Journal of Synchrotron Radiation, 5, 1298, 1998
- [SAL03] Salditt, T., Metzger, T. H., Brandt, Ch., Klemradt, U., und Peisl, J., Physical Review B 51, 5617 (2003)
- [SAM94] Samant, M. G., Stöhr, J., Parkin, S., Held, G. A., Hermsmeier, B. D., Herman, F., Physical Review Letters 72, (1994)
- [SCH87] Schuetz, G., Wagner, W., Wilhelm, W., Kienle, P., Zeller, R., Frahm, R., und Materlik, G., Physical Review Letters 58, 737 (1987)
- [SCH90] Persönliche Mitteilung, G. Schütz
- [SCH93] Schwegle, W., Dissertation, Universität Karlsruhe (1993)
- [SCH94] Schütz, G., Knülle, M., und Ebert, H., aus Konferenzband: Resonant Anomalous X-ray Scattering, Hrsg. Materlik,G.,Sparks,C.J.,Fischer, K., 535 (1994)
- [SCW92] Schwabl, F.: "Quantenmechanik", Springer-Lehrbuch, 1992
- [SIN88] Sinha, S. K., Sirota, E. B., Garoff, S., und Stanley, H. B., Physical Review B 38, 2297 (1988)
- [STE89] Stearns, D. G., Journal of Applied Physics 65, 491 (1989)
- [SUM98] Sumitomo Electric. Sumicrystal, Synthetic Single Crystal Diamond. General Catalogue, Hyogo, Japan (1998)
- [SUZ97] M. Suzuki, N. Kawamura, S. Goto, M. Mizumaki, M. Kuribayashi, J. Kokubun, K. Horie, K. Hagiwara, K. Ishida, H. Maruyama, T. Ishikawa, SPring8 Annual Report 1997, 235 (1997)
- [SUZ99] M. Suzuki, N. Kawamura, M. Mizumaki, A. Urata, H. Maruyama, S. Goto, T. Ishikawa, J. Sync. Rad. 6, 190 (1999)

- [TOL99] Tolan, M.: "X-ray scattering from soft matter thin films", Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999
- [VAN86] Van Der Laan, G., Thole, B. T., Sawatzky, G. A., Goedkoop, J. B., Fuggle, J. C., Esteva, J. M., Karnatak, R., Remeika, J. P., und Dabkowska, H. A., Physical Review B 34, 6529 (1986)
- [VEG97] Vega, A., Bouarab, S., Balbas, L. C., Demangeat, C., Dreysse, H., Journal of Magnetism and Magnetic Materials 165, 265-267 (1997)
- [WEI03] Weigand, F., Dissertation, Universität Würzburg (2003)
- [WIL00] Wilhelm, F., Bovensiepen, U., Scherz, A., Pouloupoulos, P., Ney, A., Wende, H., Ceballos, G., and Baberschke, K., J.Magn.Magn.Mater. 222, 163 (2000)
- [WMIweb] www.wmi.badw.de/E23/lehre/vorlesung/Vorlesung_Magnetoole_003.jpg
- [WOL01] Wolf, S. A., Awschalom, D. D., Buhrman, R. A., Daughton, J. M., Von Molnar, S., Roukes, M. L., Chtchelkanova, A. Y., und Treger, D. M., Science 294, 1488 (2001)
- [XIE04] Xie, T. et al., Journal of Physics-Condensed Matter 16 (48), 2004

Anhang A

Das PC-Programm

Um Reflektivitäten und Asymmetrien nicht mehr manuell modellieren zu müssen wurde ein auf C++ basierendes Simulations-Fit-Programm entwickelt. Mit diesem ist es möglich Reflektivitäten und Asymmetrien zu simulieren und an gemessene Spektren anzupassen. Die Benutzeroberfläche ist in Abbildung A1 gezeigt.

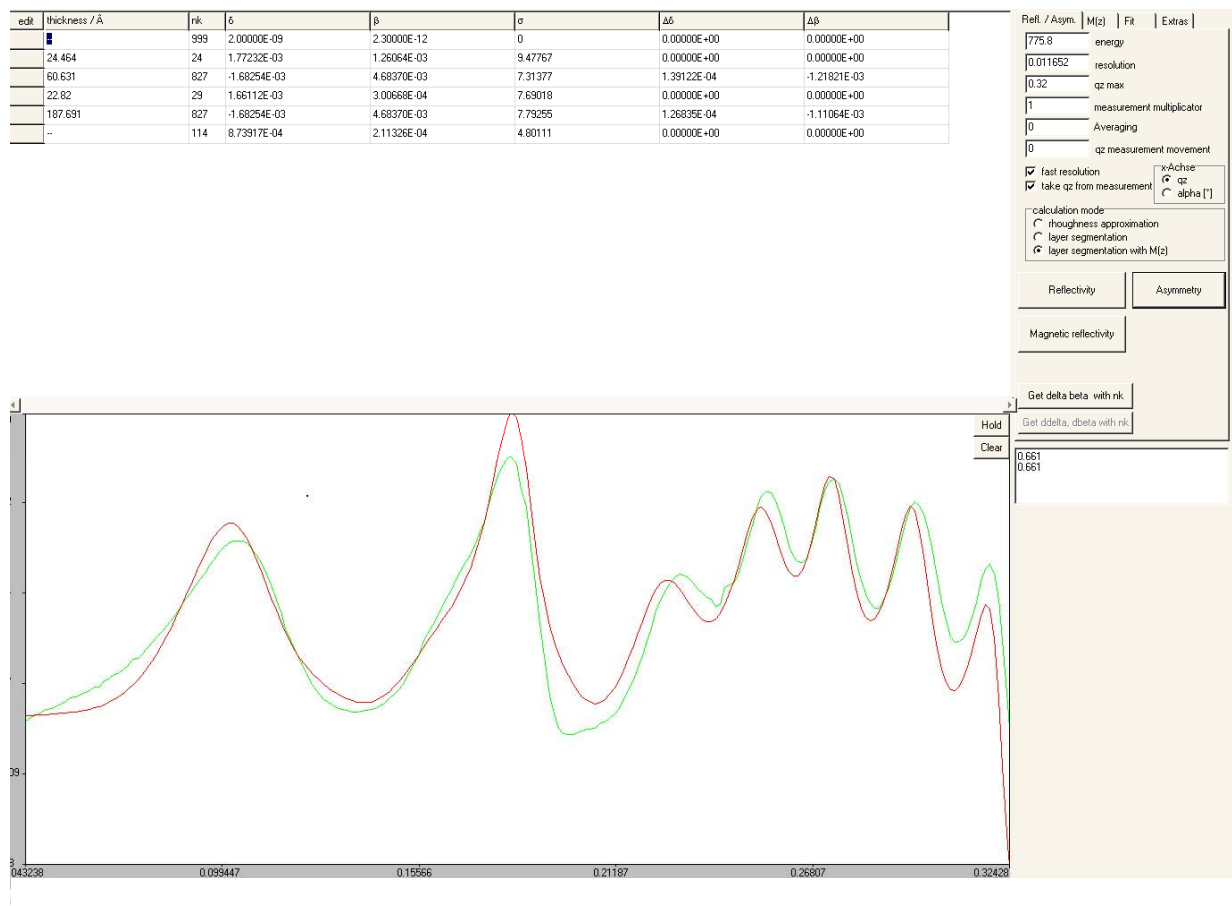


Abbildung A1: Benutzeroberfläche des neu entwickelten Programms zur Simulation von Reflektivitäten und Asymmetrien.

In der oberen, linksbündigen Tabelle werden die Parameter des Schichtstapels wie die Dicken, die Rauigkeiten, sowie die optischen und magneto-optischen Konstanten eingegeben. Dies erfolgt manuell oder kann für die entsprechenden Energien eingelesen werden. Im unteren Fenster werden Simulationen und die zuvor eingelesenen Messdaten dargestellt. Der rechte, obere Teil besteht aus 4 Untermenüs. Unter „Ref/Asym“ findet man Eingabefenster für die Energie, die Auflösung, Messdatenverschiebung,

Messwertmultiplikator, Mittelung über eine gewünschte Anzahl von Messpunkten sowie eine Auswahl von verschiedenen Modellen zur Schichtprofilunterteilung. Unter „Fit“ sind alle Fitoptionen zu finden, wobei jeder Parameter in der Schichteingabetabelle einzeln angepasst werden kann. Zudem kann angegeben werden, ob die Reflektivität (magnetisch oder unmagnetisch) oder die Asymmetrie „gefittet“ werden soll. Neben der Variation der einzelnen Parameter in gewünschten Abweichungen ist zusätzlich die Methode des „Simulated Annealing“ implementiert, um zu vermeiden, dass der Fit an lokalen Minima konvergiert. In $M(z)$ können die magneto-optischen Konstanten mit zusätzlichen magnetischen Profilen gefaltet werden, um magnetische Reflektivitäten und Asymmetrien anzupassen. Unter „Extras“ befinden sich drei verschiedene Segmentierungsverfahren um Schichtprofile zu erstellen sowie Eingabefenster für den Polarisationsgrad.

Das Programm selbst befindet sich in stetiger Weiterentwicklung. Zum einen um es benutzerfreundlicher zu machen, zum anderen um noch vorhandene Näherungen im Bereich der Streuung elliptisch polarisierter Strahlung an Grenzflächen zu eliminieren. So ist der Übergang der σ - und π -Komponenten untereinander bei der Streuung an jeder einzelnen Grenzfläche noch nicht implementiert, wodurch es bei nicht vollständig zirkularer bzw. nicht vollständig linearer Polarisation zu minimalen Fehlern kommen kann.

Anhang B

Simulationen des asymmetrischen (111)- und (220)-Reflexes

In diesem Teil des Anhangs sollen exemplarisch der reale zirkularen Polarisationsgrade der asymmetrischen (111)- und (220)-Reflexe bei verschiedenen Energien dargestellt werden. Diese asymmetrischen Reflexe sind insbesondere für zukünftige Experimente bei niedrigen Energien interessant. In den Diagrammen sind neben des Winkels für den Braggpeak θ die realen zirkularen Polarisationsgrade für verschiedene Halbwertsbreiten $\Delta\Phi$ der einfallenden Röntgenstrahlung über dem Abweichungswinkel dargestellt.

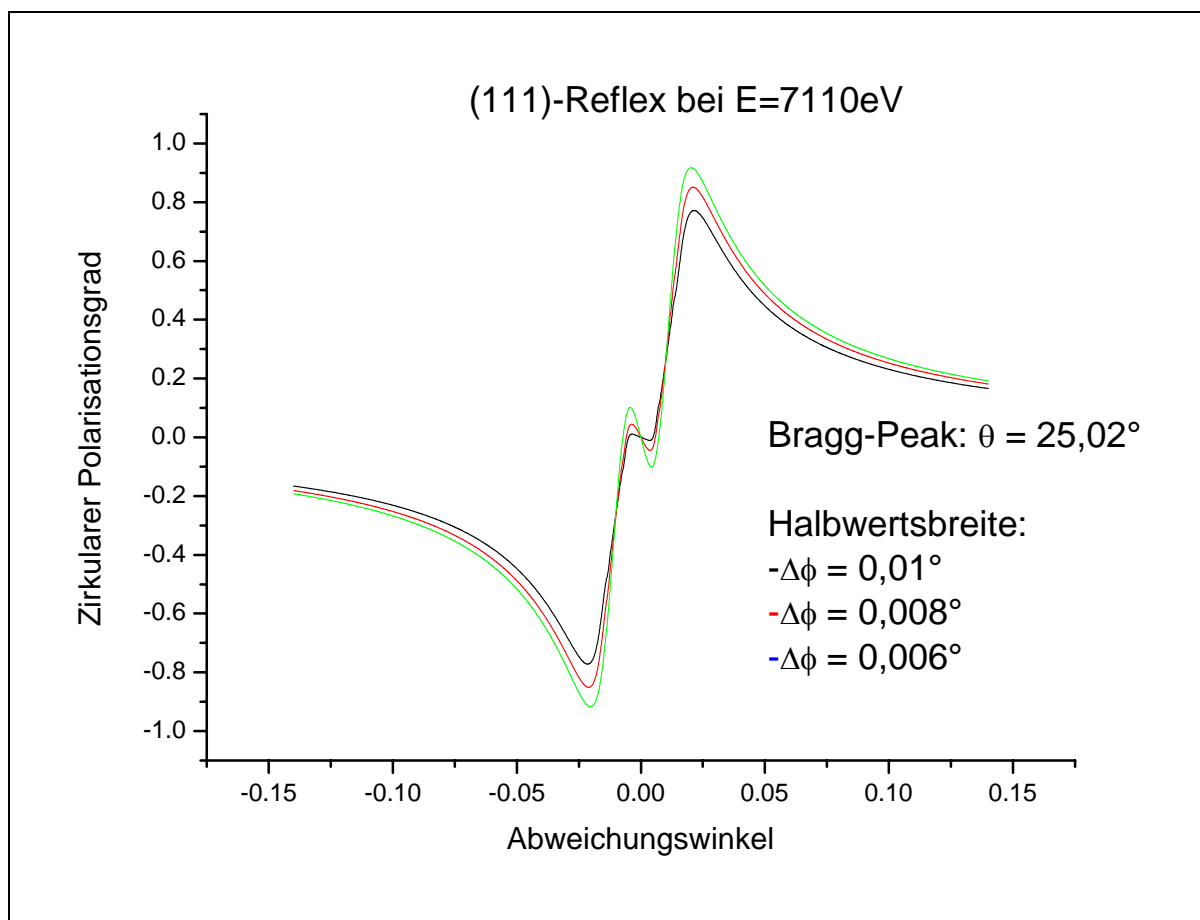


Abbildung B1: Simulierte reale Polarisationsgrade des (111)-Reflexes für verschiedene Halbwertsbreiten der einfallenden Röntgenstrahlung bei E=7110eV.

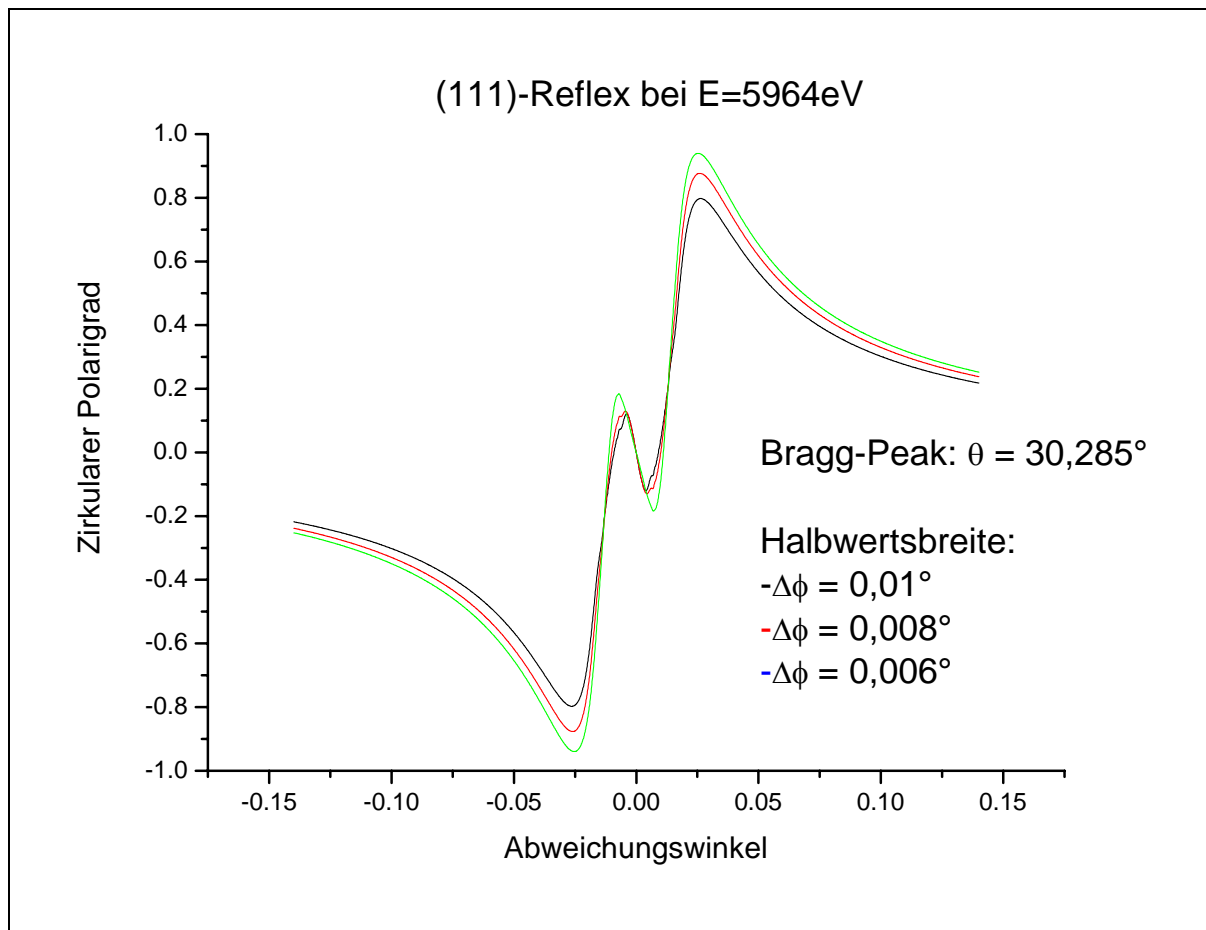


Abbildung B2: Simulierte reale Polarisationsgrade des (111)-Reflexes für verschiedene Halbwertsbreiten der einfallenden Röntgenstrahlung bei E=5964eV.

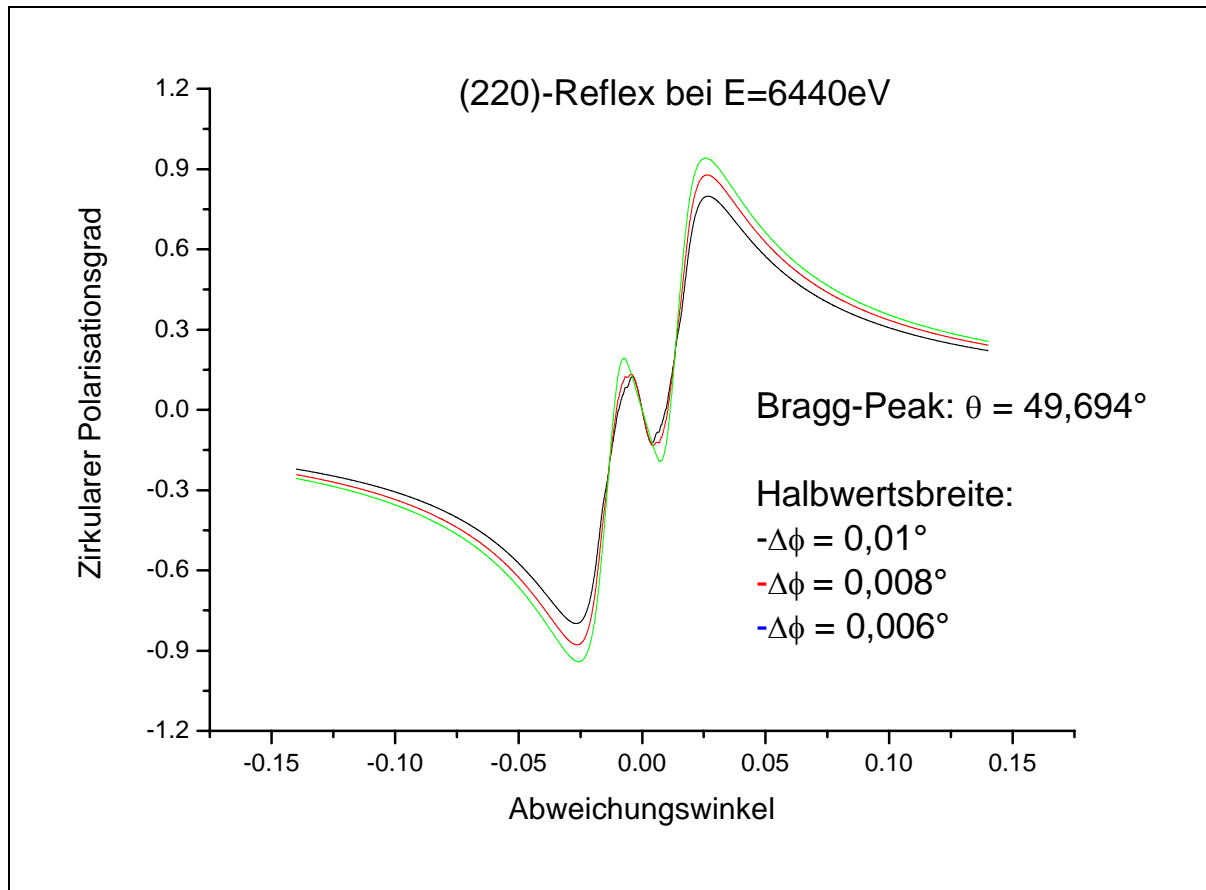


Abbildung B3: Simulierte reale Polarisationsgrade des (111)-Reflexes für verschiedene Halbwertsbreiten der einfallenden Röntgenstrahlung bei E=6440eV.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich noch bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Insbesondere bei:

Frau Prof. Dr. Gisela Schütz für die entgegenkommende Aufnahme in ihre Arbeitsgruppe und die interessante Themenstellung,

Herr Prof. Dr. Jörg Wrachtrup für die freundliche Übernahme des Mitberichts,

Eberhard Goering für die Betreuung der Arbeit,

Detlef und Paolo bei BESSY, sowie Ralf, Andreas und Nicolai bei ANKA für die angenehmen Wochen bei ihnen und ihre große Hilfe bei den vielen Strahlzeiten,

Sebastian Macke für die hervorragende Arbeit bei der Programmierung,

Sabine, Sonja, Katrin, Manfred, Martin und allen anderen Mitgliedern der Werkstätten und Servicegruppen für die gute Zusammenarbeit und ihre schnelle Durchführung von Aufträgen,

Ulrich, Stefan, Frank Adams und Herr Wochner der Abteilung Dosch für ihre Unterstützung bei den zusätzlichen Messungen,

Hönes für die vielen lustigen Tage während des Studiums und während der Promotion, sowie für die großen Hilfen bei irgendwelchen Computerproblemen,

allen Teilnehmern des Spanischkurses für die immer recht witzigen 1 ½ Stunden pro Woche beim Versuch Spanisch zu lernen,

Theresa, Rolf, Bernd, Frank Mehner und Thomas Meissner für die Hilfen bei experimentellen Problemen sowie bei der Herstellung und Charakterisierung von Proben,

Scheck, Torsten, Sebastian, Jofi, Max, Peter, Marc und allen anderen der Skatrunde im „Boddschi“ für die netten Abende und zahlreichen anderen Aktivitäten während der letzten Jahre,

allen weiteren Mitgliedern und ehemaligen Mitgliedern der Abteilung und des gesamten Instituts, die alle dazu beigetragen haben, dass stets ein angenehmes Arbeitsklima herrschte,

Andi, Fred, Marcus, Clausi, Hanne, Pfarre, Stefan, Egon und allen weiteren Ulmer Kumpels und Bekannten für die tollen Wochenenden,

Steffen, Fabi und allen anderen Sportkollegen sowie den Hausmeistern des Sportinstituts für die schönen Zeiten beim und nach dem Training,

meinen Eltern, die mich immer unterstützten und mir mein Studium überhaupt erst ermöglicht haben, sowie meiner Schwester, ohne die ich in den letzten Jahren wahrscheinlich verhungert wäre,

und Andrea einfach für alles.

Lebenslauf

17.10.1974	geboren in Ulm
1981-1985	Grundschule Eichenplatz in Ulm
1985-1994	Kepler-Gymnasium in Ulm
07/1994	Abitur
09/1994-10/1995	Zivildienst, Friedrich-von-Bodenschwingh-Schule in Ulm
WS 1995	Beginn des Studiums an der Universität Stuttgart, Fachrichtung Physik und Sportwissenschaft (höheres Lehramt)
05/2002	Abschluss des Studiums, Erstes Staatsexamen
seit 10/2002	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Planck-Institut für Metallforschung Stuttgart, Abteilung Schütz, Beginn dieser Arbeit