

Kontamination der Oberfläche von CaF₂-Schichten bei atmosphärischen Bedingungen

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

vorgelegt von: Kilian Freude
Matrikelnummer: 1001408
Erstgutachter: Prof. Dr. habil. Joachim Wollschläger
Zweitgutachter: Dr. Philipp Rahe
eingereicht in: Osnabrück, am 3. September 2025

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| 1 Einleitung | 5 |
| 2 Theoretische Grundlagen | 7 |
| 2.1 XPS | 7 |
| 2.2 Volumenstrukturen | 9 |
| 2.3 Oberflächen und Überstrukturen | 11 |
| 3 Materialsystem | 13 |
| 3.1 Silicium (111) | 13 |
| 3.2 Calciumflourid | 15 |
| 3.3 Sauerstoff | 16 |
| 3.4 Kohlenstoff | 17 |
| 4 Experimentelle Grundlagen | 19 |
| 4.1 Ultrahochvakuum (UHV) | 19 |
| 4.2 Verdampfer | 20 |
| 4.3 Pyrometer | 21 |
| 4.4 XPS-Aufbau | 22 |
| 4.5 Propenpräperation | 23 |
| 5 Ergebnisse | 25 |
| 5.1 Kalibrierung Pyrometer | 25 |
| 5.2 Positionierung Verdampfer | 29 |
| 5.3 Verunreinigung von CaF ₂ | 31 |
| 6 Zusammenfassung und Ausblick | 47 |
| 7 Conclusion and outlook | 49 |
| 8 Literaturverzeichnis | 51 |

1 Einleitung

Aufgrund der großen Verfügbarkeit und geringen Kosten ist Silicium ein gern genutztes Element in der Halbleiterelektronik, zudem stellt es sich als leicht dotierbar dar. Calciumfluorid stellt dazu als Isolator das ideale Gegenstück dar, weil zwischen den Gitterkonstanten von Calciumfluorid und Silicium nur eine Gitterfehlanpassung von 0,6 % [13] herrscht und somit das System eine stabile Grundlage für die Herstellung von Halbleiterbauteilen darstellt, da der Isolator CaF_2 auf dem Silicium ohne Verspannungen und Anpassungen wachsen kann. Um die vorteilhafte Oberflächenstruktur des Siliciums zu erhalten, muss aber eine 7x7-Struktur nach dem DAS-Modell (Dimer-Adatom-Stacking-fault) vorliegen, welches auch aufgrund seiner niedrigeren Anzahl von freien Bindungen die stabilste Oberflächenstruktur des Si(111) darstellt. [11]

Besonders interessant ist die Kombination von den beiden Stoffen für Resonanztunneldioden und Feldeffekttransistoren. Die Resonanztunneldioden bestehen aus Halbleitern (hier also Silicium), die von dünnen Tunnelbarrieren getrennt werden (hier das Calciumfluorid). Daraus resultiert eine Diode, dessen Widerstand negativ differentiell ist, das bedeutet, dass der Widerstand kleiner wird, wenn die Spannung erhöht wird. Dies wird zum Beispiel zum Anregen von Schwingkreisen genutzt[25]. Bei den Feldeffekttransistoren oder kurz FET ist der Widerstand des Bauteils einstellbar und werden in der Hochfrequenztechnik und Digitaltechnik genutzt[6]. Dies geschieht dadurch, dass an den Kathoden n+ dotiertes Silicium anliegt und dazwischen eine p dotierte Schicht vorliegt. Daraus resultiert eine Sperrsicht und somit ein Widerstand. Legt man nun eine Spannung am Kontakt zur Sperrsicht zwischen den beiden Kathoden an, bildet sich ein Tunnel zwischen den Kathoden, in dem die p dotierte Schicht durch die Spannung n+ dotiert wird und somit Strom zwischen den Kathoden fließen kann. Hierbei wird das Calciumfluorid als Isolator am Gate bzw. am ganzen Bauteil genutzt.

1 Einleitung

Diese Arbeit bezieht sich primär auf die Herstellung von Calciumfluorid auf Silicium und die Verschmutzung der Probe durch Kontakt mit der Atmosphäre. Hierbei liegt der Fokus auf Stickstoff, Sauerstoff und Kohlenstoff, da diese bereits bei vorherigen Versuchen als Fremdatome im System identifiziert wurden. Hierfür wird eine In-Situ XPS-Messung durchgeführt, und diese dann nach bestimmten Kontaktzeiten mit der Atmosphäre wiederholt. Diese Messwerte sollen dann dafür genutzt werden, wie lange eine Probe Kontakt mit der Atmosphäre haben darf, bis relevante Verschmutzungen vorliegen, ebenso wie solche Verschmutzungen aussehen werden. Die theoretischen Grundlagen für dieses Vorgehen werden im Kapitel 2 ausgeführt, im 3. Kapitel werden Calciumfluorid und Silicium sowie mögliche Fremdelemente vorgestellt. Das Messsystem und die Aufbauten dafür werden im 4. Kapitel dargestellt und erklärt, der Fokus liegt hier auf dem XPS im Ultrahochvakuum, sowie die dazugehörige Präparation. Im Kapitel 5 folgt dann die Auswertung der Messergebnisse, die dann im Kapitel 6 und 7 zu einer Zusammenfassung mit Ausblick resultieren, welcher in deutscher und englischer Sprache vorliegen.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 XPS

Um das chemische Verhältnis der Elemente zu bestimmen, wird in dieser Arbeit die Röntgenphotoelektronenspektroskopie (eng.: X-ray photoelectron spectroscopy oder kurz: XPS) angewendet. Bei dieser Messmethode werden Röntgenstrahlen mit einer konkreten Energie auf die Probe beschleunigt. Diese Energie reicht nun, um die Elektronen aus den kernnahen Orbitalen der unterschiedlichen Teilchen so anzuregen, dass sie aus dem Atom heraus gelangen können. Hierfür muss die Energie der Röntgenstrahlung $\hbar\omega$ größer sein als die Austrittsarbeit des Elektrons Φ_A , also der Energie, die benötigt wird, um ein Elektron aus dem Atom zu lösen, und der Bindungsenergie des Elektrons E_B . Die überbleibende Energie stellt dann die kinetische Energie des befreiten Elektrons dar.

$$E_{kin} = \hbar\omega - E_B - \Phi_A \quad (2.1)$$

Zusätzlich zur Austrittsarbeit aus dem Atom muss die Austrittsarbeit aus dem Spektrometer Φ_S mit betrachtet werden, wodurch sich die gesamte Austrittsarbeit $\Phi_G = \Phi_S + \Phi_A$ ergibt und die Formel wie folgt korrigiert werden muss (vgl. Abb. 2.1).

$$E'_{kin} = \hbar\omega - E_B - \Phi_G \quad (2.2)$$

Da die Bindungsenergie bei jedem Kristall unterschiedlich sind und die Energie der Röntgenstrahlung gleich bleibt, kann anhand der kinetischen Energie der freigewordenen Elektronen bestimmt werden, von welchen Element sie stammen. Hierfür werden die Elektronen mit einem Linsensystem fokussiert und in einen hemisphärischen Analysator geführt. In diesem liegt eine Spannung zwischen innerer und äußerer Halbkugel an, wodurch die Elektronen mithilfe der Coulomb-Kraft abgelenkt werden. Entspricht die Coulomb-Kraft nun der benötigten Zentripetal-Kraft erreicht das Elektron den Sensor und es wird gezählt. Anhand der angelegten Spannung lässt sich dann die Energie des Elektrons bestimmen.

2 Theoretische Grundlagen

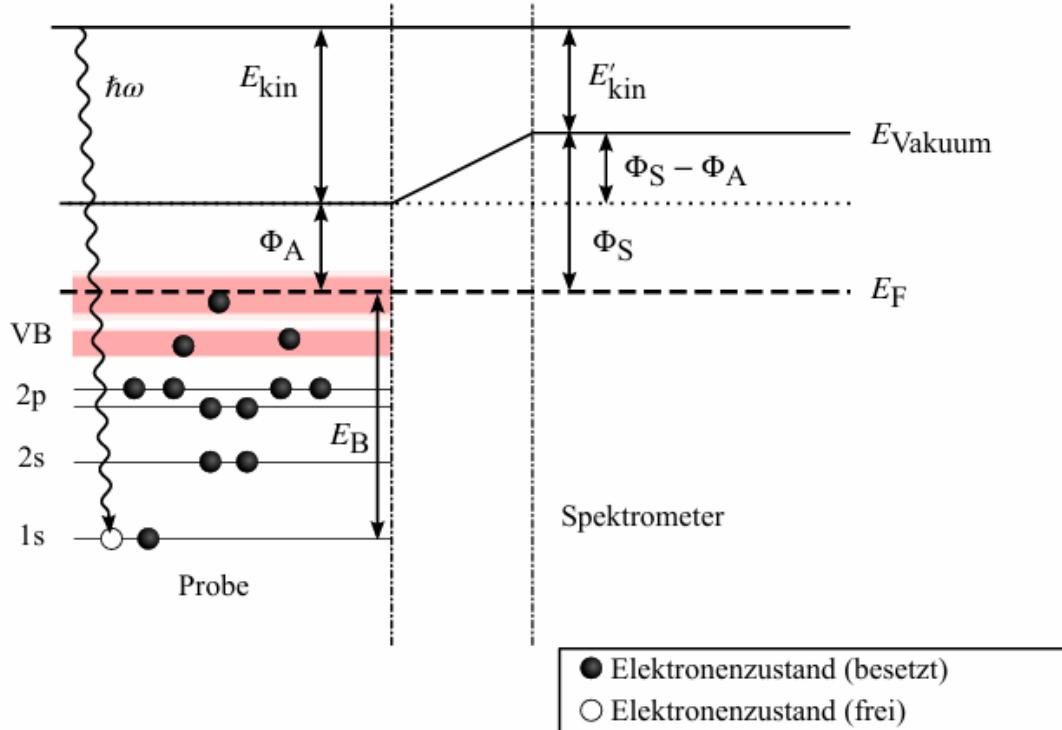


Abbildung 2.1: Energieschema bei einer XPS-Messung. Hierbei stellt E_B die Bindungsenergie dar, $\hbar\omega$ die Energie der Röntgenstrahlen, Φ_A ist die Austrittsarbeitsenergie und Φ_S entspricht der gesamten Austrittsarbeitsenergie Φ_G . E_F ist in diesem Kontext die Fermi-Energie, welche ein Elektron mindestens haben muss, um aus dem Atom auszutreten. E_{kin} und E'_{kin} sind die entsprechenden kinetischen Energien nach [22].

Neben diesen Elektronen können auch noch die sogenannten Auger-Elektronen aufgezeichnet werden. Hierbei wird nach dem Herauslösen des ersten Elektrons das Loch von einem Elektron aus energetisch höherer Schale gefüllt. Die hierbei frei werdende Energie wird entweder in Form von Röntgenstrahlung frei oder auf ein drittes Elektron abgegeben, welches sich durch diese Energie wiederum aus dem Atom löst. Diese Elektronen werden dann, genauso wie die Elektronen die beim XPS entstanden sind gezählt und es sind Elektronen mit anderer kinetischer Energie zu messen. Diese Elektronen werden hier zwar nicht aktiv betrachtet, sind aber ein hilfreicher Indikator bei der Identifikation der beteiligten Elemente. [15]

2.2 Volumenstrukturen

In der Festkörperphysik lassen sich Volumenkristalle mithilfe ihrer Basisvektoren \vec{b}_i der Einheitszelle, welche immer von einem Gitterpunkt zum Nächsten zeigen, und aufgrund ihrer Translationssymmetrie mit folgender Summe darstellen:

$$\vec{R} = \sum n_i \vec{b}_i , n_i \in \mathbb{N} \quad (2.3)$$

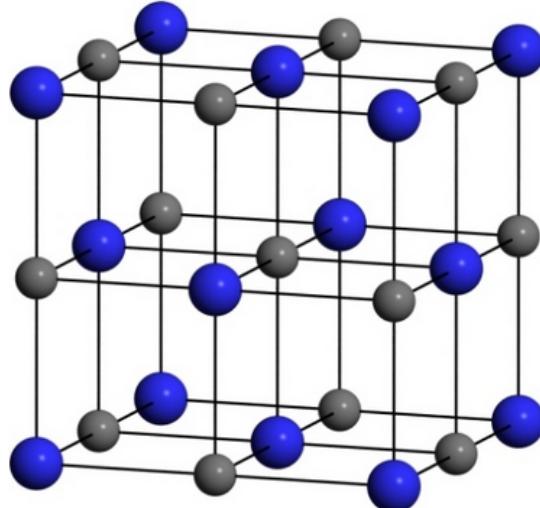


Abbildung 2.2: Beispiel eines NaCl-Kristalls aus [1].

Die Basisvektoren ergeben zusammen eine Einheitszelle. Diese ist dadurch zu beschreiben, dass sie sich im Kristall periodisch wiederholt und somit eine Verschiebung um einen Einheitsvektor weiterhin dazu führt, dass eine Einheitszelle vorliegt. Mit den Einheitsvektoren und der oben beschriebenen Summe kann dann jeder Punkt des Kristalls als Linearkombination der Basisvektoren beschrieben werden (Vgl. Abb. 2.2). Aufgrund der Unendlichkeit des Kristalls kann bei dem Kristall auch die Translationssymmetrie gezeigt werden. Dies bedeutet, dass eine Verschiebung des Kristalls um unbestimmt viele Einheitsvektoren dazu führt, dass der Kristall immer noch identisch ist und die Periodizität bestehen bleibt.

2 Theoretische Grundlagen

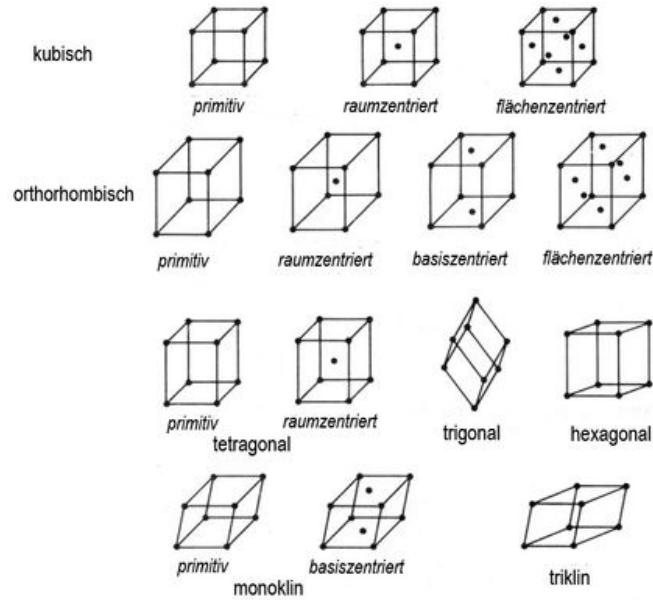


Abbildung 2.3: 3D-Bravias Gitter aus [30].

Zur Beschreibung der Einheitszellen werden die 17 BRAVIAS- Gitter (vgl. Abb. 2.3) verwendet, die alle möglichen Strukturen der Einheitszellen beschreiben. Ein Beispiel dafür wäre das sc-Gitter, also das Simple-cubic-Gitter, welches eine simple würzelförmige Struktur meint. [4]

2.3 Oberflächen und Überstrukturen

Bei Oberflächen fällt im Gegensatz zu Volumenstrukturen die Dritte Dimension weg ($b_3 = 0$), dadurch vereinfachen sich die BRAVIA-Gitter zu 5 unterschiedlichen Möglichkeiten(vgl. Abb. 2.4). Diese sind jedoch oft energetisch ungünstig, da freie Bindungen vorliegen. Deshalb kommt es zu Rekonstruktionen der Oberflächen, um die Oberfläche energetisch günstiger zu machen.

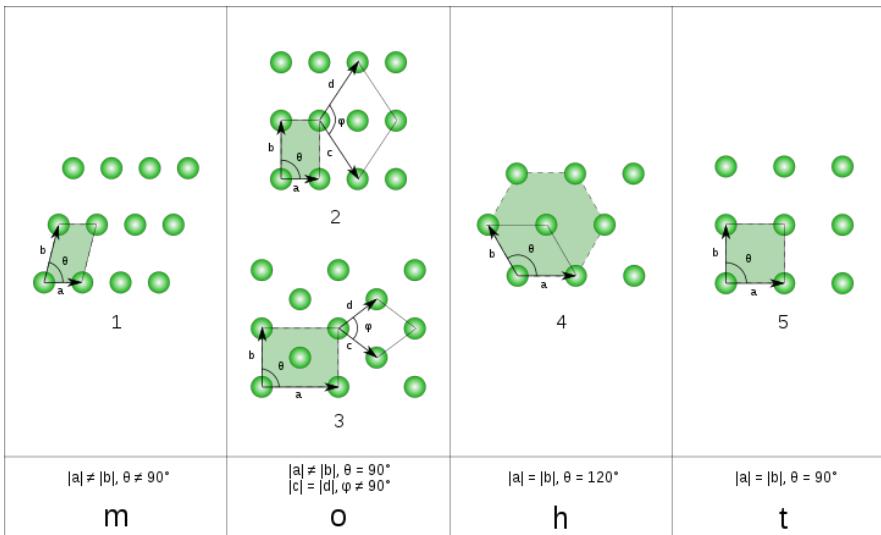


Abbildung 2.4: 2D- Bravias Gitter aus [7].

Zur Bestimmung der Orientierung der Oberfläche relativ zum Kristall werden die Millerschen Indizes genutzt. Diese ergeben sich durch die Schnittpunkte der Ebene mit den Achsen des Kristallgitters und werden in Vielfachen der Gitterkonstanten angegeben. So bedeutet Beispielsweise (1 1 1), dass die Ebene einmal diagonal durch die Einheitszelle verläuft. (vgl. Abb. 2.5 (c))

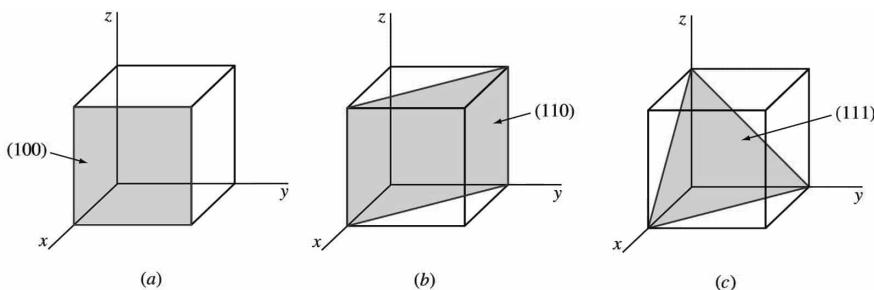


Abbildung 2.5: Miller Indizes a) (1 0 0) b) (1 1 0) c) (1 1 1) aus [14].

2 Theoretische Grundlagen

Der Miller-Index wird benötigt, um die Rekonstruktion der Oberfläche mithilfe der Wood-Notation zu beschreiben. Hierbei stellt S das Substart, R Φ stellt den Drehwinkel und N die Anzahl von Adsorbaten (Ad) in einer Einheitszelle dar. Dadurch kommt es zur folgenden Beschreibung:

$$S(HKL) - i(m \times n)R\Phi - NAd$$

Da mit adsorbatfreien Rekonstruktionen ohne Drehwinkel gearbeitet wird, lässt sich die Notation vereinfachen.

$$S(HKL) - (m \times n)$$

m bzw. n ist hierbei definiert als $m = \frac{|\vec{g}_1|}{|\vec{b}_1|}$ und $n = \frac{|\vec{g}_2|}{|\vec{b}_2|}$ wobei \vec{g}_1 bzw. \vec{g}_2 folgendermaßen definiert sind:

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{A} \begin{pmatrix} b_2^y \\ -b_2^x \end{pmatrix}, \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{A} \begin{pmatrix} -b_1^y \\ b_1^x \end{pmatrix}$$

Wobei A die Fläche ist, die von \vec{b}_1 und \vec{b}_2 aufgespannt wird und b_i^j die j-te Komponente des Basisvektors \vec{b}_i mit $i=1,2$ darstellt. Somit ergibt sich bspw. das Si(111)-(7 \times 7) welches in dieser Arbeit von Bedeutung ist. [33]

3 Materialsystem

Silicium stellt die Grundlage des Substrats dar, Calciumfluorid ist die aufgedampfte Schicht. Neben diesen Stoffen wurde im Verlauf der Arbeit noch Sauerstoff und Kohlenstoff auf der Probe festgestellt, weshalb sie hier ebenfalls genauer betrachtet werden.

3.1 Silicium (111)

Silicium ist ein Element der 4. Hauptgruppe und gehört zur Gruppe der Halbleiter, weshalb die Leitfähigkeit mit der Temperatur ansteigt. Es hat die Ordnungszahl von 14 und der Elektronenkonfiguration von $[Ne]3s^23p^2$, sowie einen Schmelzpunkt von 1414 °C. Das Silicium kristallisiert aufgrund der vier sp^3 -Orbitalen, welche aus den 3s und den drei 3p-Orbitalen hybridisiert wird, in einer Diamantstruktur, welche aus zwei flächenzentrierten kubischen Gittern besteht (englisch. Face centered cubic = fcc) (siehe Abb. 3.1). Die Gitter sind jedoch in der Raumdiagonalen um ein Viertel gegeneinander verschoben. Die Gitterkonstante beträgt hierbei $a=5.43\text{\AA}$. [29]

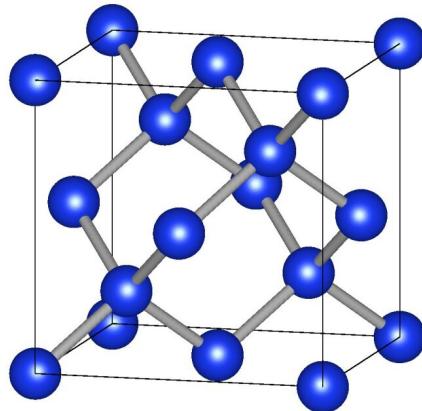


Abbildung 3.1: Einheitszelle Silicium aus [20].

3 Materialsystem

Die (7x7)-Überstruktur der Oberfläche – beschrieben durch das Dimer-Adatom-Stacking-fault-Modell – rekonstruiert sich bei Temperaturen zwischen 380°C und 950°C. In diesem Modell stellt sich die Einheitszelle aus 9 Dimeren, 12 Adatomen, jeweils einer Vakanz an den 4 Eckpunkten der Zelle und 6 Restatomen dar. Unter Restatomen sind hier Atome zu verstehen, die nicht durch eine Bindung mit den Adatomen gesättigt werden. Zudem liegt noch ein Stapelfehler im Vergleich zur Volumenstruktur auf einem der Hälften vor (vgl. Abb. 3.2). Durch diese DAS-Struktur liegen statt 49 ungesättigte Bindungen nur noch 19 vor, wodurch diese Struktur energetisch stabiler ist. [32]

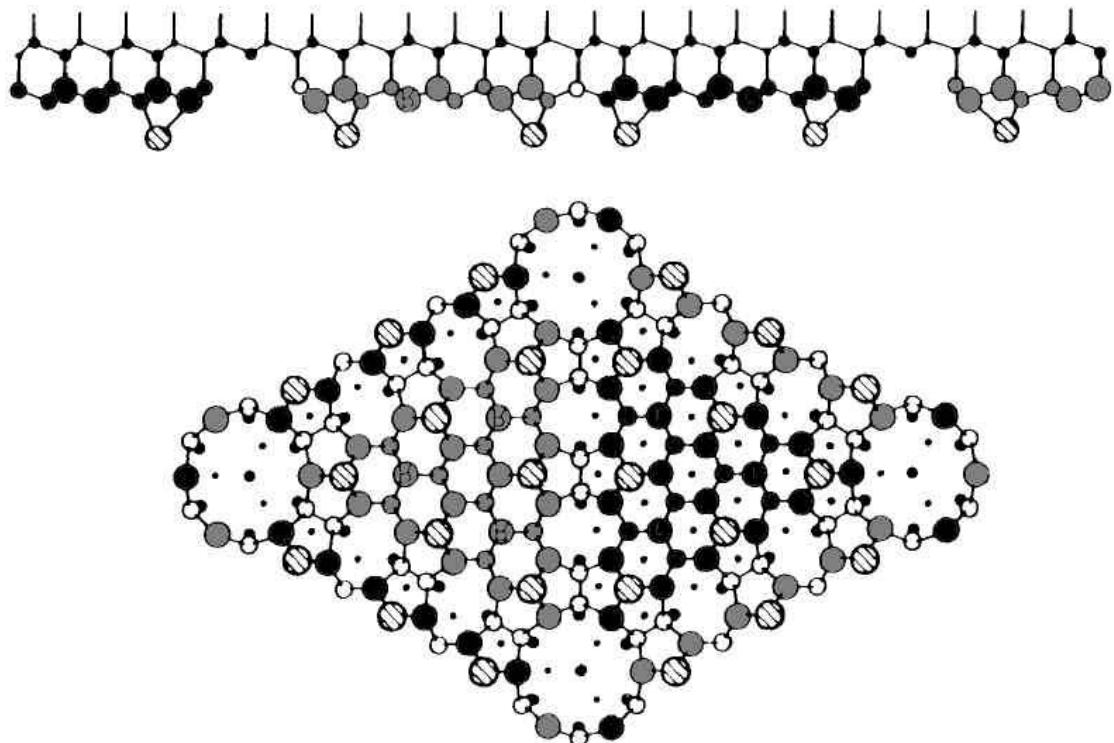


Abbildung 3.2: 7x7 Rekonstruktion der Si-Oberfläche aus [3]. Die großen gestreiften Atome stellen die Adatome dar, die dicken Grauen mit einem R sind die Restatome und die kleinen Weißen stellen die Dimer dar.

3.2 Calciumflourid

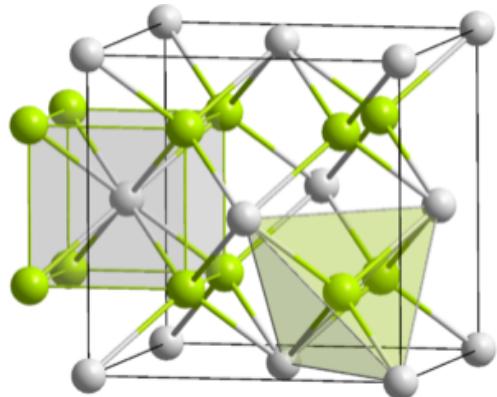


Abbildung 3.3: Calciumfluoridkristallstruktur aus [8].

Calciumfluorid stellt als ionische Verbindung aus einem Ca^{2+} Kation und zwei F^- Anionen einen Isolator dar. Hier bilden die Calcium-Kationen ein kubisch-flächenzentriertes Gitter und die Fluorid-Anionen ein einfach kubisches Gitter, das aber um ein Viertel in der Diagonalen verschoben ist (vgl. Abb. 3.3) [13]. Daraus resultiert eine Gitterkonstante von 5,46 Å bei Raumtemperatur, wodurch sich eine Gitterfehlanpassung von 0,6 % gegenüber Silicium ergibt. Die Schmelztemperatur liegt bei 1418 °C [10] [26].

3.3 Sauerstoff

Sauerstoff hat als Element der 6. Hauptgruppe die Elektronenkonfiguration [He]2s²2p⁴ und die Ordnungszahl 8. Sauerstoff hat nach Pauling eine Elektronegativität von 3,44 und ist damit eins der Elemente, die am stärksten an Elektronen zieht. In Verbindungen mit Wasserstoff ermöglicht diese Elektronegativität die Ausbildung von Wasserstoffbrücken, also einer starken Bindung zwischen zwei Molekülen aufgrund ihrer Polarität, die einer ionischen Bindung ähnelt. Daraus resultiert auch, dass sich der Wasserstoff abspalten kann und somit HO⁻-Moleküle gebildet werden können. Dazu kommt, dass Wasser als Verbindung von Wasserstoff und Sauerstoff neben der starken Polarität zwischen den Elementen (vgl Abb. 3.4) auch noch asymmetrisch ist und somit das Molekül stark polar ist. Zu dieser starken Polarität kommt bei Sauerstoff noch eine Reaktivität von O₂. Für das hier stattgefundene Experiment ist Sauerstoff von Relevanz, da es mit 21 % in der Luft vorzufinden ist. [28]

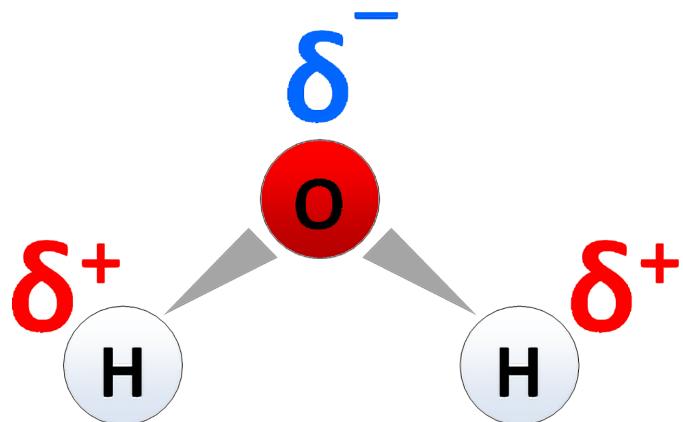


Abbildung 3.4: Polarität von H₂O entnommen aus [21]. Positive Polarität $\delta+$ des H-Atoms und negative Polarität $\delta-$ des O-Atoms

3.4 Kohlenstoff

Mit der Ordnungszahl 6 gehört Kohlenstoff zur 4. Hauptgruppe und ist somit in derselben Gruppe wie das Silicium, wodurch sich beide Elemente ähneln und sich gegenseitig ersetzen könnten. Kohlenstoff kann in Kombination mit Wasserstoff lange bzw. große Moleküle bilden, die dann Adsorbate auf dem Substrat bilden. Die Elektronegativität ist mit 2,55 niedriger als beim Sauerstoff, wodurch CO und CO₂ polar wären, wenn CO₂ nicht symmetrisch wäre und bei CO die Ladung des Moleküls die Polarität durch Elektronegativität wieder ausgleicht. Des weiteren kann sich Kohlenstoff in Reinform auf unterschiedliche Art und Weise ausbilden. Graphen hat zum Beispiel eine wabenartige sechseckige Struktur oder Diamant hat eine Diamantstruktur, die aus zwei fcc Gittern besteht, die einander durchdringen (Vgl. Abb. 3.5). [27]

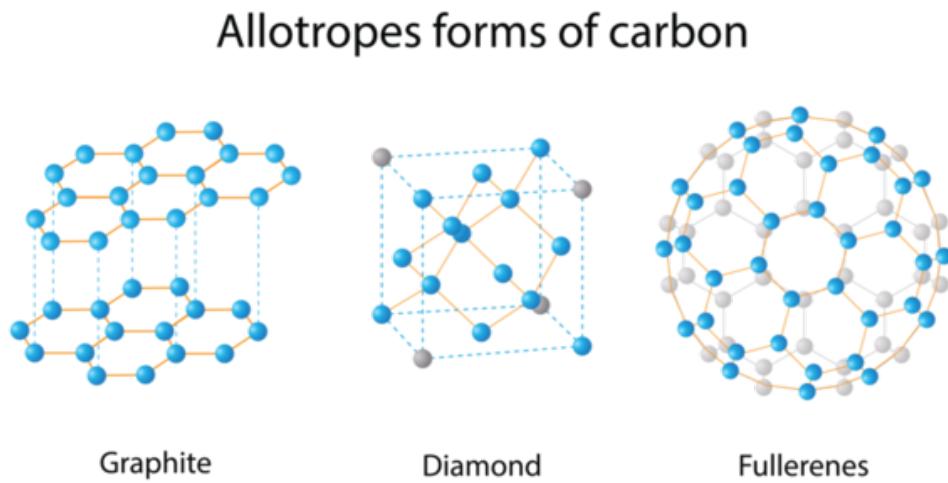


Abbildung 3.5: Allotrope von Kohlenstoff aus [2].

4 Experimentelle Grundlagen

4.1 Ultrahochvakuum (UHV)

Um die Präparate permanent frei von Fremdatomen zu halten, finden alle Messungen sowie Präparationen in Ultrahochvakuumkammern statt. Fremdatome könnten potenzielle Verunreinigungen erzeugen und dadurch die Messungen verfälschen. In diesen Kammern werden 4 Pumpen eingesetzt, um den Druck bei ungefähr $2 * 10^{-9}$ mbar zu halten. Die erste dieser Pumpen stellt die Drehschiebepumpe dar, welche den Druck auf ungefähr 10^{-3} mbar bringt. Darauf folgt die Turbomolekularpumpe, welche mithilfe eines Aufbaues ähnlich einer Turbine und den dadurch entstehenden Molekularströmen den Druck auf ca. 10^{-8} mbar bringt.

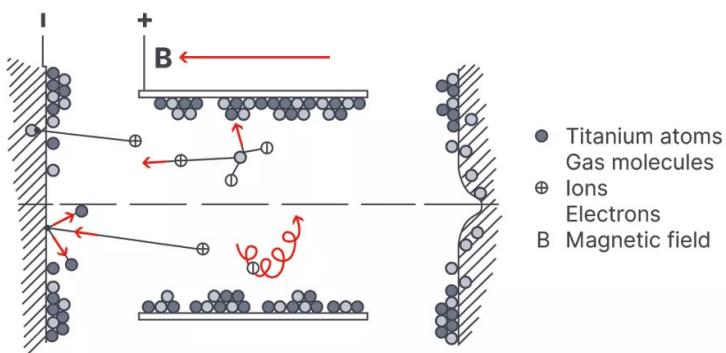


Abbildung 4.1: Vereinfachte Darstellung der Ionengetterpumpe in Kombination mit Titansublimationspumpe, Bild entnommen aus [18].

Für den finalen Druck sorgt zuletzt die Kombination einer Ionengetter- und einer Titansublimationspumpe. Erstere funktioniert, indem sie die restlichen Gasatome ionisiert und mit einem elektrischen Feld auf eine Oberfläche beschleunigt und dann gebunden werden (Vgl. Abb.4.1) Die zweite Pumpe funktioniert, indem Titan auf eine gekühlte Adsorberfläche aufgedampft wird und dabei die Restgase mit in die Schicht aufnimmt. Ist die Titanschicht zu verschmutzt, folgt der nächste Aufdampfdurchgang.

4.2 Verdampfer

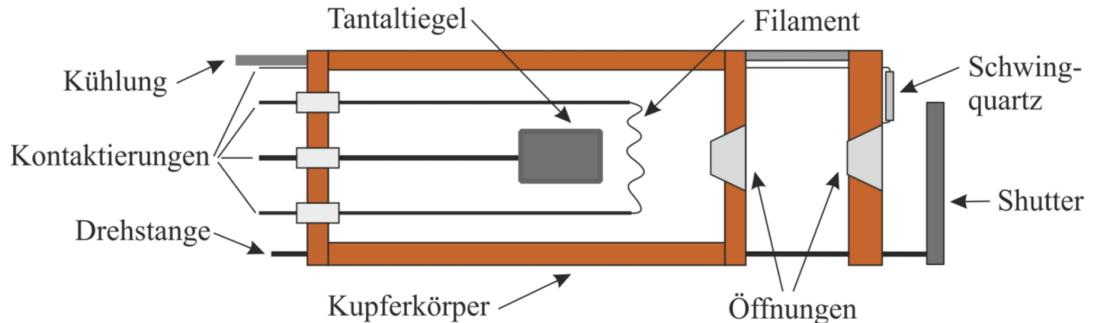


Abbildung 4.2: Schematischer Aufbau des Verdampfers, entnommen aus [36]. Das Thermocoupe ist auf dieser Grafik nicht zu sehen und der Quarzkristall ist für diese Arbeit nicht von Relevanz

Um die Präparate zu bedampfen wird ein Verdampfer genutzt, der aus einem Tiegel, gefüllt mit CaF_2 , besteht, welcher in einen Zylinder mit Heiz-Filamenten positioniert wird. Vor der Öffnung des Verdampfers befindet sich ein Shutter, also eine Metallplatte, die verhindert, dass beim Aufwärmen des CaF_2 , dieses auf die Probe gelangt. Die Temperatur des Tiegels lässt sich mit einem Thermocouple im Zylinder bestimmen. Das Thermocouple arbeitet mit dem Seebeck-Effekt bei dem eine Temperaturdifferenz in einem Leiter zu einer Spannung führt, da sich die Elektronen im erwärmten Teil des Drahtes ausbreiten. Nutzt man diesen Effekt nun bei zwei Drähten aus unterschiedlichen Metallen mit unterschiedlich starken Seebeck-Effekten, lässt sich die Spannung zwischen den beiden Drähten nutzen, um mit dem entsprechenden Messgeräten die Temperatur zu berechnen [31]. Das entsprechende Steuermodul der Heizung nimmt sich die vom Thermocouple bestimmte Temperatur und passt Spannung und Stromstärke so an, dass man die vorher eingegebene Temperatur erreicht und hält. Dadurch wird ein kontrollierter Aufdampfvorgang gewährleistet. Die Verdampfung basiert auf der Sublimation von CaF_2 also dem direkten Übergang von festen in den gasförmigen Aggregatzustand des CaF_2 . Dies ist hier aufgrund des niedrigen Drucks in der Kammer möglich und findet bei ungefähr 1180°C statt, wodurch die Bedingungen über dem Tripelpunkt hinausgehen. [17]

4.3 Pyrometer

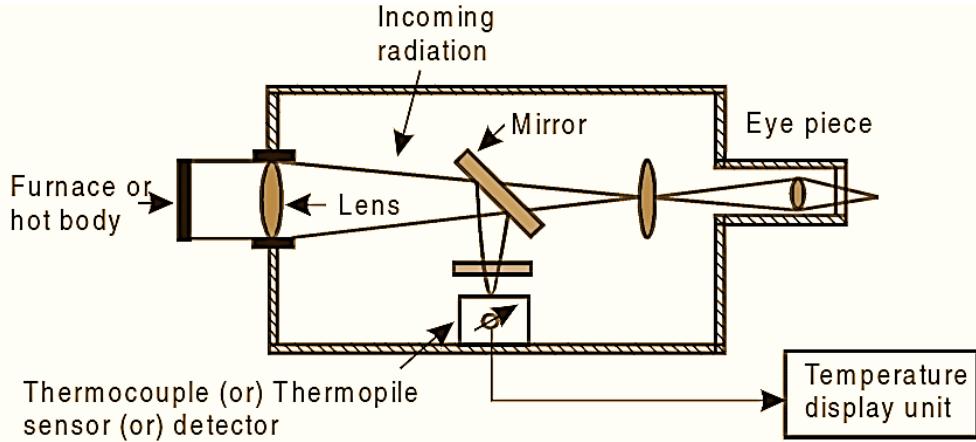


Abbildung 4.3: Aufbau eines Pyrometers entnommen aus [37].

Ein Pyrometer misst die Temperatur eines Objektes anhand der ausgesendeten infraroten Strahlung. Diese Strahlung wird zu Beginn durch eine Linse auf einen halbdurchlässigen Spiegel fokussiert, der einerseits auf den Sensor des Pyrometers spiegelt und andererseits das Licht auf ein Öffnung für das Auge durchlässt (Vgl. Abb. 4.3). Der Verlauf wird durch den Spiegel geteilt, um ein genaues Zielen und Fokussieren des Pyrometers zu ermöglichen. Der Sensor wurde vorher auf Silicium kalibriert, wodurch das Pyrometer dann die gemessene Spannung umrechnen kann und die Temperatur angibt, die vorliegen muss, um genau diese Intensität an Infrarotstrahlung zu erhalten.

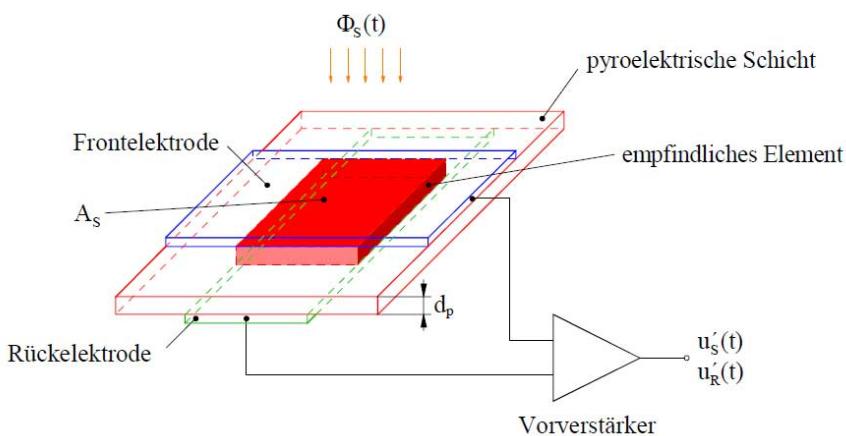


Abbildung 4.4: Aufbau eines Pyroelektrischen IR-Sensors aus [38].

4 Experimentelle Grundlagen

Der IR-Sensor funktioniert nach dem Prinzip, dass die Infrarotstrahlung das empfindliche Element erwärmt, welches die Fläche der pyroelektrischen Schicht meint, welche durch das IR-Licht bestrahlt wird. Diese Temperaturänderung im Pyroelektrikum, führt zu einer Ladungsänderung, da sich die Dipole durch die Temperatur alle gleich ausrichten und somit eine positive Ladung auf der einen und eine negative Ladung auf der anderen Seite erzeugt. Der Vorverstärker wandelt diese Ladungsänderung in eine Signalspannung um, welche dann vom Pyrometer in eine Temperatur umgerechnet werden kann (Vgl. Abb. 4.4). Neben der Signalspannung liegt zusätzlich eine Rauschspannung vor, welche aus den Rauschquellen im Form des empfindlichen Elements, sowie des Vorverstärkers entsteht und deshalb ein Minimalsignal an IR-Strahlung vorliegen muss, welche bei dem hier benutzten Pyrometer bei 300 °C liegt und somit keine Temperaturen unter 300°C gemessen werden können. [38][9]

4.4 XPS-Aufbau

Die Röntgenphotoelektronenspektroskopie wird genutzt um die chemische Zusammensetzung einer Probe bestimmen. Hierbei werden Röntgenstrahlen auf die Probe gerichtet und mithilfe des äußeren Photoeffekts Elektronen aus der Probe gelöst. Die Elektronen weisen eine kinetische Energie von der Röntgenenergie abzüglich der Austrittsenergie und Bindungsenergie auf. Da jedes Element und jede Schale eine andere Bindungsenergie haben, aber alle mit derselben Röntgenenergie gelöst werden, weisen die Elektronen unterschiedliche kinetische Energien auf und können anhand dieser auf die entsprechenden Elemente zurückgeführt werden.

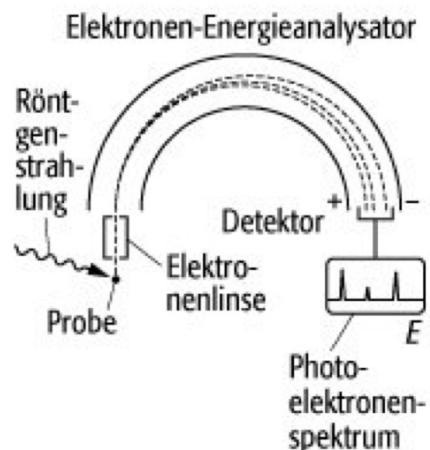


Abbildung 4.5: XPS Aufbau aus [39].

Dies geschieht, indem die Elektronen durch einen Halbkugelförmigen Kondensator geleitet werden, nachdem sie vorher mit einem Linsensystem fokussiert wurden. In diesem Kondensator werden sie dann durch das elektrische Feld abgelenkt. Ist die kinetische Energie aber größer als die elektrische, werden die Elektronen

nicht stark genug abgelenkt und werden gegen den äußeren Teil des Kondensators beschleunigt. Ist die Energie hingegen zu gering, werden sie stärker vom E-Feld angezogen und werden auf die innere Halbkugel beschleunigt. Somit kommen nur die Elektronen mit der passenden kinetischen Energie am Detektor an (Vgl. Abb. 4.5). Um nun eine Messung der Probe durchzuführen, werden unterschiedliche Spannungen am Kondensator angelegt, wodurch unterschiedliche Energien gemessen werden und somit eine Messung der Energien der Photoelektronen gegen ihre Häufigkeit ermöglicht wird. Zuletzt werden die unterschiedlichen Ausschlägen des Energie-Häufigkeit-Diagramms den entsprechenden Elementen zugewiesen, da die Energien der Elemente bereits bekannt sind.

Diese Messmethode ist oberflächensensitiv, das bedeutet, dass Atome in den tieferen Schichten weniger Ausschläge geben als die in den höheren Schichten. Dies liegt am Prinzip der freien mittleren Weglänge und der Universalkurve. Hierbei gilt für jede Energie eines Elektrons eine maximale Weglänge, die sie zurücklegen kann, bis das Elektron nicht mehr aus der Probe heraus gelangt. Daraus resultiert, dass mehr Elektronen der Oberfläche aus der Probe gelangen als aus tieferen Schichten. Dadurch lässt sich das Verhältnisse der Elemente nicht aus der Anzahl an ausgetretenen Elektronen schlussfolgern [24].

4.5 Propenpräperation

Aus einem vicinalen Si(111)-Wafer werden die Substratproben, welche die Maße 5 mm x 12 mm haben, geschnitten und nacheinander mit destillierten Wasser, Aceton und Isopropanol in Ultraschallbad gereinigt. Durch diesen Reinigungsschritt werden größere Molekülketten von der Probe entfernt. Um zu verhindern, dass sich Fette auf der Probe oder dem Probenhalter sammeln, werden diese nur mit Handschuhen berührt. Zum Schutz vor Nickelkontamination des Siliciums, welches zu einer $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ Überstruktur anstelle der 7x7- Struktur führen würde, wird die Probe nur mit Kunststoffpinzetten berührt und transportiert. [35]

Daraufhin wird das Silicium auf dem Probenhalter befestigt und über die Messkammer in die Präparationskammer überführt. Zunächst wird die Probe mithilfe einer Direktstromheizung über Nacht auf 650 °C geheizt, um die Kohlenstoffadsorbate zu entfernen.

Darauf folgt dann das sogenannte “Flash annaeling”, um die Siliciumoxide von der Oberfläche zu entfernen. Hierbei wird die Probe für 2 bis 5s auf 1150 °C geheizt, bevor sie dann für 30s auf 830 °C gehalten wird. Dieses Verfahren wird insgesamt 8 Mal wiederholt. Wichtig ist hierbei, dass der Druck nicht 1×10^{-8} mBar

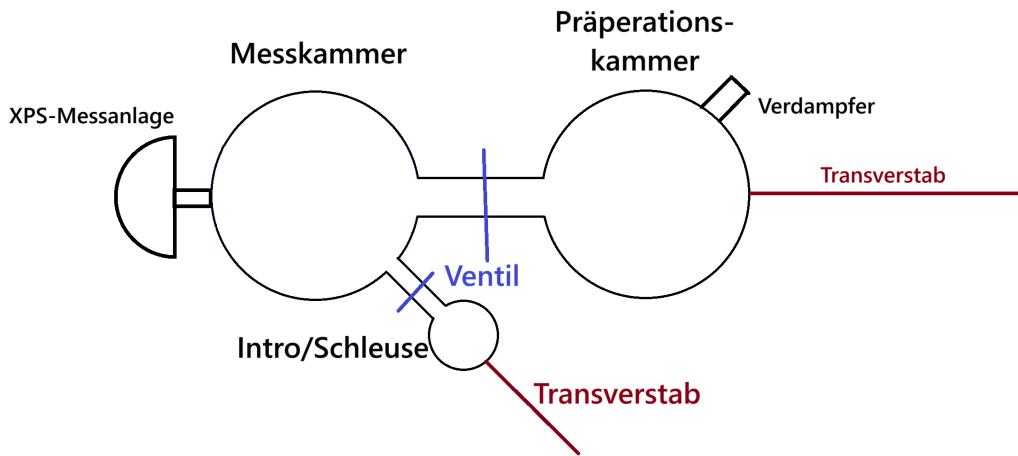


Abbildung 4.6: Vereinfachter Aufbau der UHV-Kammern

überschreiten darf, da sich sonst eine Molekülwolke über der Probe bildet, durch die sich die Adsorbate erneut auf der Probe absetzten. Nach dem Flashen wird die Probe langsam ($5^{\circ}\text{C}/\text{s}$) bis auf 750°C herabgekühlt, worauf sie dann mit $25^{\circ}\text{C}/\text{s}$ wieder auf Zimmertemperatur gebracht wird.

Sind diese Schritte der Reinigung erfüllt, wird das Silicium mit Calciumfluorid mittels RMBE (reactive molecular beam epitaxy) bedampft. Hierbei wird der Probenhalter möglichst nahe am Verdampfer gebracht, der mittig auf die Probe ausgerichtet wird. Dann wird die Probe wieder mit Direktstrom auf 600°C erhitzt und der Verdampfer wird langsam auf 1180°C erhitzt, da der Sublimationspunkt von CaF₂ bei 1100°C liegt. Auch hierbei wird darauf geachtet, dass der Druck nicht über 10^{-8} mBar gerät.[17]

Bei jeder Temperaturmessung der Probe wurde ein Pyrometer benutzt, welches anhand von Wärmestrahlung die Temperatur der Probe erkennt und vorher an der Maschine mithilfe eines Thermocouples kalibriert wurde. Diese Kalibrierung wurde zudem über eine Messung des Schmelzpunktes kontrolliert. Dies wird als nächstes betrachtet.

5 Ergebnisse

5.1 Kalibrierung Pyrometer

Die Temperaturmessung der Probe anhand des verbauten Thermocouples stellte sich zu Beginn als nicht umsetzbar heraus, da der Abstand zwischen Probe und Couple zu groß ist und deswegen die Temperatur zu niedrig ist, was sich dadurch erkennbar macht, dass bei glühender Probe nur 160 °C angezeigt wird. Deshalb wird ein Pyrometer zur Messung der Temperatur genutzt. Hierbei stellte sich heraus, dass das Pyrometer an der Stelle, bei der in der Theorie die Temperatur an höchsten sein müsste, zu niedrige Temperaturen anzeigte. Zum Beispiel schmolz die Probe bei einer Temperatur von knapp 1080 °C laut Pyrometer. Deshalb wurde der Probenhalter komplett abgemessen und der Temperaturverlauf in Abhängigkeit der anliegenden Spannung und des fließenden Stroms dokumentiert, um das Pyrometer korrekt ausrichten zu können. Hierbei ergab sich zu der Verlauf, wie im Bild 5.1 zu sehen:

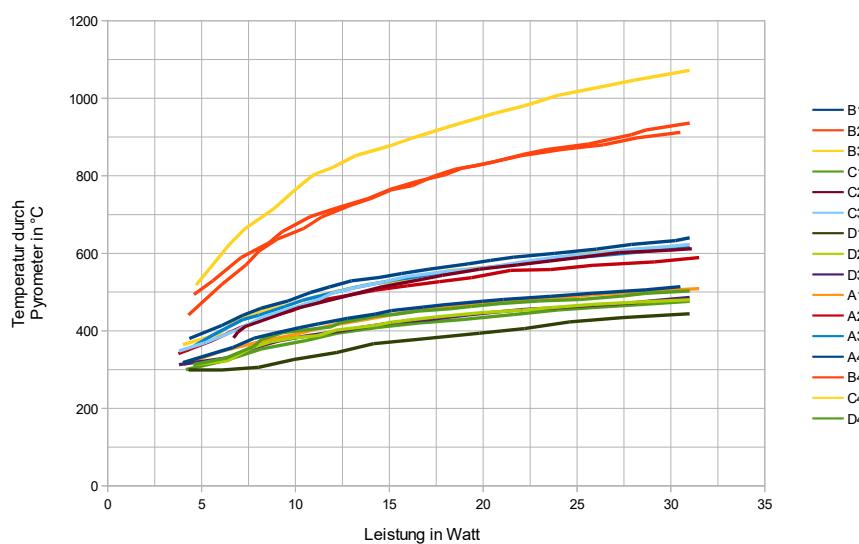


Abbildung 5.1: Temperatur gemessen durch das Pyrometer auf der entsprechenden Region, aufgetragen gegen die anliegende Leistung.

5 Ergebnisse

Wobei die Regionen wie im Bild 5.2 definiert sind:

Die Regionen überlappen sich hier zum Teil, so liegt A2 zum Beispiel zur Hälfte in A1 und zur anderen Hälfte in A3. Für diese Unterteilung wurde sich bewusst entschieden, da die Verläufe nach vorherigen groben Abmessungen von Oben nach Unten feiner sind, als von Rechts nach Links.

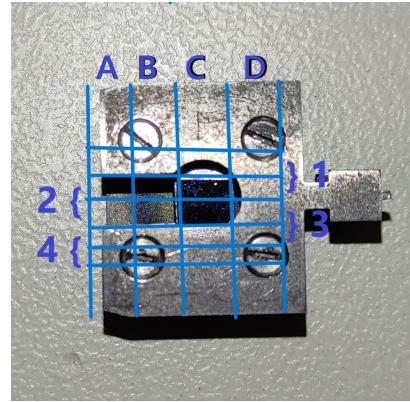


Abbildung 5.2: Unterteilung des Probenhalters.

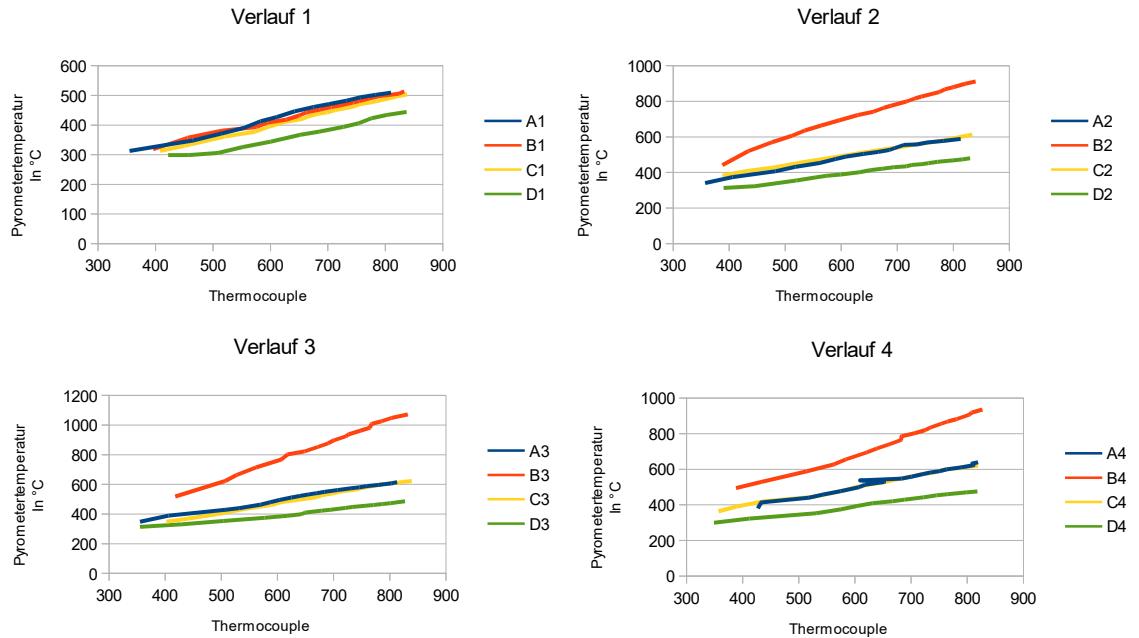


Abbildung 5.3: Pyrometertemperatur gegen Temperatur gemessen durch das Thermocouple unterteilt in die Horizontalen.

Es ist ersichtlich, dass die Regionen B2, B3 und B4 wärmer sind als der Rest und besonders B3 ist wärmer als der Rest der Regionen. Laut Rasterung sollte aber keine dieser Regionen hohe Temperaturen aufweisen, da sie nicht auf dem Silicium liegen. Anhand dieser B-C Verschiebung konnte ein Fehler in der Optik des Pyrometers vermutet werden, wodurch mit dem Pyrometer 5 mm weiter links von der Probe gemessen werden muss, um die korrekte Temperatur zu erhalten.

5.1 Kalibrierung Pyrometer

Zudem sind bei den Messungen Symmetrien festzustellen. Die erste Symmetrieebene verläuft senkrecht durch die B-Regionen und sorgt somit dafür, dass die Verläufe der Temperaturdiagramme von A- und C-Regionen auf einander liegen, wenn sie auf derselben Horizontalen liegen(Vgl. Abb. 5.3).

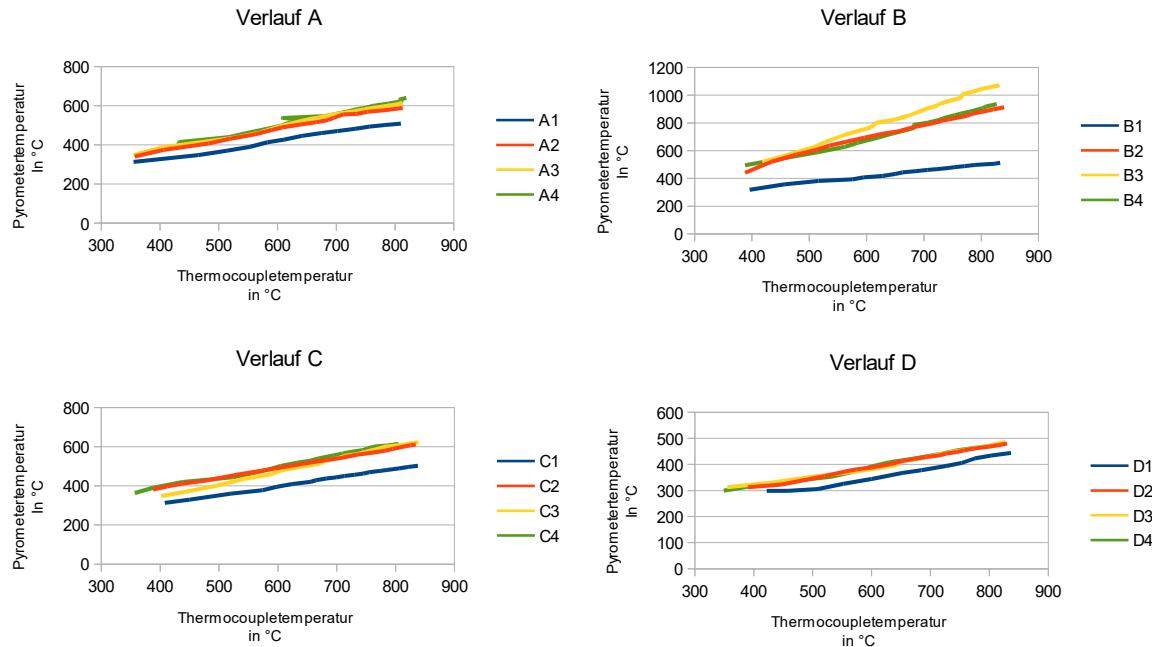


Abbildung 5.4: Pyrometertemperatur gegen Temperatur am Thermocouple; unterteilt in die Vertikalen.

Ein ähnliches Phänomen lässt sich auch in der Vertikalen durch die 3er-Regionen feststellen. Nur ist es hier aufgrund der feineren Rasterung bei allen Verläufen bis auf B weniger deutlich.(Vgl. Abb. 5.4)

5 Ergebnisse

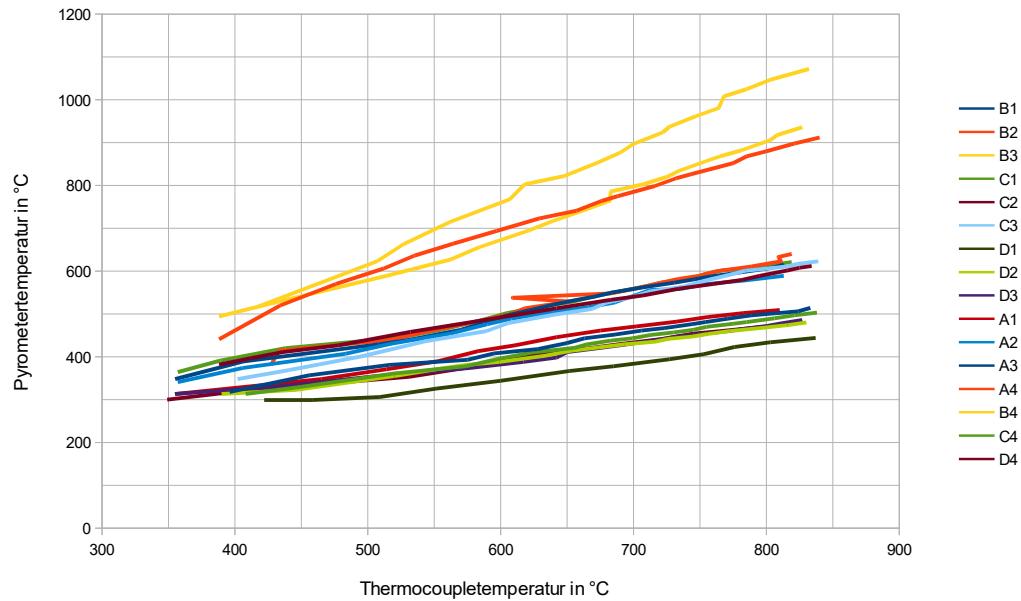


Abbildung 5.5: Thermocouple- gegen Pyrometertemperatur.

Aufgrund dieser Symmetrien und dem Gesamtbild wird der heißeste Punkt in der Region B3 vermutet. Zum Vergleich der Messungen mit der tatsächlichen Temperatur wurde die Temperatur, welche am Thermocouple gemessen wurde, gegen die Temperatur aufgetragen, die mit dem Pyrometer gemessen wurde. Dadurch ergaben sich die Verläufe in Abbildung 5.5.

Hier stellt sich nun heraus, dass B2, B3 und B4 eine Steigung von über 1 haben. Dies bedeutet, dass die Probe nach Thermocouple kälter ist als die Wärmestrahlung vermuten lässt. Das zeigt, dass das Thermocouple nicht nah genug an der Probe war und somit zu niedrige Temperaturen ergibt. Um diese Theorie zu bestärken, wurden einerseits die Messungen von B3 und den anliegenden Regionen an eine logarithmische Funktion gefittet und die benötigte Leistung zum Schmelzen der Probe bestimmt. (siehe Tabelle 5.1)

| | A | B | C |
|---|----------------|----------|-------------|
| 2 | 9.627.173,57 W | 223,63 W | 6.836,27 W |
| 3 | 12.581,72 W | 97,51 W | 9.045,30 W |
| 4 | 10.404,57 W | 244,69 W | 13.493,99 W |

Tabelle 5.1: Da die Fits keine großen Abweichungen aufweisen, kann hierbei von einer Genauigkeit von $\pm 5\%$ ausgegangen werden.

Daraufhin wurde die Probe langsam erhitzt, bis sie durchgebrannt ist. Zum einen wurde dabei die Leistung aufgenommen und zum anderen mit dem Pyrometer in B3 gemessen. Dabei stellte sich heraus, dass die Probe bei 1398 °C laut Pyrometer und ungefähr 93 Watt schmilzt. Dies zeigt im Vergleich mit der Theorie [29], dass nur B3 als korrekte Region infrage kommen kann. Der Druck hat keinen ausreichenden Einfluss auf die Schmelztemperatur, um eine andere Regionen zu rechtfertigen.

Der Fehler bei der Ausrichtung des Pyrometers wird sich wahrscheinlich daraus ergeben, dass sich der Spiegel um wenige Grad verdreht haben könnte. Dadurch wird die IR-Strahlung nicht an der Stelle gemessen wird, auf welche das Pyrometer laut Optik ausgerichtet wird, da durch die Drehung des Spiegels eine Verschiebung stattfindet. Somit wird nun die Temperatur der Probe gemessen, indem in die Region B3 gezielt wird und in X- sowie Y-Richtung nach dem Maximum gesucht wird. Dieses Maximum wird dann der Probentemperatur entsprechen.

5.2 Positionierung Verdampfer

Da der Aufbau zur Bedampfung der Probe in dieser Konstellation vorher nicht verwendet wurde, muss die gleichmäßige Bedampfung der Probe kontrolliert werden. Die Probe wurde wie zuvor beschrieben präpariert und möglichst nah an den Verdampfer herangebracht, sowie zentral und parallel zu Verdampfer ausgerichtet. Nachdem der Verdampfer auf 1180 °C und die Probe auf 600°C aufgeheizt wurden, wird der Shutter geöffnet und die Probe für 5 Minuten bedampft. Nachdem dies erfolgt ist, wird der Shutter wieder geschlossen und sowohl Verdampfer als auch Probe langsam wieder auf Raumtemperatur abgekühlt. Um nun zu Prüfen wie die Probe bedampft wurde, sind mehrere XPS-Messungen an unterschiedlichen Stellen (vgl. Abb. 5.6) durchgeführt worden, die nun miteinander verglichen werden können.

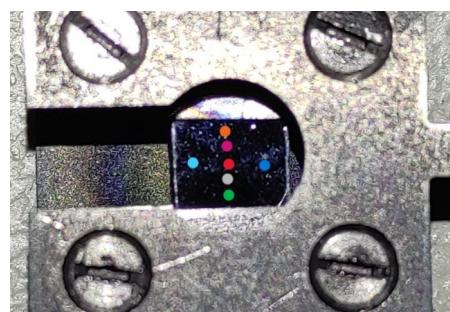


Abbildung 5.6: Messpunkte XPS.

5 Ergebnisse

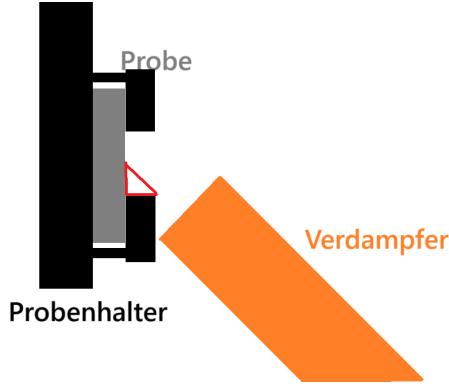


Abbildung 5.7: Skizze zum Verdampferaufbau

In Abbildung 5.8 wird deutlich, dass im unteren Bereich nicht ausreichend bedampft wurde. Dies lässt sich daran erklären, dass der Probenhalter eine Erhebung hat, die bei dem angewinkeltem Aufbau des Verdampfers dazu führt, dass der untere Teil der Probe überdeckt wird und somit nicht bedampft wird (Vgl. Abb. 5.7).

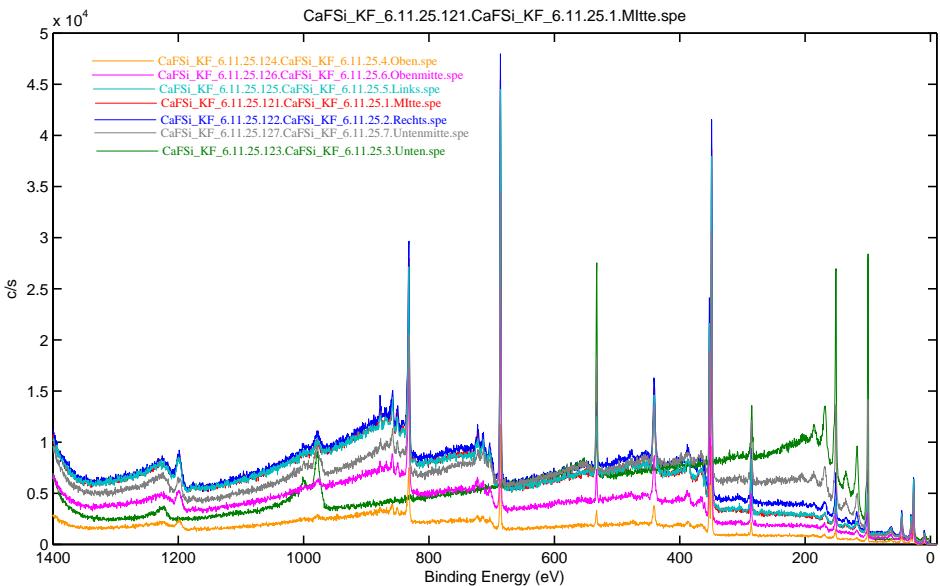


Abbildung 5.8: Messung von 1400 eV bis 0 eV bei unterschiedlichen Punkten.

Im Zentrum der Probe und horizontal dazu unterscheiden sich die Punkte nicht und entsprechen den theoretisch erwarteten Verläufen. Oberhalb der Probe nimmt die Intensität der Ca- und F-Atome wieder ab, dies lässt sich einerseits mit dem Temperaturgradienten der Probe und andererseits mit dem größeren Abstand zum

Verdampfer erklären, da der Verdampfer schräg von unten (ca. 45°) bedampft und somit die oberen Bereiche der Probe weiter weg sind als die Unteren. Für die folgenden Messungen wird somit die Mitte der Probe als Messpunkt genutzt, einerseits weil dort die Abweichung minimal ist und somit leichte Ungenauigkeiten bei der Position des Messpunktes keinen großen Einfluss auf die Messungen haben. Dazu kommt, dass in dem zentralen Bereich die Menge an Calcium und Fluor groß ist und somit dieser für die kommenden Messungen vorteilhaft ist, da die Silicium-Peaks aufgrund dessen, dass das Silicium keinen Kontakt zur Luft hat, weniger relevant sind.

5.3 Verunreinigung von CaF_2

Um nun zu überprüfen in welcher Form die Probe an der Luft verschmutzt wird, wird eine Probe wie beschrieben präpariert und direkt eine In-Situ-Messung durchgeführt, hierbei handelt es sich um eine Messung bei der sich die Probe durchgehend im Vakuum befindet. Diese Messung gilt als Vergleichsmessung, um festzustellen, welche Elemente durch die Luft auf die Probe gelangt sind und welche bereits beim Bedampfen auf dem Substrat waren. Danach wird die Probe für bestimmte Zeiten an der Luft gelassen, um festzustellen, in welchen Zeitraum sich welche Elemente auf der Probe absetzen. Um diese Elemente zu identifizieren, wird jedes Mal eine XPS-Messung mit der Probe durchgeführt. Zur Kalibrierung der Messung wurde der Si2p-Peak verwendet, da Silicium bei jeder Messung in ausreichender Menge und in bekannter Form vorliegt.

| ID | Zeit zur letzten Messung | Gesamte Zeit in Luft | Farbe |
|-----|--------------------------|----------------------|----------|
| 102 | 0 | 0 | Rot |
| 106 | +0:02 | 0:02 | Blau |
| 108 | +0:30 | 0:32 | Grün |
| 110 | +3:00 | 3:32 | Gelb |
| 112 | +3:00 | 6:32 | Cyan |
| 114 | +5:30 | 12:02 | Magenta |
| 116 | +24:35 | 36:37 | Grau |
| 118 | +71:35 | 108:12 | Braun |
| 120 | +161:07 | 269:19 | Neongrün |
| 128 | +403:57 | 673:16 | Schwarz |

Tabelle 5.2: Abstände zwischen den Messungen mit einer Messgenauigkeit von maximal $\pm 30\text{ sek}$

5 Ergebnisse

Die Zeit, in der die Probe im UHV ist, wird nicht mit in die Zeit eingerechnet, auch hier ist zwar in der Theorie eine Verunreinigung der Probe möglich, stellt sich aber aufgrund des Drucks als höchst unwahrscheinlich dar. Die unterschiedlichen Messungen fanden zu den Zeiten in Tabelle 5.2 statt.

Besonders relevant ist, dass der zeitliche Abstand zwischen den Messungen nicht linear ist und die Probe somit auch offensichtlich nicht linear wächst, sondern die Wachstumsgeschwindigkeit langsam abnimmt.

Bei diesen Messungen sieht man die Veränderung der Oberfläche der Probe. Es wird sich speziell auf die Elemente Stickstoff, Calcium, Fluor, Silicium, Kohlenstoff und Sauerstoff konzentriert. Diese ergeben sich einerseits aus den Messungen als relevant, andererseits - wie bei Stickstoff - aus vorherigen Fragestellungen anderer Experimente bzw. Arbeiten, bei denen die Herkunft des Stickstoffs auf einer Probe nicht deutlich zugeordnet werden konnte. Um die Peaks korrekt zuzuordnen, werden die Quellen [12] und [23] genutzt, wobei bei den hier gemessenen Werten von einer Genauigkeit von 0,4 eV ausgegangen wird, da dies der Abstand zwischen den unterschiedlichen Energien ist, bei denen die Röntgen-Elektronen gemessen wurde.

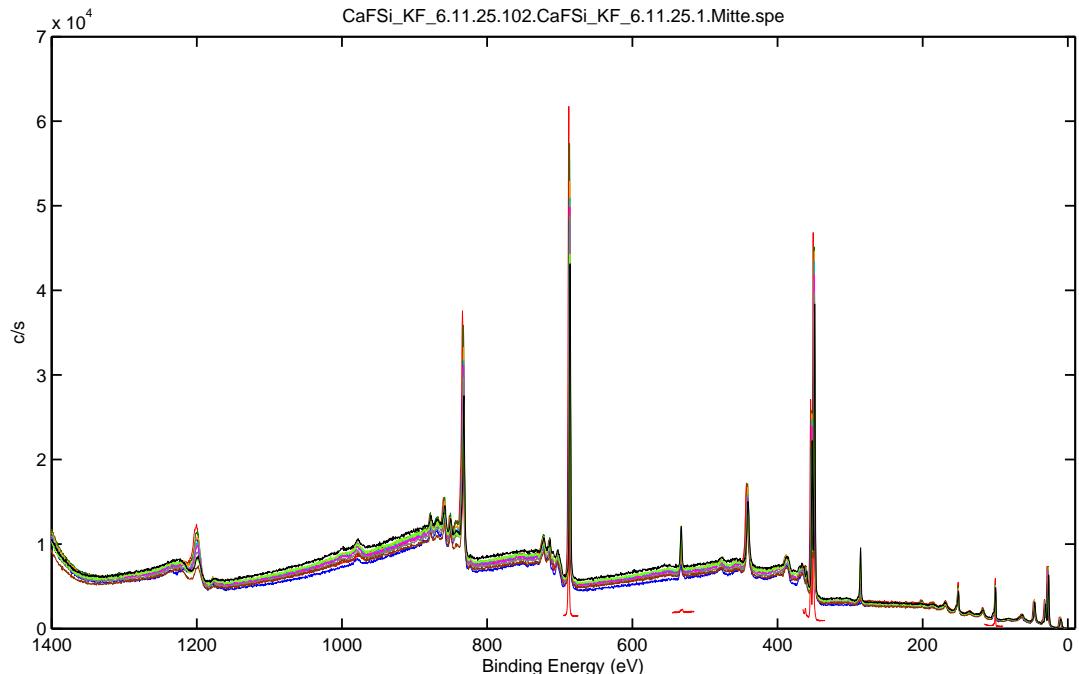


Abbildung 5.9: Volles Survey der Unterschiedlich verschmutzten Proben.

5.3 Verunreinigung von CaF_2

Bereits in Abbildung 5.9 werden die Peaks von Fluor (ungefähr 686 eV sowie 835 eV wobei es sich hier um das KLL-Auger-Elektron handelt) und dem Calcium-Doppelpeak (bei ungefähr 350 eV) deutlich, wobei dieser eher wie ein einzelner Peak aussieht und der Calcium-Peak bei 430 eV. Die Silicium-Peaks beginnen ab 100eV und sind ebenfalls zu erkennen, wie auch die Peaks bei 530eV (Sauerstoff) und bei ungefähr 280 eV (Kohlenstoff). Den Peak, der nicht erkennbar ist, ist der von Stickstoff, der bei ungefähr 400 eV zu erwarten ist. Im Folgenden werden diese Peaks genauer betrachtet.

Stickstoff

Der Stickstoff ist in diesen Messungen von Relevanz, da er bei anderen Messungen mit denselben Elementen, aber in einer anderen UHV-Kammer entdeckt wurde und nicht genau auf eine Ursache zurückgeführt werden konnte. Um auf diese Frage eingehen zu können, wurde die Stickstoffregion bei diesem Aufbau genauer betrachtet und hat dabei Abbildung 5.10 ergeben.

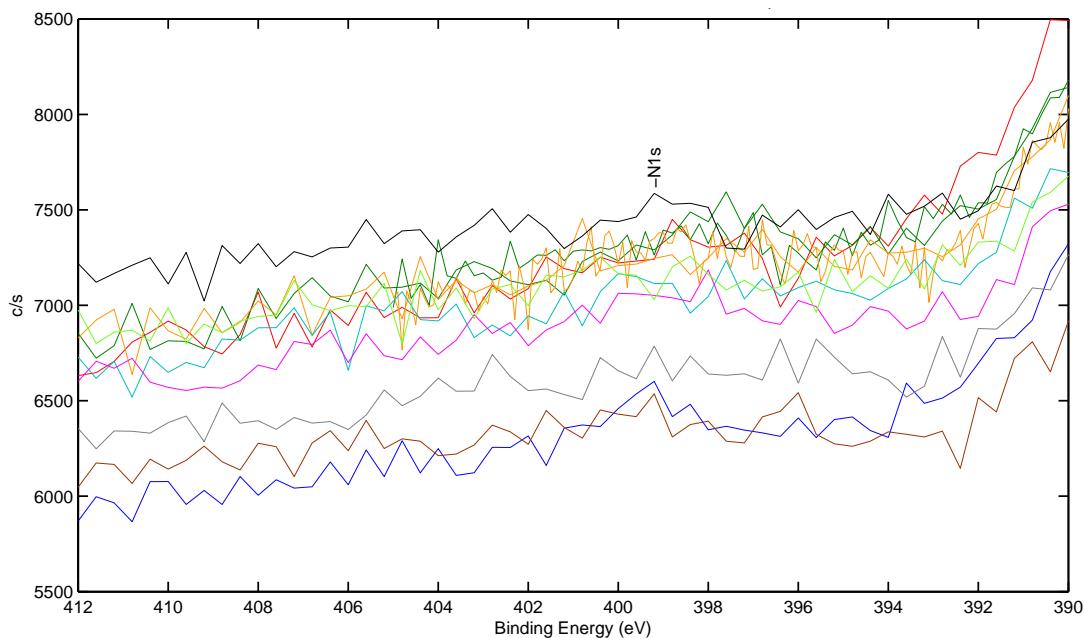


Abbildung 5.10: XPS-Messung in der Region von 412 eV bis 390 eV in der ein Stickstoffpeak vorliegen müsste.

5 Ergebnisse

Die Messung zeigt, dass sowohl bei der In-Situ Messung, als auch nach mehreren Wochen Luftkontakt keine Kontaminierung mit Stickstoff stattgefunden hat und somit dieses Element nicht aus der Luft stammen kann und auch nicht bei der Bedampfung in der Kammer entstanden sein kann. Der Anstieg bei 390 eV ist hier nicht auf den Stickstoff, sondern auf den Calcium-Doppelpeak zurückzuführen, der sich dort schon andeutet.

Calcium

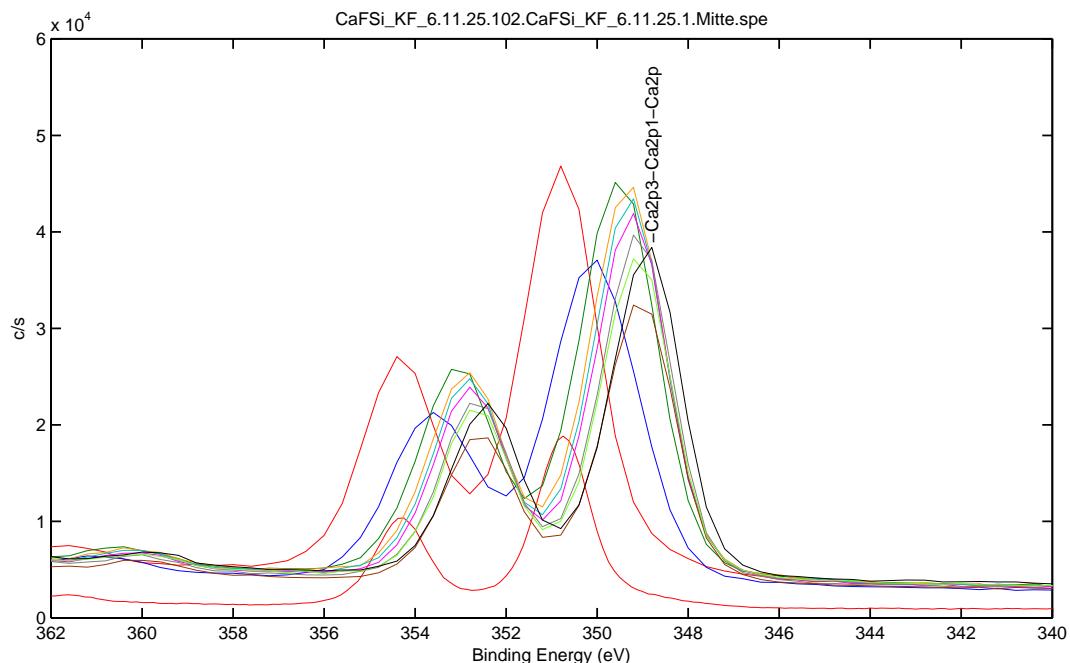


Abbildung 5.11: Ca2p Peaks der Probe nach unterschiedlichen Zeiten.

Bei dem Calcium-Peak (Vgl. Abb. 5.11) lässt sich feststellen, dass bei den ersten beiden Messungen ein Versatz zu den anderen Messungen festzustellen ist, hierbei handelt es sich um einer Verschiebung der Bindungsenergie aufgrund von Ladung auf bzw. in der Schicht, die genauere Erklärung dafür wird beim Fluor herangeführt. Im Allgemeinen lassen sich hier einige Schwankungen in der Intensität der unterschiedlichen Messungen feststellen, die auf Messfehler der XPS-Anlage und leicht unterschiedliche Messpunkte zurückzuführen sind. Trotz dieser Fehler fällt auf, dass das Calcium mit der Zeit immer schwächer wird. Von einer Abnahme des Calciums ist hierbei aber nicht auszugehen, sondern eher davon, dass sich eine Schicht über dem Calciumfluorid bildet, die dafür sorgt, dass weniger Elektronen des Calciums den Detektor erreichen.

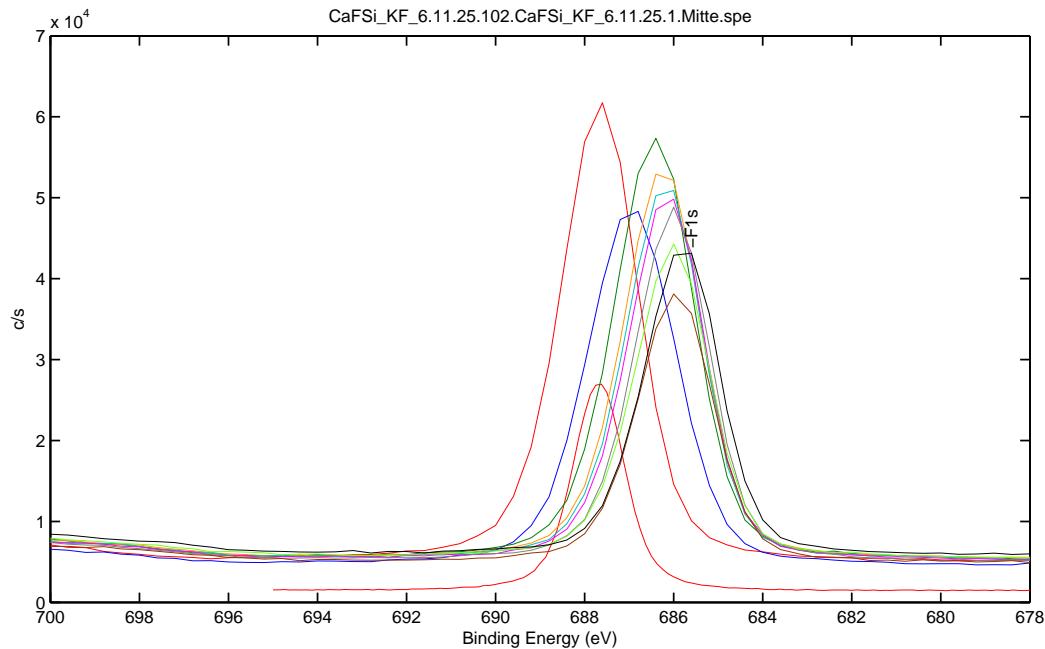
Fluor

Abbildung 5.12: F1s Peak der Probe nach unterschiedlichen Zeiten.

Wie beim Calcium nimmt auch beim Fluor die Intensität mit der Zeit ab (Vgl. Abb. 5.12). Diese Abnahme des Fluors lässt sich ähnlich erklären wie beim Calcium und ist der Überdeckung durch die neugebildete Schicht geschuldet.

5 Ergebnisse

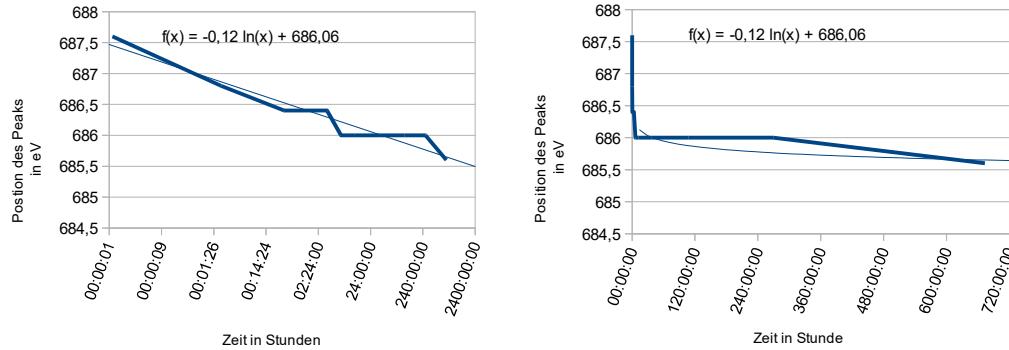


Abbildung 5.13: Verschiebung der Bindungsenergie in Abhangigkeit zur Zeit an der Luft.(Links logaritmische X-Achse; Rechts Lineare X-Achse)

Es ist ersichtlich, dass auch hier zu Beginn eine Verschiebung des Peaks aufgrund von Ladung vorliegen muss. Nach dem Kontakt mit der Luft verschiebt sich der Peak aber innerhalb weniger Minuten auf seine korrekte Bindungsenergie, wodurch die Theorie naheliegt, dass die Ladung durch Kontakt mit der Luft neutralisiert wird, oder die Adsorbate dafur sorgen, dass sich das CaF₂ nicht auflt (Vgl. Abb. 5.13).

| ID | Position der Peaks | | | |
|-------|--------------------|----------|----------|----------|
| | F KLL | F 1s | Ca 2s | Ca 2p |
| 102 | 860 eV | 687,6 eV | 442,4 eV | 350,8 eV |
| 106 | 859,6 eV | 686,8 eV | 441,6 eV | 350 eV |
| 108 | 858,4 eV | 686,4 eV | 441,2 eV | 349,6 eV |
| 110 | 858,4 eV | 686,4 eV | 441,2 eV | 349,2 eV |
| 112 | 858,4 eV | 686 eV | 440,8 eV | 349,2 eV |
| 114 | 858,4 eV | 686 eV | 440,8 eV | 349,2 eV |
| 116 | 858,4 eV | 686 eV | 440,8 eV | 349,2 eV |
| 118 | 858,4 eV | 686 eV | 440,8 eV | 349,2 eV |
| 120 | 858,4 eV | 686 eV | 440,8 eV | 349,2 eV |
| Final | 858 eV | 685,6 eV | 440,8 eV | 348,8 eV |

Tabelle 5.3: Position der Peaks von F und Ca mit einer Messgenauigkeit von $\pm 0,2$ eV.

Aus den Tabellen 5.3 und 5.4 lsst sich entnehmen, dass die Abstnde zwischen den Peaks ziemlich konstant bleiben und nur mit 0,4 eV vom Mittelwert abweichen, diese Schwankung ist unter Anbetracht der Messgenauigkeit von

5.3 Verunreinigung von CaF_2

0,4 eV vollkommen akzeptabel. Dies spricht für eine Ladung des gesamten CaF_2 , was davon unterstützt wird, dass die Peaks des Siliciums unter Anbetracht der Messgenauigkeit bei derselben Energie liegen und somit eine Verschiebung der gesamten Messdaten nicht als Begründung infrage kommt.[5]

| Differenz der Peaks | | | | | |
|---------------------|-------------|-------------|------------|------------|-------------|
| F KLL-F 1s | F KLL-Ca 2s | F KLL-Ca 2p | F 1s-Ca 2s | F 1s-Ca 2p | Ca 2s-Ca 2p |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,8 eV | 418 eV | 509,6 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172 eV | 417,2 eV | 508,8 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172 eV | 417,2 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 337,2 eV | 92 eV |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,4 eV | 417,6 eV | 509,2 eV | 245,2 eV | 336,8 eV | 91,6 eV |
| 172,4 eV | 417,2 eV | 509,2 eV | 244,8 eV | 336,8 eV | 92 eV |

Tabelle 5.4: Differenz der F- und Ca- Peaks, mit einer Messgenauigkeit von $\pm 0,4$ eV.

Zusätzlich stellt sich der Peak des Ca LMM als schwer definierbar heraus, da er sich über fast 10 eV erstreckt und somit ein genauer Wert als Peak nicht zu definieren ist. Somit ergibt sich eine Schwankung der Differenzen zu den anderen Peaks und eine Messgenauigkeit von ungefähr 5 eV. Deshalb wurde dieser Peak hier nicht betrachtet. (Vgl. Abb. 5.14)

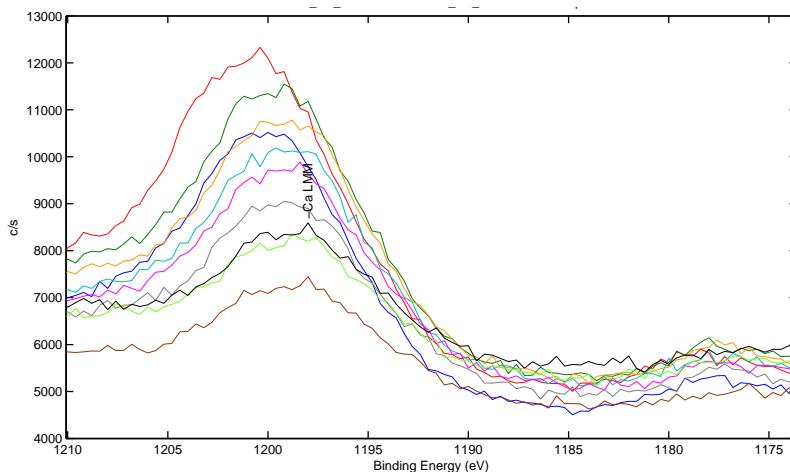


Abbildung 5.14: Peak bei 1200 eV, zurückzuführen auf Ca LMM.

5 Ergebnisse

Von Zusätzlicher Interesse der Zusammensetzung der Probe ist das Verhältnis zwischen Fluor und Calcium, wobei dieses bei ungefähr 2/1 liegen müsste. Aufgrund der Grenzschicht zum Silicium liegt auch CaF vor, wodurch das Verhältnis leicht abgeschwächt werden sollte. Die Atomaren Verhältnisse wurden durch die Analysesoftware der XPS-Anlage durchgeführt, bei der die Wirkungsquerschnitte mit der Intensität multipliziert werden und somit die atomaren Verhältnisse bestimmt werden können, solange die Elemente gleich tief liegen, da die effektive Weglänge nicht mit in Anbetracht gezogen wird.

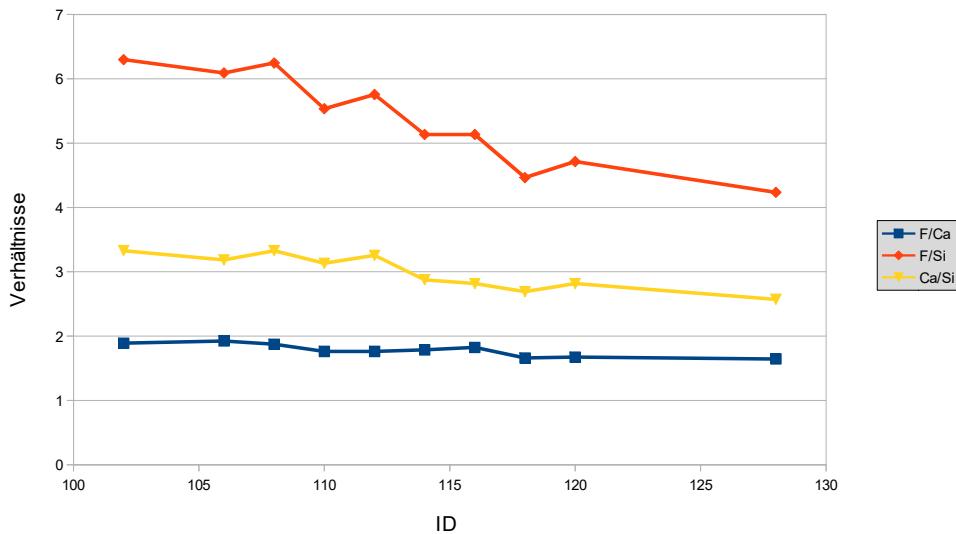


Abbildung 5.15: Atomare Verhältnisse F/Ca, F/Si und Ca/Si aus der Analysesoftware der XPS-Anlage.

Die Grafik 5.15 zeigt, wie zu Beginn ein Verhältnis von 1,9/1 vorliegt, welches sich unter Anbetracht der Grenzschicht als realistisch darstellt. Jedoch nimmt das Verhältnis mit der Zeit zu 1,65/1 ab, da die Zunahme von Calcium durch die Luft nicht möglich ist, müsste das bedeuten, dass Fluor verloren geht. Um diese Theorie weiter zu bestätigen, wurden die Verhältnisse von Calcium und Fluor zum Silicium betrachtet. Hierbei sollte die Veränderung der beiden Verhältnisse nahezu gleich sein, da sie in derselben Schicht liegen und durch die Überdeckung des CaF₂ auch gleichermaßen geschwächt werden müssten. Jedoch stellt sich auch hier heraus, dass der Fluor um einiges schneller fällt als das Calcium. Somit ist die Theorie bestärkt, dass der Fluor aus der Schicht entfernt wird. Hierbei ist es wahrscheinlich, dass durch die ionisierende Strahlung Fluor von der Oberfläche gelöst wird und später durch Moleküle aus der Luft ersetzt wird [19]. Dies kann auch zur Erklärung der Ladung des CaF₂ hergezogen werden.

Silicium

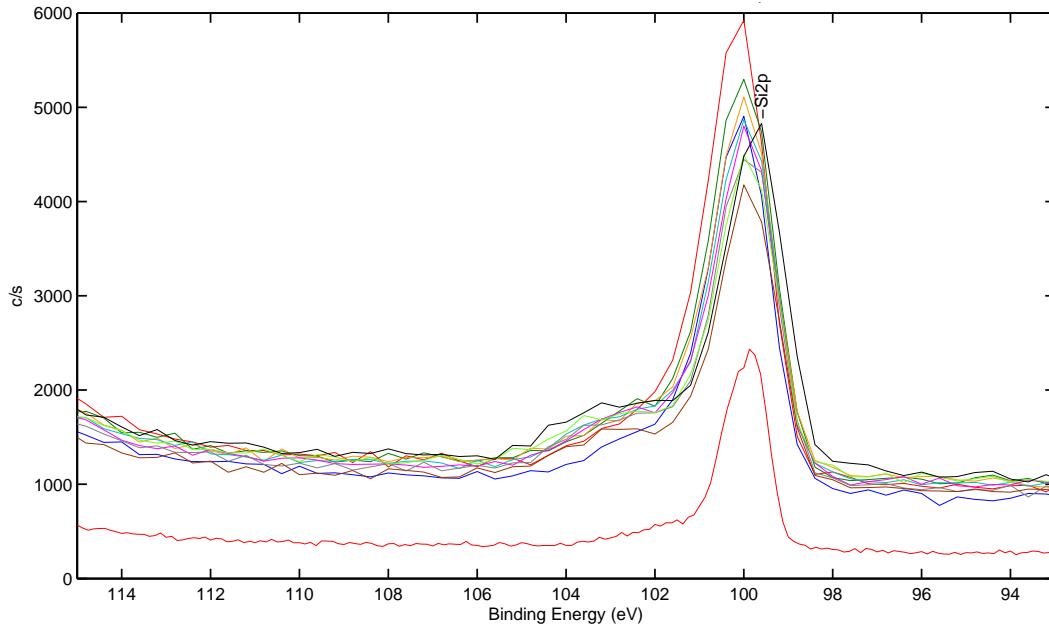


Abbildung 5.16: Si2p Peak der Probe zu unterschiedlichen Zeitpunkten.

Beim Silicium sind ähnliche Muster wie bei Calcium und Fluor festzustellen. Der Versatz zwischen den Messungen ist hier jedoch kaum erkennbar. Im Allgemeinen ist hier zu erwähnen, dass der Silicium-Peak um einiges schwächer vorliegt, als bei den anderen beiden Stoffen (Vgl. Abb. 5.16). Dies liegt hier aber daran, dass schon zur ersten Messung eine dicke Schicht in Form des Calciumfluorids auf dem Silicium liegt. Aus diesem Grund wirkt sich die neue Schicht auch um einiges schwächer auf die Intensität des Peaks aus und dieser nimmt nur langsam ab, jedoch ist dieses Verhalten auch hier zu erkennen. Links vom Hauptpeak, dessen Energie klar auf reines Silicium schließen lässt, sieht man eine weitere leichte Erhebung, welche sich nach [23] auf Siliciumdioxid, welches bei der Reinigung nicht vollständig entfernt wurde, schließen lässt, da die vierfach positive Ladung des Siliziums dazu führt, dass sich schwieriger Elektronen lösen lassen. Beim Sauerstoff ist dies zwar nicht zu sehen, dies wird aber der Konzentration vom Siliciumdioxid geschuldet sein, welches hier schon schwach ist. Jedoch spricht für das Siliciumdioxid, dass es bei späteren Messungen minimal intensiver wird, weil wahrscheinlich Sauerstoff in die Probe eindringen konnte.

5 Ergebnisse

Sauerstoff

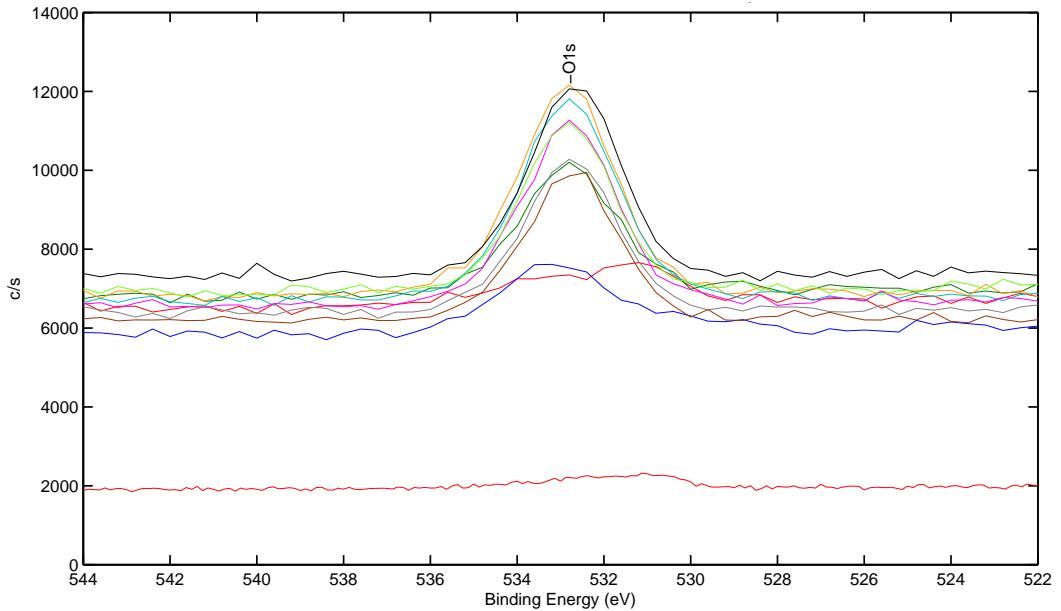


Abbildung 5.17: O1s Peaks der Probe zu Unterschiedlichen Zeitpunkten.

Anhand des Sauerstoff-Peaks ist erkenntlich, dass der Sauerstoff eines der Elemente aus der neuen Schicht darstellen müssen. Die Energie liegt hier bei 535 bis 531 eV, womit es sich vor allem um C-O-Bindungen handelt. Um welche Form von C-O-Bindung es sich handelt, ist hier nicht genauer zuzuordnen, aber das lässt sich mithilfe des Kohlenstoff-Peaks konkretisieren. Bei der ersten Messung sieht man eine kleine Erhebung zwischen 532 und 531 eV, welche man auf Wasser zurückführen kann, welches vorher bei der Reinigung nicht vom Substrat entfernt wurde [16]. Auffallend ist zudem, dass es beim Sauerstoff zu einer Art Sättigung kommt. Dies lässt sich daraus schließen, dass der Peak der vierten Messung (3,5 Stunden) nicht mehr überschritten wird und somit kaum bis kein Sauerstoff mehr angelagert wird (Vgl. Abb. 5.17). Da die Schicht noch nah an der Oberfläche liegt, ist es äußerst unwahrscheinlich, dass die Tiefe der Schicht hier bereits an der Ähnlichkeit der Peaks schuld ist und die Schicht somit doch noch wächst und die tieferen Sauerstoffatome nicht mehr gemessen werden.

Kohlenstoff

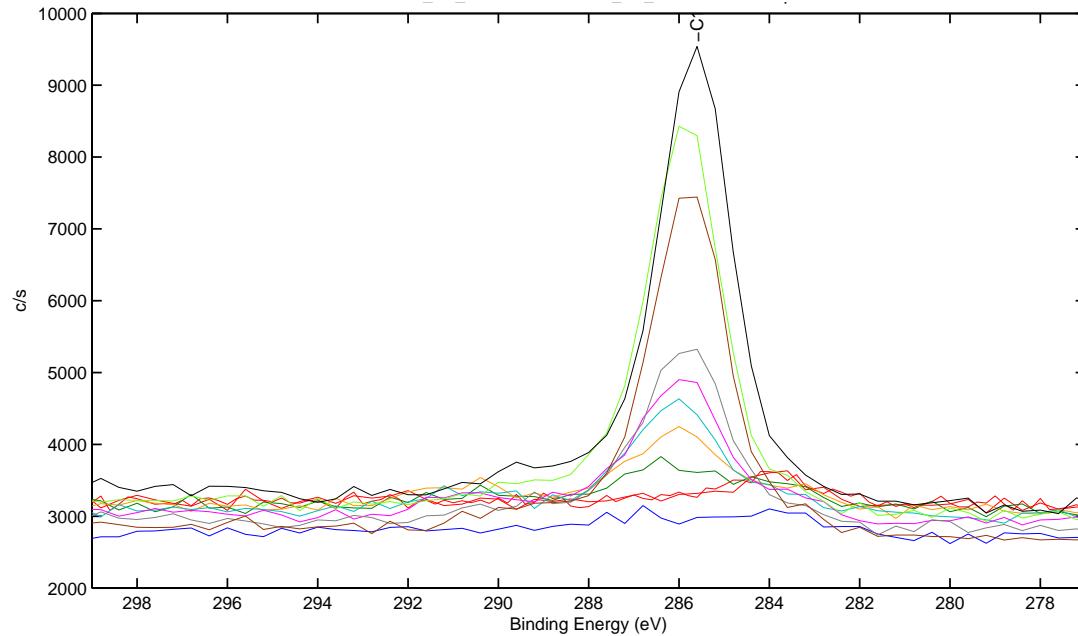


Abbildung 5.18: C1s Peak der Probe bei unterschiedlichen Zeiten.

Im Gegensatz zum Sauerstoff, wächst der Kohlenstoff permanent, was darauf schließen lässt, dass die Schicht aus Molekülen der Luft langsam weniger Sauerstoff enthält und immer mehr zu einer reinen Kohlenstoffschicht wird. Dafür spricht auch, dass der Peak leicht von 286 eV (C-O) immer mehr in Richtung von 284,8 eV verschiebt (C-C;C-H) (Vgl. Abb. 5.18). Diese Theorie wird durch den Sauerstoff bestätigt, welcher mit der Zeit nicht mehr gewachsen ist und somit bestätigt, dass weniger C-O Bindungen hinzukommen. Um den Verlauf genauer zu beschreiben, kann man die Positionen des Kohlenstoff-Peaks zwischen den unterschiedlichen Messungen vergleichen, wobei die erste Messung wegen später genannten Gründen nicht beachtet wird.

| C-Peaks | 106 | 108 | 110 | 112 | 114 | 116 | 118 | 120 | 128 |
|----------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|-------|
| Bindungenergie in eV | 286,8 | 286,4 | 286,0 | 286,0 | 286,0 | 285,6 | 285,9 | 286 | 285,6 |

Tabelle 5.5: Position der C1s-Peaks mit einer Messgenauigkeit von $\pm 0,2$ eV.

Die Tabelle 5.5 zeigt eine Verschiebung des Peaks, welcher aber damit begründet ist, dass die beiden unterliegenden Peaks (einmal zu C-O-Bindungen und zu C-C-Bindung) unterschiedlich schnell wachsen, dies lässt sich besonders gut beweisen,

5 Ergebnisse

wenn man die Messungen in die unterschiedlichen Peaks zerlegt und versucht einen passenden Fit zu erstellen. Hierbei sieht man wie sowohl der C-O als auch der C-C Peak zwar wachsen, aber unterschiedlich schnell. Wodurch auch der Unterschied zur ladungsbedingten Verschiebung wie beim CaF₂ deutlich wird, wo bei der Bindungsenergie des Peaks der ersten Messung, bei der letzten Messung keinen Ausschlag mehr vorliegt.

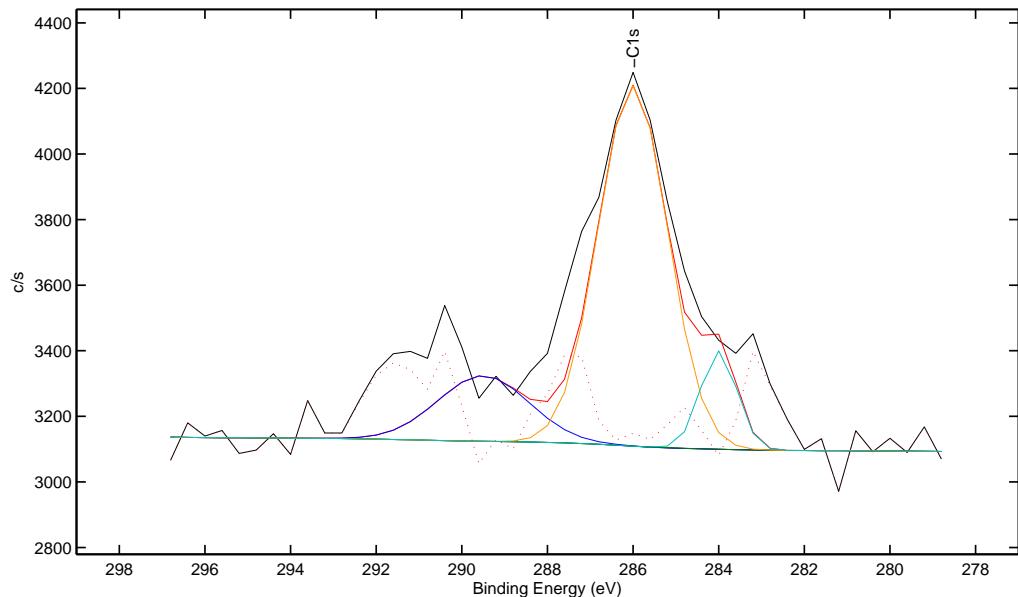


Abbildung 5.19: Fit der Messung 110, da frühere Messungen bei C1s nicht sinnvoll zu fitten sind.

Blau: Carbonate (290-298,5 eV), Orange: C-O (ca. 286 eV),
Grün: C-C (ca. 284,8 eV), Türkis: C-Si (248 eV) .

Die Messung mit der ID 110 (Vgl. Abb. 5.19) stellt hierbei den Beginn der Fits dar, weil vorherige Messungen zu kleine Peaks beim C 1s Peak aufweisen. Bei den Fits wurde eine Gauß-Kurve an den jeweiligen Bindungsenergien angesetzt und die Intensität so angepasst, sodass die Summe der Kurven, den Messwerten entspricht. Hier sieht man wie der Peak aus dem hier orangen C-O-Peak besteht und schwache Peaks in Blau bzw. Türkis ausweist, die einmal auf Carbonate bei ca. 290 bis 289,5 eV und C-Si-Verbindungen bei ca. 284 eV zurückzuführen sind. Erstere werden wahrscheinlich aus der Luft entstanden sein und sich auf der Oberfläche angelagert haben, von der dann die Kohlenstoff-Sauerstoff-Schicht gewaschen ist. Dies passt damit zusammen, dass dieser leichte Ausschlag bei der ersten Messung nicht vorlag. Der C-Si-Peak bestand hingegen schon bei der Messung 102 und spricht somit für eine Verunreinigung, die bereits vor dem Aufdampfen vorgelegen haben muss.

5.3 Verunreinigung von CaF_2

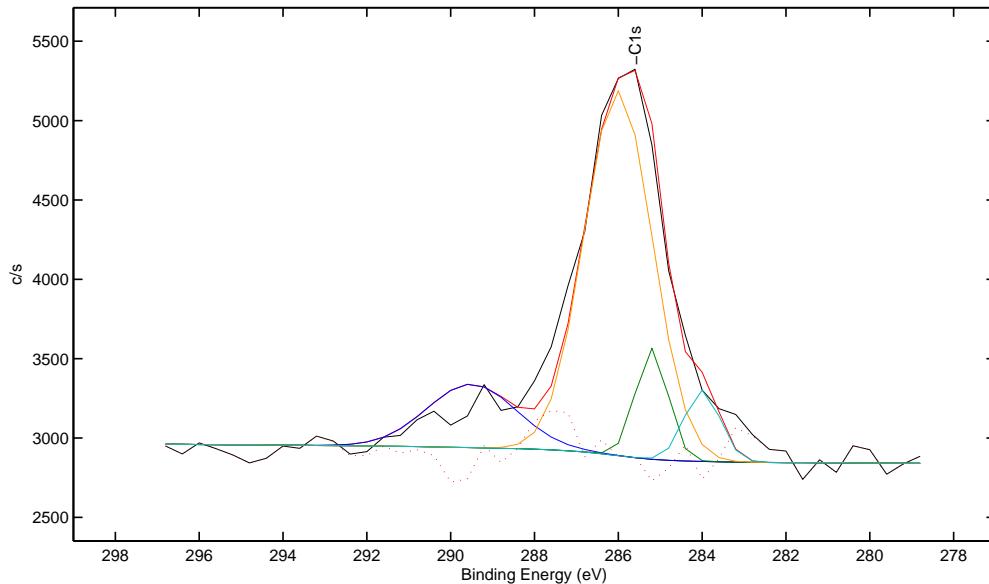


Abbildung 5.20: Fit der Messung 116.

Blau: Carbonate (290-298,5 eV), Orange: C-O (ca. 286 eV),
Grün: C-C (ca. 284,8 eV), Türkis: C-Si (248 eV).

Bei der Messung 116 sieht man den grünen Peak, bei der Energie für eine C-C bzw. C-H-Verbindung. Der Peak der C-O-Verbindung ist ebenfalls gewachsen, wodurch der resultierende Peak mit angestiegen ist, die Carbonat-Erhöhung ist ebenfalls angestiegen, was auch aufgrund des Schichtwachstums Sinn ergibt (Vgl. Abb. 5.20). Der Fakt, dass der türkise Peak nicht weiter wächst, spricht hier weiter für die Verschmutzung in Form von Si-C-Verbindung, da diese natürlich vom CaF_2 überdeckt wurden und nun nicht weiter wachsen. Dieser Peak wird auch genutzt, um die Intensität zwischen den unterschiedlichen Messungen einfach vergleichen zu können.

Bei der letzten Messung (Vgl. Abb. 5.21) sieht man dann gut wie der grüne Peak stark angestiegen ist, wohingegen der C-O-Peak eher weniger stark gewachsen ist. Sowohl die Carbonate als auch die Silicium-Kohlenstoffverbindungen scheinen nicht gestiegen zu sein. Ersteres stellt sich unter Betrachtung des Sauerstoff-Peaks auch als sinnvoll heraus, da auch dieser zum Zeitpunkt der letzten Messungen nicht mehr gewachsen ist. Somit ist die Verschiebung des C-Peaks vermutlich nicht wie beim CaF_2 mit einer Ladung der Schicht begründet, sondern liegt daran, dass sich hier das Verhältnis zwischen den unterschiedlichen Bindungsformen ändert und sich der Peak somit in Richtung des C-C- bzw. C-H-Peaks verschiebt.

5 Ergebnisse

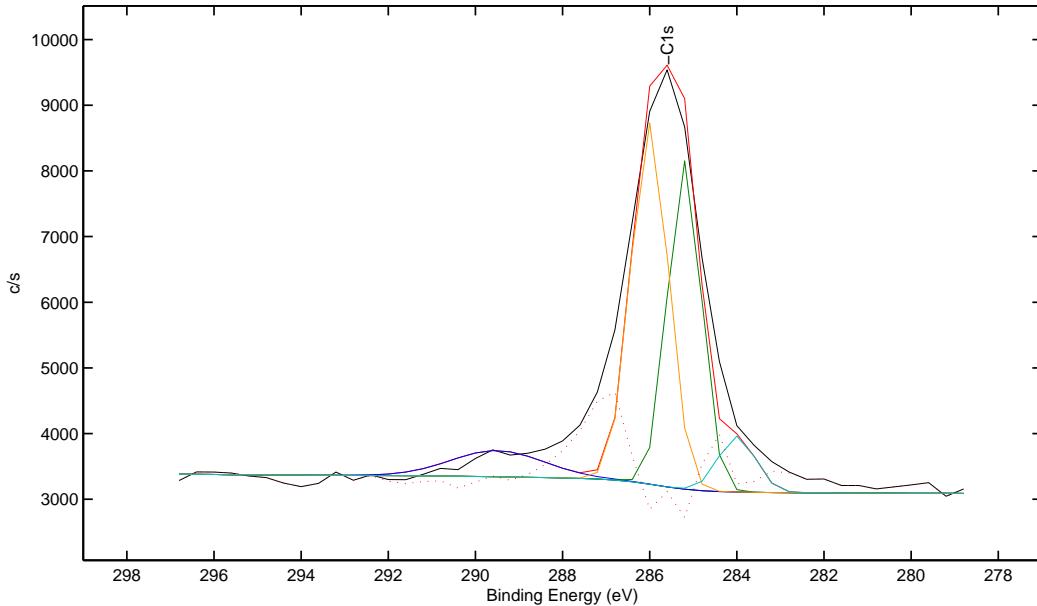


Abbildung 5.21: Fit der letzten Messung.

Blau: Carbonate (290-298,5 eV), Orange: C-O (ca. 286 eV),
Grün: C-C (ca. 284,8 eV), Türkis: C-Si (248 eV).

Besonders relevant ist, dass man hier nochmal klarstellt, dass der zeitliche Abstand zwischen den Messungen nicht linear ist und die Probe somit auch offensichtlich nicht linear wächst, sondern die Wachstumsgeschwindigkeit langsam abnimmt. Die Schwankungen zwischen den einzelnen Messungen können damit erklärt werden, dass die Probe nicht immer an genau derselben Stelle gemessen wurde, oder die Messanlage selber leichte Schwankungen aufweist. Bezogen auf die Energie könnte man auch noch andere Oxide vermuten, jedoch fehlen dafür die entsprechenden Metalle, wodurch dies die einzigen sinnvollen Stoffe sind.

Theorien zur neuen Schicht

Aus den Messungen können wir schlussfolgern, dass die einzigen beteiligten Stoffe in der neuen Schicht, Sauerstoff und Kohlenstoff darstellen, zudem ist möglicherweise noch Wasserstoff beteiligt, welches nicht mit XPS gemessen werden kann. Alle Elemente sind in der Atmosphäre vorhanden, wodurch die Herkunft erklärt ist. So liegen diese in der Luft in Form von O_2 , CO_2 , H_2O , H_2 , CO und CH_4 vor. Von besonderer Relevanz bzgl. des Beginns des Wachstums ist der Fakt, dass der Sauerstoff sehr schnell anfängt zu wachsen, und der Kohlenstoff hingegen eher weniger stark wächst.

Eine Theorie zu der Schicht ist, dass sich zu Beginn Wasser an die Calciumionen mit Wasserstoffbrücken verbindet. Daraus resultiert Calciumhydroxid CaOH , wodurch sich auch ein Teil des Sauerstoff-Peaks erklären lässt. Passend zu den höheren Bindungsenergien des Sauerstoffs und den ersten Kohlenstoffwerten reagieren CaOH mit CO_2 aus der Luft zu CaHCO_3 , wodurch sich die ersten Kohlenstoffatome in der oberen Schicht ablagern. Diese Reaktion ist vergleichbar zum technischen Kalkkreislauf. [34]

Jedoch handelt es sich hier nur um eine Theorie, die auf Tendenzen in den XPS-Messungen basiert, jedoch nicht garantiert so vorliegt, da es nicht so genau definiert werden kann. Diese Theorien stellen sich in diesem Kontext aber als realistisch dar. Zu diesem Wachstum kommen möglicherweise noch Kohlenstoffketten, die als Adsorbat auf die Oberfläche liegen. Für eine genaue Identifikation der neuen Schicht, neben den einzelnen Bausteinen Kohlenstoff und Sauerstoff, ist somit eine Analyse der Probe in der Chemie sinnvoller als eine Betrachtung in diesem Bereich, da hierfür das Wissen und die Messverfahren nicht vorhanden sind.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war es festzustellen, wie der Kontakt einer Probe mit der Luft die Oberfläche der Si-CaF₂-Probe beeinflusst. Dafür musste der Aufbau der In-Situ-Messung erst einmal kalibriert werden. Dies bedeutet bei diesem Aufbau die Kontrolle des Pyrometers und des Verdampfers.

Hierbei wurde festgestellt, dass das Pyrometer wahrscheinlich einen Defekt aufweist, wodurch das Zielen des Pyrometers fehlerhaft ist, und korrekterweise versetzt zum eigentlichen Mittelpunkt gemessen werden muss. Dies konnte man einerseits über die zusätzliche Messung der Temperatur durch ein Thermocouple bestätigen. Des Weiteren hat auch ein Fit der Temperaturen in Abhängigkeit der Heizleistung dazu geführt diese Theorie zu bestärken.

Beim Verdampfer musste aufgrund der speziellen Form des Probenhalters und der ersten ausgiebigen Nutzung des Verdampfers, erst getestet werden, wie sich das CaF₂ auf der Probe absetzt. Hierbei wurde festgestellt, dass die Probe nicht gleichmäßig bedampft wird, jedoch hierbei in der Horizontalen gleichmäßig ist. Nur in der Vertikalen konnte eine Abnahme nach oben und eine Kante nach unten festgestellt werden.

Nachdem der Aufbau für die Messungen vorbereitet wurde, konnte nun mit einer In-Situ-Messung festgestellt werden, wie rein der Prozess der Probenherstellung in dem Aufbau ist, wobei leichte Verschmutzung der Probe durch Kohlenstoff und Sauerstoff festgestellt wurde, welcher aber keinen großen Einfluss auf die Messungen hat, jedoch wurden nach mehreren weiteren Messungen mit unterschiedlicher Zeit an der Luft deutlich, dass es ein Wachstum einer Schicht aus Kohlenstoff und Sauerstoff stattfindet. Der Sauerstoff scheint sich hier nach ein paar Stunden nicht mehr zu ändern, der Kohlenstoffanteil wächst hingegen in dem gemessenen Zeitraum konsequent.

Wie sich dieses Wachstum nun genau darstellt und in welcher Form die neue Schicht wächst ist hierbei eine Frage für folgende Arbeiten. Genauso ist noch von Interesse, wie sich die neue Schicht in noch längeren Zeiträumen verhält, was jedoch den zeitlichen Umfang dieser Arbeit überschreitet. Auch bezogen auf den Verdampfungsprozess könnte dieser noch genauer betrachtet und möglicherweise noch optimiert werden, um eine gleichmäßige Schicht zu gewährleisten. Auch

6 Zusammenfassung und Ausblick

eine ausführlichere Betrachtung des Einflusses der Dicke der CaF₂-Schicht auf die Verschmutzung könnte von Interesse sein.

Als primäres Resultat der Arbeit konnte aber festgestellt werden, dass es durchaus sinnvoll sein kann eine Ex-Situ-Messung mit Proben durchzuführen, da man bei kurzer Zeit an der Luft, wie zum Beispiel den Transport von einem Raum in den Anderen, nicht mit großer Verschmutzung rechnen muss. Bei Proben die bereits länger Kontakt zur Luft haben ist eine Verschmutzung möglich, jedoch kann es sich nur um Kohlenstoff und Sauerstoff handeln, stellt man weitere Elemente auf der Probe fest, müssen diese aus anderen Quellen stammen.

7 Conclusion and outlook

The aim of this work was to determine how contact between a sample and the air affects the surface of the Si-CaF₂ sample. To do this, the in-situ measurement setup first had to be calibrated. In this setup, this means checking the pyrometer and the evaporator.

It was found that the pyrometer probably had a defect, causing the pyrometer's lines to be faulty, and that measurements had to be taken slightly offset from the actual center point in order to be correct. This was confirmed by additional temperature measurements using a thermocouple. Furthermore, a fit of the temperatures as a function of the heating power also reinforced this theory.

Due to the special shape of the sample holder and the first extensive use of the evaporator, it was first necessary to test how the CaF₂ settles on the sample. It was found that the sample is not evenly vaporized, but is uniform horizontally. Only vertically was a decrease towards the top and an edge towards the bottom observed.

Once the setup for the measurements had been prepared, an in-situ measurement was used to determine how pure the sample preparation process in the setup is. Slight contamination of the sample with carbon and oxygen was detected, but this did not have a significant impact on the measurements. However, after several further measurements with different exposure times to air, it became clear that a layer of carbon and oxygen was growing. The oxygen content appears to remain unchanged after a few hours, while the carbon content grows consistently over the measured period.

How exactly this growth occurs and in what form the new layer grows is a question for further work. It is also of interest how the new layer behaves over even longer periods of time, but this exceeds the scope of this work. With regard to the evaporation process, it would also be possible to examine the evaporation process in more detail and possibly optimize it to ensure a more uniform layer. A more detailed examination of the influence of the thickness of the CaF₂ layer on contamination could also be of interest.

The primary result of the work was that it can be useful to carry out ex situ measurements with samples, as short periods of exposure to air, such as transport

7 Conclusion and outlook

from one room to another, are unlikely to cause significant contamination. Samples that have been in contact with air for longer periods may be contaminated, but this contamination can only be carbon and oxygen. If other elements are detected on the sample, they must originate from other sources.

8 Literaturverzeichnis

- [1] URL: https://daten.didaktikchemie.uni-bayreuth.de/3d_molekuele/03_07_nacl.png.
- [2] URL: <https://ar.inspiredpencil.com/pictures-2023/carbon-graphite-diamond>.
- [3] *7x7*. URL: https://www.researchgate.net/figure/The-7-7-reconstruction-of-Si-according-to-the-dimer-adatom-stacking-fault-model-Rest_fig11_35899684.
- [4] J. Bahlmann. *IV-LEED Untersuchungen an Ag(001): Experimentelle Einflüsse und Datenanalyse*. 2017.
- [5] Beatriz Mendoza-Sanchez/ Vincent Fernandez/ Pascal Bargiela/ Neal Fairley/ Jonas Baltrusaitis. “Surface science insight note: Charge compensation and charge correction in X-ray photoelectron spectroscopy”. In: *Surface and Interface Analysis* 56.8 (Apr. 2024), S. 525–531.
- [6] Heinz Beneking. *Feldeffekttransistoren*. Springer Verlag, 1973. ISBN: 3-540-06377-3.
- [7] *Bravais-Gitter*. URL: <https://biancahoegel.de/wissen/mineral/bravais-gitter.html>.
- [8] *Calciumfluorid*. URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Calciumfluorid>.
- [9] H. Stöcker D. Meyer. *Pyroelektrizität*. Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität. URL: <https://blogs.hrz.tu-freiberg.de/pyro/pyroelektrizitaet/>.
- [10] C. Deiter. *Röntgenstrukturanalyse von Halbleiter-Isolator-Schichtsystemen*. 2005.
- [11] R. Fritzsche. “Van der Waals-terminierte Silizium (111) Oberfläche und Grenzfläche”. Diss. Technische Universität Darmstadt, 2004.
- [12] D. Briggs G. Beamson. *High Resolution XPS of Organic Polymers - The Scienta ESCA300 Database* Wiley Interscience. 1992.
- [13] A. Gerdes. *Simulationen zu Röntgenstrukturuntersuchungen des Systems CaF₂/Si(111)*. 2004.

8 Literaturverzeichnis

- [14] *How to calculate Miller Indices for Crystallographic planes?* URL: <https://extrudesign.com/how-to-calculate-miller-indices-for-crystallographic-planes/>.
- [15] J. C. Vickerman und I. S. Gilmore. *Surface Analysis- The Principal Techniques*. 2009.
- [16] H. Idriss. *On the wrong assignment of the XPS O1s signal at 531-532 eV attributed to oxygen vacancies in photo- and electro-catalysts for water splitting and other materials applications*. Okt. 2021.
- [17] Felix Johannsmann. "Untersuchung zur Molekularstrahlepitaxie ultradünner CaF₂-Schichten auf Si(111)". Bachelorarb. Universität Osnabrück, 2024.
- [18] Leybold. *How do ion pumps work*. URL: <https://www.leybold.com/de-de/knowledge/vacuum-fundamentals/vacuum-generation/how-do-ion-pumps-work>.
- [19] Kouji Miura, Kazuhiko Sugiura und Hiroshi Sugiura. "F⁺-desorption mechanism from CaF₂(111) surface by low-energy electron irradiation". In: *Surface Science Letters* 253.1 (1991), S. L407–L410. ISSN: 0167-2584.
- [20] *Physik-Durchbruch des Jahres*. URL: <https://www.lichtgedanken.uni-jena.de/792/physik-durchbruch-des-jahres>.
- [21] *Polarität*. URL: <https://www.bs-wiki.de/mediawiki/index.php?title=Polarit%C3%83%C2%A4t>.
- [22] T. Pollenske. "Präparation von Oxidkristalloberflächen und Epitaxie von Magnetitschichten". Magisterarb. Universität Osnabrück, 2022.
- [23] C.D. Wagner / A.V. Naumkin / A. Kraut-Vass / J.W. Allison / C.J. Powell / J.R.Jr. Rumble. *NIST Standard Reference Database 20, Version 3.4*. <http://srdata.nist.gov/xps/>, 2003.
- [24] P. Sigmund S. Tougaard. "Influence of elastic and inelastic scattering on energy spectra of electrons emitted from solids". In: *Physical Review* 25.7 (1982), S. 4452–4466.
- [25] Patrick Schnabel. *Tunneldioden*. URL: www.elektronik-kompendium.de/sites/bau/0111022.htm.
- [26] T. Seilnacht. *Calciumfluorid*. URL: https://www.seilnacht.com/Chemie/ch_caf2.html.
- [27] T. Seilnacht. *Kohlenstoff*. URL: <https://www.seilnacht.com/Lexikon/6Kohlen.htm>.
- [28] T. Seilnacht. *Sauerstoff*. URL: <https://www.seilnacht.com/Lexikon/6Sauerst.htm>.

- [29] *Silcon*. URL: <https://webelemnets.com/silicon/>.
- [30] *Struktur der Kristalle*. URL: https://physik.fandom.com/de/wiki/Struktur_der_Kristalle.
- [31] tec-science. *Wie funktioniert ein Thermoelement*. März 2019. URL: <https://blogs.hrz.tu-freiberg.de/pyro/pyroelektrizitaet/>.
- [32] K. Takayanagi u.a. *Structure analysis of Si(111)-7 x 7 reconstructed surface by transmission electron diffraction*. 1985.
- [33] T. Fauster u.a. *Oberflächenphysik*. 2019.
- [34] Dr K. T. Risch W. Asselborn M Jäckel. *Chemie heute*. 2013, S. 47.
- [35] M. Henzler und W. Göpek. *Oberflächenphysik des Festkörpers*. B.G. Teubner, 1994.
- [36] W.Schreiber. “SPA-LEED-Untersuchungen an epitaktischen TerbiumSilizid-Schichten auf Silizium(111)- und Silizium(557)-Oberflächen”. Magisterarb. Universität Osnabrück, 2017.
- [37] *What is Radiation Pyrometer? Working Principle, Construction, Diagram Advantages*. URL: <https://howelectrical.com/radiation-pyrometer/>.
- [38] *Wie funktioniert ein pyroelektrischer Infrarotsensor?* Dias Infrared Systems. URL: <https://dias-infrared.de/funktionsweise-pyroelektrischer-infrarotsensor/>.
- [39] *XPS*. URL: <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/xps/15714>.

Danksagung

Zum Schluss dieser Arbeit möchte ich mich bei allen bedanken, die mich dabei unterstützt haben.

Allen voran möchte ich Prof. Dr. Joachim Wollschläger dafür danken, dass er mir die Möglichkeit gegeben hat in der Arbeitsgruppe Dünne Schichten und Grenzflächen meine Bachelorarbeit zu verfassen. Seine sehr herzliche, lustige und offene Art hat für eine sehr gute Arbeitsatmosphäre geführt, wodurch ich mir nie Sorgen machen musste, mit Fragen zu ihm zu kommen.

Zusätzlich möchte ich mich bei Dr. Philipp Rahe dafür bedanken, dass er das Amt des Zweitprüfers übernommen hat.

Des weiteren möchte ich mich bei meinem Betreuer Chris Schröder bedanken. Dank ihm habe ich mich schnell in der Arbeitsgruppe aufgenommen gefühlt und gut zurechtgefunden. Danke für die Hilfe bei der Auswertung, im Labor, bei jeder Nachfrage, egal wie sehr ich mal auf dem Schlauch stand und für das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Auch bei den anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe möchte ich mich herzlich bedanken. Einmal bei Alexander für die Hilfe im Labor und im Umgang mit den Maschinen. An Luis für den fachlichen Austausch, der doch öfter geholfen hat als man glauben mag. Und danke an jeden in der AG, der für die angenehme Stimmung gesorgt hat, mich sofort in die Gruppe aufgenommen hat und nicht zuletzt durch das gemeinsame Mittagessen davon abgehalten hat mich vollständig in der Arbeit zu verlieren.

Zuletzt ein Dank an meine Familie und Freunde, die mich auch mal von der Uni abgelenkt haben und einen Ausgleich schaffen konnten. Trotzdem haben sie mir konsequent geholfen meine Motivation, diese Arbeit zu verfassen aufrechtzuerhalten. Allen voran möchte ich mich hier bei Arii bedanken, dass sie meine Arbeit nochmal auf Rechtschreib- und Formatierungsfehler korrigiert hat und mich emotional nochmal mehr unterstützt hat.

Erklärung zur selbstständigen Abfassung der Bachelorarbeit

Nachname, Vorname: Freude, Kilian

Geburtsdatum: 27.03.2003

Matrikelnummer: 1001408

Titel der Bachelorarbeit:

Kontamination der Oberfläche von CaF₂-Schichten bei atmosphärischen Bedingungen

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.

Falls Werkzeuge mit künstlicher Intelligenz (KI) eingesetzt wurden, habe ich deren Einsatzweise und -zweck transparent angegeben

Ich versichere, dass die eingereichte Druckversion der Bachelorarbeit und eine ggf. digital eingereichte Version identisch sind.

Ort, Datum, Unterschrift