

---

# **Strukturelle Analyse von Au-induzierten Nanodrähten auf Si(111) mittels LEED**

---

Bachelorarbeit vorgelegt im Rahmen der Prüfung für den  
Zwei-Fächer-Bachelor-Studiengang im Teilstudiengang  
Physik

Matrikel-Nummer: 974612

Osnabrück, 18. Juli 2022

*Autor:* Florian Steinbach

*Erstprüfer:* Prof. Dr. Joachim Wollschläger

*Zweitprüfer:* Prof. Dr. Simone Sanna



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>2</b>
2.1	Festkörper und Oberfläche . . . . .	2
2.2	Reziproker Raum . . . . .	6
2.3	IV-LEED . . . . .	7
2.3.1	Beugung . . . . .	7
2.3.2	Dynamische Streutheorie . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Experimentelle Grundlagen</b>	<b>13</b>
3.1	Ultrahochvakuum (UHV) . . . . .	13
3.2	LEED-Aufbau und Funktion . . . . .	13
3.3	Kammer- und Versuchsaufbau . . . . .	17
3.3.1	Kammer . . . . .	18
3.3.2	Verdampfer . . . . .	19
3.4	Präparation . . . . .	20
3.5	Auswertungsmethodik . . . . .	21
3.5.1	Aufnahmemethodik . . . . .	21
3.5.2	Rohdaten Auswertung . . . . .	23
3.5.3	IV-Kurven Simulation . . . . .	24
3.5.4	Pendry-R Faktor . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Materialsystem</b>	<b>27</b>
4.1	Silicium . . . . .	27
4.2	Gold . . . . .	28
4.3	Si(111)-5x2-Au . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Messergebnisse und Auswertung</b>	<b>31</b>
5.1	Messungen . . . . .	31
5.1.1	Gemessene Überstrukturen . . . . .	31
5.1.2	Si(111)-(5x2)-Au . . . . .	33
5.1.3	Andere Au-induzierte Überstrukturen . . . . .	35
5.2	Vergleich mittels Pendry-R Faktor . . . . .	38
5.3	Linearkombination der Modelle . . . . .	42
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>43</b>
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>45</b>
<b>8</b>	<b>Anhang</b>	<b>47</b>
<b>9</b>	<b>Danksagung</b>	<b>52</b>

## 1 Einleitung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung der Si(111)-5x2-Au Oberfläche mittels Low Energy Electron Diffraction (LEED). LEED beruht, auf dem Prinzip der Beugung niederenergetischer Elektronen. Mit dieser Methodik lassen sich Informationen über die Struktur der Oberfläche gewinnen und auch Unterschiede zwischen verschiedenen Oberflächen feststellen. Für das untersuchte System liegen zwei unterschiedliche Modelle vor, wobei keines der Beiden klar präferiert werden kann. Die gewählte Untersuchungsmethode soll in diesem Fall eine Tendenz hin zu einem der Modelle zeigen.

Die untersuchte Oberfläche Si(111)-5x2-Au bildet sogenannte Nanodrähte aus. Darunter werden Drähte mit einem Durchmesser in der Größenordnung einiger Nanometer verstanden. Motiviert wird die genaue Untersuchung von Nanodrähten durch ein industrielles Interesse, da diese die kleinste Art von Drähten darstellen, und somit vielversprechend für die Mikroelektronik sind. Die reale Umsetzung von industriellen atomaren Drähten ist jedoch durch die begrenzten technischen Möglichkeiten zurzeit fraglich. Untersuchungen dieser Oberfläche bieten aber ebenfalls die Möglichkeit zum Studium an eindimensionalen Systemen.

Die Si(111)-5x2-Au Überstruktur wurde von Bishop und Riviere im Jahr 1969 entdeckt [1], danach häufig reproduziert und mittels vieler Methoden untersucht. Dennoch ist die Struktur der Oberfläche bisher nicht genau geklärt, da sich die Modelle sehr ähneln. Momentan sind die Modelle EBH [2] und KK [3] von Interesse, zuvor lagen andere Modelle vor, darüber hinaus war lange Zeit die Anzahl der Goldatome pro Einheitszelle ein großer Diskussionspunkt. Dem richtigen Modell wird sich also angenähert. Ein Großteil der Arbeiten bevorzugt zurzeit das KK-Modell, welches ein Au-Atom pro Einheitszelle mehr aufweist, als das EBH-Modell. Die genaue Spezifikation der Oberfläche ist von Interesse, da die Goldatome eindimensionale Atomketten auf der Halbleiteroberfläche des Siliciums ausbilden und somit einen brauchbaren Prototypen für Nanodrähte darstellen.

Im Folgekapitel werden die nötigen theoretischen Grundlagen geklärt. In Kapitel 3 werden die experimentellen Grundlagen zum Versuch erläutert. Die Ergebnisse, sowie ihre Interpretation, finden sich in Kapitel 5.

## 2 Theoretische Grundlagen

Die theoretischen Grundlagen für diese Arbeit bestehen aus Grundlagen zur Oberflächenphysik kristalliner Festkörper und der Elektronenbeugung an periodischen Strukturen. Des Weiteren wird die in der Arbeit verwendete Methodik IV-LEED erklärt. Diese Grundlagen sind in der Literatur in [4] und [13] zu finden.

### 2.1 Festkörper und Oberfläche

Im Experiment wurde ein Siliciumkristall als Substrat verwendet. Bei einem Kristall handelt es sich um einen homogenen Festkörper, der in alle Raumrichtungen eine Periodizität aufweist.

Der Kristall setzt sich aus sogenannten gleichen Einheitszellen zusammen, deren Volumen und Form durch Vektoren beschrieben werden kann. Durch eine Einheitszelle lässt sich somit das gesamte Kristallgitter beschreiben. Die mit kleinstem Volumen wird dabei die primitive Einheitszelle genannt. Das gesamte Gitter kann durch die Translationsvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  beschrieben werden. Diese Translationsvektoren spannen die primitive Einheitszelle des Kristalls auf und die möglichen Gitter lassen sich in 14 sogenannte Bravais-Gitter klassifizieren.

Die Anordnung der Einheitszellen lässt sich durch das Punktgitter  $\vec{B}$  beschreiben. Hierbei wird das Punktgitter  $\vec{B}$  durch Vielfache der Translationsvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  aufgespannt.

$$\vec{B} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad \text{mit } u, v, w \in \mathbb{Z} \quad (1)$$

Als Oberfläche wird der Übergang zwischen verschiedenen Phasen bezeichnet, die Oberfläche eines Kristalls bedeutet also ein Ende der Periodizität in einer Raumrichtung. Durch die so entstehenden ungesättigten Bindungen an der Oberfläche des Kristalls, einem energetisch ungünstigen Zustand, ordnen sich die Oberflächenatome neu an, teilweise unter Bildung neuer Bindungen, um die Energie zu minimalisieren. Dabei können auch vollständig neue Bindungen ausgebildet werden, wodurch sich die Struktur der Oberfläche leicht bis stark verändert, je nach Material. Zur Beschreibung der Periodizität einer Oberfläche genügen fünf zweidimensionale Bravais-Gitter, die in Abbildung 1 gezeigt werden.

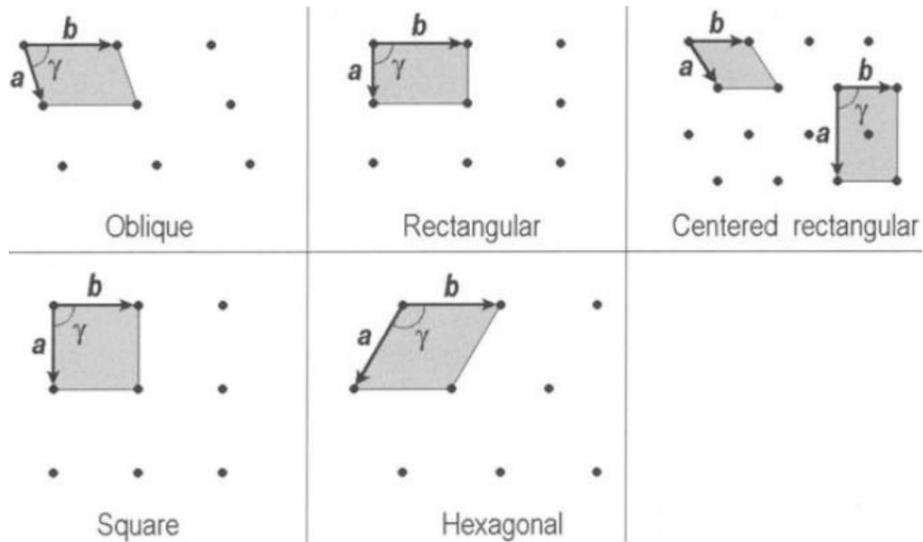


Abbildung 1: Zu sehen sind die fünf zweidimensionalen Bravais-Gitter, mit den Translationsvektoren  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$ . In Lesereihenfolge: schiefwinklig, rechtwinklig, zentriert-rechtwinklig, quadratisch und hexagonal. Das zentriert-rechtwinklige Gitter ist nicht primitiv. Entnommen aus [4].

In der Geometrie und Kristallographie ist ein Bravais-Gitter (Abbildung 1) eine unendliche Aneinanderreihung diskreter Punkte, erzeugt durch die diskreten Translationsvektoren (Gleichung 1).

Auch der Abstand der ersten Gitterebenen der Oberfläche verändert sich, sowie die Schwingungseigenschaften. Dies ergibt sich aus dem Smoluchowski-Effekt [5].

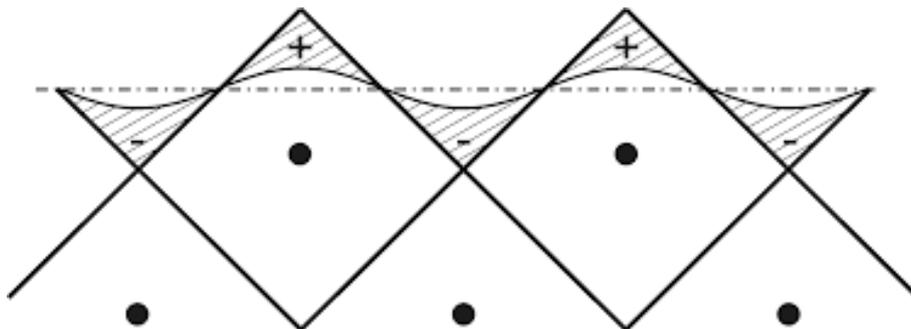


Abbildung 2: Abgebildet ist die Ladungsverteilung einer Metalloberfläche. Die gezackte Linie entspricht der Oberfläche, die Wellenlinie repräsentiert die Gleichgewichtsladungverteilung. Eingezeichnete Punkte repräsentieren die Position der Atomkerne des Metalls, die geraden Linien dazwischen ein kastenartig genähertes Potential des Atoms. Entnommen aus [5].

Der Smoluchowski-Effekt beschreibt eine Umverteilung der Elektronenwol-

ke auf einer Metalloberfläche. Die Abbildung 2 zeigt dies. Die Unebenheit der Oberfläche wird durch die gezackte Linie dargestellt. Um einen möglichst energetisch stabilen Zustand zu erreichen, wird die Ladungsverteilung geglättet, was gewellt eingezeichnet ist. Dieser Effekt führt zu einem geringeren Ebenenabstand zwischen der obersten Ebene und der zweiten Gitterebene von der Oberfläche aus gesehen, während der Abstand zwischen Zweiter und Dritter größer ausfällt. Der Effekt fällt je nach Richtung und Art des Kristalls unterschiedlich aus.

Es entstehen lokale Schwingungsmoden nahe der Oberfläche, welche ebenso wie modifizierte Ebenenabstände auf die Struktur des Gitters Einfluss nehmen und somit bei einer Untersuchung dessen beachtet werden müssen. Die elektronischen Zustände sind auch verändert, denn während im Festkörper Blochwellen vorliegen, sind die Wellenfunktionen der Oberfläche nah an dieser lokalisiert. Dies tritt auch bei Festkörper-Festkörper Übergängen auf, wie zum Beispiel bei dem PN Halbleiterübergang. Mit zunehmender Tiefe in den Kristall hinein nehmen die Auswirkungen der Oberfläche ab. Dies reicht von der Oberfläche gesehen einige Atomlagen, bis hin zu 100 Atomlagen bei optischen Effekten in den Festkörper hinein.

Da Kristalle anisotrop sind und die Ausrichtung der benutzten Oberfläche definiert werden muss, gibt es die Millerschen Indizes, welche die Orientierung der Oberfläche angeben. Die Millerschen Indizes lauten  $h$ ,  $k$  und  $l$  und geben den Schnittpunkt der Ebene mit den Achsen des Koordinatensystems als Kehrwert ganzzahlig an. Ohne Vorliegen eines Schnittpunktes wird der entsprechende Index als 0 angegeben. Veranschaulicht werden einige räumliche Orientierungen in der Abbildung (3). Im Versuch wurde beispielsweise Silicium mit der Orientierung (111) verwendet. Hierbei sagt der Millersche-Index aus, in welche Richtung der Wafer aus dem Siliciumkristall geschnitten wurde.

In der Oberflächenphysik wird das zugrunde liegende Material als Substrat bezeichnet. Die veränderte Struktur an der Oberfläche wird Überstruktur genannt. Verändert die atomare Umstrukturierung wegen der Minimierung der Oberflächenenergie die Periodizität der Oberfläche, wird dies Rekonstruktion genannt. Bleibt die Periodizität erhalten, nennt man dies Relaxation. Zur Überstruktur können auch Adsorbate zählen, wobei die Elementarzelle größer als die des Kristallgitters ist.

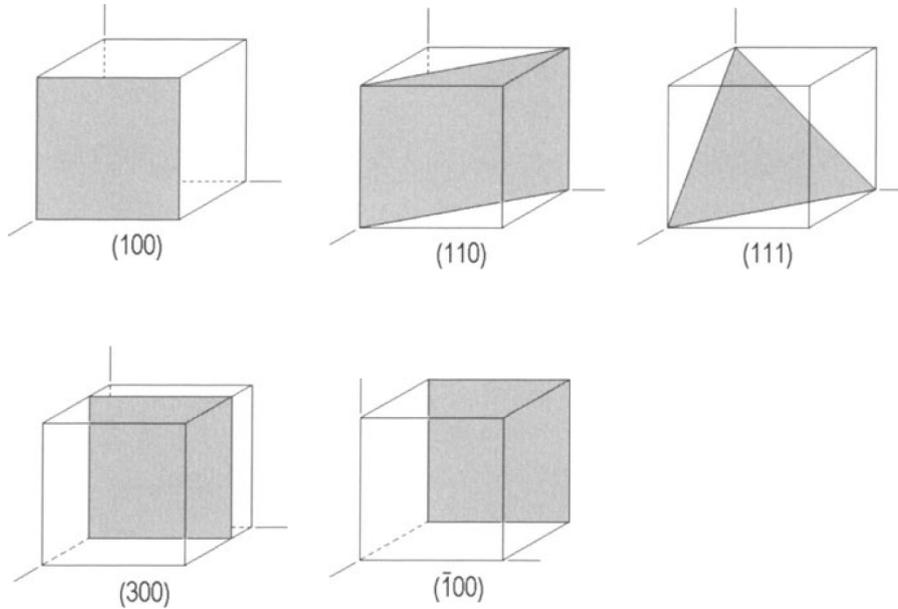


Abbildung 3: Beispiele für Millerindizes des kubischen Gitters. Entnommen aus [4].

Um Substrat und Überstruktur, auch relativ zueinander, beschreiben zu können, existieren zwei gängige Notationsmöglichkeiten. Die verwendete Notationsweise dieser Arbeit ist die WOOD-Notation. Auf die Matrix-Notation wird nicht eingegangen, da sie für die verwendete Oberfläche nicht benötigt wird. Die Wood-Notation bezieht sich auf das Längenverhältnis von Translationsvektoren zwischen Überstruktur  $\vec{a}'$  und  $\vec{b}'$  und Substrat  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$ . Die Längenverhältnisse werden dann durch die Faktoren  $m$  und  $n$  ausgedrückt.

$$\|\vec{a}'\| = m\|\vec{a}\|, \quad \|\vec{b}'\| = n\|\vec{b}\| \quad (2)$$

Angegeben wird die Notation folgendermaßen:

$$X(hkl)c(m \times n) - R\varphi - Ad \quad (3)$$

$X$  gibt das Substrat an,  $\varphi$  den Winkel zwischen den Translationsvektoren von Substrat und Überstruktur und  $c$  ob eine Zentrierung vorliegt. Liegt keine Drehung vor, so wird der Winkel weggelassen. Eine mit einem Adsorbat induzierte Überstruktur wird mit dessen chemischen Symbol am Ende gekennzeichnet. Sind die Winkel zwischen den Translationsvektoren des Substrates unterschiedlich zu denen der Überstruktur, so muss die Matrix-Notation angewandt werden.

## 2.2 Reziproker Raum

Das Beugungsbild von Kristallen entspricht nicht dem realen Bild des Gitters, sondern dem Bild des zugehörigen reziproken Gitters. Der reziproke Raum dient somit der Interpretation von Beugungsbildern, hier insbesondere der Interpretation von LEED-Bildern.

Einem Kristallgitter im Realraum kann ein Gitter im reziproken Raum zugeordnet werden, welches äquivalent mithilfe der reziproken Gittervektoren beschrieben wird.

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad \text{mit } h, k, l \in \mathbb{Z} \quad (4)$$

Umgerechnet wird wie folgt:

$$\vec{a}_3^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \quad \vec{b}_3^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \quad \vec{c}_3^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (5)$$

Für das zweidimensionale Gitter einer Überstruktur fällt der Vektor  $\vec{c}_3^*$  weg:

$$\vec{G}_{hk} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* \quad \text{mit } h, k \in \mathbb{Z} \quad (6)$$

$$\vec{a}_2^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{n}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|}, \quad \vec{b}_2^* = 2\pi \frac{\vec{n} \times \vec{a}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|} \quad (7)$$

Der eingeführte Vektor  $\vec{n}$  ist der Normalenvektor zur Oberfläche.

Die reziproken Translationsvektoren liegen also, wie in Abbildung 4 zu sehen, durch den Normalenvektor in der gleichen Ebene wie die Realraumvektoren. Darüber hinaus stehen  $\vec{a}^*$  und  $\vec{b}$ , sowie  $\vec{b}^*$  und  $\vec{a}$  senkrecht zueinander. Dies ist in der Grafik 4 im Teil a) erkennbar.

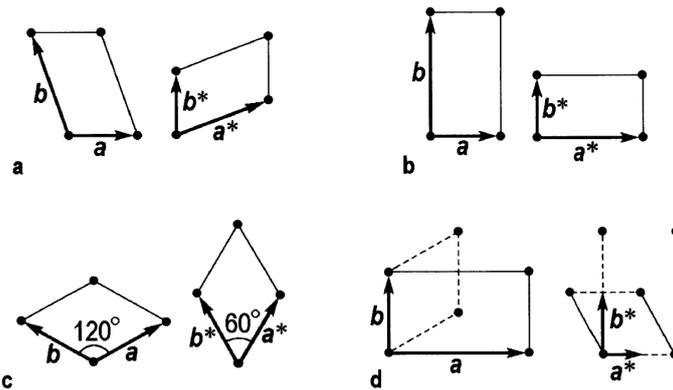


Abbildung 4: Die Translationsvektoren und Einheitszellen des realen Raumes und ihrer dazugehörigen reziproken 2D Bravais-Gitter. In Teilgrafik b ist die inverse Länge besonders gut zu erkennen. Entnommen aus [4].

Die Dimension des reziproken Raumes ist die inverse Länge. Durch die zweidimensionale Periodizität der Oberfläche visualisiert sich dessen reziproker Raum durch Stangen, da die Periodizität entlang der Oberflächennormalen im Unendlichen liegt, wodurch die Punkte dieser Richtung durch die inversen Längenverhältnisse unendlich nah aneinander rücken. Es ergeben sich die Stangen. Der zweidimensionale Fall entspricht also einer Lage des dreidimensionalen Körpers. Der zweidimensionale Fall ist auch in der Ewald-Konstruktion erkennbar (Abbildung 8). Im dreidimensionalen Fall würde der reziproke Raum aus Punkten bestehen. Das ist im Experiment der Fall, denn es wird die Oberfläche eines dreidimensionalen Festkörpers untersucht. Da die Eindringtiefe der Elektronen jedoch begrenzt ist, liegt ein Grenzfall zwischen beiden Ansichten vor. Dies wird in der Abbildung 5 gezeigt.

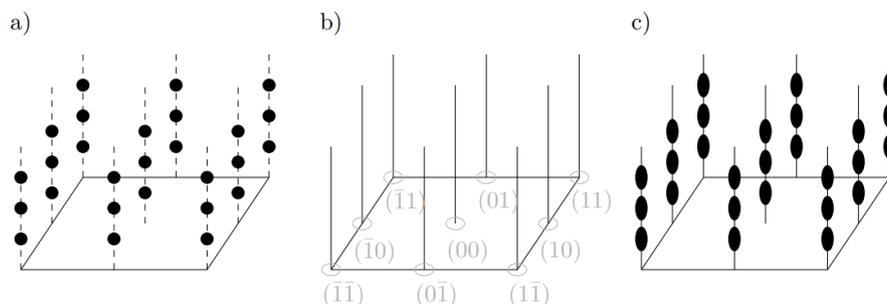


Abbildung 5: Gezeigt wird eine schematische Darstellung des reziproken Raumes in drei und zwei Dimensionen, sowie dem Mischfall. In Abschnitt a) werden die Beugungspunkte des dreidimensionalen Falles, in b) werden die Beugungstangen des zweidimensionalen Falles gezeigt. Abschnitt c) stellt die bei der Messung auftretende Realität, den Mischfall dar. Die gemessene Intensität ist somit abhängig von der Stelle, an der die Stange gemessen wird.

## 2.3 IV-LEED

In diesem Kapitel wird zunächst die Beugung an Kristallen erläutert, insbesondere für niederenergetische Elektronen. Im zweiten Teilkapitel wird auf die dynamische Beugungstheorie eingegangen und anschließend auf IV-LEED Bezug genommen.

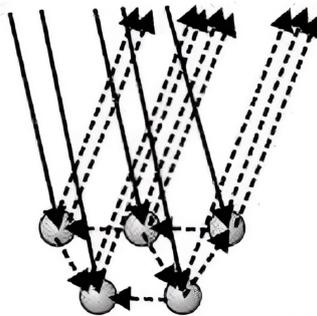
### 2.3.1 Beugung

Mithilfe der Beugung, dem Ablenken von Wellen an Hindernissen, können Kristalle näher untersucht werden, hier mittels Elektronen. Dies ist durch den Wellen-Teilchen-Dualismus der Quantenphysik möglich. Es lässt sich dem Elektron eine De-Broglie-Wellenlänge zuordnen:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_{kin}}} \quad (8)$$

Bei Low Energy Electron Diffraction (LEED) wird die Beugung von Elektronen mit geringer kinetischer Energie, also einer großen Wellenlänge verwendet. Die Energie liegt in der Größenordnung von 100 eV, was einer Wellenlänge von einem halben bis zwei Angström entspricht. Diese Wellenlänge entspricht der Größenordnung atomarer Abstände in den meisten Kristallen. Das Beugen von Elektronen stellt einen Bereich der Materialuntersuchung dar. Bei LEED handelt es sich lediglich um nur eine der vielen Möglichkeiten, beispielsweise: Transmission electron diffraction (TED), reflection high energy electron diffraction (RHEED) und mehr. Die Methoden unterscheiden sich überwiegend durch ihren Energiebereich, woraus die Eindringtiefe in das Material bestimmt wird (Abbildung(9)).

Beugung kann sich jedoch auch mit jeder anderen Art von physikalischen Wellen zeigen. Es ist lediglich wichtig, dass die Größenordnung der Wellenlänge und dem Beugungsobjekt übereinstimmen. Die verschiedenen Arten physikalischer Wellen streuen und interagieren auf verschiedene Weisen mit dem Material. Bei Elektronenbeugung ist eine Mehrfachstreuung möglich, sowohl zwischen Atomen einer Lage, als auch zwischen den Lagen. Skizziert zu sehen in Abbildung(6).



**Elektronenbeugung**

Abbildung 6: Eine skizzierte Darstellung der Elektronenbeugung, sowie der Mehrfachstreuung, ist dargestellt. Nicht gestrichelte Pfeile stellen die einfallenden Elektronen dar, gestrichelte Pfeile die gebeugten Elektronen. Die Mehrfachstreuung tritt bei Elektronen mit geringer Energie vermehrt durch einen größeren Streuquerschnitt auf.

Die Elektronen treffen als ebene Welle auf die Probe und werden elastisch gestreut. Durch den Gangunterschied der Elektronen entsteht konstruktive und destruktive Interferenz, wodurch dann auf einem Schirm wiederum ein

Beugungsbild entsteht.

Die Welle trifft auf der Probe nebeneinander liegende Streuzentren, deren Abstand durch den Vektor  $\vec{R}$  beschrieben wird. Die Vektoren  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}$  sind der einfallende und der gestreute Wellenvektor. Somit lässt sich die Interferenz für den konstruktiven Fall wie folgt rechnen:

$$\vec{R} * \left( \frac{\vec{k}}{\|\vec{k}\|} - \frac{\vec{k}_0}{\|\vec{k}_0\|} \right) = m\lambda \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z} \quad (9)$$

Die Herkunft dieser Gleichung wird durch die Visualisierung der Lauebedingung, einer äquivalenten Beschreibung zur Bragg-Bedingung, ersichtlicher. Ausschlaggebend ist der Gangunterschied für die konstruktive Interferenz, welcher ein ganzzahlig Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  sein muss.

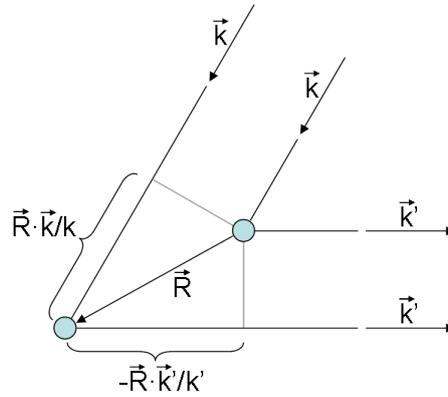


Abbildung 7: Eine skizzierte Darstellung der Elektronenbeugung an zwei Atomen mit dem Abstand  $\vec{R}$  zueinander und die daraus resultierenden Größen. Die einfallende ebene Welle wird durch  $k$  beschrieben, während die gebeugte Welle mit  $k'$  gekennzeichnet wird, außerdem geht dies aus der Pfeilrichtung hervor. Im Folgenden gilt die Notation  $\vec{k}_0$  für die einfallende ebene Welle und  $k$  für die gebeugte Welle. Entnommen aus [6].

Im Dreidimensionalen gilt dann mit einem Gittervektor  $G_{hkl}^{\vec{}}$ :

$$\left( \frac{\vec{k}}{\|\vec{k}\|} - \frac{\vec{k}_0}{\|\vec{k}_0\|} \right) = \frac{\lambda}{2\pi} G_{hkl}^{\vec{}} \quad (10)$$

Die Laue-Bedingung ergibt sich, da für Wellen bei elastischer Streuung aufgrund der Energieerhaltung  $\|\vec{k}\| = \|\vec{k}_0\| = \frac{2\pi}{\lambda}$  gilt. Dies ist möglich, da bei LEED ausschließlich elastisch gestreute Elektronen detektiert werden.

$$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k}_0 \quad (11)$$

Diese Bedingung verbildlicht sich mit der Ewald Konstruktion (Abbildung(8)).

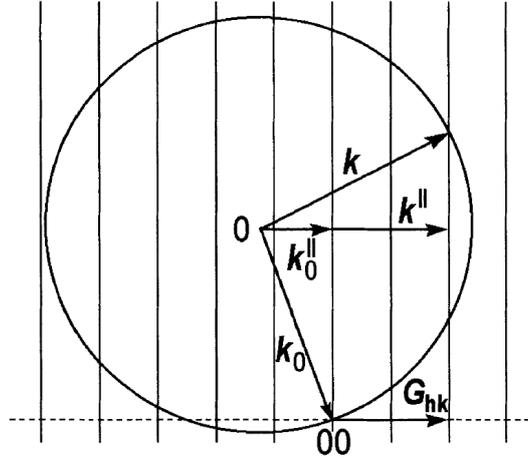


Abbildung 8: Zu sehen ist ein Schnitt durch eine Ewaldkonstruktion für eine Beugung an einem zweidimensionalen Gitter einer Oberfläche. Eingezeichnet sind der einfallende Wellenvektor  $\vec{k}_0$  und der gestreute Wellenvektor  $\vec{k}$ , sowie ihre parallelen Komponenten und der Gittervektor  $\vec{G}$ . Entnommen aus [4].

Eine Ewaldkugel wird konstruiert, indem zunächst das reziproke Kristallgitter und dann der einfallende Wellenvektor  $\vec{k}_0$  eingezeichnet wird. Der Wellenvektor trifft auf einen reziproken Gitterpunkt und der Kreis wird um den Ursprung von  $\vec{k}_0$  mit einem Radius  $k$  gezeichnet. Die gestreuten Wellenvektoren  $\vec{k}$  werden zu allen Punkten eingezeichnet, die Schnittpunkte zwischen Stangen und Kugel sind. Der Gittervektor  $\vec{G}$  ergibt sich aus der Differenz der Streuvektoren. Durch den zweidimensionalen Fall werden auch die parallelen Anteile der Wellenvektoren zur Oberfläche eingetragen, da die Beugungsbedingung entlang des senkrechten Anteils beliebig erfüllt ist. Es ergibt sich die Gleichung:

$$\vec{k}^{\parallel} - \vec{k}_0^{\parallel} = \vec{G}_{hk} \quad (12)$$

In einem LEED-Experiment wird das sich ergebende Beugungsmuster beobachtet und analysiert. Ein IV-LEED Experiment ist ein LEED-Experiment, in dem die Energie der gebeugten Elektronen in einem Intervall durchgeführt wird. Bei der IV-LEED Methodik werden die Reflexe aufgenommen und ihre Intensitätsveränderung abhängig von der Elektronenenergie untersucht. Die Intensität wird gegen die Spannung der Elektronenbeschleunigung aufgetragen.

### 2.3.2 Dynamische Streutheorie

Die dynamische Streutheorie beschreibt die Streuprozesse und die Interferenz an einem Festkörper. Bei der dynamischen Streutheorie werden Mehrfachstreuprozesse, Wechselwirkungen bei Mehrstrahlanregung, sowie Amplituden-

und Phasenbeziehungen zwischen den Wellen berücksichtigt. Hierdurch wird eine exakte Beschreibung der Intensität der Beugung ermöglicht.

Durch die Lauebedingung wird zwar die Position der Reflexe, nicht aber ihre Intensität beschrieben. Diese Informationen über die Intensität werden aus dem sogenannten Strukturfaktor  $F$ , sowie aus dem Debye-Waller-Faktor gewonnen, der die Temperaturabhängigkeit beschreibt. Der Strukturfaktor  $F$  hängt von der Phasendifferenz  $\varphi$  zwischen den gebeugten Strahlen und der Elektronendichte des Kristalls ab. Somit gilt für die Intensität die Proportionalität:

$$I \propto |F|^2 \quad (13)$$

Der Debye-Waller-Faktor entspringt der thermischen Bewegung der Atome im Gitter. Eine steigende Temperatur führt zu einer exponentiellen Verminderung der Intensität. Daher sollte eine Messung bei möglichst geringer Temperatur, also einem thermisch ruhigem Atomgitter, stattfinden. Die Kalkulationen sind für einen senkrechten Einfall des Elektronenstrahls vorgesehen.

Durch den großen Streuquerschnitt niederenergetischer Elektronen treten vermehrt Mehrfachstreuungen auf (6). Durch diesen Effekt ergeben sich mehrere Phänomene:

Zum Einen streut das Atom die eintreffende ebene Welle direkt, also die Primärwelle, zum anderen streut das Atom die gebeugten Wellen seiner umliegenden Atome. Dies beruht jedoch auf Gegenseitigkeit. Durch die Wechselwirkungen, um alle Streuprozesse mit einzurechnen, wird der Strukturfaktor  $F$  durch einen dynamischen Strukturfaktor ersetzt. Somit wirkt sich auch die Mehrfachstreuung auf die Intensität aus, wodurch diese abhängig von der Struktur der untersuchten Einheitszelle wird. Damit lässt sich durch die oberflächenintensive Methode IV-LEED, durch die Untersuchung der Intensitätsverläufe, sehr genau die Oberflächenstruktur untersuchen. Da aus der Intensität jedoch nicht direkt die Struktur errechnet werden kann, werden durch die dynamische Streutheorie die Intensitäten verschiedener Modelle zu der Oberfläche berechnet und mit den experimentellen Daten verglichen. Die Zusammenführung von Experiment und Theorie wird in Grafik 15 gezeigt. Ein Maß für die Übereinstimmung liefert der Pendry-R Faktor (3.5.4).

Bei den Kalkulationen zum Experiment wird zunächst die Streuung an einem Atom als Phasensprung beschrieben. Anschließend wird eine Schicht aus diesen Atomen gebildet, um die Mehrfachbeugung innerhalb dieser Lage miteinzubeziehen. Abschließend werden die Lagen aufgeschichtet und auch hier die Mehrfachbeugung zwischen den Ebenen eingerechnet. Durch die mehrfach beugenden Prozesse wird eine Simulation sehr rechenaufwändig und der Rechenaufwand erhöht sich mit steigender Größe der Einheitszelle.

Das Potential eines Kristalls wird durch das sogenannte Muffin-Tin-Modell genähert. Dieses Modell schneidet das radialsymmetrische Potential um das Atom in einem gewählten Abstand ab und ersetzt es durch ein konstantes Potential mit dem Wert des Realteils des inneren Potentials  $V_{0r}$ . Die sphärischen Atompotentiale enthalten die Einflüsse durch andere Atome und somit sind Fernkraftwirkungen enthalten. Durch das Muffin-Tin-Modell ist es jedoch möglich, die Streuung auf einen Phasensprung reduzieren zu können. Das konstante Potential zwischen den Atomen erleichtert zudem die Beschreibung der Propagation des Elektrons im Kristall ungemein. Dies stellt eine Annäherung dar, welche durch die guten Übereinstimmungen zwischen Experiment und Theorie gerechtfertigt sind.

## 3 Experimentelle Grundlagen

### 3.1 Ultrahochvakuum (UHV)

Um eine möglichst intakte Oberfläche nach einer Präparation (3.4) einer Probe längerfristig zu bewahren, muss diese vor Adsorbaten geschützt werden, da schon kleine Verunreinigungen bei der oberflächensensitiven Methode IV-LEED zu schlechteren Ergebnissen führen. Adsorbate sind Atome, die sich an die Oberfläche binden. Dabei ist zwischen der gewollten Überstruktur und ungewollter Verschmutzung zu unterscheiden. Die gewollte Überstruktur bildet sich durch Auftragen von Adsorbaten mittels eines Verdampfers, die Verschmutzung stammt aus der Restatmosphäre der Vakuumkammer. Die Restgasatmosphäre resultiert aus Desorption vom Material der Kammer, kleinen Lecks und dem Ausgasen mancher Materialien, sowie der Kammer selbst. Die beste Möglichkeit eine Verschmutzung zu verhindern, ist anfangs die Probe gut zu reinigen und dann in einer schützenden Umgebung aufzubewahren, wozu sich eine Vakuumkammer eignet. Hierbei gilt, je stärker das Vakuum ist, desto langsamer verschmutzt die Probe. Ein Maß für die Verunreinigungsgeschwindigkeit ist die Monolagenzeit  $\tau$ , welche sich aus  $n_0$ , der Dichte der Oberflächenatome und  $j$ , der Teilchenstromdichte errechnen lässt. Die Monolagenzeit  $\tau$  beschreibt die Dauer, bis die Oberfläche vollständig von einer Adsorbatlage bedeckt ist:

$$\tau = \frac{n_0}{j} = \frac{n_0 \sqrt{2\pi m k_B T}}{p} \quad (14)$$

Demnach wäre ein möglichst starkes Vakuum, beziehungsweise geringer Druck, sinnvoll, technisch jedoch nicht beliebig möglich. Zum Aufrechterhalten eines geringen Drucks ist eine Vielzahl von Geräten nötig, die im Versuchsaufbau (3.3) näher erklärt werden.

Die Kammer selbst sollte, um UHV geeignet zu sein, aus einem möglichst undurchlässigen, stabilen und nicht selber ausgasendem Material bestehen. Pumpen reduzieren die Atmosphäre in der Kammer, wobei hier schwach gebundene Partikel schnell abgepumpt werden, da sie quasi sofortig bei geringem Druck desorbieren. Stark gebundene Partikel desorbieren nicht und stellen somit auch kein Problem dar, die mittelmäßig gebundenen Moleküle, insbesondere Wasser, desorbieren mit der Zeit und führen zu den Adsorbaten auf der Probe. Nach dem Abpumpen wird eine Vakuumkammer ausgegast, also erhitzt, denn durch die Wärme lösen sich Adsorbate schneller.

### 3.2 LEED-Aufbau und Funktion

In diesem Versuch wurde die Messmethodik Low Energy Electron Diffraction, kurz LEED, verwendet. Dazu werden Elektronen in einem niedrigen Energiebereich von 20-500eV an den Oberflächenatomen gebeugt. Dies ent-

spricht etwa einer Wellenlänge von  $0,6\text{\AA}$  bis  $2,7\text{\AA}$ , was der Größenordnung der atomaren Abstände entspricht. Die de-Broglie Wellenlänge eines Teilchens ist gegeben durch 8.

Durch die daraus resultierende geringe mittlere freie Weglänge der Elektronen, bleibt auch die Eindringtiefe dieser sehr gering (Abbildung 9), bei etwa  $5\text{\AA}$  bis  $10\text{\AA}$  und so findet die Streuung in den oberen Ebenen der Oberfläche statt. Im verwendeten Energiebereich liegt die Eindringtiefe bei  $5\text{\AA}$ , was der Größe der kubischen Einheitszelle von Silicium entspricht. Die geringe Eindringtiefe macht diese Methodik sehr oberflächensensitiv und ist daher eine gute Methodik, um eine Oberfläche genauer auf kleine Strukturunterschiede zu untersuchen.

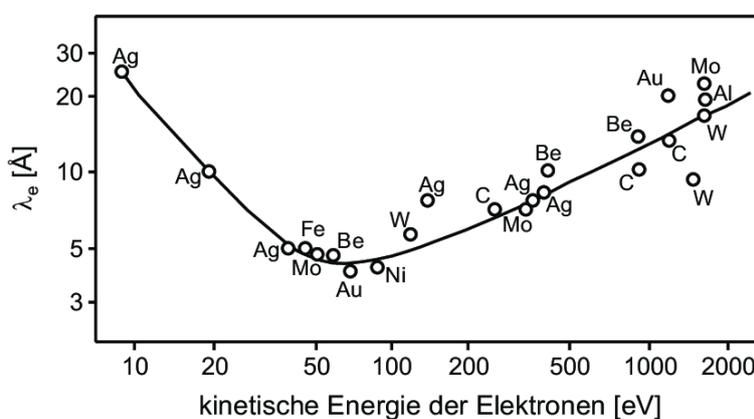


Abbildung 9: Abgebildet ist die mittlere freie Weglänge von Elektronen in verschiedenen Materialien abhängig von ihrer Energie. Die Eindringtiefe entspricht im gewählten Energieintervall etwa  $5\text{\AA}$ , was der kubischen Einheitszelle des Siliciums entspricht. Entnommen aus [7].

Die oberste Schicht stellt die Überstruktur dar, aber auch die Ebenen darunter sind rekonstruiert, beispielsweise durch veränderte Ebenenabstände. Es werden auch Informationen über diese Ebenen erhalten, was bei Oberflächensimulationen starke Auswirkungen haben kann.

Die Reflexpositionen ergeben sich aus der Ewaldkonstruktion, wie im Kapitel(2.3.1) beschrieben und in Abbildung(10) zu sehen. Dabei erhellen und verdunkeln sich die Reflexe je nach konstruktiver und destruktiver Interferenz.

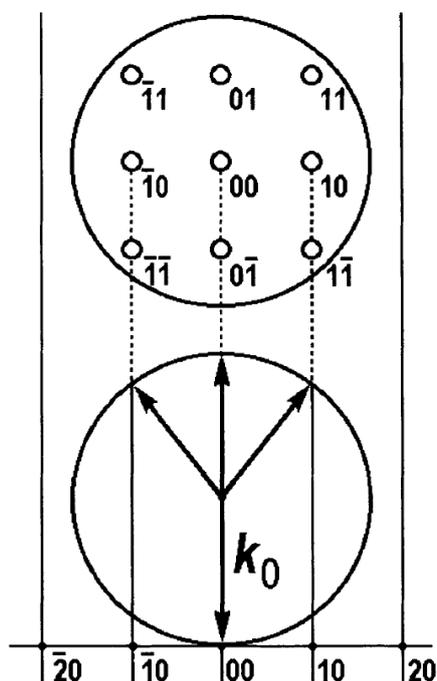


Abbildung 10: Abgebildet sind die Reflexe, die sich aus der Ewaldkugel ergeben. Hier ist auch die gängige Methode zur Benennung der Hauptreflexe angegeben. Entnommen aus [4].

Der Aufbau eines LEED ist in Abbildung(11) zu sehen. Dabei handelt es sich um die genutzte Art von LEED-Messgerät. Die Hauptkomponenten sind die Elektronenkanone, der Probenhalter, die microchannelplate (kurz MCP), sowie der Fluoreszenzschirm. Die Elektronenkanone produziert einen gebündelten Elektronenstrahl mit niedriger Energie. Der Fluoreszenzschirm mit seinen 4 Gittern dient der Beobachtung des Beugungsbildes, welches aus den gebeugten Elektronen entsteht. Die Probe ist mittig vor der Elektronenkanone und dem Schirm platziert, wodurch der (0,0) Reflex auf dem Schirm von der Elektronenkanone verdeckt wird, sowie auch einige andere Reflexe durch das zur Kanone führende Kabel. Dies ist beispielsweise in Abbildung(15) zu erkennen.

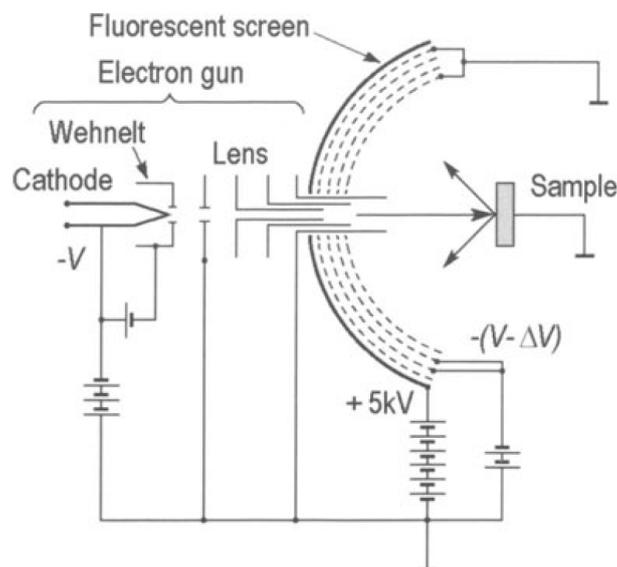


Abbildung 11: Dargestellt ist die Skizze eines LEED Versuchsaufbaus, bestehend aus Elektronenkanone, Fluoreszenzschirm und Probe. Im durchgeführten Versuch befindet sich die Kathode zwischen Schirm und Probe. Der Unterschied zum Aufbau eines MCP-LEEDS liegt darin, dass der Schirm zwar ortsgleich liegt, jedoch nicht gekrümmt ist. Vor dem Schirm befindet sich die MCP. Entnommen aus [4].

Die Elektronenkanone besteht aus einem Filament mit einem Wehneltzylinder und einer elektrostatischen Linse. Das Filament liegt auf einem negativen Potential von  $-V$ , während die Probe und das erste Gitter geerdet sind. Durch das geerdete Gitter findet die Beugung in einem feldfreien Raum statt. Das zweite und dritte Gitter verhindern das Auftreffen der inelastisch gebeugten Elektronen auf dem Schirm, denn sie liegen auf einem etwas geringeren Potential als der Schirm. Dabei gilt, je größer das Delta zum Schirm, desto heller sind die Reflexe auf dem Schirm, aber auch die Hintergrundhelligkeit. Ziel hierbei ist, möglichst helle Reflexe im Vergleich zum Hintergrund zu bekommen, also einen größtmöglichen Kontrast. Das vierte Gitter liegt auf dem Erdpotential und schirmt die anderen Gitter vor dem Feld des Schirmes ab, der im Kilovoltbereich liegt. Die elastisch gestreuten Elektronen werden nach Passieren der Gitter auf den Schirm beschleunigt, wo sie dann das Beugungsbild erzeugen. Eine Kamera nimmt dann das Bild, vom für jede durchfahrene Energie der Elektronenkanone auf, und sendet dieses an den Computer, an dem die Daten dann weiter ausgewertet werden. Bei einem MCP-LEED werden die Elektronen nicht direkt nach den vier Gittern auf den Schirm treffen. Zuvor werden sie durch die MCP zwischen Gittern und Schirm vervielfacht und treffen dann auf einen geraden Schirm. Durch die Projektion des Bildes einer Kugel auf eine ebene Fläche kommt

es zu einem Projektionsfehler.

Einstellbar sind die Spannungsparameter von Schirm, Fokus, Strahl, Gitter und Wehneltzylinder, sowie der Strom am Filament.

Die Interpretation eines LEED Bildes ist nicht trivial. Das LEED Bild zeigt nicht das reale Gitter, sondern dessen reziprokes Gitter. Die Umrechnung wurde bereits im Grundlagenkapitel(2.2) erklärt. Dies wird in der Abbildung 12 beispielhaft für simple Strukturen gezeigt.

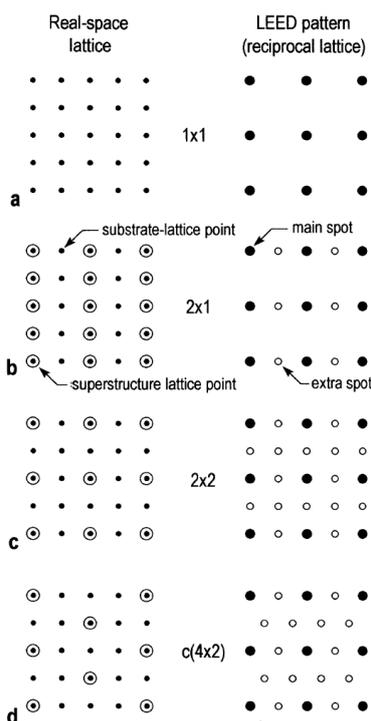


Abbildung 12: Simple Gitter dargestellt im realen Raum und reziprokem Raum. Es wird deutlich, wie sich Gitterpunkte des Substrates und der Überstruktur auf das LEED-Bild auswirken. Entnommen aus [4].

Die einzelnen Intensitätsmaxima, auch Reflexe genannt, können unterschiedlich hell sein. Auch dies wird von der Struktur der Oberfläche verursacht. Das zu erwartende Beugungsbild für eine Oberfläche kann durch Computersimulationen berechnet werden (2.3.2).

### 3.3 Kammer- und Versuchsaufbau

In diesem Kapitel werden sowohl die gesamte Kammer, als auch die Hauptkammer und der gebaute Verdampfer gezeigt und erläutert.

### 3.3.1 Kammer

Die Hauptkammer, in der die Messungen durchgeführt wurden, hängt mit einer weiteren Kammer und einer Schleuse, die sich beide Kammern teilen, zusammen. Die Schleuse arbeitet mit einem Vorvakuum und einer Turbomolekularpumpe und wird für die Versuche mittels eines Schiebeventils von der Hauptkammer getrennt.

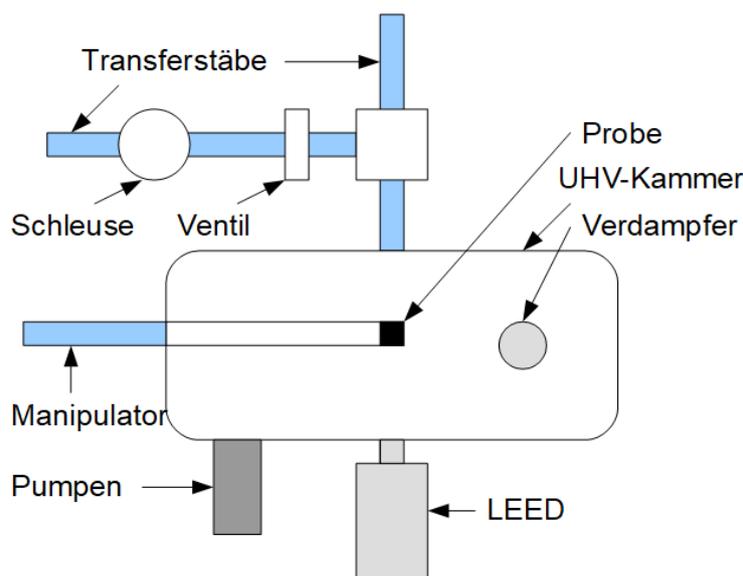


Abbildung 13: Die Hauptkammer ist mit Mess- und Präparationsgeräten ausgestattet, sowie mit Fenstern, Temperaturmessung und einem beweglichen Probenteller auf einem Arm.

Die Pumpen sind an ein Vorvakuum angeschlossen, welches durch eine Rotationspumpe oder eine Kompressorpumpe erzeugt wird. Sie reduziert den Druck von  $10^3$  mbar auf  $10^{-1}$  mbar. Eine Turbomolekularpumpe verstärkt das Vakuum dann auf  $10^{-8}$  mbar und die Ionen Getter Pumpe schafft dann einen Idealdruck von  $10^{-10}$  mbar, was mit diesem Aufbau bei der Messung allerdings nicht ganz erreicht werden konnte. Der Druck lag bei  $5 \cdot 10^{-10}$  mbar. Die Turbomolekularpumpe wird erst ab einem Druck von unter 5 mbar eingeschaltet. Der Arbeitsdruck soll durch die Ionengerter- und Titansublimationspumpe gehalten werden. Während der Benutzung der Kammer wird der Druck in der Kammer durch zwei Druckmesser erfasst, ein Piranivakuummeter für den Vordruckbereich und ein Extraktor-Ionisationsvakuummeter im UHV-Bereich.

Trotz UHV sollten Experimente schnell durchgeführt werden, da es durch die Restatmosphäre dennoch nach (14) zu Verunreinigungen kommt, welche die Oberflächenstruktur verändern.

Die Probe wird mittels eines Transferstabes durch eine Schleuse in die Vorkammer gebracht und mithilfe eines weiteren Transferstabs durch ein Ventil in die Hauptkammer. Dieses Einschleusen in Stufen findet statt, damit nicht für das Einführen einer neuen Probe die gesamte Kammer belüftet werden muss. Innerhalb der Kammer wird die Probe mittels eines Manipulators bewegt, wobei die Probe hierbei in einem Probenhalter ruht. Der Manipulator erlaubt eine sehr genaue Positionierung der Probe vor dem Verdampfer und der LEED-Optik. Dazu ist dieser in fünf Freiheitsgraden beweglich: Die Translation ist in alle drei Raumrichtungen möglich, sowie die Drehung um zwei Winkel. Die Drehung um die Oberflächennormale ist nicht möglich. Die im Probenhalter befestigte Probe kann durch Leitungen am Probenhalterarm per Stickstoff gekühlt werden. Auch eine Erhitzung mittels Direktstrom ist möglich. Die Temperatur an der Probe wird über ein Thermoelement gemessen, sowie mit einem Pyrometer durch ein Fenster der Kammer beim Ausgasen und Flashen.

Das LEED ist an der Seite der Kammer angebracht, der Verdampfer auf der Unterseite der Kammer. Eine Skizze dieses Kammersystems ist in Abbildung 13 zu sehen.

#### **3.3.2 Verdampfer**

Für den Versuch wurde ein selbstgebauter Verdampfer verwendet, der aus Einzelteilen anderer Verdampfer zusammengestellt wurde, um das Gold in entsprechender Menge auf die Siliciumoberfläche aufzutragen. Die Verdampferenteile wurden von der Feinmechanischen Werkstatt der Universität Osnabrück gefertigt. Der Verdampfer wurde unter Aufsicht an die Kammer angebracht.

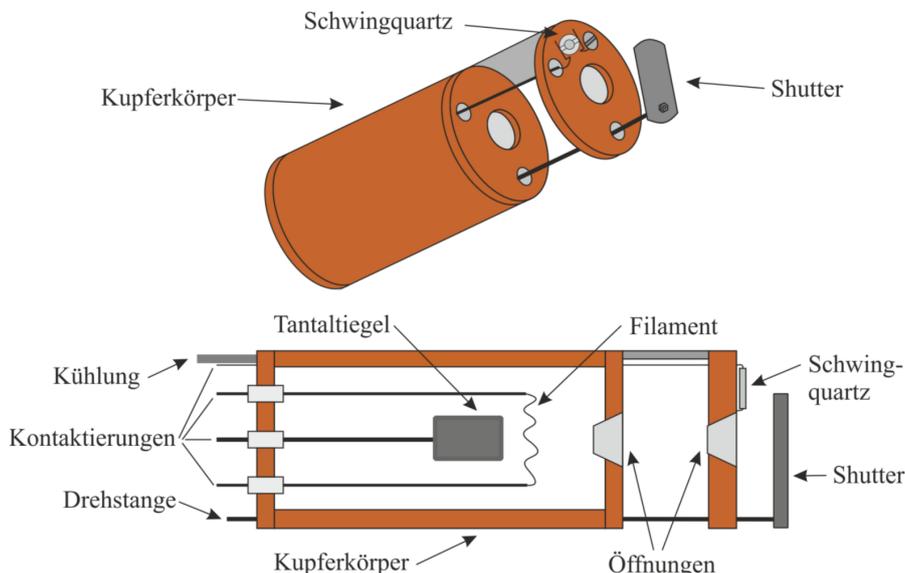


Abbildung 14: Abgebildet ist eine schematische Darstellung des Verdampfers. Die Funktionsweise wird im Text erläutert. Entnommen aus [8].

Durch den Glühelktischen Effekt treten freie Elektronen aus dem Filament aus. Die Elektronen aus dem Filament treffen beschleunigt auf den auf positiver Spannung liegenden Tiegel und erhitzen ihn. Das sich im Tiegel befindende Gold schmilzt und verdampft, wobei es dann entweder auf den geschlossenen Shutter oder, bei geöffnetem Shutter, durch die Öffnung auf die Probe trifft. Das Gehäuse wird wassergekühlt.

Der Schwingquartz funktionierte nicht wie vorgesehen, weshalb die aufgetragene Menge über die Zeit des Aufdampfens und über den Strom am Filament, also die Leistung, kontrolliert wurde. Die Spannung zum Tiegel betrug immer 1000 V. Der Strom am Filament betrug 2,71 A. Dies resultiert in einem Emissionsstrom von  $I = 30,7 \text{ mA}$ . Wurde die gewünschte Zeitspanne lang aufgetragen, so wurde der Shutter geschlossen. Auch wenn der Schwingquartz nicht funktionierte, so war mit dieser Methode trotzdem eine Reproduzierbarkeit möglich. Eine schematische Zeichnung ist zur Verdeutlichung in Abbildung 14 zu sehen.

Der Verdampfer ist mit einer Wasserkühlung ausgestattet, so wird ein Überhitzen und Erhitzen der Kammer verhindert und somit ein Steigen des Drucks in der Kammer.

### 3.4 Präparation

Zur Präparation wurde die in die Kammer eingeführte Siliciumoberfläche, etwa  $5 \times 15 \text{ mm}$ , mit dem Probenarm vor ein Fenster gefahren. Durch die elektrischen Kontakte am Probenhalter kann die Probe mittels Direktstrom

geheizt werden. Zunächst wird das Substrat für einige Stunden ausgegast bei  $650^{\circ}\text{C}$ . Um den Reinigungsprozess abzuschließen, wird ein weiteres Verfahren namens flash annealing genutzt. Hierbei wird die Probe möglichst schnell mehrmals bis kurz vor den Schmelzpunkt erhitzt und wieder abgekühlt. Durch das flash annealing wird die Siliciumoxidschicht und andere Adsorbate entfernt. Liegt nach dem Säubern die gewollte Substratstruktur vor, so kann fortgefahren werden. Dieser Vorgang wurde für alle Proben durchgeführt. Per LEED Bild ist die Struktur des Substrates erkennbar. Die  $7\times 7$  Struktur, die vorliegen soll, ist bekannt und direkt identifizierbar.

Mithilfe des Probenarms wurde die Probe vor den Verdampfer gefahren und die gewünschte Menge an Gold wurde aufgetragen. Bei manchen Proben wurde nach dem Aufdampfen nochmals nach geheizt.

Der gewünschten Überstruktur wurde sich in Schritten mittels eines bekannten Phasendiagramms angenähert [9].

### 3.5 Auswertungsmethodik

Die Aufnahme und Auswertung der Bilder wird genau geschildert, da dies einen wesentlichen Anteil, neben der Probenpräparation, an der Qualität der Ergebnisse trägt.

#### 3.5.1 Aufnahmemethodik

Die im Experiment aufgenommenen LEED Bilder wurden jeweils mit mehreren Bildern der gleichen Settings gemittelt. Dies wird averaging genannt. Diese Art der Aufnahme wurde zuvor an Si[100] getestet und hat die Aufnahmen im Vergleich zum Einzelbild verbessert.

Hierzu wurde die Channelplate Spannung verringert und die Aufnahme von einem Bild mit 100ms Belichtungszeit erhöht auf 20 Bilder mit 50ms Belichtungszeit. Hierbei musste zwischen Erhöhung der Qualität und dem damit verbundenen Zeitaufwand abgewägt werden, da 20 Aufnahmen mit 50ms Belichtungszeit erheblich länger dauerten als die erwartete Sekunde. Die Verzögerung entspringt dem Aufnahmeprogramm und konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht verbessert werden. Eine Aufnahme eines Datensatzes über das gesamte Energieintervall dauerte etwa eine halbe Stunde.

Bei Aufnahmen ohne Averaging, wie in Abbildung (15), liegen diverse Probleme vor, unter Anderem fällt es der Auswertungssoftware im nächsten Schritt schwer die Daten automatisch auszuwerten (siehe 3.5.2), verursacht durch zu geringen Kontrast in den Aufnahmen.

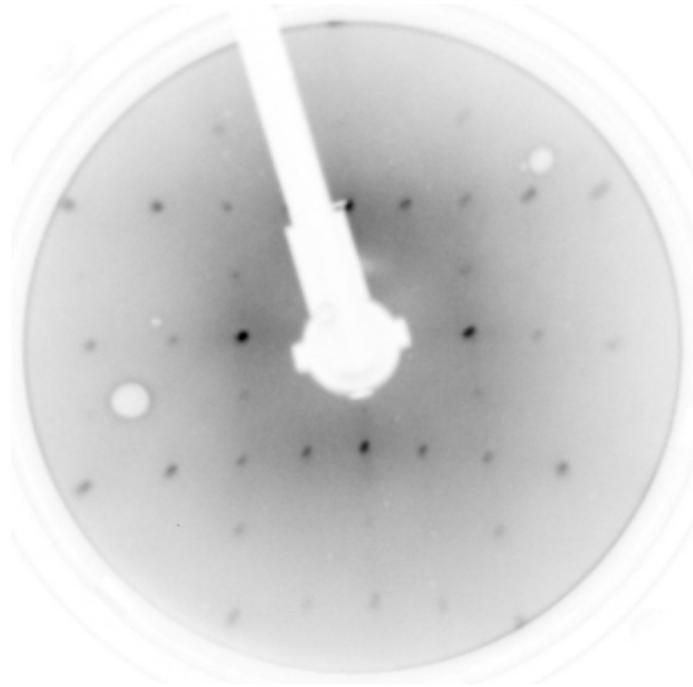


Abbildung 15: Aufnahme von Si[100] ohne Averaging. Die Energie der Aufnahme ist 135eV. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert.

Das Rauschen wird ebenfalls durch die Kühlung der Probe verringert. Allerdings sind beide Bilder (15) und (16) gekühlte Aufnahmen. Die Aufnahmesoftware speichert die Intensität mit 8 Bit, also Intensitäten zwischen 0 und 255. Dabei ist das Maximum von 255 nicht der hellste Punkt, sondern eine vom Programm definierte Intensität, wodurch es zu Übersteuerungen von Pixeln kommen kann. Bei der Aufnahme ohne Averaging werden Kurven wiederholt überbelichtet, was zu Fehlern in den IV-Kurven, die aus den Einzelaufnahmen erstellt werden, führt.

In der Aufnahme (16) ist zu erkennen, dass die Hintergrundintensität bei gleicher Energie verringert wurde, während die Reflexe nicht mehr übersteuern. Selbst mit dem Auge sind nun mehr Details zu erkennen, wie die nun erkennbaren Streaks zwischen den Reflexen. Die Reflexe sind nun mit weniger Arbeit auswertbar. Es liegen mehr Details im IV-Spektrum vor, was den zusätzlichen Zeitaufwand bei den Aufnahmen lohnend macht.



Abbildung 16: Aufnahme mit Si[100] mit Averaging. Die Energie der Aufnahme ist 135eV und es handelt sich um die gleiche Probe wie in Abbildung 15. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert.

### 3.5.2 Rohdaten Auswertung

Die Auswertung der Beugungsbildern über eine Serie von Energien der Elektronen, erfolgt durch die von Jascha Bahlmann geschriebenen Matlab Programme, welche hier den entsprechenden Dateinamen tragen werden. Verwendet wurden die Programme *IV-Messung*, *IV-Korrektur* und *DataOrg*.

Zunächst werden mittels des Programms *IV-Messung* die LEED-Bilder nacheinander ausgewertet, um Intensitätskurven der einzelnen Reflexe zu kreieren, auch wird hier eine RoI (Region of Interest) gesetzt. *IV-Messung* erkennt nach Markierung die Reflexe und folgt ihnen von Bild zu Bild, wobei die Intensität dabei durch den totalen Wert der gemittelten Intensität im markierten Kreis, einem Radius um den Peak, abzüglich der Hintergrundhelligkeit, ermittelt wird. Dies geschieht, soweit das Programm kann, automatisch. Sollten bei einzelnen Bildern Probleme auftreten, lässt sich die RoI per Hand setzen. Bereits in diesem Schritt werden erste Reflexe begründet aussortiert, da sie von Flecken auf den Aufnahmen teils verdeckt werden, der Energiebereich zu klein ist, da sie früh in den Rand der Elektronenkanone laufen, oder ein nebenliegender Hauptreflex zu sehr den Nebenreflex überstrahlt, wodurch der Verlauf des Spektrums nicht mehr glaubwürdig ist. Das Aussortieren von Reflexen erfolgt vor dem Wissen um die Güte der

Kurven für den Pendry-R Faktor.

Mittels des Programms IV-Korrektur wurden Aufnahmefehler, sowie leichtes Rauschen entfernt. Messbereiche werden hier ebenfalls zusammengefügt. Die Messdaten konnten nicht mit gleichen Einstellungen über den gesamten Energiebereich aufgenommen werden, weshalb die Datensätze in zwei Teilen aufgenommen werden mussten, da mit steigender Energie der Winkel der Probe geändert werden musste, um einen senkrechten Einfall zu gewährleisten. Ebenfalls wurden mit diesem Programm Teile von Kurven weggeschnitten, falls hier festgestellt wurde, dass der Nachbarreflex mit in den Untersuchten hineingestrahlt hat. Auch konnten mit diesem Programm die IV-Kurven geglättet werden.

Durch die Rotationsdomänen sind immer drei Reflexe symmetrieäquivalent, was bedeutet, dass ihre Spektren genau gleich sein sollten. Mittelt man diese, so kann man den Einfluss von statistischen Fehlern in der Datenaufnahme verringern. Händisch wurden diese Symmetriegleichen durch ein kleines eigenes Skript zusammengefasst.

Mit dem Programm DataOrg war der Vergleich mit dem errechneten Modell, sowie mit anderen IV-Kurven, möglich. Das Programm arbeitet mit dem Pendry-R Faktor als Bewertungskriterium 3.5.4.

### 3.5.3 IV-Kurven Simulation

Bei der Simulation werden mehrere Parameter variiert. Dabei handelt es sich um die Schwingungsparameter des Siliciums im Bulk und an der Oberfläche, sowie den Schwingungsparameter vom Gold. Darüber hinaus wird der Parameter des Potentials  $V_i$  variiert. Dieser Vorgang wird Parameteroptimierung genannt und wurde manuell durchgeführt, indem viele Simulationen durchgeführt wurden, wobei der Pendry-R Faktor (3.5.4) im Vergleich zu den Rohdaten minimiert wurde.

Die Simulationen wurden anhand der dynamischen Streutheorie durchgeführt 2.3.2, mit dem Programm *CLEED*.

### 3.5.4 Pendry-R Faktor

Ein reliability Faktor vergleicht die simulierten IV-Spektren mit den experimentellen Spektren und ist dabei ein Maß für die Übereinstimmung dieser. Generell kann durch das Nutzen eines sogenannten reliability Faktors die Übereinstimmung zweier Kurven betrachtet werden. Hier wird der Pendry R-Faktor verwendet [10], welcher die IV-Kurven in Form ihrer logarithmischen Ableitung behandelt. Die Daten werden daraufhin, wie in dem Pfeildiagramm 15 gezeigt, zusammengeführt.

Dies ginge ebenfalls nach Augenmaß, jedoch ist der Pendry-R Faktor quantitativ, wiederholbar und automatisierbar.

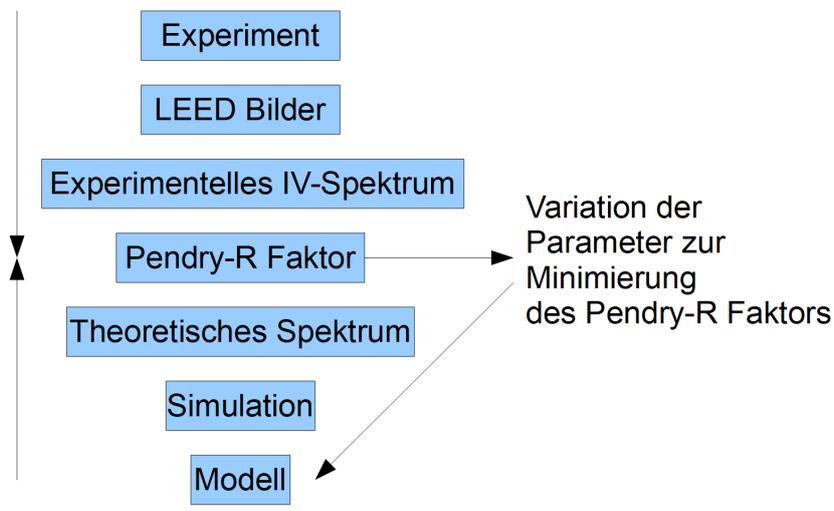


Abbildung 17: Die Zusammenführung der Daten durch den Pendry-R Faktor und die darauf beruhende Variation der Parameter.

Der Pendry-R Faktor ( $R$ ) nutzt die logarithmische Ableitung der IV-Kurven. Die Berechnung ist dem Folgenden zu entnehmen:

$$R = \sum_g \int (Y_{g_{th}} - Y_{g_{exp}})^2 dE / \sum_g \int (Y_{g_{th}}^2 + Y_{g_{exp}}^2) dE \quad (15)$$

$$Y = L / (1 + L^2 * V_{oi}^2) \quad (16)$$

$$L(E) = \frac{dI}{dE} / I \quad (17)$$

Durch die logarithmische Ableitung  $L$  wird der R-Faktor insensitive auf relative Intensitäten. Der R-Faktor ergibt sich aus der Differenz der Funktionen  $Y$  aus Theorie (th) und Experiment (exp), wird durch den Nenner normiert und über alle Reflexe summiert ( $g$ ).

Der Pendry-R Faktor ist dadurch empfindlich auf Positionen von Hoch- und Tiefpunkten, sowie Sattelpunkten, während die relative Intensität weniger wichtig ist. Wenn die Kurven sich entgegengesetzt entwickeln, also eine steigt, während die andere fällt, so wirkt sich dies positiv aus. Der Pendry-R Faktor beträgt 0, wenn die Kurven übereinstimmen und 1 wenn diese keinerlei Korrelation haben. Ein Faktor von unter 0,2 gilt als sehr gut übereinstimmend, während ein Faktor von über 0,5 eine schlechte Übereinstimmung signalisiert. Bei einem Faktor von unter 0,2 wird von einer erfolgreichen Strukturanalyse gesprochen. Ein Pendry-R Wert einer gesamten Messreihe wird durch das Mitteln der Pendry-R Werte der einzelnen

### 3 EXPERIMENTELLE GRUNDLAGEN

Kurven, gewichtet nach der Länge der Kurven ermittelt.

Gezeigt wird dieser Vergleich mit Pedry-R Faktor beispielhaft in den Abbildungen 18 mit guter Übereinstimmung und 19 mit schlechter Übereinstimmung.

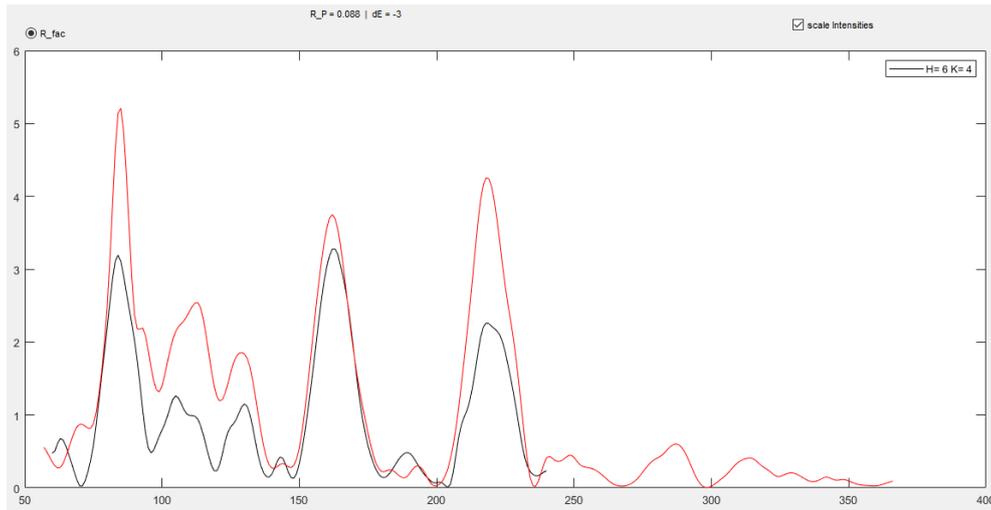


Abbildung 18: Zwei Kurven, die einen geringen R-Wert von 0,088 erzeugen.

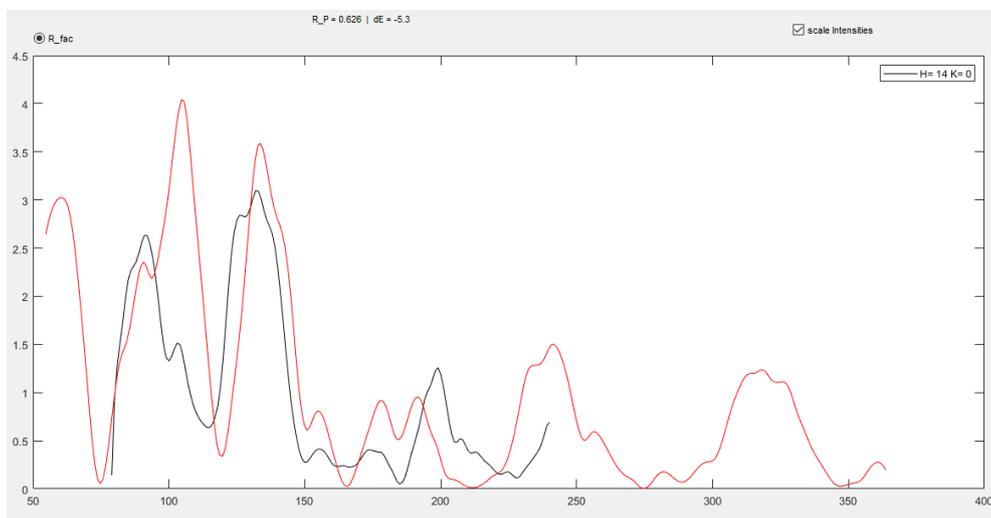


Abbildung 19: Zwei Kurven, die einen hohen R-Wert von 0,626 erzeugen.

## 4 Materialsystem

### 4.1 Silicium

Silicium [11] ist ein Halbmetall mit der Ordnungszahl 14 aus der 4. Hauptgruppe und 3. Periode des Periodensystems der Elemente und das zweithäufigste Element der Erde. Außerdem ist es ein Heißleiter, das heißt, die Leitfähigkeit nimmt mit steigender Temperatur zu, was zu einem hohen Widerstand bei Raumtemperatur führt. Die Schmelztemperatur liegt bei 1683 K, seine Elektronenkonfiguration lautet  $[Ne]3s^23p^2$ . Silicium ist ein wichtiges Element für die Elektronik und dient darüber hinaus zur Definition des Kilogramms, auch im menschlichen Körper kommt es vor. Silicium entstammt der Explosion massiver Sterne und weißer Zwerge.

Da in der Elektronik-Industrie Silicium bereits in Form von Wafern verwendet wird, liegt ein grundsätzliches Interesse an Nanodrähten auf Silicium vor. Durch die hybridisierenden Orbitale 2s und 2p entstehen vier  $sp^3$ -Hybridorbitale in tetraedischer Anordnung. Silicium liegt damit in der Diamantstruktur vor, einem fcc Gitter mit einem zusätzlichen Basisatom von  $1/4$  in der Raumdiagonalen (20). Die kubische Gitterkonstante entspricht  $5,43 \text{ \AA}$  mit einem Atomabstand von  $2,35 \text{ \AA}$ .

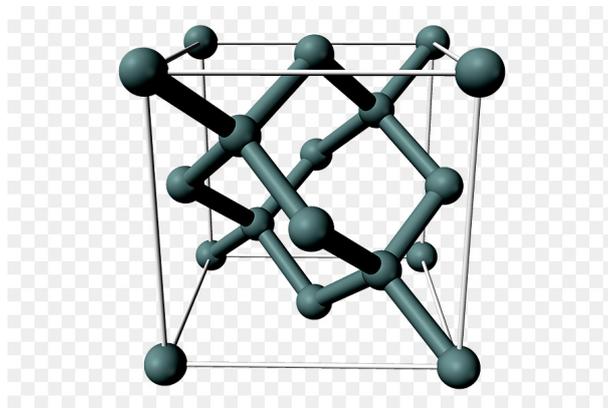


Abbildung 20: Abgebildet ist eine kubische Einheitszelle von Silicium. Die Struktur wird auch Diamantstruktur genannt. Entnommen aus [12].

Verwendet wurde das Silicium(111). Es entspricht einem Schnitt in der Raumdiagonalen des Kristalls, so dass so immer zwei Ebenen gepaart nah aneinander liegen. Die sich ergebende Einheitszelle ist hexagonal mit einer Seitenlänge von  $3,84 \text{ \AA}$ . Die Oberfläche rekonstruiert durch nicht gesättigte Bindungen, in eine energetisch günstigere Anordnung, neu zu einer (7x7)-Struktur. (siehe Abbildung 21). Auch kann eine (2x1)-Struktur entstehen, jedoch nur, wenn das Substrat gebrochen wird. Darüber hinaus ist die (2x1)-Struktur metastabil und geht bei steigender Temperatur oder auch generell

nach einiger Zeit irreversibel in die (7x7)-Struktur über. Für diese (7x7)-Struktur liegt das dimer-atom-stacking fault model (DAS-Modell) vor. Dieses ist das in Abbildung 21 gezeigte Modell. Die Einheitszelle der (7x7)-Struktur ist siebenmal größer als die Einheitszelle der nicht rekonstruierten Oberfläche.

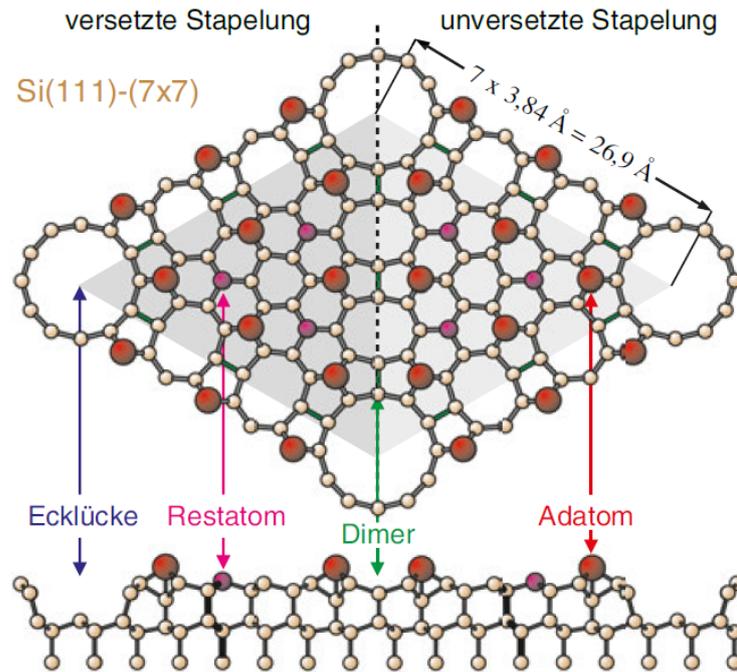


Abbildung 21: Silicium(7x7) Oberflächenrekonstruktion in der Oben- und Seitenansicht. Das Modell besteht aus 12 Adatomen, 6 Restatomen, 9 Dimeren und einem Eckstück pro Einheitszelle, auch corner hole genannt. Die (7x7)-Struktur besteht aus zwei dreieckigen Einheiten, von denen eine eine versetzte Stapelung aufweist. Die Einheitszelle ist grau hervorgehoben. Entnommen aus [13].

Zum Kalibrieren der Messtechnik wurde Si[100] verwendet. Diese Oberfläche weist eine (1x2)-Struktur auf, die sich bei tiefen Temperaturen in eine (4x2) Struktur umwandelt [14].

## 4.2 Gold

Gold [15] ist ein Übergangsmetall der ersten Nebengruppe (Gruppe 11) mit der Ordnungszahl 79. Der Siedepunkt liegt bei 3243 K und der Schmelzpunkt bei 1337,33 K. Die Elektronenkonfiguration lautet  $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s$  und es liegt ein stabiles Isotop vor. Gold ist ein guter elektrischer Leiter, auch bei Raumtemperatur. Darüber hinaus ist es ein reaktionsträges Ele-

ment und weist eine hohe Korrosionsbeständigkeit auf.

Gold ist eins der ersten vom Menschen genutzten Metalle, das in reiner Form in der Natur vorkommt. Es dient als Währung und wird in der heutigen Technik verwendet. Gold entstammt aus Vorgängen der Neutronensternverschmelzung.

### 4.3 Si(111)-5x2-Au

Die Entdeckung der Überstruktur geschah 1969 durch Bishop und Rivier [1]. Seither ist sie von Interesse, da die Oberflächenrekonstruktion zur Ausbildung von Nanodrähten führt. Auch bei tiefen Temperaturen bis 20K bleibt die Si(111)-5x2-Au Überstruktur metallisch leitend. Diese gleichbleibende Eigenschaft ist wichtig, da die LEED-Untersuchung bei tiefen Temperaturen stattfindet [16].

Derzeit ist nicht abschließend geklärt, ob das EBH-Modell nach Erwin, Barke und Himpsel [2] oder das KK-Modell nach Kwon-Kang [3], welche sich nur geringfügig voneinander unterscheiden, die Struktur richtig wiedergibt. Das KK-Modell verfügt dabei über ein Goldatom mehr pro Einheitszelle, als das EBH-Modell. Das EBH-Modell zeichnet sich durch seine einfache (Au S) und doppelte (Au D) Goldkette aus, das AN-Modell durch Y-förmige Einheiten. Visualisiert dargestellt ist dies in Abbildung 22.

Das EBH-Modell geht von einer HCC-Struktur des Siliciums aus und die (5x2)-Elementarzelle weist sechs Goldatome auf, die die Siliciumatome ersetzen. Zwischen den Goldketten befinden sich Siliciumatome mit einer Periodizität von (5x1), aufgrund der Dimerisierung weist die Elementarzelle eine (5x2) Periodizität auf. Dies lässt sich im Beugungsbild anhand der Streaks beobachten, da benachbarte Goldketten unkorreliert sind [17].

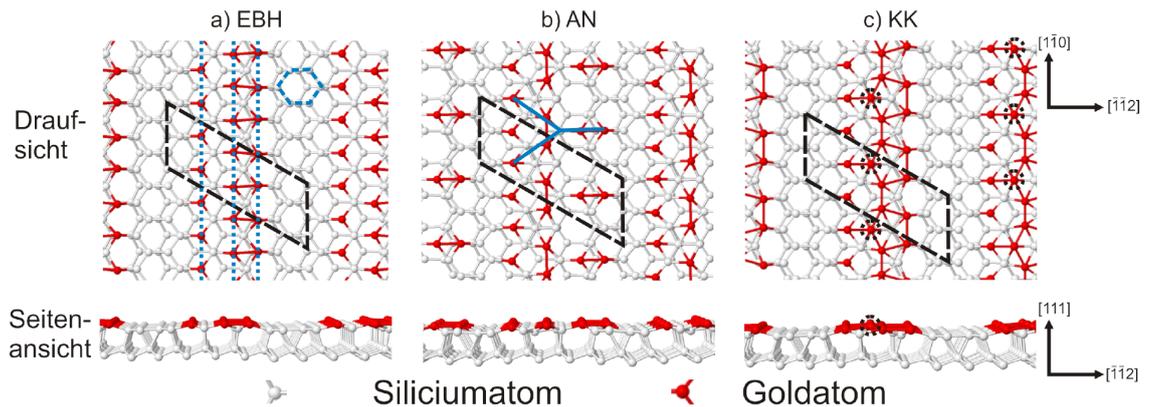


Abbildung 22: Abgebildet sind das EBH- und KK-Modell, sowie das veraltete AN-Modell. Die rot eingezeichneten Atome stellen die Goldatome dar. Das unterscheidende Zusatzgoldatom ist im KK-Modell gekennzeichnet. Die gestrichelten Kästen kennzeichnen die Elementarzellen.

Zu dieser Oberfläche liegen eine Vielzahl an Untersuchungen mittels verschiedener Methoden vor. Welches dieser beiden Modelle (EBH und KK) korrekt ist, ist bereits Thema einiger Arbeiten und es steht zur Diskussion ob eine Kombination der Modelle vorliegt (z.B:[18]). Das KK-Modell wird zurzeit bevorzugt, jedoch findet weiterhin eine Diskussion zu diesem Thema statt. Experimente mittels Surface X-Ray Diffraction schließen das AN-Modell aus, während das KK-Modell gegenüber dem EBH-Modell bevorzugt wird [19].

Die Beschichtungsdicke liegt zwischen 0,6 und 0,8 Monolagen. Die Struktur entsteht beim Auftragen von Gold auf ein Si(111)-7x7 Substrat in einem Temperaturfenster von etwa  $700^{\circ}C$  bis  $800^{\circ}C$  [9]. Eine Präparation der Struktur erweist sich durch die spezifischen Parameter als schwierig, zumal die Beschichtungsdicke in Experimenten unterschiedlich ausfällt. Die Oberfläche tritt mit drei Rotationsdomänen auf der Oberfläche auf, was dem hexagonalen Charakter des Siliciums entstammt.

Das KK-Modell weist ein zusätzliches Goldatom pro Einheitszelle auf, was in der Abbildung 22 markiert ist. Dieses zusätzliche Atom befindet sich zwischen der Einzel- und Doppelreihe aus Goldatomen, wodurch sich neue Bindungen bilden und eine höhere Beschichtungsdicke beim KK-Modell, als beim EBH-Modell vorliegt. Beide Modelle, EBH und KK, sind sich zwar ähnlich, es ist jedoch zu erwarten, dass sich beide Modelle bei einer Untersuchung mittels IV-LEED klar unterscheiden, da die Untersuchungsmethode sehr oberflächensensitiv ist. Auch könnten beide Modelle gleichzeitig vorliegen. Durch die große Ähnlichkeit von EBH und KK ist die Unterscheidung dieser Modelle schwierig, besonders mit Methoden die nicht so oberflächenintensiv wie IV-LEED sind, wodurch es immer wieder zu widersprüchlichen Aussagen über diese Oberfläche kommt.

## 5 Messergebnisse und Auswertung

Bei der Präparation der Si(111)-(5x2)-Au Struktur wurden Beschichtungsdicke und Beschichtungstemperatur variiert, bis die gewollte Oberfläche in Reinheit und reproduzierbar entstanden ist und gemessen werden konnte. Da die erwünschte (5x2)-Phase im Phasendiagramm in einem kleinen Bereich vorliegt, waren mehrere Versuche bis hin zur Reproduzierbarkeit nötig. Hierbei ist eine Vielzahl an Datensätzen von 16 verschiedenen Präparationen entstanden, jedoch wurde lediglich die Hauptmessung der gesuchten 5x2 Phase unter gekühlten Bedingungen vollständig aufgenommen.

Im Versuch wurde ein Siliciumsubstrat aus einem planaren Silicium(111)-Wafer mit einer Ungenauigkeit von  $(\pm 0, 1^\circ)$  verwendet. Durch seine planare Beschaffenheit sind die drei Rotationsdomänen im Versuch etwa gleich stark ausgeprägt. Das Gold wurde während der verschiedenen Präparationen nicht nachgefüllt und die Kammer nicht verändert.

Die Messdaten wurden mit dem EBH-Modell, dem KK-Modell und einer Version des KK-Modells, erstellt von Prof. Dr. Simone Sanna, verglichen. Die als EBH und KK benannten Modelle weisen jeweils 3 rekonstruierte bilayer Silicium unter den Nanodrähten auf. Das als KK-tiefe bezeichnete Modell weist mehr rekonstruierte Lagen auf. Die Herangehensweise und die Grundlagen zu diesem Versuch, wie auch der Simulation der Daten, sowie das Zusammenführen von Theorie und Experiment wurde in den Vorkapiteln geschildert.

### 5.1 Messungen

In diesem Unterkapitel wird auf die Messung und die Präparation der verschiedenen beobachteten Oberflächenstrukturen Bezug genommen.

#### 5.1.1 Gemessene Überstrukturen

Durch die Vielzahl der Messungen kann ein Temperatur- und Bedeckungsbereich der Si(111)-(5x2)-Au Phase abgeschätzt werden, wobei die Messungen nicht zahlreich genug ausfallen, um ein eigenes Phasendiagramm mit ausreichend Aussagekraft erstellen zu können.

Aufgenommen wurden die Strukturen (7x7) des Silizium-Bulks, die gewollte (5x2) Bedeckung und die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  Struktur, sowie Mischungen dieser Strukturen und Mischungen mit einer (1x1)-Struktur, welche durch hohe Temperaturen beim Präparieren entsteht. Durch die zu geringe Anzahl der Messpunkte können die Bereiche der Phasen auf der Oberfläche im Phasendiagramm nicht genau abgegrenzt werden, was zu einer hohen Ungenauigkeit führt. Dennoch wurde ein Phasendiagramm visualisiert (23), um die Messungen, die markiert sind, einordnend festzuhalten, da im Folgenden nicht auf jede Messung eingegangen wird.

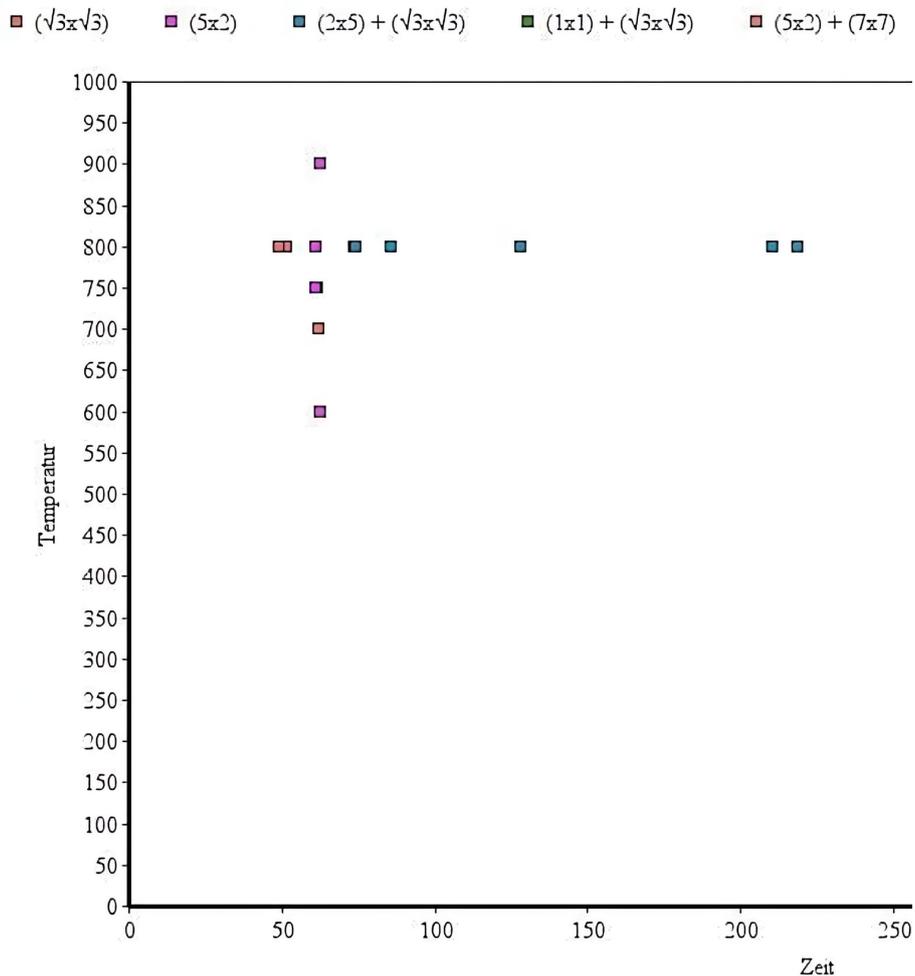


Abbildung 23: Gezeigt wird das selbst erstellte Phasendiagramm. Die Temperatur ist in Grad Celsius angegeben, die Bedeckung wurde gegen die Auftragszeit ersetzt. Die Datenlage ist zu gering um die Bereiche eindeutig ziehen zu können.

Die LEED-Bilder der  $(5 \times 2)$ -Bedeckung sind im Temperaturbereich von  $700\text{C}^\circ$  bis  $800\text{C}^\circ$  am hochwertigsten bei gleich langer Auftragszeit. Die Streaks sind besser erkennbar und die  $(5 \times 2)$ -Struktur auf den LEED-Bildern klar ausgeprägt. In dem Phasendiagramm ist die  $(5 \times 2)$ -Bedeckung zwischen der  $(7 \times 7)$ -Bedeckung und der  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Bedeckung auf der Zeitskala positioniert. Am Phasendiagramm ist zudem erkennbar, dass zunächst die Beschichtungsstärke, durch die Beschichtungszeit, der  $(5 \times 2)$ -Bedeckung ermittelt wurde, dann die Temperatur mit der hochwertigsten  $(5 \times 2)$ -Bedeckung.

### 5.1.2 Si(111)-(5x2)-Au

Gezeigt wird hier ein LEED-Bild (25), welches dem Datensatz entstammt, der für die IV-LEED Analyse verwendet wurde. Zu sehen ist das LEED-Bild der Si(111)-(5x2)-Au Struktur und im Folgenden wird auf diese IV-LEED Messreihe Bezug genommen, wenn von den Messdaten der Si(111)-(5x2)-Au Struktur gesprochen wird. Es handelt sich dabei um die finalisierte Messung, die reproduzierbar war. Die Probe wurde bei 750 Grad Celsius für 61 Sekunden mit einem Filamentstrom von 30,7mA am Tiegel bedampft und nach dem Bedampfungsvorgang nicht weiter erhitzt. Vor dem Auftragen des Goldes wurde das Vorliegen einer Si-7x7 Struktur überprüft. Das vorliegende LEED-Bild, welches zur Überprüfung genutzt wurde, ist im Folgenden in Abbildung 24 zu sehen.

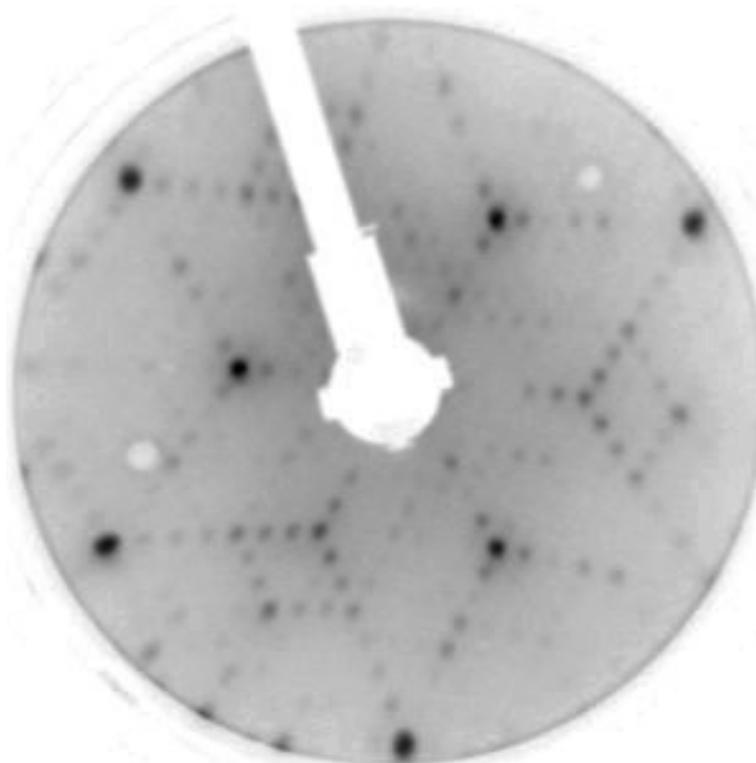


Abbildung 24: Ausschnitt der finalen Messung der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche zu Grunde liegenden Si-(7x7) Struktur. Zu sehen ist die Aufnahme bei einer Energie von 120 eV. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert und dann um 20% verdunkelt.

Gemessen wurde bei einer Temperatur von  $-190^{\circ}\text{C}$  bis  $-163^{\circ}\text{C}$  und einem Druck von etwa  $10^{-9}$  mBar. Das LEED war wie folgt eingestellt: Der Fokus lag auf einer Spannung von 160V, das Gitter auf einer Spannung von 115V,

das Filament auf einem Strom von 2,71A und der Schirm auf einer Spannung von 3,5kV, die sich davor befindende MCP (Multi channel plate) lag auf einer Spannung von 0,48kV. Der fokussierende Wehneltzylinder lag auf einer Spannung von 2V.

Die präparierte Oberfläche hatte am Ende der Messung ein Alter von etwa 2 Stunden. Gemessen wurde mit dem Bildmittelungsverfahren, mit 20 Bildern pro Elektronenenergieschritt mit einer Belichtungszeit von 50ms, in zwei Intervallen, von 60eV bis 240eV und von 220eV bis 370eV, um den senkrechten Einfall des Elektronenstrahls zu gewährleisten. Die Überschneidung der Intervalle dient der besseren Zusammenführung der Messintervalle. Der Abstand der Messpunkte betrug 1eV, wodurch die Anzahl einzelner Messpunkte der IV-Kurven bei über 12.000 Punkten vor der Mittlung der Rotationsdomänen liegt, wenn später aussortierte Reflexe, nach in den Grundlagen erwähnten Kriterien, nicht eingerechnet werden. Die Anzahl der ausgewerteten inäquivalenten Reflexe beträgt 40. Der Datensatz sollte durch den großen Messbereich aussagestark sein. Durch eine Schätzung der Peaks weist der Datensatz 760 Peaks auf. Durch die Anzahl der gewählten vier Freiheitsgrade ergibt dies eine hohe Redundanz von mindestens 190. Die Freiheitsgrade sind die drei Schwingungsamplituden und der Imaginärteil des inneren Potentials ( $V_i$ ).

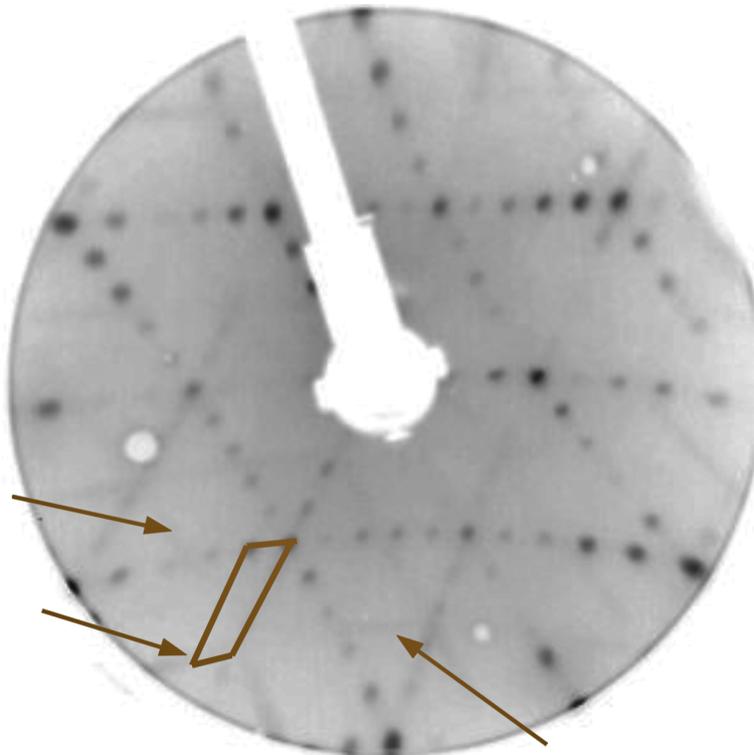


Abbildung 25: Ausschnitt der finalen Messung der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche. Zu sehen ist die gemittelte Aufnahme bei einer Energie von 120 eV. Die (5x2)-Struktur wurde eingezeichnet und einige Streaks mit einem Pfeil markiert. Die Streaks sind schlechter erkennbar, als im Auswertungsprogramm. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert und dann um 20% verdunkelt.

In der Abbildung 25 ist das LEED-Bild der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche zu sehen. Zu erkennen sind sowohl die erwarteten Streaks, die die x2-Periodizität darstellen, als auch die Beugungsreflexe der x5-Periodizität. Sowohl die Streaks als auch die Beugungsreflexe liegen in den drei erwarteten Rotationsdomänen vor. Ein Teil der Aufnahme ist durch die Elektronenkanone verdeckt. Reflexe, die in der Nähe des Randes der Elektronenkanone, sowie in der Nähe des Randes des Schirms oder in der Nähe der dunklen Punkte, verursacht durch Schirmverschmutzung, liegen, sind nicht weiter zuverlässig auswertbar, da ein Teil der Intensität verloren geht.

### 5.1.3 Andere Au-induzierte Überstrukturen

Zusätzlich zu der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche mit drei Rotationsdomänen wurden auch Einzelaufnahmen anderer Au-induzierter Oberflächen gemacht. Wird zu wenig Gold aufgetragen, entsteht eine Mischung der (7x7)-Struktur

des Siliciums und der (5x2)-Struktur der rekonstruierten Oberfläche.

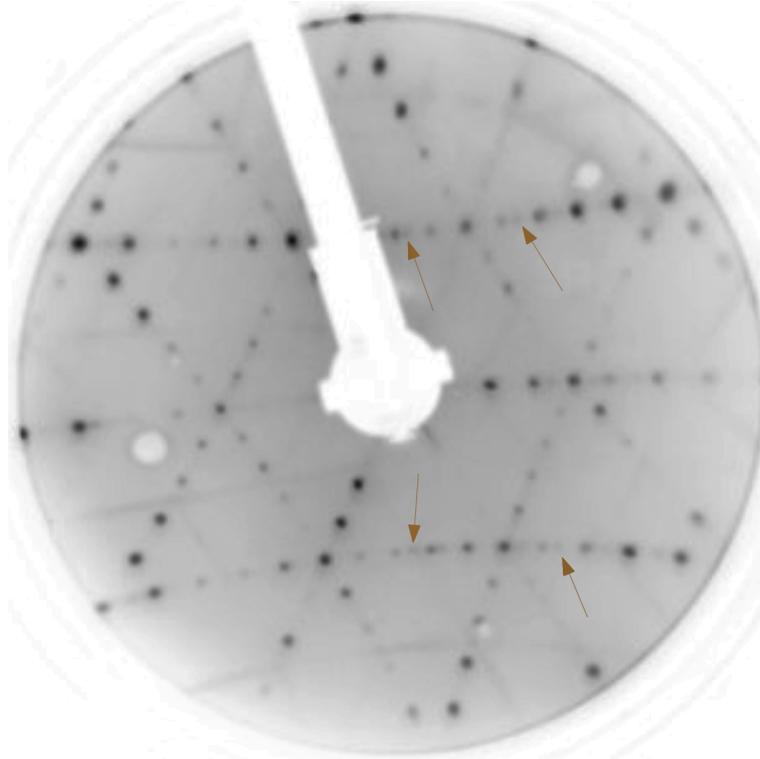


Abbildung 26: LEED-Bild der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche mit zu wenig Gold, weshalb auch die Si(111)-(7x7)-Au Struktur zu sehen ist. Dargestellt ist die gemittelte Aufnahme bei einer Energie von 120 eV. Die Aufnahme ist im Phasendiagramm nah an der Si(111)-(5x2)-Au Zone, weshalb die zusätzlichen Reflexe teils schwer erkennbar sind und nicht in jeder Rotationsdomäne vorliegen. Einige zusätzlichen Reflexe wurden markiert. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert und dann um 15% verdunkelt.

Wird zu viel Gold aufgetragen, geht die (5x2)-Phase in die  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase fließend über. Es wurden auch reine  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phasen präpariert, jedoch liegt die in 27 gezeigte Aufnahme an der Grenze zur Si(111)-(5x2)-Au-Phase.



Abbildung 27: LEED-Bild der Si[111]- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ Au Oberfläche mit der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche mit einer Rotationsdomäne. Zu sehen ist die gemittelte Aufnahme bei einer Energie von 120 eV. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert und dann um 15% verdunkelt.

Die Si[111]-5x2Au Oberfläche wurde ebenfalls mit lediglich einer Rotationsdomäne aufgenommen. Dies geschah bei der Präparation häufiger, konnte jedoch nicht auf bestimmte Auslöser zurückgeführt werden. Auch kam es vor, dass auf einer Probe sowohl Bereiche mit einer Rotationsdomäne, als auch mit allen drei Rotationsdomänen nebeneinander vorhanden waren, jedoch keine Bereiche mit zwei Rotationsdomänen. Dieser Fall einer Rotationsdomäne wird für gewöhnlich beispielsweise an der Si(553)-Au Oberfläche untersucht, die Strukturen sind zwar nicht identisch, aber miteinander verwandt. Bei dieser Oberfläche liegen Si(111)-Au Stufen vor, auf denen sich die Goldnanodrähte nur in eine Richtung ausbilden können.



Abbildung 28: LEED-Bild der Si(111)-(5x2)-Au Oberfläche mit einer Rotationsdomäne. Zu sehen ist die gemittelte Aufnahme bei einer Energie von 100 eV. Zur besseren Sichtbarkeit wurde das LEED-Bild farblich invertiert.

## 5.2 Vergleich mittels Pendry-R Faktor

Nach Auswertung der LEED-Bilder nach (3.5) mithilfe simulierter Daten zu den Modellen EBH und KK, sowie einer angepassten KK-Modellversion mit mehr rekonstruierten Lagen von Prof. Dr. Simone Sanna, im Folgenden KK-tiefe genannt, und einer durchgeführten Strukturparameteroptimierung aller Modelle, kommt es zu einer klaren Bevorzugung des KK-Modells. Hierbei schneiden KK und KK-tiefe beide gleich mit einem Pendryfaktor von 0,201 im Vergleich zur Messung ab, das EBH-Modell mit einem Pendryfaktor von 0,334. Die Modelle EBH und KK unterscheiden sich durch einen Pendry-R Faktor von 0,354 und lediglich 13 der 64 errechneten Kurven weisen einen Pendry-R Faktor von unter 0,2 auf, was dem Wert zwischen KK-Modell und Versuch entspricht. Ein Unterschied zwischen den IV-Kurven der Modelle liegt eindeutig vor und lassen sich somit mit IV-LEED klar unterscheiden. Der Unterschied zwischen EBH-Modell und Messung fällt ähnlich groß aus wie der Unterschied zwischen den Modellen selbst.

Die Parameter der Simulationen waren bei den Modellen wie folgt einge-

stellt, nachdem sie durch eine Parameteroptimierung gefunden wurden: Der verwendete Imaginärteil des inneren Potentials betrug  $4,5\text{eV}$  bei beiden Simulationen, dem EBH- und dem KK-Modell. Die Schwingungsparameter bei der Simulation für das KK-Modell lagen für den Siliciumbulk bei  $0,03\text{\AA}$ , für das Silicium an der Oberfläche bei  $0,09\text{\AA}$  und für die Goldatome lag der Schwingungsparameter bei  $0,14\text{\AA}$ . Die Schwingungsparameter bei der Simulation für das EBH-Modell lagen für den Siliciumbulk bei  $0,03\text{\AA}$ , für das Silicium an der Oberfläche bei  $0,08\text{\AA}$  und für die Goldatome bei  $0,11\text{\AA}$ . Die Parameteroptimierung ergab beim EBH-Modell kaum Verbesserungen. Sogar bei extremen Parametern, wie einer Schwingung für das Silicium an der Oberfläche von 1 hat sich der Pendry-R Faktor kaum verändert, sondern lag in diesem Extremfall bei  $0,366$ , was auf grundsätzliche Unstimmigkeiten dieses Modells gegenüber der untersuchten Oberfläche hinweist.

Das Modell KK-tiefe wurde mit folgenden Parametern untersucht: Der verwendete Imaginärteil des inneren Potentials betrug bei der Simulation  $3,6\text{eV}$ . Der Schwingungsparameter lag für den Siliciumbulk bei  $0,06\text{\AA}$ , für das Silicium an der Oberfläche bei  $0,09\text{\AA}$  und für die Goldatome bei  $0,14\text{\AA}$ . Unter diesen Parametern ergab sich der gleiche Pendry-R Faktor von  $0,201$  wie beim KK-Modell, wobei das der Erwartung entspricht, da die Modelle KK und KK-tiefe untereinander einen Pendry-R Faktor von  $0,043$  erzeugen und somit sehr ähnlich sind. Somit zeigt dieses Ergebnis, dass verbliebene Unstimmigkeiten nicht aus der beschränkten Lagenanzahl der KK-Modellsimulation stammen.

Aussagestarke Reflexe zwischen EBH- und KK-Modell weisen sich durch große Pendry-R Faktoren zwischen ihnen aus, da sie sich somit am stärksten unterscheiden. Wäre eines der Modelle bezüglich dieser Reflexe besonders übereinstimmend, so würde es die Richtigkeit dieses Modells bestärken. Die Reflexe mit den größten Unterschieden zwischen den Modellen sind in der folgenden Tabelle (1) aufgeführt.

Zwar sind bei den beiden unterschiedlichsten Reflexen die Vergleichswerte zwischen Messung und KK-Modell auch hoch, jedoch überzeugt hier erneut das KK-Modell gegenüber dem EBH-Modell im Schnitt über die kritischsten Reflexe. Im Folgenden werden einige dieser kritischen Kurven in Abbildung (29 - 31) dargestellt. Die zugehörigen Pendry-R-Werte sind der Tabelle 1 zu entnehmen:

## 5 MESSERGEBNISSE UND AUSWERTUNG

Reflex	EBH - KKK	KK - Messung	EBH - Messung
(0   0,8)	0,568	0,258	0,504
(1,8   -0,8)	0,435	0,532	0,326
(0   1,8)	0,421	0,194	0,636
(0   0,6)	0,435	0,186	0,384
(1,4   0)	0,446	0,263	0,626
(0   1,6)	0,562	0,077	0,496
(0,8   0)	0,494	0,155	0,235
(1,2   0)	0,479	0,147	0,442
Schnitt	0,48	0,2265	0,456

Tabelle 1: Aufgelistet sind die Pendry-R-Faktor Werte der kritischen Werte.

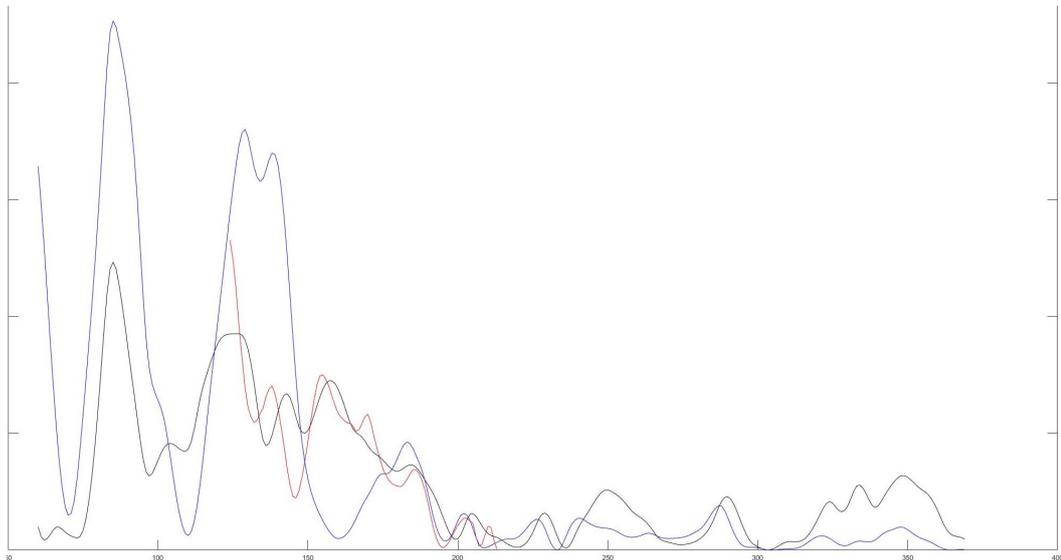


Abbildung 29: Abgebildet sind die IV-Linien aus dem Versuch (rot), vom KK-Modell (schwarz) und vom EBH-Modell (blau). Dargestellt ist der Reflex (0 | 1,8).

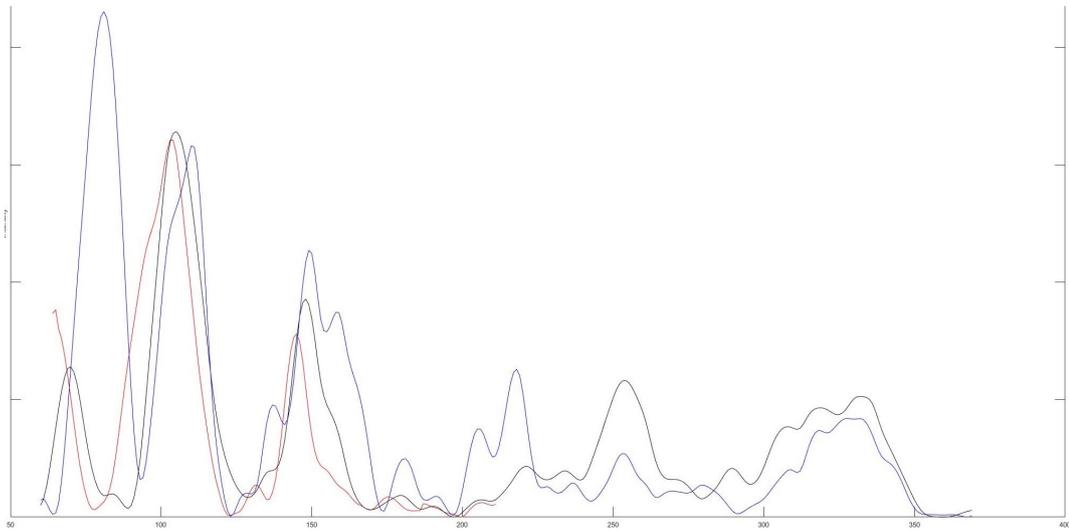


Abbildung 30: Abgebildet sind die IV-Linien aus dem Versuch (rot), vom KK-Modell (schwarz) und vom EBH-Modell (blau). Dargestellt ist der Reflex  $(1, 2 | 0)$ .

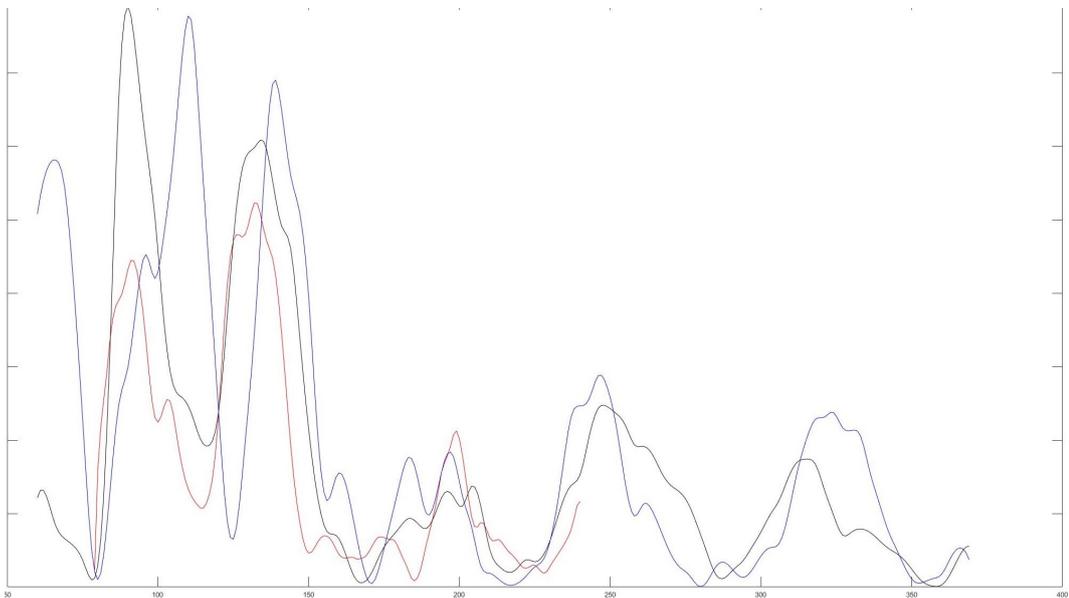


Abbildung 31: Abgebildet sind die IV-Linien aus dem Versuch (rot), vom KK-Modell (schwarz) und vom EBH-Modell (blau). Dargestellt ist der Reflex  $(1, 4 | 0)$ .

Die IV-Kurven der Messung im Vergleich mit dem KK-Modell befinden sich vollständig im Anhang 8.

Der R-Faktor zwischen Experiment und KK-Modell beträgt 0,201, jedoch wird bei Betrachtung der Einzelkurven auffällig, dass der R-Faktor teils stark variiert. Es liegen sowohl einige sehr gute Werte von unter 0,1 vor, als auch Ausreißer von über 0,5. Dies könnte an Problemen in der Datenauswertung liegen, wie zum Beispiel nicht genau aussortierten Reflexen. Es kann aber auch daraufhin deuten, dass das KK-Modell in der jetzigen Form nicht ganz korrekt ist, also zum Beispiel Atompositionen leicht optimiert werden müssten, also eine Strukturparameteroptimierung.

### 5.3 Linearkombination der Modelle

Eine Mischung der beiden Modelle könnte auf der Oberfläche koexistieren, weshalb Linearkombinationen der IV-Kurven der errechneten EBH- und KK-Modelle angefertigt wurden. Die entsprechenden Pendry-R Faktoren dieser Linearkombinationen gegenüber dem Modell sind der Tabelle (2) zu entnehmen:

EBH Anteil in %	10	20	30	40	50	60	70	80	90
Pendry-R Faktor	0,196	0,197	0,202	0,211	0,223	0,239	0,257	0,279	0,305

Tabelle 2

Hierbei wird zunächst auffällig, dass eine kleine Beimischung des EBH-Modells zum KK-Modell den Pendry-R Faktor leicht senkt. Allerdings ist der Unterschied marginal. Bei kleinen Beimischungen des KK-Modells zum EBH-Modell finden direkt große Schritte im Pendry-R Faktor statt. Auch dies spricht im Gesamten stark gegen das EBH-Modell. Von einer Kombination oder auch Koexistenz der Modelle ist nicht auszugehen. Die vorhandenen Daten zeigen zwar bei kleinen Beimischungen des EBH-Modells zum KK-Modell eine kleine Verbesserung, wodurch eine Koexistenz möglich wäre, allerdings ist die Verbesserung im Pendry-R-Wert so unsignifikant, dass die Verbesserung auch auf einem Zufall beruhen kann.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die Ermittlung des richtigen Modells für die Si(111)-(5x2)-Au Rekonstruktion der Si(111)-(7x7) Oberfläche. Dazu wurde die entsprechende Oberfläche präpariert und mittels IV-LEED untersucht. Die beiden Modelle dieser Oberfläche lauten EBH- und KK-Modell, das KK-Modell wird bisher bevorzugt. Bei der Untersuchung schließt das KK-Modell erheblich besser mit einem Pendry-R Faktor gegenüber der Messung von 0,201 ab, als das EBH-Modell mit einem Pendry-R Faktor gegenüber der Messung von 0,334. Auch in besonders unterschiedlichen Reflexen zwischen EBH- und KK-Modell schließt das KK-Modell deutlich besser ab. Bei der untersuchten Linearkombination der Modelle erweist sich das KK-Modell als überlegen, da eine Beimischung des EBH-Modells die Resultate nicht signifikant verbessert. Durch die Ähnlichkeit der Modelle geht der Pendry-R Faktor des EBH-Modells gegenüber der Messung zwar nicht gegen hohe Werte, die keine Korrelation mehr bedeuten würden, jedoch fällt er erheblich höher aus als der Pendry-R Faktor des KK-Modells gegenüber der Messung. Durch die große Messdatenmenge und die untersuchten Kriterien kann gesagt werden, dass es sich beim KK-Modell um das zutreffende Modell für die Si(111)-5x2Au Rekonstruktion handelt, während das EBH-Modell die Messdaten wesentlich schlechter erklären kann. Das Modell KK-tiefe liefert durch die mit Kalkulation von mehr rekonstruierten Ebenen keine besseren Ergebnisse als das KK-Modell. Die restlichen vorhandenen Unstimmigkeiten entstammen also nicht einer beschränkten Lagenanzahl.

Zukünftige Untersuchungen sollten sich der Strukturparameteroptimierung widmen. Von Interesse ist ebenfalls das Auftreten nur einer Rotationsdomäne auf Si(111). Interessant wäre hier, ob das Auftreten dieses Falles eine Strukturänderung mit sich bringt. Dies könnte ebenfalls mittels IV-LEED untersucht werden.



## 7 Literaturverzeichnis

- [1] H. E. Bishop and J. C. Riviere. Segregation of gold to the silicon (111) surface observed by Auger emission spectroscopy and by LEED. *Journal of Physics D: Applied Physics* 2, 163, (1969).
- [2] S.C.Erwin, I. Barke, and F.J. Himpsel. Structure and energetics of Si(111)-(5x2)-Au. *Physical Review B* 80, 155409, (2009).
- [3] S.G. Kwon and M.H. Kang. Identification of the Au Coverage and Structure of the Au/Si(111)-5x2 Surface. *Physical Review Letters* 113, 086101, (2014).
- [4] K. Oura, V.G. Lifshits, A.A. Saranin, A.V. Zltov, and M. Katayama. *Surface Science - An Introduction*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2003).
- [5] Freie Universität Berlin. <http://webdoc.sub.gwdg.de/ebook/diss/2003/fu-berlin/2002/245/theory.pdf>. Internet. Stand: 15.07.2022.
- [6] Laue-Bedingung. <https://de.wikipedia.org/wiki/Laue-Bedingung>. Internet. Stand: 15.07.2022.
- [7] Mittlere freie Weglänge von Elektronen. [https://www.researchgate.net/figure/Abbildung-46-Mittlere-freie-Weglaenge-l-e-fuer-Elektronen-in-Kristallen-als-Funktion\\_fig4\\_279480798](https://www.researchgate.net/figure/Abbildung-46-Mittlere-freie-Weglaenge-l-e-fuer-Elektronen-in-Kristallen-als-Funktion_fig4_279480798). Internet. Stand: 15.07.2022.
- [8] W. Schreiber. SPA-LEED-Untersuchungen an epitaktischen TerbiumSilizid-Schichten auf Silizium(111)- und Silizium(557)-Oberflächen. Masterarbeit. Universität Osnabrück, (2017).
- [9] F. Timmer. Diffraction studies on ordering of quasi-one-dimensional structures and nanowires on silicon surfaces induced by metals. Universität Osnabrück, (2017).
- [10] J. B. Pendry. Reliability factors for leed calculations. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, 13:937–44, 1980.
- [11] Silicium. <https://www.chemie.de/lexikon/Silicium.html.ref-0/>. Internet. Stand: 15.07.2022.
- [12] Einheitszelle von Silicium. <https://de.cleanpng.com/png-w68une/> Internet. Stand: 15.07.2022.
- [13] K. Heinz T. Fauster, L. Hammer and A. Schneider. *Oberflächenphysik:*

*Grundlagen und Methoden*. Oldenbourg, (2013).

[14] T. Uda H. Shigekawa Y. Sugawara S. Mizuno H. Tochiyama Y. Yamashita J. Yoshinobu K. Nakatsuji H. Kawai F. Komori. Ground state of the Si(0 0 1) surface revisited - Is seeing believing? *Progress in Surface Science*, 76(6):147-162, (2004).

[15] Gold. <https://www.chemie.de/lexikon/Gold.html>. Internet. Stand: 15.07.2022.

[16] F. Hotzel, K. Seino, C. Huck, O. Skibbe, F. Bechstedt, and A. Pucci. Metallic Properties of the Si(111) 5x2 Au Surface from Infrared Plasmon Polaritons and Ab Initio Theory. *Nano Letters* 15, 4155, (2015).

[17] S. C. Erwin, I. Barke und F. J. Himpsel. "Structure and energetics of Si(111)-(5x2) - Au". *Physical Review B* 80.15, S.5540, (2009).

[18] A. Alexander. LEED-Untersuchungen von Au-induzierten Überstrukturen auf Si(111). Universität Osnabrück, (2017).

[19] T. Shirasawa, W. Voegeli, T. Nojima, Y. Iwasawa, Y. Yamaguchi, and T. Takahashi. Identification of the Structure Model of the Si(111)(5x2)Au Surface. *Physical Review Letters* 113, 165501, (2014).

## 8 Anhang

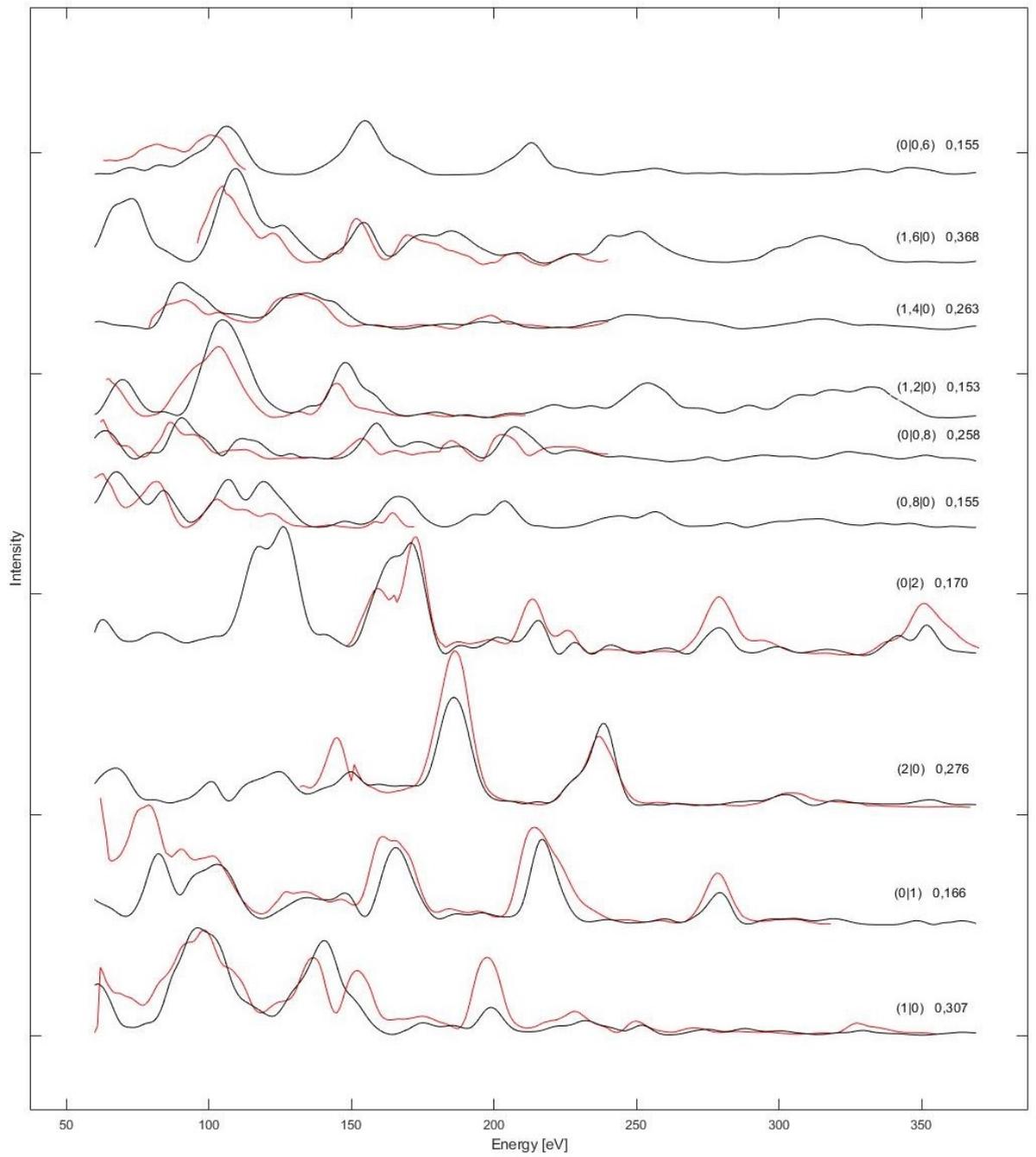


Abbildung 32: IV-LEED Kurven der Messung (rot) und des simulierten KK-Modells (schwarz).

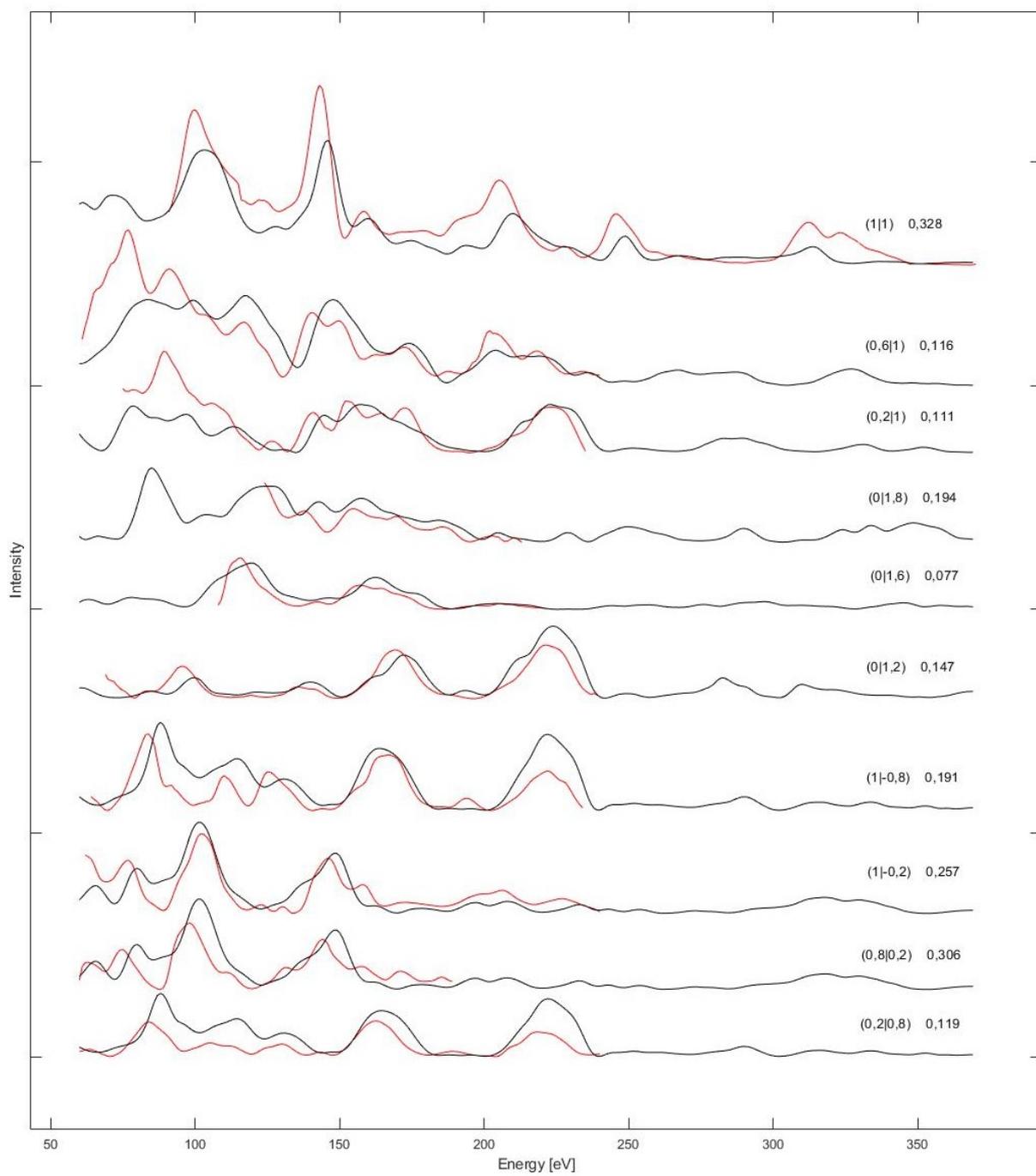


Abbildung 33: IV-LEED Kurven der Messung (rot) und des simulierten KK-Modells (schwarz).

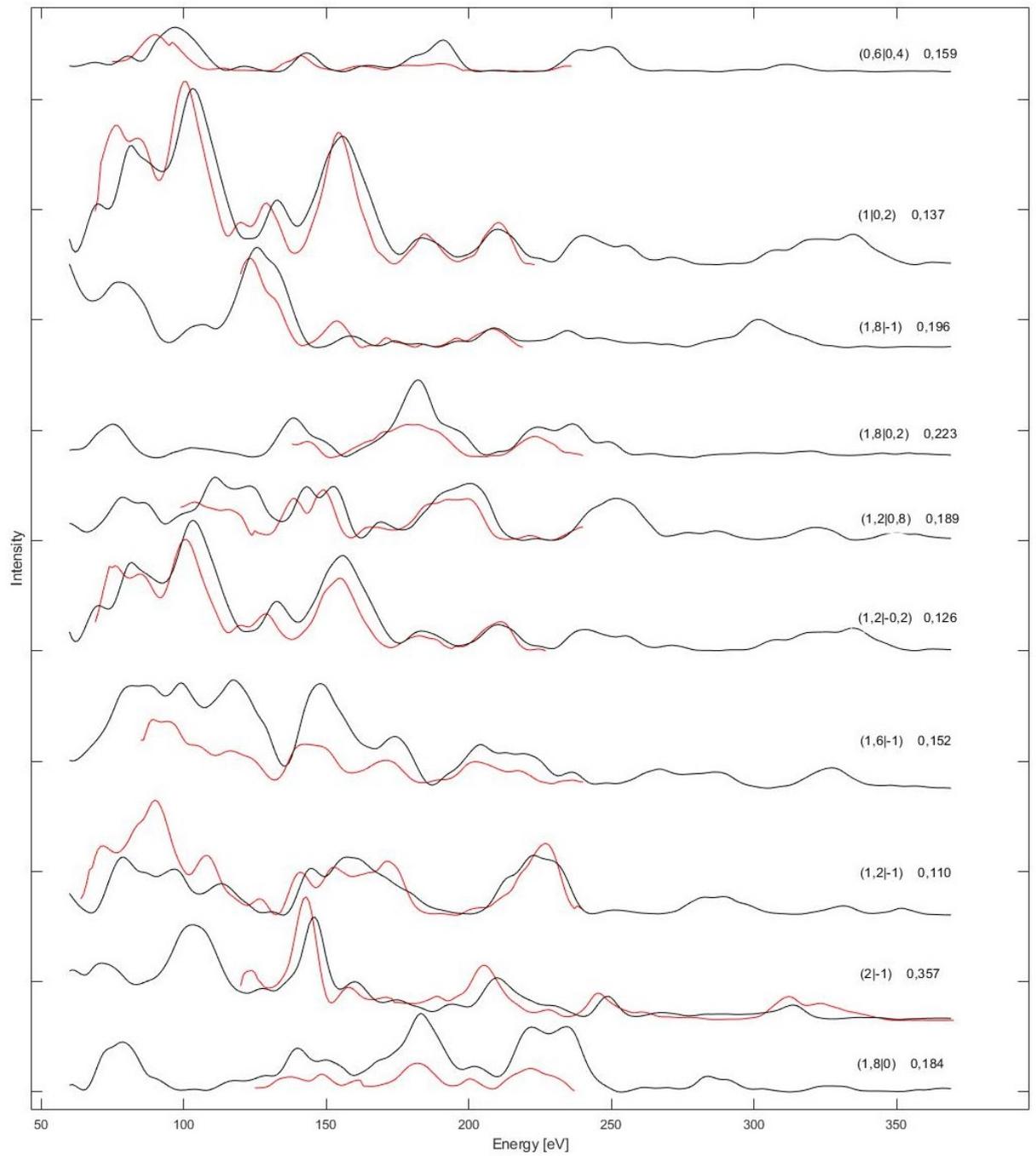


Abbildung 34: IV-LEED Kurven der Messung (rot) und des simulierten KK-Modells (schwarz).

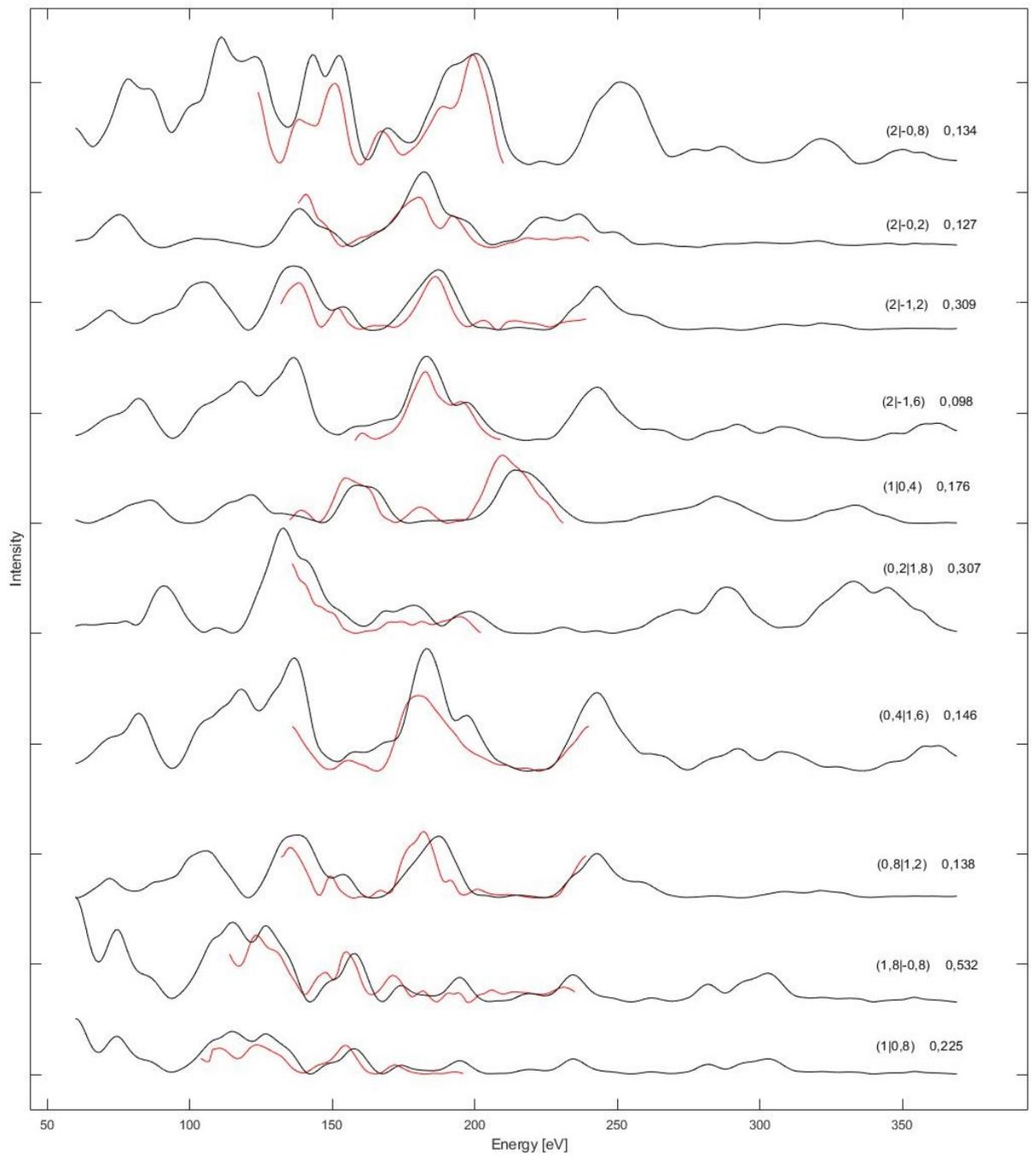


Abbildung 35: IV-LEED Kurven der Messung (rot) und des simulierten KK-Modells (schwarz).

H	K	KK-Tiefe	KK	EBH
1	0	0,319	0,307	0,338
0	1	0,186	0,166	0,299
2	0	0,259	0,276	0,362
0	2	0,227	0,170	0,225
0,8	0	0,114	0,155	0,235
0	0,8	0,349	0,258	0,504
1,2	0	0,159	0,153	0,693
1,4	0	0,309	0,263	0,626
1,6	0	0,320	0,368	0,605
0	0,6	0,507	0,516	0,394
0,2	0,8	0,088	0,119	0,141
0,8	0,2	0,302	0,306	0,507
1	-0,2	0,218	0,257	0,370
1	-0,8	0,136	0,191	0,083
0	1,2	0,155	0,147	0,442
0	1,6	0,100	0,077	0,496
0	1,8	0,217	0,194	0,636
0,2	1	0,126	0,111	0,144
0,6	1	0,116	0,116	0,303
1	1	0,337	0,328	0,234
1,8	0	0,185	0,184	0,316
2	-1	0,376	0,357	0,249
1,2	-1	0,108	0,110	0,097
1,6	-1	0,144	0,152	0,420
1,2	-0,2	0,147	0,126	0,151
1,2	0,8	0,155	0,189	0,221
1,8	0,2	0,330	0,223	0,421
1,8	-1	0,198	0,196	0,129
1	0,2	0,135	0,137	0,138
0,6	0,4	0,150	0,159	0,491
1	0,8	0,234	0,225	0,174
1,8	-0,8	0,490	0,532	0,326
0,8	1,2	0,147	0,138	0,214
0,4	1,6	0,159	0,146	0,243
0,2	1,8	0,282	0,307	0,260
1	0,4	0,280	0,176	0,478
2	-1,6	0,109	0,098	0,274
2	-1,2	0,252	0,309	0,306
2	-0,2	0,175	0,127	0,205
2	-0,8	0,114	0,134	0,219

Tabelle 3: Die komplette Auflistung aller Penry-R Werte gegen $\tilde{A}_4$  über den Messergebnissen.

## 9 Danksagung

Abschließend möchte ich allen direkt und indirekt beteiligten Menschen danken, die es mir ermöglicht haben, diese Arbeit zu schreiben.

Ein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Joachim Wollschläger für das Ermöglichen dieser Arbeit und Jascha Bahlmann für seine Betreuung, sowie das Korrekturlesen und beiden für ihre große Geduld.

Darüber hinaus bedanke ich mich bei meiner Familie, besonders meinen Eltern. Ganz besonders danke ich meiner Freundin Jasmin, denn sie war stets für mich da und gab mir die Energie, die ich brauchte, um voranzukommen.

Anlage:

**Erklärung zur selbstständigen Abfassung der Bachelorarbeit**

Name: .....

Geburtsdatum: .....

Matrikelnummer: .....

Titel der Bachelorarbeit: .....

.....

Ich versichere, dass ich die eingereichte Bachelorarbeit<sup>1</sup> selbstständig und ohne unerlaubte Hilfe verfasst habe. Anderer als der von mir angegebenen Hilfsmittel und Schriften habe ich mich nicht bedient. Alle wörtlich oder sinngemäß den Schriften anderer Autoren entnommenen Stellen habe ich kenntlich gemacht.

\_\_\_\_\_  
Ort, Datum

\_\_\_\_\_  
Unterschrift

<sup>1</sup>Bei einer Gruppenarbeit gilt o. für den entsprechend gekennzeichneten Anteil der Arbeit.