

Kurzzusammenfassung

Das Ziel der molekularen Spintronik ist es mittels Molekülen kleinste schaltbare magnetische Einheiten zu realisieren. Die Moleküle dienen dabei auf dem Wege der Miniarisierung zukünftiger elektronischer Geräte als Bausteine um deren Integrationsdichte und Energieeffizienz zu erhöhen. Als einer der Schlüsseleigenschaften gilt es die Wechselwirkung einzelner Moleküle und molekularer Monolagen mit Metalloberflächen zu untersuchen und zu kontrollieren. Dazu ist die wohldefinierte und kontrollierte Adsorption von Molekülen in Submonolagen-Bedeckungen auf sauberen einkristallinen Oberflächen von (Übergangs-) Metallen unter Ultrahochvakuumbedingungen erforderlich. Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurde die Chemisorption dreier aromatischer Moleküle auf verschiedenen Übergangsmetalloberflächen und die damit einhergehende Bildung von molekularen Hybridmagneten untersucht. Das Vorhaben ist durch den Nachweis eines Molekül-basierten Spinfiltereffekts in mesoskopischen Kontakten durch Raman et al. inspiriert und fokussiert sich auf die Grundlagen im Hinblick auf den experimentellen Nachweis des Spinfiltereffekts in einem einzelnen Doppeldeckermolekül. Der theoretisch vorgeschlagene Mechanismus basiert auf der Adsorption von intrinsisch nicht-magnetischen, flachen aromatischen Molekülen auf ferromagnetischen Oberflächen, wobei starke Hybridisierung der molekularen π -Orbitale mit den spinaufgespaltenen d -Orbitalen des Substrats auftritt. Das daraus resultierende Ungleichgewicht der spinaufgelösten Zustände des adsorbierten Moleküls induziert im Molekül magnetische Eigenschaften wie eine spinabhängige Bandlücke, ein stabiles magnetisches Moment oder Spinpolarisation an der Fermi-Energie. Die induzierten magnetischen Eigenschaften sowie die atomare und elektronische Struktur der Molekül-Substrat Hybridssysteme wurden mittels (spin-polarisierter) Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie im Ultrahochvakuum und bei tiefen Temperaturen (4 K) untersucht.

Zunächst wurden Vorstudien zur Adsorption der flachen aromatischen Moleküle Pyren und HBC auf Au(111) und Fe/W(110) bzw. auf Co/Cu(111) durchgeführt, da beide Moleküle zu Beginn des Projekts als mögliche essentielle aromatische Bausteine speziell designer Doppeldeckermoleküle in Frage kamen. Geeignete Doppeldeckermoleküle müssen so konzipiert sein, dass die π -Systeme zweier aromatischer Bausteine in einem geringeren als dem van-der-Waals-Abstand dicht gestapelt sind und es deswegen zu einer direkten intramolekularen π - π -Wechselwirkung kommt. Das letztendlich in der Arbeitsgruppe von Prof. Kögerler erfolgreich synthetisierte Fc-Py²-Fc Doppeldeckermolekül, das alle primären Anforderungen als möglicher molekularer Spinfilter erfüllt, zeichnet sich durch zwei verbrückte, übereinander gestapelte Pyren (Py)-Moleküle aus, welche durch zwei Ferrocene (Fc) fixiert werden. Das Fc-Py²-Fc-Molekül konnte erfolgreich auf ferromagnetischen Co-Nanoinseln auf Cu(111) deponiert und detailliert

untersucht werden. Der Vergleich der Eigenschaften der Fc-Py²-Fc-Moleküle und ihres Erscheinungsbilds auf Co(111) und Cu(111) Flächen zeigt markante Unterschiede, woraus sich Chemisorption auf der Co-Oberfläche ableiten lässt. Spin-polarisierte Messungen bestätigen diese Beobachtung und zeigen die Ausbildung eines molekularen Hybridmagneten mit relativ zum Substrat invertierter Spinpolarisation an den Ferrocenpositionen, während an der Pyrenposition keine signifikante Spinpolarisation gemessen werden konnte. Dieses Resultat kann einerseits mit einer starken Energie- und intramolekularen Positionsabhängigkeit der Spinpolarisation erklärt werden. Andererseits wird ein bislang nicht diskutierter Hybridisierungseffekt vorgeschlagen, bei dem die starke Wechselwirkung des unteren π -Systems mit der Co-Oberfläche zu einer Verschiebung des π -Orbitals zum Substrat hin führt, wodurch sich der effektive Abstand der beiden π -Systeme im Molekül vergrößert. Die reduzierte intramolekulare π - π -Wechselwirkung im chemisorbierten Fc-Py²-Fc-Molekül könnte auch die stark unterdrückte Spinpolarisation an der Pyrenposition erklären.