

# SPA-LEED-Untersuchungen an quasi-eindimensionalen Dysprosiumsilizidstrukturen auf Si(001)

Bachelorarbeit vorgelegt im Rahmen der Prüfung für den Zwei-Fächer-Bachelor-Studiengang im Teilstudiengang Physik Matrikel-Nummer: 953091 Osnabrück, 1. Oktober 2015

Autor: Jascha BAHLMANN

Erstprüfer: Prof. Dr. Joachim WOLLSCHLÄGER

Zweitprüfer: Prof. Dr. Mario DÄHNE

# Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	1
2.	Theoretische Grundlagen         2.1. Festkörper und Oberfläche         2.2. Reziproker Raum         2.3. Beugung an periodischen Strukturen         2.4. Intensitätsprofil von Reflexen	<b>3</b> 3 4 5 6
3.	Experimentelle Grundlagen         3.1. Ultrahochvakuum (UHV)         3.2. Probenpräparation         3.3. SPA-LEED         3.3.1. Aufbau         3.3.2. Ewald-Konstruktion	<ol> <li>11</li> <li>12</li> <li>12</li> <li>13</li> <li>14</li> </ol>
4.	Materialsystem         4.1. Si(001)	<b>15</b> 15 15 17
5.	Messergebnisse und Auswertung         5.1.       Substrat Si(001)	<ol> <li>19</li> <li>19</li> <li>23</li> <li>24</li> <li>30</li> <li>34</li> </ol>
6.	Zusammenfassung und Ausblick	37
Lit	teraturverzeichnis	39
Α.	Anhang         A.1. Bedeckungsserie 500 °C	<b>41</b> 41 45 49 49 52

Inhaltsverzeichnis

# 1. Einleitung

Diese Arbeit widmet sich dem Wachstum von Dysprosium auf Si(001) und der Analyse der entstehenden Oberflächenstrukturen. Dabei werden insbesondere die Einflüsse von der Bedeckung und der Substrattemperatur untersucht.

Quasi-eindimensionale Strukturen sind von großem wissenschaftlichen Interesse, da sie physikalische Eigenschaften besitzen, die nicht bei höherdimensionalen Objekten auftreten. An ihnen lassen sich Phänomene wie die Peierls-Instabilität oder die Tomonaga-Luttinger-Flüssigkeit untersuchen, die außergewöhnliche elektronische Zustände und strukturelle Veränderungen hervorrufen[1],[2].

Durch eine geringe Gitterfehlanpassung des Dysprosiumsilizids in einer Raumrichtung der Si(001)-Oberfläche, lassen sich quasi-eindimensionale Strukturen, die man als Nanodrähte bezeichnen kann, aufwachsen[3],[4]. Diese Nanodrähte zeigen zusätzlich zu ihrer Eindimensionalität metallische Eigenschaften, die zahlreiche Anwendungen wie miniaturisierte elektrische Kontakte oder *plasmonic waveguides* denkbar machen[5],[6]. Ebenso wäre eine Überprüfung physikalischer Modelle für eindimensionale Metalle durch Untersuchungen der Nanodrähte möglich.

Zusätzlich zu den Nanodrähten wurden von Dysprosium induzierte  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktionen der Si(001)-Oberfläche festgestellt[4],[7].

In dieser Arbeit dient die Spot Profile Analysis - Low Electron Energy Diffraction (SPA-LEED) als Untersuchungsmethode. Die bisher in der Literatur veröffentlichten Arbeiten über die von Seltenen Erden induzierten Oberflächenstrukturen auf Si(001) beruhen zum großen Teil auf Untersuchungen durch Scanning Tunneling Microscope (STM). Bei der beugenden Messmethode SPA-LEED werden Periodizitäten der Strukturen auf Oberflächenbereichen der Größenordnung weniger Millimeter detektiert, während die untersuchten Bereiche beim STM wesentlich kleiner sind. Daher lässt sich SPA-LEED als komplementäre Methode zum STM auffassen, die bisherige Ergebnisse bestätigen oder widerlegen kann.

Im Vergleich zu konventionellem LEED liegt der Vorteil bei SPA-LEED in der zusätzlichen Analyse der Profilform, die Rückschlüsse auf die Morphologie der Oberfläche zulässt.

In Kapitel 2 werden die für diese Arbeit notwendigen theoretischen Grundlagen erläutert. Anschließend werden in Kapitel 3 die experimentellen Grundlagen dargestellt, woraufhin in Kapitel 4 ein Überblick über das Materialsystem gegeben wird. Kapitel 5 beinhaltet die Darstellung und Auswertung der im Rahmen dieser Arbeit angefertigten Messungen. Abschließend folgt in Kapitel 6 eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit.

# 2. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zur Anfertigung dieser Arbeit notwendigen theoretischen Grundlagen geschaffen. Zuerst wird die für diese Arbeit relevante Physik der Festkörper- und Oberflächenstrukturen dargestellt. Eine Erläuterung zu den Hintergründen der *Spot Profile Analyzer* - *Low Energy Electron Diffraction* (SPA-LEED) Messtechnik folgt in Kapitel 3.3.

## 2.1. Festkörper und Oberfläche

In der Festkörperphysik wird streng zwischen dem Festkörper und seiner Oberfläche unterschieden. Viele Eigenschaften des Festkörpers beruhen auf der Periodizität, die in jeder Raumrichtung vorliegt. Er ist somit aus sich wiederholenden Einheitszellen aufgebaut, die sich in keiner Weise voneinander unterscheiden.

Bei der Oberfläche hingegen ist diese Translationsinvarianz in einer Raumrichtung gebrochen. Die ungesättigten Bindungen an der Oberfläche können eine Rekonstruktion der Oberflächenatome verursachen, sodass die Gesamtenergie des Systems minimiert wird. Die so entstandene rekonstruierte Oberfläche unterscheidet sich in der Regel von einer äquivalenten Ebene im Festkörper.

Statt der 14 BRAVAIS-Gitter, die zur Klassifizierung verschiedener Kristallstrukturen dienen, lässt sich die Oberfläche mit 5 BRAVAIS-Gittern beschreiben (siehe Abbildung 2.1). Zur mathematischen Behandlung der Oberflächenstrukturen werden Translationsvektoren eingeführt. Sie beschreiben die Periodizität der Oberfläche. Unterschieden wird hierbei zwischen der rekonstruierten Oberflächenstruktur und der Struktur, die einer äquivalenten Oberfläche im Festkörper entspricht.

$$\vec{r}_{\text{Festkörper}} = m_1 \vec{a} + m_2 \vec{b}$$
,  $\vec{r'}_{\text{Oberfläche}} = m'_1 \vec{a'} + m'_2 \vec{b'}$  mit  $\{m_1, m_2, m'_1, m'_2\} \in \mathbb{Z}$  (2.1)

Das Parallelogramm, das durch die Vektoren  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  aufgespannt wird, bezeichnet man als Einheitszelle. Um eine zweidimensionale Struktur vollständig beschreiben zu können, muss man gegebenenfalls eine mehratomige Basis berücksichtigen.

Die üblichen Notationen von Überstrukturen beziehen die vorhandene Überstruktur auf eine darunterliegende, nicht rekonstruierte Ebene des Festkörpers.

Bei der Matrix-Notation wird die Beziehung zwischen den Translationsvektoren des Substrats und den Translationsvektoren der Überstruktur in eine Matrix überführt.

$$\vec{a'} = G_{11}\vec{a} + G_{12}\vec{b} \qquad \qquad \vec{b'} = G_{21}\vec{a} + G_{22}\vec{b} \qquad (2.2)$$

Die Überstruktur wird durch die Matrix G beschrieben

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} \quad .$$
 (2.3)

WOOD's Notation hingegen betrachtet das Verhältnis der Längen der Translationsvektoren.

$$\frac{|\vec{a'}|}{|\vec{a}|} = m \qquad \qquad \frac{|\vec{b'}|}{|\vec{b}|} = n \tag{2.4}$$



**Abbildung 2.1.:** Die 5 BRAVAIS-Gitter für zweidimensionale Strukturen: (1) quadratisch [ $|\vec{a}| = |\vec{b}|$ ;  $\alpha = 90^{\circ}$ ], (2) rechtwinklig [ $|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$ ;  $\alpha = 90^{\circ}$ ], (3) rechtwinklig zentriert [ $|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$ ;  $\alpha = 90^{\circ}$  mit zentriertem Basisatom], (4) hexagonal [ $|\vec{a}| = |\vec{b}|$ ;  $\alpha = 60^{\circ}$ ], (5) schiefwinklig [ $60^{\circ} \neq \alpha \neq 90^{\circ}$ ]. Das rechtwinklig zentrierte Gitter ist kein primitives Gitter, jedoch wird es häufig benutzt, da es leicht zu beschreiben ist.

Die Überstruktur wird als  $X(hkl)c(m \times n) - R\varphi - Ad$  angegeben, mit den Millerschen Indices *hkl* des Substrats X.  $\varphi$  gibt gegebenenfalls die Drehung zwischen den Basis-Translationsvektoren des Substrats und der Überstruktur an, während eine eventuelle Zentrierung mit dem c angegeben wird (z.B. Si(001) $c(4 \times 2)$ ). Wird die Überstruktur von Adsorbatatomen induziert, wird Addurch das entsprechende chemische Symbol mit der Anzahl der in einer Einheitszelle vorhandenen Adsorbatatome ersetzt (z.B. Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3} - R30^{\circ}-3Bi$ ).

Zu beachten ist, dass WOOD's Notation im Gegensatz zu der Matrix-Notation nur korrekt verwendet werden kann, wenn der Winkel zwischen den Translationsvektoren des Substrats dem Winkel zwischen den Translationsvektoren der Überstruktur entspricht.

#### 2.2. Reziproker Raum

Der reziproke Raum ist ein Konzept, das sehr nützlich bei der Verwendung von beugenden Messmethoden wie SPA-LEED ist. Dabei wird jedem Punktgitter, das die Periodizität einer Oberflächenstruktur beschreibt, eindeutig ein reziprokes Gitter zugeordnet. Dieses reziproke Punktgitter lässt sich mathematisch analog zu Gleichung 2.1 beschreiben.

$$\vec{G} = h_1 \vec{a}^* + h_2 \vec{b}^*$$
 mit  $\{h_1, h_2\} \in \mathbb{Z}$  (2.5)

Die reziproken Translationsvektoren ergeben sich aus den Translationsvektoren des zugrunde liegenden Gitters nach Gleichung 2.6, wobei  $\vec{n}$  ein Einheitsvektor senkrecht zu der Oberfläche ist.

$$\vec{a}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{b} \times \vec{n}}{|\vec{a} \times \vec{b}|} \qquad \qquad \vec{b}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{n} \times \vec{a}}{|\vec{a} \times \vec{b}|}$$
(2.6)

Die Dimension der reziproken Translationsvektoren ist somit  $\left[\frac{1}{\text{Länge}}\right]$ . Zudem ist zu bemerken, dass  $\vec{a}$  senkrecht auf  $\vec{b}^*$  und  $\vec{b}$  senkrecht auf  $\vec{a}^*$  steht.

Der reziproke Raum eines dreidimensionalen Kristalls besteht aus Punkten. Da bei zweidimensionalen Oberflächenstrukturen der Abstand in vertikaler Richtung jedoch unendlich ist, rücken die Punkte im reziproken Raum so dicht zusammen, dass Stangen entstehen. Abbildung 2.2 zeigt den reziproken Raum eines dreidimensionalen Kristalls sowie einer zweidimensionalen Oberfläche.



**Abbildung 2.2.:** Schematische Darstellung des reziproken Raumes für einen dreidimensionalen Kristall (a) und einer zweidimensionalen Oberfläche (b) mit quadratischer Einheitszelle. Während bei dem Kristall scharfe Bragg-Reflexe vorliegen, entstehen durch die verminderte Translationssymmetrie bei (b) Beugungsstangen.



**Abbildung 2.3.:** Zeichnung zur Herleitung der Beugungsbedingung von zwei benachbarten Streuzentren, deren relative Lage zueinander durch  $\vec{a}$  beschrieben wird. Die Vektoren  $\vec{s}$  und  $\vec{s_0}$  sind Einheitsvektoren mit der Richtung des einfallenden beziehungsweise des gebeugten Strahls. Aus den Längen der rot gestrichelten Linien lässt sich der Gangunterschied bestimmen.

### 2.3. Beugung an periodischen Strukturen

Nach dem Welle-Teilchen-Dualismus der Quantenphysik lassen sich den für die Beugung verwendeten Elektronen Wellenlängen zuordnen. Da der Abstand der Elektronenquelle zur Probenoberfläche hinreichend groß ist, können die Elektronen als ebene Welle aufgefasst werden. Aus Abbildung 2.3 lässt sich die Bedingung für konstruktive Interferenz durch zwei benachbarte Streuzentren, deren Lage zueinander durch  $\vec{a}$  beschrieben wird, herleiten. Konstruktive Interferenz ist somit zu erwarten, wenn Gleichung 2.7 erfüllt ist, da der Gangunterschied beider Wellen in diesem Fall einem Vielfachen der Wellenlänge  $\lambda$  entspricht.

$$\vec{a} \cdot (\vec{s} - \vec{s_0}) = h_1 \lambda \qquad \text{mit } h_1 \in \mathbb{Z} \tag{2.7}$$

Für zwei Punkte, deren relative Lage zueinander  $\vec{b}$  oder  $\vec{c}$  beschreibt, folgt analog

- $\vec{b} \cdot (\vec{s} \vec{s_0}) = h_2 \lambda \qquad \text{mit } h_2 \in \mathbb{Z}$  (2.8)
- $\vec{c} \cdot (\vec{s} \vec{s_0}) = h_3 \lambda \qquad \text{mit } h_3 \in \mathbb{Z} \quad . \tag{2.9}$

Für einen beliebigen Translationsvektor des reziproken Gitters  $\vec{G} = h_1 \vec{a}^* + h_2 \vec{b}^* + h_3 \vec{c}^*$  lassen sich die Gleichungen 2.7 bis 2.9 zu Gleichung 2.10 zusammenfassen, die der Beugungsbedingung für einen dreidimensionalen Kristall entspricht.

$$\vec{s} - \vec{s_0} = \frac{\lambda}{2\pi} \vec{G} \tag{2.10}$$

Als Beweis können beide Seiten skalar mit  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  oder  $\vec{c}$  multipliziert werden. Man erhält die Gleichungen 2.7 bis 2.9 zurück.

Da der reziproke Raum einer zweidimensionalen Oberfläche aus Stangen besteht, kann die Komponente von  $\vec{G}$ , die senkrecht zur Oberfläche ist, einen beliebigen Wert annehmen, um Gleichung 2.10 zu erfüllen. Somit sind alleine die Komponenten von  $\vec{s}$  und  $\vec{s_0}$ , die parallel zur Oberfläche sind, von Bedeutung. Ersetzt man außerdem  $\vec{s}$  und  $\vec{s_0}$  durch die Wellenzahlvektoren  $\vec{k}$  und  $\vec{k_0}$  gemäß

$$\vec{s} = \frac{\lambda}{2\pi} \vec{k} \qquad \qquad \vec{s_0} = \frac{\lambda}{2\pi} \vec{k_0} \quad , \tag{2.11}$$

ergibt sich die hinreichende Beugungsbedingung an zweidimensionalen Oberflächen

$$\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}_{0,\parallel} = \vec{G}_{\parallel} \tag{2.12}$$

mit  $\vec{G}_{\parallel} = h_1 \vec{a}^* + h_2 \vec{b}^*$ . Da die Anzahl von benachbarten Streuzentren, die vom Elektronenstrahl getroffen werden sehr groß ist, sind scharf ausgeprägte Intensitätsmaxima zu erwarten.

#### 2.4. Intensitätsprofil von Reflexen

In dieser Arbeit werden Intensitätsprofile von Reflexen analysiert, um qualitativ festzustellen, wie geordnet verschiedene Überstrukturen vorliegen. Die Mechanismen zeigen eine Analogie zu der Beugung von Licht an periodisch angeordneten Streuzentren, die im Folgenden dargestellt wird.

Die einzelnen Streuzentren werden hierbei als Quellen für Elementarwellen angesehen. Nach der FRAUNHOFER'schen Näherung (der Abstand der Streuzentren ist gering gegen den Abstand zum Schirm) erreichen die von den einzelnen Streuzentren ausgesandten Lichtstrahlen den Schirm parallel. Der Gangunterschied  $\Delta x$  zweier benachbarter Strahlen entspricht gemäß Abbildung 2.4 somit  $\Delta x = g \cdot \sin(\theta)$ . Hierbei ist g der Abstand zweier benachbarter Streuzentren. Die Phasendifferenz  $\Delta \varphi$  lässt sich aus dem Gangunterschied gemäß

$$\Delta \varphi = 2\pi \cdot \frac{\Delta x}{\lambda} = 2\pi \cdot \frac{g \cdot \sin\left(\theta\right)}{\lambda} \tag{2.13}$$

bestimmen.

Zur Beschreibung der einzelnen Wellen wird ein Phasor verwendet, der die komplexe Amplitude der Welle darstellt. Abbildung 2.5 zeigt ein Zeigerdiagramm für vier Phasoren mit der Phasendifferenz  $\Delta \varphi$ , was einer Beugung an N = 4 Streuzentren entspricht. Für N Streuzentren liefert das Dreieck  $P_1P_2Q$ 

$$\sin\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) = \frac{A_1}{2\cdot r} \quad , \tag{2.14}$$

während aus dem Dreieck  $P_1SQ$ 

$$\sin\left(N \cdot \frac{\Delta\varphi}{2}\right) = \frac{A_{Ges}}{2 \cdot r} \tag{2.15}$$

folgt.



Abbildung 2.4.: Schematische Darstellung zur Beugung an N = 4 Streuzentren mit den Abständen g. Von links erreicht eine ebene Welle die Streuzentren, von denen jeweils Elementarwellen ausgehen. Für den Beugungswinkel  $\theta$  ergibt sich der Gangunterschied von Lichtstrahlen zweier benachbarter Streuzentren gemäß  $\Delta x = g \cdot \sin(\theta)$ .



**Abbildung 2.5.:** Zeigerdiagramm für die Beugung an N = 4 Spalten. Die Phasoren  $\vec{A}_n$  sind jeweils um den Winkel  $\varphi$  gegeneinander verdreht und aneinandergelegt. Nun ist es möglich einen Kreis mit dem Mittelpunkt Q durch alle Punkte  $P_n$  zu ziehen.  $\vec{A}_{Ges}$  ist die Vektorsumme aller Phasoren. Ihr Betrag entspricht der Amplitude am Schirm. Der Punkt S halbiert den Vektor  $\vec{A}_{Ges}$ .



**Abbildung 2.6.:** Intensitätsprofil für N = 3, N = 8 und N = 100 bei konstanter einfallender Intensität  $I_0$ . Auf der Abszisse ist die Phasendifferenz aufgetragen. Ihr Wert in Bogenmaß wurde durch  $2\pi$  dividiert, sodass sich die Hauptmaxima bei ganzen Zahlen befinden. Die Abhängigkeit der Intensität und der Halbwertsbreite der Hauptmaxima von der Anzahl der Streuzentren N ist deutlich zu erkennen.



Durch Umformen und Einsetzen lässt sich r eliminieren, sodass sich Gleichung 2.16 ergibt. Zudem wurde berücksichtigt, dass die Intensität proportional zum Quadrat der Amplitude ist.

$$I_{Ges} = I_0 \cdot \left(\frac{\sin\left(N \cdot \frac{\Delta\varphi}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)}\right)^2 \tag{2.16}$$

In der Abbildung 2.6 werden die Intensitätsprofile für drei verschiedene Werte der Anzahl der Streuzentren N gezeigt. Bei den Hauptmaxima ist die Phasendifferenz ein Vielfaches von  $2\pi$ , somit ist für diese Fälle die Kleinwinkelnäherung berechtigt.

$$I_{Ges} = I_0 \cdot \left(\frac{N \cdot \frac{\Delta\varphi}{2}}{\frac{\Delta\varphi}{2}}\right)^2 = I_0 \cdot N^2$$
(2.17)

Die Intensität der Hauptmaxima ist somit proportional zum Quadrat der Anzahl der Streuzentren N. Die einzelnen Streuzentren entsprechen im Experiment den Einheitszellen der Oberflächenstrukturen. Übertragen auf die Beugung von Elektronen an Oberflächenstrukturen ist somit zu erwarten, dass die Intensität der Reflexe von der Domänengröße abhängt. Im Experiment beeinflussen jedoch thermische Effekte sowie das begrenzte Auflösungsvermögen der SPA-LEED Apparatur ebenfalls die gemessenen Intensitäten. Dennoch sollten die Reflexe umso intensiver sein, je größer die Domänen sind.

Die weitere Analyse von Gleichung 2.16 zeigt zudem eine Abhängigkeit der Reflexbreiten von der Anzahl der Streuzentren N. Der Zähler des Bruchs aus Gleichung 2.16 besitzt zwischen 0 und

 $2\pi$  noch weitere Nullstellen, die zu einer Auslöschung der Gesamtintensität führen, und zwar an den Stellen  $\Delta \varphi = \frac{2\pi \cdot k}{N}$  mit  $k \in \{1, \dots, N-1\}$ . Das bedeutet, dass sich in regelmäßigen Abständen genau N-1 Intensitätsminima zwischen

Das bedeutet, dass sich in regelmäßigen Abständen genau N-1 Intensitätsminima zwischen den Hauptreflexen befinden. Je größer N ist, desto schmaler müssen die Hauptreflexe werden, da die benachbarten Minima zunehmend näher rücken.

Für die Beugung von Elektronen an Oberflächenstrukturen bedeutet dies, dass die Halbwertsbreite von Reflexen bei steigender Domänengröße sinken muss.

## 3. Experimentelle Grundlagen

In diesem Kapitel werden wichtige experimentelle Voraussetzungen für die Durchführung der anschließenden Messungen erläutert. Außerdem wird die im Rahmen dieser Bachelorarbeit verwendete Versuchsanordnung dargestellt. In Kapitel 3.3 findet sich zudem noch die spezifische Theorie zur Messung mit SPA-LEED.

## 3.1. Ultrahochvakuum (UHV)

Wegen der hohen Oberflächensensitivität ist für SPA-LEED Untersuchungen eine adsorbatfreie Oberfläche notwendig. Zudem muss die mittlere freie Weglänge der Elektronen größer sein als der doppelte Abstand zwischen Elektronenquelle/Detektor und Probe. Aus diesen Gründen ist eine Ultrahochvakuumkammer unerlässlich.

Der Druck von  $10^{-10}$  mbar für die Messungen wurde durch ein mehrstufiges Pumpensystem erzeugt. Eine Drehschieberpumpe liefert den Vordruck von  $10^{-2}$  mbar für die Turbopumpe, die mit der Schleuse und der Hauptkammer verbunden ist und einen Druck von  $10^{-8}$  mbar erzeugt. Der Enddruck in der Hauptkammer wird durch eine Ionengetter- sowie eine Titansublimationspumpe erzeugt. Abbildung 3.1 zeigt schematisch die in dieser Arbeit verwendete UHV-Kammer.



**Abbildung 3.1.:** Schematischer Aufbau der verwendeten UHV-Kammer. Die Vorkammer dient zum Einschleusen neuer Proben, ohne die Hauptkammer belüften zu müssen. Der Probenhalter ist an einem Manipulator befestigt, um die Probe zum SPA-LEED, Verdampfer oder Pyrometer drehen zu können. Entnommen aus [8] und angepasst.

Abbildung 3.2.: Schematischer Aufbau des verwendeten Verdampfers. Der Shutter ermöglicht bei Bedarf die Unterbrechung des Flusses des Dysprosiums zur Probe. Am Verdampfer ist außerdem eine Quarzkristall-Mikrowaage (QCM) zur Abschätzung der Aufdampfmenge angebracht. Entnommen aus [9] und angepasst.

#### 3.2. Probenpräparation

An die Siliziumprobe im Probenhalter konnte eine elektrische Spannung angelegt werden, sodass durch den elektrischen Strom eine Substrattemperatur von etwa 1200 °C erreichbar war. Die Temperatur der Probe wurde mittels eines Pyrometers geprüft.

Nach dem Einschleusen einer neuen Probe wurde diese für mehrere Stunden bei etwa 600 °C ausgegast, um Adsorbate zu entfernen. Anschließend wurde die Probe geflasht, indem die Substrattemperatur rasch auf etwa 1150 °C erhöht wurde. Nach wenigen Sekunden des hohen Temperatureinflusses wurde der Strom verringert, damit sich die Probe abkühlen konnte. Dieser Zyklus wurde fünf bis zehnmal durchgeführt, um eine möglichst gute Oberfläche zu erhalten. Dieses Flashen der Probe sprengt die Siliziumoxidschicht ab, welches Verschmutzungen mit sich reißt, sodass eine reine Siliziumoberfläche zurück bleibt.

Um das Dysprosium auf die Probe aufzubringen, wurde ein Verdampfer verwendet, in dem sich Dysprosium in einem Tiegel befand. Abbildung 3.2 zeigt den schematischen Aufbau des verwendeten Verdampfers. Der Tiegel wurde auf positive Hochspannung gelegt, sodass von einem Filament emittierte Elektronen mit hoher kinetischer Energie auf den Tiegel treffen, um diesen zu erhitzen. Dadurch wurde das Dysprosium kontrolliert zum Verdampfen gebracht und diffundierte zu der Probe. Die aufgedampfte Menge wurde mittels einer Quarzkristall-Mikrowaage abgeschätzt. Da Dysprosiumatome ebenfalls auf dem Schwingquarz adsorbieren, ändert sich dessen Masse um  $\Delta m$ , was zu der Frequenzänderung  $\Delta f$  führt. Wenn das Verhältnis  $\frac{\Delta f}{f_0}$  klein ist, gilt Gleichung 3.1. Dabei ist  $f_0$  die Eigenfrequenz des Schwingquarzes,  $\mu_q$  sein Schermodul und  $\rho_q$  seine Dichte. A ist die Fläche des Quarzes, auf der Dysprosium adsorbieren kann.

$$\Delta f = -\frac{2 \cdot f_0^2}{A \cdot \sqrt{\rho_q \cdot \mu_q}} \cdot \Delta m \tag{3.1}$$

So kann die Aufdampfmenge des Dysprosiums auf die Probe anhand der Frequenzänderung des Schwingquarzes abgeschätzt werden. Es war möglich eine stabile langsame Frequenzänderung von etwa  $100 \,\mathrm{Hz} \,\mathrm{min}^{-1}$  einzustellen, sodass Aufdampfmengen gut reproduzierbar waren.

Vor jedem Aufdampfen wurde die Probe etwa sechsmal geflasht, um eine möglichst adsorbatfreie Oberfläche zu garantieren. Es wurde ausschließlich bei erhöhter Substrattemperatur aufgedampft. Die Temperatur der Probe während des Aufdampfvorgangs wurde mit Hilfe des Pyrometers eingestellt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden 3 verschiedene Siliziumproben aus dem gleichen Wafer gefertigt. Es wurde jeweils eine für die Voranalyse sowie für die beiden Bedeckungsserien verwendet. Die Messungen wurden stets bei Raumtemperatur durchgeführt.

### 3.3. SPA-LEED

Beim SPA-LEED werden Elektronen für die Beugung an der Oberfläche benutzt. Nach dem Welle-Teilchen Dualismus der Quantenphysik besitzt ein Elektron somit Eigenschaften von klassischen Wellen sowie klassischen Teilchen. Bei der beugenden Messmethode SPA-LEED wird dabei der Wellencharakter der Elektronen genutzt. Der bei SPA-LEED verwendete Energiebereich von 20 eV bis 500 eV entspricht nach Gleichung 3.2 einer De-Broglie-Wellenlänge von etwa 0.5 Å bis 2.7 Å, was in der Größenordnung typischer atomarer Abstände in Kristallen liegt.

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \tag{3.2}$$



**Abbildung 3.3.:** Beispielhafte Einheitszellen in der modifizierten kinematischen Streutheorie. Die Einheitszellen reichen in den Festkörper hinein. Durch die Mehrfachstreuung hängt das Beugungsbild von der Energie des einfallenden Elektronenstrahls ab. Entnommen aus [10] und angepasst.

Der Streuquerschnitt von Elektronen dieser Energie ist sehr groß, weshalb die Eindringtiefe der Elektronen gering ist. Dadurch ist SPA-LEED äußerst oberflächensensitiv, weil nur die obersten Atomlagen signifikant zum Signal beitragen. Durch den hohen Streuquerschnitt tritt ebenfalls Mehrfachstreuung auf. Zu einer vollständigen Beschreibung der Beugungsbilder ist daher eine modifizierte kinematische Streutheorie notwendig, in der die Einheitszelle als dreidimensionale Säule gesehen wird (Abbildung 3.3).

## 3.3.1. Aufbau

In Abbildung 3.4 ist der schematische Aufbau eines SPA-LEED zu sehen. In der Elektronenkanone emittiert ein Filament Elektronen, die durch ein Potentialgefälle beschleunigt werden. Durch die Oktopolplatten wird der Strahl abgelenkt und gelangt unter dem Winkel  $\varepsilon$  auf die Probe. Hier liegt ein Unterschied zum herkömmlichen LEED, bei dem der Elektronenstrahl immer senkrecht auf die Probe trifft. Der Vorteil beim SPA-LEED ist, dass auf diese Weise auch der 00-Reflex detektiert werden kann, da er nicht von der Elektronenkanone verdeckt wird. Das als Detektor dienende Channeltron ist in einem festen Winkel  $\alpha$  zur Elektronenkanone verbaut. Durch diesen Aufbau ist der Winkel zwischen dem einfallendem Strahl  $\vec{k}_0$  und dem gebeugten Strahl  $\vec{k}$  konstant und somit unabhängig vom Einfallswinkel  $\varepsilon$ . Durch Variation der an den Oktopolplatten angelegten Spannung lässt sich  $\varepsilon$  verändern, sodass der reziproke Raum abgetastet werden kann. Dies übernimmt ein Computerprogramm, wodurch automatisierte Messungen ermöglicht werden.



Abbildung 3.4.: Schematischer Aufbau eines SPA-LEEDs. Zur Veranschaulichung ist ein möglicher Strahlengang blau markiert. Der Winkel  $\alpha$  zwischen der Elektronenkanone und dem Channeltron ist durch den Aufbau bedingt und nicht veränderbar. Der Winkel  $\varepsilon$  entspricht dem Winkel, unter welchem die Elektronen auf die Oberfläche treffen. Entnommen aus [8].



**Abbildung 3.5.:** Ewald-Konstruktion von herkömmlichen LEED (a) und SPA-LEED (b) für zwei verschiedene Reflexe. Durch den Aufbau ist der Winkel zwischen  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}$  beim SPA-LEED konstant. Es gilt  $\Theta = 180^\circ - \alpha$ .

### 3.3.2. Ewald-Konstruktion

Da bei SPA-LEED nur elastisch gestreute Elektronen detektiert werden, muss  $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$  sein. Mit dieser zusätzlichen Bedingung lässt sich Gleichung 2.12 durch die Ewald-Konstruktion veranschaulichen (Abbildung 3.5).

Bei herkömmlichem LEED trifft der Elektronenstrahl stets senkrecht auf die Probe, weswegen  $\vec{k}_0$  parallel zu den Beugungsstangen gezeichnet wird, sodass sich sein Endpunkt auf der (00)-Beugungsstange befindet. Um den Anfangspunkt wird nun ein Kreis mit dem Radius  $|\vec{k}_0|$  gezeichnet.

Für die Gültigkeit von Gleichung 2.12 sind nur die Komponenten der Vektoren  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}$ , die parallel zur Oberfläche verlaufen, von Bedeutung. Die Komponenten senkrecht zur Oberfläche haben keinen Einfluss auf Gleichung 2.12. Somit ist bei allen Schnittpunkten des Kreises mit den Stangen ein Reflex zu erwarten.

Beim SPA-LEED wird der einfallende Wellenvektor  $\vec{k}_0$  mit dem Winkel  $\varepsilon$  zur (00)-Stange so eingezeichnet, dass sich sein Endpunkt auf der (00)-Beugungsstange befindet.  $\vec{k}$  wird um den konstanten Winkel  $\Theta$  rotiert und an den Anfangspunkt von  $\vec{k}_0$  gelegt. Da nicht der Winkel des Detektors, sondern der Einfallswinkel variiert wird, entsteht die Ewaldkugel durch Rotation der beiden Vektoren um den Endpunkt von  $\vec{k}_0$ . Wie auch beim herkömmlichen LEED finden sich Beugungsreflexe an den Schnittpunkten der Ewaldkugel mit den Beugungsstangen.

Die modifizierte Ewaldkugel vom SPA-LEED hat bei gleicher Elektronenenergie einen etwa doppelt so großen Radius, weshalb sich ein größerer Ausschnitt aus dem reziproken Raum darstellen lässt. Durch den konstant geringen Beugungswinkel weist das SPA-LEED allerdings eine geringere Verzerrung des Bildes auf.

## 4. Materialsystem

In diesem Kapitel werden mit Dysprosium und Silizium die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Materialien und ihre relevanten Eigenschaften vorgestellt, wobei insbesondere die Si(001)-Oberfläche dargestellt wird. Ein weiterer Abschnitt beschäftigt sich mit den bisherigen Forschungsergebnissen der von Seltenen Erden induzierten Nanostrukturen auf Si(001).

## 4.1. Si(001)

Silizium hat die Ordnungszahl 14 und gehört somit zu der 4. Hauptgruppe, ebenso wie Kohlenstoff und Germanium. Der Schmelzpunkt liegt bei 1407 °C[18]. Es ist ein Halbleiter und somit auch Heißleiter. Die leitende Eigenschaft ist für SPA-LEED notwendig, um Aufladungseffekte durch die Elektronen an der Probe zu verhindern.

Im Kristall hybridisieren das 2s-Orbital zusammen mit den drei 2p-Orbitalen zu insgesamt vier sp<sup>3</sup>-Hybridorbitalen in tetraedrischer Anordnung. Die vier Valenzelektronen des Siliziums befinden sich in jeweils einem Hybridorbital. Diese Elektronenkonfiguration führt zu einer Diamantstruktur, die aus einem fcc-Gitter mit der Basis (0, 0, 0) und  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  besteht (Abbildung 4.1). Die kubische Gitterkonstante ist 5.43 Å.

In dieser Arbeit wurde der (001)-Schnitt durch den Kristall verwendet, was einer Seitenfläche der kubischen Einheitszelle entspricht. Die Einheitszelle der Oberfläche ist somit quadratisch. Auf Grund der Flächenzentrierung der kubischen Einheitszelle ergibt sich eine Seitenlänge der quadratischen Einheitszelle von  $\frac{\sqrt{2}}{2} \cdot 5.43$ Å = 3.84Å. Die zwei ungesättigten Bindungen pro Oberflächenatom führen zu einer hohen Gesamtenergie

Die zwei ungesättigten Bindungen pro Oberflächenatom führen zu einer hohen Gesamtenergie des Systems. Zur Minimierung dieser Energie rekonstruiert die Si(001)-Oberfläche. Abbildung 4.2 zeigt diese Dimerisierung, bei der sich stets zwei benachbarte Siliziumatome binden. Auf Grund der Bindung zu den Siliziumatomen in der darunterliegenden Ebene ist nur eine Ausrichtung möglich. Die entstandene Rekonstruktion weist eine  $(2 \times 1)$ -Überstruktur auf. An atomaren Stufenkanten, die auf jeder realen Oberfläche zu finden sind, liegen die Dimerreihen um 90° gedreht vor. Im Beugungsbild ist daher immer die Überlagerung beider Rotationsdomänen vorzufinden.

## 4.2. Dysprosium

Dysprosium besitzt die Ordnungszahl 66 und gehört somit zu den Lanthanoiden und Seltenen Erden. Der Schmelzpunkt liegt bei 1407 °C. Es existieren sieben verschiedene stabile Isotope, wobei <sup>161</sup>Dy, <sup>162</sup>Dy, <sup>163</sup>Dy und <sup>164</sup>Dy am häufigsten vorkommen. Die Elektronenkonfiguration lautet [Xe]4f<sup>10</sup>6s<sup>2</sup>. Das silbergraue Metall ist unedel und daher reaktionsfreudig. Es tritt mit der Oxidationszahl +*III* auf[19]. Alle dreiwertigen Seltenen Erden zeigen ein ähnliches chemisches Verhalten.



**Abbildung 4.1.:** Kubische Einheitszelle der Diamantstruktur mit der Seitenlänge *a*. Die blauen Kugeln entsprechen einem fcc-Gitter; die roten Kugeln sind die um jeweils  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  verschobenen Atome der Basis. Zur besseren Veranschaulichung der dreidimensionalen Struktur werden zwei verschiedene Perspektiven gezeigt. Die Si(001)-Oberfläche entspricht der schraftierten Seitenfläche der kubischen Einheitszelle



**Abbildung 4.2.:** (a) Nicht rekonstruierte Si(001)-Oberfläche. Die quadratische Einheitszelle hat eine Seitenlänge von  $\frac{\sqrt{2}}{2} \cdot a$ , wobei *a* die Seitenlänge der kubischen Einheitszelle ist. Analog zu Abbildung 4.1 wurde eine Seitenfläche der kubischen Einheitszelle schraffiert. (b) Rekonstruierte Oberfläche mit  $(2 \times 1)$ -Überstruktur. Die roten Kugeln stellen die Siliziumatome in der Lage unter den Oberflächenatomen dar. Die blauen Kugeln sind gegenüber der Ausgangsposition verschoben.

## 4.3. Dreiwertige Seltene Erden auf Si(001)

Von Dysprosium ist bekannt, dass es wie andere dreiwertige Metalle der Seltenen Erden Nanodrähte auf Siliziumoberflächen ausbildet. Die Gitterkonstante der Selten Erdsilizide stimmt in einer Raumrichtung nahezu perfekt mit dem Gitter des Substrats überein, was das Wachstum von Strukturen in dieser Raumrichtung begünstigt. In der anderen Raumrichtung passen die Gitterkonstanten nur sehr schlecht zueinander, sodass das Wachstum in dieser Richtung energetisch ungünstig ist. Aus diesem Grund bilden sich Nanodrähte, die wegen ihrer Eindimensionalität interessante physikalische Eigenschaften besitzen.

Die weitere Erforschung wird durch zahlreiche denkbare technische Anwendungen motiviert. Beispiele sind miniaturisierte elektrische Kontakte oder auch *plasmonic wavequides*[5],[6]. Die Nanodrähte sind vielversprechend, da Selten Erdsilizide zum einen leicht zu präparieren sind, und zum anderen auf Silizium wachsen, welches eine dominante Stellung in der Halbleiterelektronik einnimmt.

Abseits von den technischen Anwendungen können die Nanodrähte ebenfalls zur weiteren Erforschung der Eigenschaften eindimensionaler Metalle beitragen. Durch die quasi-eindimensionalen Abmessungen könnten Modelle wie das der Tomonaga-Luttinger-Flüssigkeit überprüft werden. Bisherige Untersuchen von Dysprosium auf Si(001) im Monolagenbereich zeigen das Wachstum einer  $(2 \times 4)$ -Überstuktur, einer  $(2 \times 7)$ -Überstruktur und das der Nanodrähte[4],[7]. Höhere Bedeckungen führen zur Bildung rechteckiger Inseln, welche die energetisch günstigste Dysprosiumsilizidstruktur zu sein scheinen.

Für Terbium wurde gezeigt, dass die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur aus zwei Einheiten aufgebaut ist[11]. Diese  $(2 \times 3)$ - und  $(2 \times 4)$ -Untereinheiten sind entweder direkt oder mit dem Versatz einer halben Gitterkonstante aneinandergereiht, wie in Abbildung 4.3 zu sehen ist. Diese beiden Variationen treten statistisch verteilt auf, wodurch auf größeren Oberflächenbereichen keine geordnete  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion zu finden ist.

Des weiteren wurde für Terbium gezeigt, dass die Nanodrähte einzeln und als Bündel mehrerer nebeneinander liegender Nanodrähte auftreten können[11]. Die Nanodrähte zeigen dabei auf ihrer Oberfläche eine  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion. Außerdem führt der durchschnittliche Graben-zu-Graben-Abstand zwischen Nanodrahtbündeln zu Reflexen im Beugungsbild. Die chemische Ähnlichkeit dreiwertiger Seltener Erden legitimiert den Vergleich zwischen Terbium und Dysprosium.



**Abbildung 4.3.:** (a) Schematische Darstellung der beiden möglichen Aneinanderreihungen der  $(2 \times 3)$ und  $(2 \times 4)$ -Untereinheiten der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion. (b) Die schwarzen Kugeln geben die Periodizität des nicht rekonstruierten Substrats an. Die rechtwinklige (blau) und schiefwinklige (grün) Einheitszelle der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion wurden markiert.

# 5. Messergebnisse und Auswertung

In diesem Kapitel wird das Vorgehen hinsichtlich der durchgeführten Messungen erläutert. Zudem werden die gemessenen Daten dargestellt und ausgewertet.

Die Siliziumproben für die verschiedenen Messreihen wurden jeweils aus dem selben Wafer gefertigt. Das Dysprosium in dem Tiegel des Verdampfers musste im Rahmen dieser Arbeit nicht nachgefüllt werden.

Zu Beginn wurde der Einfluss der Parameter *Substrattemperatur* beim Aufbringen des Dysprosiums und *Aufdampfmenge* des Dysprosiums analysiert. Die Aufdampfmenge wird im Folgenden in der Einheit Hz angegeben. Damit ist die Frequenzdifferenz der Quarzkristall-Mikrowaage des Verdampfers gemeint, die ein Maß für die Menge des auf die Probe aufgebrachten Dysprosiums darstellt.

## 5.1. Substrat Si(001)

Abbildung 5.1 zeigt einen 2D-Scan sowie einen Linescan der Hauptachse des geflachten Substrats. Die durch die Dimerbildung entstandene  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion der Si(001)-Oberfläche tritt auf realen Oberflächen in zwei um 90° gedrehten Rotationsdomänen auf. Im Beugungsbild sind immer beide Rotationsdomänen vertreten.

Bei den Linescans ist auf der Abszisse die Position in Prozent Brillouinzone (%BZ) aufgetragen. Die Hauptmaxima befinden sich somit bei 0%BZ und  $\pm 100\%$ BZ. Diese Darstellung erleichtert das Erkennen der Periodizitäten.

Die scharfen Reflexe deuten auf Bereiche mit langreichweitiger Ordnung hin. Aus der geringen Intensität des Untergrunds lässt sich darauf schließen, dass nur wenige Defekte auf der Oberfläche vorliegen. Die zu erkennende Verzerrung der Reflexe hat eine nicht bekannte Ursache und konnte nicht behoben werden.

## 5.2. Voranalyse des Materialsystems

Ziel der Voranalyse war es zu erfahren, bei welchen Substrattemperaturen während des Aufdampfens und welchen Aufdampfmengen die  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstrukturen auftreten. Außerdem wurde die Energie der Elektronen des SPA-LEEDs variiert, um die Energie zu finden, bei der die zu untersuchenden Strukturen gut abgebildet werden. Dieses Wissen um den Einfluss der Parameter wurde benötigt, um Bedeckungsserien aufzunehmen. Dabei wurde bei einer festen Substrattemperatur die Aufdampfmenge variiert, um ihren Einfluss auf die Überstrukturen zu bestimmen.

Bei einer Substrattemperatur von 600 °C wurde bei der Aufdampfmenge 100 Hz die in der Literatur bekannte  $(2 \times 4)$ -Überstruktur gefunden[7]. Für diese Parameter wurde die Elektronenenergie von 52 eV bis 128 eV variiert. Da die Mehrfachstreuung die Intensitäten verschiedener Reflexe stark beeinflussen kann, wird durch die Variation der Energie sichergestellt, dass Reflexe mit energieabhängigen Intensitäten bemerkt werden. Abbildung 5.2 zeigt die SPA-LEED Aufnahmen der Energien 63 eV, 81 eV und 96 eV. Im Anschluss wurde der Einfluss der Substrat-



Abbildung 5.1.: 2D- und Linescan der geflashten Si(001)-Oberfläche. Eine Rotationsdomäne der  $(2 \times 1)$ -Überstruktur wurde markiert. Das Beugungsbild setzt sich aus den beiden um 90° gegeneinander verdrehten Rotationsdomänen zusammen. Der Linescan zeigt deutlich die (×2)-Periodizität auf der Hauptachse.





**Abbildung 5.3.:** Abhängigkeit der Oberflächenstruktur von der Substrattemperatur. Es ist zu erkennen, dass die  $(2 \times 4)$ -Überstruktur nur bei 500 °C und 600 °C auftritt.

temperatur auf die Überstrukturen geprüft. Hierfür wurde eine Aufdampfmenge von 100 Hz bei den Substrattemperaturen 400 °C, 500 °C, 600 °C und 700 °C verwendet. Abbildung 5.3 zeigt die entsprechenden 2D-Bilder.

Bei 400 °C ist der Untergrund wesentlich ausgeprägter als bei den anderen Aufnahmen, was dafür spricht, dass diese Temperatur für ein geordnetes Aufwachsen von Dysprosiumsiliziden zu gering ist. Bei 500 °C und 600 °C ist die (2 × 4)-Überstruktur zu erkennen, während bei 700 °C nur die (2 × 1)-Rekonstruktion der Si(001)-Oberfläche zu finden ist. Ob sich bei 700 °C durch die verstärkte Oberflächendiffusion Inseln gebildet haben, oder die Dysprosiumatome aufgrund der hohen Temperatur nicht adsorbieren können, ist unklar. Für das weitere Studium der von Dysprosium induzierten Oberflächenstrukturen eignen sich somit nur Substrattemperaturen zwischen 500 °C und 600 °C.

Um den Einfluss der Aufdampfmenge auf das Wachstum abschätzen zu können, wurde eine grobe Bedeckungsserie bei 500 °C durchgeführt. Abbildung 5.4 zeigt 2D- und Linescans der vier untersuchten Bedeckungen. Bei der Aufdampfmenge von 100 Hz ist die  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion erneut zu erkennen. Bei 200 Hz bildet sich die aus der Literatur bekannte  $(2 \times 7)$ -Überstruktur[4]. Dabei ist auf den Nebenachsen bei  $\pm 50\%$ BZ eine diffuse Intensität (Streaks) zu erkennen, die auf den in Kapitel 4.3 beschriebenen Aufbau der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur zurückzuführen ist. Bei höheren Aufdampfmengen bilden sich die Streaks ebenfalls auf den Hauptachsen aus, was auf die in



Abbildung 5.4.: Grobe Bedeckungsserie bei der Substrattemperatur 500 °C. Während bei 100 Hz erneut die  $(2 \times 4)$ -Überstruktur zu beobachten ist, zeigt die Aufnahme mit 200 Hz eine  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion. Bei 400 Hz ist eine diffuse Intensität (Streaks) auf den Hauptachsen zu erkennen, die auf eine Unordnung in einer Raumrichtung hindeutet. Diese Streaks sind bei 700 Hz noch deutlicher. Der rote Pfeil markiert die Scanrichtung der Linescans. Bei 400 Hz sind in den Linescans auf den Streaks zusätzlich schwache Reflexe zu erkennen. Hingegen sind bei 700 Hz nur noch Reflexe bei etwa  $\pm 20\%$ BZ und  $\pm 50\%$ BZ erkennbar.



Abbildung 5.5.: Beugungsbilder der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstruktur bei einer Elektronenenergie von 52 eV.

der Literatur beschriebenen Nanodrähte hinweist[3]. Sowohl bei 400 Hz, als auch bei 700 Hz sind Reflexe auf den Streaks zu erkennen, die weder zu der  $(2 \times 4)$ - noch zu der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion gehören. Diese Reflexe stammen von der Struktur der Nanodrähte.

Es war eine deutliche Verschlechterung der Beugungsbilder mit zunehmender Messdauer zu verzeichnen. Die Intensität und Schärfe der Reflexe war nach 20 Minuten bereits deutlich vermindert. Diese rasche Verschlechterung könnte durch den Elektronenstrahl der SPA-LEED Apparatur oder auch durch Wechselwirkungen der Strukturen mit dem Restgas in der Kammer verursacht werden. Aus diesem Grund ist es nicht möglich bei den folgenden feineren Bedeckungsserien bei einer Bedeckung Linescans und 2D-Scans mit verschiedenen Energien aufzunehmen. Aus diesem Grund wurde nach einer Energie gesucht, bei der im Beugungsbild alle Überstrukturen gut zu erkennen sind. Deshalb wurden für die Aufdampfmenge 200 Hz, bei der die  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion entsteht, Beugungsbilder bei verschiedenen Elektronenenergien erstellt.

Bei der Elektronenenergie 52 eV sind die  $(2 \times 4)$ - und die  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion jeweils gut zu erkennen. Abbildung 5.5 zeigt die Beugungsbilder beider Überstrukturen bei 52 eV. In den folgenden Bedeckungsserien wird daher als Elektronenenergie 52 eV verwendet.

### 5.3. Bedeckungsserien

Aus den gesammelten Daten war es möglich die Rahmenbedingungen für eine feinere Bedeckungsserie zu erstellen. Der Fokus wurde vor allem auf die Entstehung der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur, den Übergang zur  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion und den Übergang zu den Nanodrähten bei höheren Bedeckungen gelegt. Aus diesem Grund wurde die Aufdampfmenge in 20 Hz Intervallen bis auf 300 Hz erhöht. Von da an wurde die Aufdampfmenge in 50 Hz Schritten bis 1000 Hz gesteigert. Die vollständigen Bedeckungsserien befinden sich im Anhang A.

Bei jeder Aufdampfmenge wurde bei der Energie von 52 eV jeweils ein 2D-Bild, ein Linescan entlang der Hauptachse und entlang der Nebenachse bei 50%BZ in  $[0\overline{1}]$ -Richtung aufgenommen. Abbildung 5.6 veranschaulicht den Verlauf der beiden Linescans.

Zur weiteren Auswertung der Linescans wurde das Programm ReflexFit [8] verwendet. In das

#### Messergebnisse und Auswertung



**Abbildung 5.6.:** Das linke Bild dient zur Veranschaulichung der durchgeführten Linescans. Der rote Pfeil entspricht einem Scan der Hauptachse in  $[0\bar{1}]$ -Richtung, während der grüne Pfeil einen Scan  $\pm 50\%$ BZ in  $[0\bar{1}]$ -Richtung darstellt.

Rechts wird ein beispielhafter Fit mit dem Programm *ReflexFit* für die Reflexe bei 25%BZ und 28%BZ gezeigt. Auf der Abszisse sind %BZ aufgetragen, während die Ordinate die Intensität in Counts angibt. Die farbigen Kurven sind die Funktionen der entfalteten Reflexe. Die schwarze Kurve entspricht der Summe der einzelnen Funktionen und muss bei einem guten Fit den Verlauf der Messdaten wiedergeben.

Programm lassen sich die gemessenen Daten einlesen. Mit bis zu sechs verschiedenen Lorentzfunktionen lassen sich die Messdaten daraufhin anfitten. Außerdem ist es möglich einen Untergrund mit Steigung hinzuzufügen. Um einen Reflex zu entfalten, muss zusätzlich zu dem Reflex selbst die nähere Umgebung entfaltet werden, um einen guten Fit zu erhalten. *ReflexFit* gibt die Halbwertsbreite, Intensität und Position der einzelnen verwendeten Funktionen aus. Abbildung 5.6 zeigt einen exemplarischen Fit.

### 5.3.1. Bedeckungsserie 500 °C

In Abbildung 5.7 werden die Linescans in zwei dreidimensionalen Plots gezeigt. Dabei wurde die Intensität in Abhängigkeit von der Position und der Aufdampfmenge aufgetragen. Zur besseren Übersicht wurden die Scans bis zu einer Aufdampfmenge von 300 Hz getrennt von den Scans bei höheren Bedeckungen geplottet. Abbildung 5.8 zeigt die Beugungsbilder für vier verschiedene Bedeckungen, bei welchen die verschiedenen untersuchten Strukturen zu erkennen sind.

Wie in der Voranalyse bereits gesehen wurde, tritt die  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion bei niedrigeren Aufdampfmengen auf als andere von Dysprosium induzierte Überstrukturen. Bei 60 Hz sind im Linescan Reflexe bei  $\pm 25\%$ BZ und  $\pm 75\%$ BZ zu erkennen, die der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion zugeordnet werden können. Die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur nimmt bis 100 Hz stetig zu. Eine weitere Steigerung der Bedeckung führt zu einer Abnahme der Intensität. Im Linescan ist ohne nähere Analyse der Reflexe nicht sicher zu sagen, bis zu welcher Aufdampfmenge sich die  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion auf der Oberfläche bildet, da sich die Reflexe bei  $\pm 25\%$ BZ und  $\pm 75\%$ BZ sehr dicht bei Reflexen der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur befinden. Außerdem lässt sich durch den Einfluss der  $(2 \times 1)$ -Überstruktur der Si(001)-Oberfläche aus der Intensität des Reflexes bei  $\pm 50\%$ BZ nicht direkt auf das Vorliegen der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion schließen.

Bei 80 Hz und 100 Hz sind schwache Reflexe bei etwa $\pm 38\% \mathrm{BZ}$ zu erkennen, deren Ursache nicht bekannt ist.



Abbildung 5.7.: Dreidimensionale Plots der Linescans der Hauptachse in  $[0\bar{1}]$ -Richtung. Die Intensität ist in Abhängigkeit der Position in %BZ und der Aufdampfmenge in Hz aufgetragen. Die Intensitäten jedes einzelnen Scans wurden jeweils auf die Intensität des (00)-Reflexes normiert, um eine Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Die roten Linien dienen der besseren Erkennung der Reflexpositionen. Der Linescan bei der Aufdampfmenge 300 Hz wurde in beide Plots eingetragen.

#### Messergebnisse und Auswertung



**Abbildung 5.8.:** Auswahl der feinen Bedeckungsserie bei 500 °C. Die gezeigten Beugungsbilder stehen repräsentativ für die im Anhang A gezeigte Bedeckungsserie. Bei 200 Hz sind die von der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur stammenden Streaks auf der Nebenachse bei  $\pm 50\%$ BZ mit weißen Pfeilen markiert, aber nur schwer zu erkennen. In Abbildung 5.5 sind diese Streaks bei gleichen Parametern deutlicher zu sehen.



**Abbildung 5.9.:** 2D-Scan und Linescan entlang des grünen Pfeils bei der Aufdampfmenge 160 Hz. Auf den Hauptachsen tritt die ( $\times$ 7)- Periodizität deutlich hervor, obwohl der Linescan der Nebenachse bei  $\pm$ 50%BZ ausschließlich auf eine ( $\times$ 4)-Periodizität schließen lässt.

Bei 120 Hz sind Reflexe bei etwa  $\pm 14\%$ BZ und  $\pm 43\%$ BZ zu erkennen, die von der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur stammen. Bei steigender Bedeckung nimmt die Intensität aller Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion bis etwa 200 Hz zu. Mit weiter zunehmender Aufdampfmenge nimmt die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur ab. Bei größeren Aufdampfmengen als 350 Hz ist die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur praktisch nicht mehr erkennbar.

Abbildung 5.9 zeigt einen Linescan in  $[0\bar{1}]$ -Richtung bei  $\pm 50\%$ BZ und einen 2D-Scan bei jeweils 160 Hz Aufdampfmenge. Obwohl auf der Hauptachse die  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion prägnant ist, finden sich auf der Nebenachse bei  $\pm 50\%$ BZ nur Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur, die mit steigender Bedeckung schwächer werden. Dies spricht für den in Kapitel 4.3 erläuterten Aufbau der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur. Durch den statistisch verteilten Versatz der beiden Untereinheiten gegeneinander liegt keine geordnete  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion großer Bereiche der Oberfläche vor. Die geordnete  $(\times 7)$ -Periodizität in einer Raumrichtung führt zu den Reflexen auf der Hauptachse. Durch den statistisch verteilten Versatz in der Raumrichtung senkrecht dazu liegt die  $(\times 2)$ -Periodizität ungeordnet vor, was zu einer diffusen Intensität auf den Nebenachsen bei  $\pm 50\%$ BZ führt. Diese Streaks sind in Abbildung 5.8 markiert. Auf dem in Abbildung 5.9 gezeigten Linescan finden sich daher nur Reflexe einer  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion. Da diese Reflexe bei 200 Hz praktisch verschwinden, ist davon auszugehen, dass sie von einer  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion auf einem anderen Bereich der Oberfläche stammen und nicht durch die  $(2 \times 4)$ -Untereinheit der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion entstehen.

Ab 260 Hz ist zu erkennen, dass die Intensität zwischen den Reflexen der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstruktur zunimmt. Insbesondere auf den 2D-Scans macht sich dies durch Streaks auf den Hauptachsen bemerkbar. Diese Streaks sind bis zum Ende der Bedeckungsserie erkennbar. In den Linescans erkennt man, dass die Streaks bei Aufdampfmengen zwischen 280 Hz und 350 Hz Reflexe aufweisen, die weder zu der  $(2 \times 4)$ - noch zu der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion gehören. Besonders auffällig sind diese Reflexe bei  $\pm 20\%$ BZ und  $\pm 80\%$ BZ. Nachdem diese Strukturen bei der Aufdampfmenge 500 Hz am deutlichsten ausgeprägt sind, verschwinden diese Reflexe bis zum Ende der Bedeckungsserie bei 1000 Hz fast vollständig, sodass die Streaks auf den Hauptachsen zunehmend homogen werden.

Bei 280 Hz ist ein schwacher Reflex bei etwa  $\pm 20\%$ BZ erkennbar, der somit weder von der  $(2 \times 4)$ noch von der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur stammen kann. Mit zunehmender Bedeckung steigt die Intensität dieses Reflexes bis zu einer Aufdampfmenge von 500 Hz. Wird die Aufdampfmenge weiter erhöht, nimmt die Intensität ab. Trotzdem ist der Reflex bis zum Ende der Bedeckungsserie erkennbar. Dieser Reflex wird, wie in Kapitel 4.3 erläutert, auf den durchschnittlichen Grabenzu-Graben-Abstand der Nanodrahtbündel zurückgeführt.

Wie in Kapitel 2.4 beschrieben, lassen sich aus Halbwertsbreite und Intensität Rückschlüsse daraus ziehen, wie geordnet die jeweiligen Strukturen vorliegen. In Abbildung 5.10 wurde die Halbwertsbreite, beziehungsweise die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion gegen die Aufdampfmenge aufgetragen. Für die  $(2 \times 4)$ -Überstruktur wurden die Reflexe bei 25%BZ, -25%BZ und -75%BZ entfaltet. Da diese aus Symmetriegründen äquivalent sind, wurde in Abbildung 5.10 der arithmetische Mittelwert der Intensitäten und der Halbwertsbreiten gebildet und gegen die Bedeckung aufgetragen. Die Intensitäten wurden zusätzlich auf die Intensität des (00)-Reflexes normiert. Dadurch wird erreicht, dass die verschiedenen Messungen untereinander vergleichbar werden, auch wenn die Zahl der durch die Elektronenkanone des SPA-LEED emittierten Elektronen variiert.

Die Halbwertsbreite der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur sinkt bis zum Minimum bei 100 Hz, während die Intensität bis zum Maximum bei dieser Aufdampfmenge zunimmt. Bei der entsprechenden Bedeckung liegt die  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion daher mit der größten mittleren Domänengröße auf der



**Abbildung 5.10.:** Aus Symmetriegründen folgt die Äquivalenz verschiedener Reflexe. Von diesen äquivalenten Reflexen wurde der arithmetische Mittelwert der Halbwertsbreite sowie der Intensität gebildet und gegen die Aufdampfmenge aufgetragen. Die Intensitäten wurden zusätzlich auf die Intensität des (00)-Reflexes normiert. Die Linien dienen der besseren Visualisierung der Daten.

Oberfläche vor. Mit zunehmender Aufdampfmenge steigt die Halbwertsbreite bis 160 Hz. Nach einem Abfall bei 180 Hz steigt die Halbwertsbreite erneut stetig bis 280 Hz.

Die Intensität der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur besitzt ein Maximum bei 100 Hz. Mit zunehmender Aufdampfmenge sinkt die Intensität bis 180 Hz, allerdings steigt sie daraufhin bis 260 Hz leicht an. Größere Aufdampfmengen als 260 Hz führen zu einem Abfall der Intensität, sodass die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion ab 300 Hz für eine Entfaltung zu gering ist.

Zur näheren Analyse der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur wurden die Reflexe, die sich bei etwa 14%BZ, -14%BZ, 43%BZ und -86%BZ befinden, entfaltet. Abbildung 5.10 zeigt ebenfalls die analog zur  $(2 \times 4)$ -Überstruktur ausgewerteten Daten. Die Reflexe bei 14%BZ, -14%BZ und -86%BZ wurden auf Grund ihrer Äquivalenz ebenfalls zusammengefasst.

Die Halbwertsbreite der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion sinkt bis zum Minimum bei etwa 180 Hz bis 200 Hz. Eine zunehmende Bedeckung führt zu einem Anstieg der Halbwertsbreite. Die Positionen der Extrema der Intensität korrelieren gut mit denen der Halbwertsbreite. Bis zu der Aufdampfmenge von 180 Hz bis 200 Hz steigt die Intensität. Zunehmende Bedeckung führt zu einem Abfall der Intensität. Daraus lässt sich schließen, dass sich die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur bei etwa 200 Hz mit der größten mittleren Domänengröße auf der Oberfläche bildet. Es war nicht möglich Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion bei größeren Aufdampfmengen als 350 Hz zu entfalten.

Der Verlauf der nicht äquivalenten Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur stimmt überein, jedoch sind die Werte der Halbwertsbreite des Reflexes bei 43%BZ um im Durchschnitt etwa 30% größer, während die Intensität etwa 50% größer ist. Diese Unterschiede lassen sich durch Domänengrenzen sowie Antiphasengrenzen erklären, die einen unterschiedlichen Einfluss auf die verschiedenen Reflexe haben.

Die Reflexe auf den Streaks, die weder von der  $(2 \times 4)$ - noch von der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion stammen, entstehen durch den durchschnittlichen Graben-zu-Graben-Abstand der Nanodrahtbündel. Von diesen Reflexen ist der bei 20%BZ besonders ausgeprägt. Abbildung 5.11 zeigt die Entfaltung dieses Reflexes, der koexistent mit der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion auftritt. Aus der Position des Reflexes in %BZ lässt sich der durschnittliche Graben-zu-Graben-Abstand bestimmen. In Abbildung 5.12 ist die Halbwertsbreite und der durschnittliche Graben-zu-Graben-Abstand gegen die Bedeckung aufgetragen. Der durchschnittliche Graben-zu-Graben-Abstand nimmt mit steigender Bedeckung zu. Ebenso wird die Halbwertsbreite mit zunehmender Bedeckung größer.



**Abbildung 5.11.:** Linescan bei einer Aufdampfmenge von 300 Hz. Der Reflex bei etwa 20%BZ passt weder zu der  $(2 \times 4)$ - noch zu der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur. Er resultiert aus dem durchschnittlichen Graben-zu-Graben-Abstand der Nanodrahtbündel. Es sind zudem noch Reflexe der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion zu sehen. Ganz links im Bild deutet sich der (00)-Reflex an.



Abbildung 5.12.: Die Halbwertsbreite des Reflexes bei 20%BZ und der durchschnittliche Graben-zu-Graben-Abstand der Nanodrahtbündel *d* in Vielfachen der Gitterkonstante von Si(001) ( $a_{Si(001)} = 3.84$ Å) sind gegen die Aufdampfmenge aufgetragen.

Daraus folgt, dass die Varianz der Verteilung der Graben-zu-Graben-Abstände der Nanodrahtbündel mit steigender Bedeckung zunimmt.

Der Reflex bei 50%BZ wurde ebenfalls für die gemessenen Bedeckungen entfaltet. Abbildung 5.13 zeigt die Auftragung der Halbwertsbreite und Intensität gegen die Aufdampfmenge. Die Intensität des Reflexes bei 50%BZ steigt mit zunehmender Aufdampfmenge bis 80 Hz. Wird die Bedeckung weiter erhöht, nimmt die Intensität bis etwa 260 Hz ab. Eine weiterhin zunehmende Bedeckung führt zu einem leichten Anstieg der Intensität bis zu etwa 400 Hz. Bei höheren Bedeckungen verliert der Reflex erneut Intensität. Die Halbwertsbreite steigt mit der Bedeckung bis etwa 450 Hz an. Nach einem Plateau sinkt sie bei Bedeckungen größer als 650 Hz.

Die steigende Intensität bei niedrigen Bedeckungen lässt sich durch den zusätzlichen Beitrag der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion zum Signal des Substrats erklären. Der darauf folgende Abfall deutet dar-



Abbildung 5.13.: Auftragung der Halbwertsbreite und Intensität des Reflexes bei 50%BZ gegen die Bedeckung. Die Substrattemperatur während des Aufdampfens betrug 500 °C.

auf hin, dass das Dysprosium die Oberfläche zunehmend bedeckt und die  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion des Substrates zunehmend zerstört. Das schwach ausgeprägte Maximum in der Intensität bei etwa 400 Hz könnte auf eine  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion auf der Oberfläche der Nanodrähte selbst hindeuten, die durch S. Appelfeller bereits auf Nanodrähten aus Terbium festgestellt wurde[11].

### 5.3.2. Bedeckungsserie 600 °C

Analog zu der Bedeckungsserie bei 500 °C wurde eine weitere Bedeckungsserie bei 600 °C durchgeführt, um eventuelle Abhängigkeiten von der Temperatur festzustellen. Abbildung 5.14 zeigt die Linescans in zwei dreidimensionalen Plots. Dabei wurde die Intensität in Abhängigkeit von der Position und der Aufdampfmenge aufgetragen. Es wurden zur besseren Übersicht die Scans bis zu einer Aufdampfmenge von 300 Hz getrennt von den Scans bei höheren Bedeckungen dargestellt. Abbildung 5.15 zeigt die Beugungsbilder von vier verschiedenen Bedeckungen, bei welchen die unterschiedlichen untersuchten Strukturen zu erkennen sind.

Die erste Betrachtung der Messungen bei der Substrattemperatur von 600 °C zeigen ein ähnliches Verhalten wie die Messungen der vorherigen Bedeckungsserie. Bei 60 Hz deuten sich im Linescan Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion an. Zwischen 100 Hz und 140 Hz besitzen diese Reflexe eine hohe Intensität. Weiterhin steigende Bedeckung führt zu einer Abnahme der Intensität bis bei 200 Hz keine Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion mehr im Linescan zu erkennen sind. Bei Aufdampfmengen ab 260 Hz sind jedoch wieder Reflexe bei  $\pm 25\%$ BZ und  $\pm 75\%$ BZ zu erkennen. Ob diese Reflexe durch die gleiche  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion der Oberfläche wie bei Bedeckungen zwischen 60 Hz und 180 Hz entstehen, ist nicht sicher.

Zwischen 80 Hz und 140 Hz sind schwache Reflexe bei etwa $\pm 38\% {\rm BZ}$ zu erkennen, deren Ursache nicht bekannt ist.

Bei 120 Hz sind Reflexe bei etwa  $\pm 14\%$ BZ und  $\pm 43\%$ BZ zu erkennen, die von der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur stammen. Bei steigender Bedeckung nimmt die Intensität aller Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion bis etwa 200 Hz zu. In den 2D-Scans sind die durch den Aufbau der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion bedingten Streaks auf der Nebenachse bei  $\pm 50\%$ BZ deutlich zu erkennen. Bei 240 Hz ist die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur weiterhin deutlich ausgeprägt, jedoch erscheinen im zweidimensionalen Beugungsbild Streaks auf den Hauptachsen, die auf Nanodrähte hindeuten. Mit zunehmender Bedeckung nimmt die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion ab, bis sie bei etwa 450 Hz nicht mehr zu erkennen ist.

Während der gesamten Bedeckungsserie ist der Reflex bei 50%BZ gut zu erkennen. Seine Intensität ist jedoch bei der Aufdampfmenge von 200 Hz am geringsten. In den Linescans sind keine Reflexe zu erkennen, die auf den durchschnittlichen Graben-zu-Graben-Abstand der Nanodrahtbündel hindeuten.

Zur Analyse wurden die Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion bei 25%BZ, -25%BZ und -75%BZ entfaltet. Für die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur wurden Reflexe bei 14%BZ, -14%BZ, 43%BZ und -57%BZ entfaltet. Hierbei sind 14%BZ und -14%BZ sowie 43%BZ und -57%BZ äquivalent. Abbildung 5.16 zeigt die Auftragung der Halbwertsbreiten beziehungsweise relative Intensitäten der Reflexe der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstrukturen gegen die Auftampfmenge.

Die Halbwertsbreite der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion besitzt ein Minimum bei 100 Hz bis 140 Hz. Bei höheren Bedeckungen steigt die Halbwertsbreite stark an. Ab 220 Hz sinkt die Halbwertsbreite erneut bis zu der Aufdampfmenge von 260 Hz. Größere Aufdampfmengen führen zu einem langsamen Anwachsen der Halbwertsbreite.



Abbildung 5.14.: Dreidimensionale Plots der Linescans der Hauptachse in  $[0\bar{1}]$ -Richtung. Die relative Intensität wurde in Abhängigkeit der Position in %BZ und der Aufdampfmenge in Hz aufgetragen. Die Intensitäten jedes einzelnen Scans wurden jeweils auf die Intensität des (00)-Reflexes normiert, um eine Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Die roten Linien dienen der besseren Erkennung der Reflexpositionen. Der Linescan bei der Aufdampfmenge 300 Hz wurde in beide Plots eingetragen.



**Abbildung 5.15.:** Auswahl der Bedeckungsserie bei 600 °C. Die gezeigten Beugungsbilder stehen repräsentativ für die im Anhang A gezeigte vollständige Bedeckungsserie.



**Abbildung 5.16.:** Aus symmetrisch äquivalenten Reflexen wurde der arithmetische Mittelwert der Halbwertsbreite und Intensität gebildet und gegen die Aufdampfmenge aufgetragen. Die Intensitäten wurden zusätzlich auf die Intensität des (00)-Reflexes normiert.

Die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur bei 200 Hz so gering, dass ein Entfalten nicht möglich war.

Die Positionen der Extrema der Intensität korrelieren gut mit denen der Halbwertsbreite. Nach einem Intensitätsmaximum bei 140 Hz verschwindet die Intensität zwischen 200 Hz und 220 Hz nahezu vollständig. Steigende Bedeckung resultiert in einem weiteren Intensitätsmaximum bei 350 Hz bis 400 Hz. Ob bei diesen Bedeckungen die gleiche  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion der Oberfläche vorliegt wie zwischen 60 Hz und 180 Hz, ist nicht sicher. Daher ist die genaue Ursache dieses Intensitätsmaximums unklar.

Die größte mittlere Domänengröße der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion wird somit bei einer Aufdampfmenge von 140 Hz erreicht. Nach dem vollständigen Verschwinden der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur bei etwa 200 Hz bildet sich bei höheren Bedeckungen erneut eine  $(\times 4)$ -Periodizität auf der Oberfläche.

Die Halbwertsbreite der Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur sinkt mit steigender Bedeckung bis zu der Aufdampfmenge von 220 Hz. Anschließend ist bis 300 Hz eine Zunahme der Halbwertsbreite zu beobachten. Das Intensitätsprofil korreliert gut mit dem Verlauf der Halbwertsbreite. Bis 200 Hz steigt die Intensität stetig an. Bei höheren Bedeckungen nimmt die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion ab. Bereits bei 300 Hz waren die Reflexe nicht mehr gut zu entfalten. Die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur liegt bei 600 °C somit bei der Aufdampfmenge von 200 Hz bis 220 Hz mit der größten mittleren Domänengröße vor.

Die  $(2 \times 4)$ -Überstruktur verschwindet folglich mit der Bildung der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion vollständig. Wenn die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur wieder abnimmt, bildet sich auf der Oberfläche erneut eine  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion.

In Abbildung 5.17 wurden die Halbwertsbreite und relative Intensität des Reflexes bei 50%BZ gegen die Bedeckung aufgetragen.

Die Halbwertsbreite des Reflexes ist bis 140 Hz mit etwa 1%BZ gering. Bei größeren Aufdampfmengen steigt sie bis zu einem Maximum bei 200 Hz stark an. Bei dieser Aufdampfmenge bildet sich auf der Oberfläche die  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion mit einem hohen Ordnungsgrad. Dies ist ein weiteres Indiz für den in Kapitel 4.3 beschriebenen Aufbau der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion. Läge eine langreichweitige  $(2 \times 7)$ -Überstruktur vor, sollte die Halbwertsbreite bei 200 Hz ein Minimum besitzen. Steigt die Bedeckung weiterhin, stellt sich eine bedeckungsunabhängige Halbwertsbreite von knapp 2%BZ ein. Das Intensitätsprofil korreliert gut mit dem der Halbwertsbreite.

Im Bereich bis 200 Hz entstehen die Reflexe durch die  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion der Si(001)-Oberfläche sowie der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur. Bei den Aufdampfmengen ab 240 Hz ist auf Grund der



Abbildung 5.17.: Auftragung der Halbwertsbreite beziehungsweise relativen Intensität des Reflexes bei 50%BZ gegen die Aufdampfmenge. Die Substrattemperatur während des Aufdampfens betrug 600 °C.

unterschiedlichen Halbwertsbreite davon auszugehen, dass der Reflex durch eine Rekonstruktion auf den Nanodrähten entsteht. Durch die zunehmende Bedeckung ist die  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion der Si(001)-Oberfläche bei 220 Hz durch die Bildung der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstrukturen vermutlich nahezu vollständig zerstört.

Das Intensitätsprofil unterstützt die Ansicht, dass die Reflexe bei höheren Bedeckungen durch Nanodrähte entstehen. Da die Intensität bei 200 Hz sehr gering ist, ist nicht davon auszugehen, dass bei noch höheren Bedeckungen die  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion des Substrats existiert und zum Signal beiträgt.

## 5.4. Vergleich der Bedeckungsserien

Im Vergleich der Verläufe von Intensitäten und Halbwertsbreiten der entfalteten Reflexe der  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstruktur zwischen den beiden Temperaturen fällt auf, dass die charakteristischen Extremstellen bei 600 °C wesentlich ausgeprägter sind. Die Absolutwerte der Minima der Halbwertsbreite sind etwa halb so groß, während die der Maxima der Intensität um etwa 20% gestiegen sind. Es ist daher anzunehmen, dass sich die  $(2 \times 4)$ - und die  $(2 \times 7)$ -Überstrukturen bei 600 °C mit einer langreichweitigeren Ordnung bilden können.

Das Minimum der Halbwertsbreite und Maximum der Intensität der Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur tritt bei 600 °C mit 140 Hz auf, während dies bei 500 °C bereits bei 100 Hz der Fall ist. Ob tatsächlich höhere Bedeckungen bei 600 °C notwendig sind oder die Ursache hierfür in dem temperaturabhängigen Adsorptionskoeffizienten liegt, ist unklar.

Ein weiterer Unterschied der beiden Bedeckungsserien ist das vollständige Verschwinden der  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion bei 600 °C, wenn die Reflexe der  $(2 \times 7)$ -Überstruktur mit maximaler Intensität auftreten. Abbildung 5.18 zeigt diesen Sachverhalt exemplarisch an den Reflexen bei 25%BZ, beziehungsweise 28%BZ. Durch die schwächere Oberflächendiffusion bei 500 °C könnte es Regionen auf der Oberfläche geben, auf denen nicht genügend Dysprosiumatome für die  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion zur Verfügung stehen. Bei 600 °C würde sich das Dysprosium jedoch gleichmäßig verteilen, sodass sich auf der gesamten Oberfläche die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur bilden kann.

Bei Aufdampfmengen größer als 200 Hz sind nicht wie bei 500 °C die von den Graben-zu-Graben-Abständen der Nanodrahtbündel stammenden Reflexe zu finden. Warum sich diese Strukturen



**Abbildung 5.18.:** Fit der Messdaten bei 500 °C (links) und 600 °C(rechts) für eine Aufdampfmenge von jeweils 200 Hz. Es ist deutlich zu erkennen, dass bei 500 °C die Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur bei 25%BZ und der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion bei etwa 28%BZ koexistieren. Bei 600 °C verschwindet die  $(2 \times 4)$ -Überstruktur hingegen praktisch vollständig.

bei 600 °C nicht beobachten lassen ist unklar.

Bei größeren Aufdampfmengen als 200 Hz bilden sich bei beiden Substrattemperaturen Streaks auf den Hauptachsen. Hingegen sind bei 600 °C die Streaks auf der Nebenachse bei  $\pm 50\%$ BZ wesentlich ausgeprägter. Dies spiegelt sich in den Linescans der Hauptachse bei höheren Bedeckungen bei 50%BZ wider. Die Abbildungen 5.13 und 5.17 zeigen die Auftragung der Halbwertsbreite beziehungsweise relativen Intensität gegen die Bedeckung bei den jeweiligen Temperaturen. Bei niedrigen Bedeckungen wird der Reflex von der (2 × 1)-Rekonstruktion der Si(001)-Oberfläche verursacht. Bei zunehmender Bedeckung nimmt die Intensität folglich ab, beziehungsweise die Halbwertsbreite zu. Mit der Präsenz der voll ausgebildeten (2 × 7)-Überstruktur bei 200 Hz verschwindet der Reflex bei 50%BZ nahezu komplett. Bei 600 °C nimmt die Intensität jedoch im Gegensatz zu 500 °C bei Aufdampfmengen größer als 200 Hz erneut zu.

Es ist wahrscheinlich, dass sich die Nanodrähte bei verschiedenen Substrattemperaturen unterschiedlich bilden. Eine vermehrte Entstehung von Nanodrahtbündeln bei 500 °C würde die Reflexe bei 20%BZ sowie die schwach ausgeprägten Reflexe bei  $\pm 50\%$ BZ erklären. Wenn sich bei 600 °C vermehrt einzelne Nanodrähte mit einer (2 × 1)-Rekonstruktion auf ihrer Oberfläche bilden, lässt sich die hohe Intensität bei 50%BZ bei Aufdampfmengen über 200 Hz verstehen. Zudem würden dadurch die fehlenden Reflexe durch den durchschnittlichen Graben-zu-Graben-Abstand erklärt werden.

Abbildung 5.19 zeigt einen Überblick über die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Strukturen. Bei Bedeckungen bis 180 Hz finden sich kaum Unterschiede in der Bildung der Oberflächenstrukturen. Bei 600 °C wird die  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion jedoch bei einer Aufdampfmenge von 200 Hz vollständig durch die  $(2 \times 7)$ -Überstruktur ersetzt. Bei 600 °C ist eine  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion jedoch bis zu 450 Hz zu finden, während sie sich bei 500 °C nur bis 280 Hz bildet. Ob es sich bei 600 °C dabei um die gleiche  $(2 \times 4)$ -Rekonstruktion handelt, die bei Aufdampfmengen unter 180 Hz auftritt, ist nicht sicher.



Abbildung 5.19.: Überblick über das Auftreten der verschiedenen Oberflächenstrukturen in Abhängigkeit der Aufdampfmenge und der Substrattemperatur.

# 6. Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung des temperatur- und bedeckungsabhängigen Wachstums verschiedener von Dysprosium induzierter Überstrukturen auf der Si(001)-Oberfläche im Monolagenbereich. Dazu wurde mit 500 °C bis 600 °C der Temperaturbereich bestimmt, in dem die  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion der Oberfläche und die Bildung von Nanodrähten zu beobachten war. Die Aufdampfmengen variierten dabei von 20 Hz bis 1100 Hz. Bei niedrigen Bedeckungen rekonstruiert die Oberfläche zu einer  $(2 \times 4)$ -Überstruktur, die bei steigender Bedeckung durch eine  $(2 \times 7)$ -Überstruktur ersetzt wird. Die Teilung der  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion in zwei Untereinheiten scheint bei Dysprosium genauso wie bei Terbium vorzuliegen[11]. Bei höheren Bedeckungen bilden sich Nanodrähte, deren Oberfläche vermutlich eine  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion aufweist.

Die  $(2 \times 4)$ - und  $(2 \times 7)$ -Überstrukturen wachsen bei 600 °C mit größeren mittleren Domänengrößen auf. Zudem liegt die  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion auf den Nanodrähten bei dieser Temperatur geordneter vor. Wenn die  $(2 \times 7)$ -Rekonstruktion mit der größten mittleren Domänengröße vorliegt, können bei 500 °C koexistente Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur beobachtet werden, während die Intensität der Reflexe der  $(2 \times 4)$ -Überstruktur bei 600 °C vollständig verschwindet.

Nur bei 500 °C konnten insbesondere bei 20%BZ Reflexe beobachtet werden, die auf den durchschnittlichen Graben-zu-Graben-Abstand zwischen Nanodrahtbündeln zurückzuführen sind. Hingegen war bei 600 °C eine deutlich höhere Intensität bei  $\pm 50\%$ BZ bei Aufdampfmengen größer als 200 Hz zu messen. Daher ist davon auszugehen, dass sich die Nanodrähte bei unterschiedlichen Temperaturen verschieden bilden. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass sich bei 500 °C vermehrt Nanodrahtbündel bilden. Dies ist somit ein Ansatzpunkte für weitere Analysen.

Des weiteren wäre die Kalibrierung des Verdampfers beispielsweise mittels spektroskopischer Messmethoden sinnvoll, um die Aufdampfmenge in die Bedeckung umrechnen zu können.

Außerdem wäre eine nähere Analyse der Linescans der Nebenachse bei 50%BZ durch Entfaltung der Reflexe interessant, um einen Vergleich zu den Reflexen auf den Hauptachsen zu ziehen. Für weitere Erforschungen der von Dysprosium induzierten Nanodrähte bietet sich insbesondere vicinales Si(001) als Substrat an.

## Literaturverzeichnis

- J. M. Luttinger. An Exactly Soluble Model of a Many-Fermion System. J. Math. Phys. 4, 1963.
- [2] R. E. Peierls. Quantum Theory of Solids. Oxford University Press, 1955.
- [3] C. Preinesberger, S. Vandré, T. Kalka and M. Dähne-Prietsch. Formation of dysprosium silicide wires on Si(001). *Journal of Physics D: Applied Physics*, 1998.
- [4] B. Z. Liu and J. Nogami. A scanning tunneling microscopy study of dysprosium silicide nanowire growth on Si(001). *Journal of Applied Physics*, 2003.
- [5] M. Wanke, K. Löser, G. Pruskil, D. V. Vyalikh, S. L. Molodtsov, S. Danzenbächer, C. Laubschat and M. Dähne. Electronic properties of self-assembled rare-earth silicide nanowires on Si(001). *Physical Review B*, 2011.
- [6] D. E. Chang, A. S. Sørensen, P. R. Hemmer and M. D. Lukin. Quantum Optics with Surface Plasmons. *Physical Review Letters*, 2006.
- [7] B. Z. Liu and J. Nogami. An STM study of the  $Si(001)(2 \times 4)$ -Dy surface. Surface Science, 2001.
- [8] S. Gevers. SPA-LEED-Untersuchungen von Praseodymoxidschichten auf Si(111)-Substraten. Diplomarbeit, Universität Osnabrück, 2007.
- [9] D. Bruns. SPA-LEED-Untersuchungen zur Epitaxie von Praseodymoxidschichten auf Si(111). Diplomarbeit, Universität Osnabrück, 2008.
- [10] H. Wilkens. Phase transitions of rare earth oxide films grown on Si(111). PhD thesis, Universität Osnabrück, 2014.
- [11] S. Appelfeller, S. Kuls, M. Dähne. Tb silicide nanowire growth on planar and vicinal Si(001) surfaces. Surface Science, 2015.
- [12] K. Oura, V.G. Lifshits, A.A. Saranin, A.V. Zotov, M. Katayama. Surface Science An Introduction. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [13] H. Ibach, H. Lüth. Festkörperphysik Einführung in die Grundlagen. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002.
- [14] K. Kopitzki, P. Herzog. Einführung in die Festkörperphysik. B. G. Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH, 2004.
- [15] W. Spieß. SPA-LEED Untersuchungen an dünnen Ceroxid- und Mischoxidfilmen auf Si(111). Bachelorarbeit, Universität Osnabrück, 2013.
- [16] F. Timmer. XPS-Untersuchungen von epitaktischen Eisenschichten auf MgO(001). Bachelorarbeit, Universität Osnabrück, 2010.
- [17] Der Mehrfachspalt. Internet. http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ph/14/ep/ einfuehrung/wellenoptik/interferenz\_a.vlu/Page/vsc/de/ph/14/ep/einfuehrung/ wellenoptik/mehrfachspalt1.vscml.html Stand: 06.08.2015.

- [18] Silicium. Internet. http://www.periodensystem.info/elemente/silicium/ Stand: 30.09.2015.
- [19] Dysprosium. Internet. http://www.periodensystem.info/elemente/dysprosium/ Stand: 30.09.2015.

# A. Anhang

# A.1. Bedeckungsserie $500 \,^{\circ}\mathrm{C}$

# A.1.1. 2D-Scans







## Anhang





# A.1.2. Linescans der Hauptachse in $[0\bar{1}]\text{-Richtung}$









A.2. Bedeckungsserie  $600 \,^{\circ}\text{C}$ 

## A.2.1. 2D-Scans









A.2.2. Linescans der Hauptachse in  $[0\bar{1}]\mbox{-Richtung}$ 









# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Menschen bedanken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben.

Besonders danken möchte ich Prof. Dr. Wollschläger, der mir die Anfertigung dieser Arbeit in seiner Arbeitsgruppe Dünne Schichten und Grenzflächen ermöglicht hat.

Ein großer Dank gilt außerdem Frederic Timmer, allgemein für die Betreuung und insbesondere für die ausführlichen Antworten auf meine Fragen sowie das aufmerksame Korrekturlesen dieser Arbeit.

Vielen Dank an alle Mitglieder der Arbeitsgruppe für die freundliche Aufnahme und angenehme Arbeitsatmosphäre. Hierbei sei besonders Jari Rodewald für das Korrekturlesen dieser Arbeit erwähnt.

Ein herzlicher Dank geht außerdem an meine Familie und meine Freundin Miriam für die bedingungslose Unterstützung.

Ich versichere, dass ich die eingereichte Bachelorarbeit 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.

Osnabrück, 1. Oktober 2015

Jascha Bahlmann