



ZUSAMMENFASSUNG

Elektronische und magnetische Eigenschaften von Hybrid-Grenzflächen. Von einzelnen Molekülen zu molekularen Filmen auf metallischen Oberflächen.

Manuel Gruber

In den letzten Jahrzehnten besteht ein großes Forschungsinteresse an der Entwicklung von Nachfolgetechnologien, welche der aktuellen CMOS-Technologie überlegen sind. Dabei werden von der Synergie verschiedener Disziplinen, wie z.B. von Festkörperphysik und Chemie in der molekularen Spintronik, große Durchbrüche erwartet. In der Spintronik wird zusätzlich zur Ladung auch der Spin als Informationsträger verwendet. Dies findet z.B. heute schon in den Leseköpfen von Festplatten Anwendung. Gelänge es die Spintronik auf molekulare Systeme erfolgreich zu erweitern, hätte dies entscheidende Vorteile, die zu neuartigen sowie kostengünstigen Geräten führen könnten. Eines der größten Probleme bisher ist die Injektion eines spinpolarisierten Stroms von einem Metall in ein molekulares Material. Aus diesem Grund ist ein besseres Verständnis der Hybridgrenzflächen zwischen Molekülen und Metallen besonders wichtig.

Die Ziele meiner Arbeit waren zweigeteilt. Der erste Teil zielte darauf ab, die elektronischen und magnetischen Eigenschaften eines molekularen Systems auf verschiedenen ferromagnetischen Substraten zu studieren. Im zweiten Teil ging es darum, schaltbare funktionelle Moleküle auf metallischen Substraten zu untersuchen.

Der erste experimentelle Teil der Arbeit konzentrierte sich auf die Untersuchung von magnetischen und elektronischen Eigenschaften von Mangan-Phthalocyanin Molekülen (MnPc) und Kobalt-Filmen. Mit Hilfe des natürlichen Röntgen-Lineardichroismus und magnetischen Röntgen-Zirkulardichroismus haben wir die Geometrie der ersten Molekülschichten auf der Co(100) Oberfläche entschlüsselt. Interessanterweise arrangieren sich die Moleküle derart, dass in verschiedenen Moleküllagen die Moleküle vertikal direkt übereinander liegen. Die erste molekulare Lage koppelt ferromagnetisch an das Co(100), während die folgenden Schichten antiferromagnetisch miteinander koppeln. Diese magnetische Kopplung wird bis hin zu Raumtemperatur beobachtet. Die Ergebnisse werden durch *ab initio*-Berechnungen unterstützt. Durch Kerr-Effekt-Messungen konnten wir einen, durch die Molekülschichten induzierten, Exchange-Bias Effekt im Co(100) beobachten. Dies ist die erste Beobachtung einer unidirektionalen Anisotropie (Exchange-Bias) induziert durch eine antiferromagnetische molekulare Schicht, ein bisher fehlender Grundstein im Bereich der molekularen Spintronik. Außerdem haben wir gezeigt, dass die magnetische Kopplung zwischen den MnPc-Molekülen und Co(100) selbst durch mehrere Zwischenlagen Kupfer nicht verschwindet und bis zu Raumtemperatur stabil ist.

Der zweite experimentelle Teil dieser Arbeit konzentrierte sich auf die Untersuchung von dem Spin-Crossover-Molekül Fe(phen)₂(NCS)₂. Spin-Crossover-Moleküle bestehen aus einem Übergangsmetallatom, an dem Liganden gebunden sind. Die Moleküle können aus einem High-Spin-Zustand (HS) in einen Low-Spin-Zustand (LS) durch die Anwendung von verschiedenen äußeren Stimuli schalten. Diese bistabilen Moleküle sind ein potentieller Kandidat für zukünftige Speicher.

Die Moleküle würden mit Hilfe eines Rastertunnelmikroskops unter Ultrahochvakuum bei 4K sowie mit Hilfe der Röntgenabsorptionsspektroskopie untersucht. Wir haben die zwei Spin-Zustände eines einzelnen Moleküls von Fe(phen)₂(NCS)₂ auf einer Cu(100)-Oberfläche beobachtet. Darüber hinaus waren wir in der Lage, den Spin-Zustand eines einzelnen Moleküls selektiv und deterministisch mit Spannungspulsen zu schalten, sofern

das Molekül von dem Substrat mit einer Monolage CuN entkoppelt wird. Bei näherer Untersuchung des Schaltens konnten wir physikalische Modelle entwickeln, welche den Übergangsmechanismus erklären. Weiterhin wurde der Spinübergang auch für Moleküle der zweiten Monolage beobachtet und erklärt.