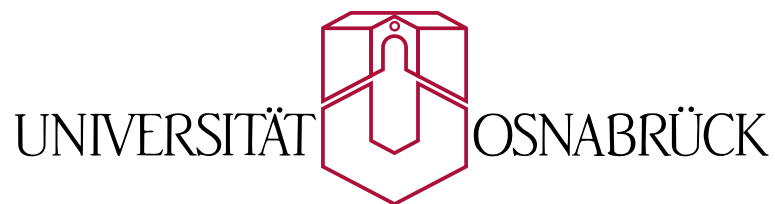


---

# Wachstum von Multi - Oxidschichten auf Silber - Substraten

---



Diplomarbeit  
von  
Lars Böwer

Fachbereich Physik  
Arbeitsgruppe Wollschläger

2. Oktober 2007



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
1.1	Wachstum	3
1.1.1	Ratengleichungen nach Venables	3
1.1.2	Wachstumsarten	5
1.1.3	Versetzungen	6
1.2	Auger-Elektronen-Spektroskopie	7
1.3	SPA-LEED	9
1.3.1	Beugung am Kristallgitter	9
1.3.2	Kinematische Näherung	11
1.3.3	Korrelationen	12
1.3.4	Instrumentelle Verbreiterung	14
1.3.5	Streuphase S	15
1.3.6	Gestufte Oberfläche	16
1.3.6.1	Analyse der zentralen Spitze	17
1.3.6.2	Analyse der diffusen Schulter	19
1.3.7	Mosaik	23
1.3.7.1	Mosaik ohne Vorzugsrichtung	24
1.3.7.2	Mosaik mit Vorzugsrichtung	25
1.3.7.3	quasi-G(S)-Kurven	27
<b>2</b>	<b>Materialeigenschaften und Präparation</b>	<b>29</b>
2.1	Materialeigenschaften	29
2.1.1	Silber	29
2.1.2	Magnesiumoxid	30
2.1.3	Nickeloxid	31
2.2	Präparation	32
2.2.1	ex-situ Präparation des Substrates	32
2.2.2	in-situ Präparation des Substrates	32
2.2.3	Oxidation der Adsorbate	33
2.3	Motivation für das System	35
<b>3</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>37</b>
3.1	Vakuumpumpen und Ultrahochvakuum	39
3.2	Massenspektrometer (QMS)	39
3.3	Probenhalter	40
3.4	Sputterkanone	40
3.5	Verdampfer	41

---

3.6	Auger Elektronen Spektroskopie (AES) . . . . .	42
3.7	SPA-LEED . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>45</b>
4.1	Messungen am Substrat . . . . .	46
4.2	MgO/Ag(100) . . . . .	51
4.2.1	300 Hz MgO . . . . .	51
4.2.2	100 Hz MgO . . . . .	55
4.2.3	50 Hz MgO . . . . .	59
4.2.4	75 Hz MgO . . . . .	62
4.2.5	Zusammenfassung MgO/Ag(100) . . . . .	64
4.3	NiO/MgO/Ag(100) . . . . .	65
4.3.1	50 Hz NiO . . . . .	66
4.3.2	100 Hz NiO . . . . .	69
4.3.3	200 Hz NiO . . . . .	71
4.3.4	350 Hz NiO . . . . .	75
4.3.5	500 Hz NiO . . . . .	78
4.3.6	Zusammenfassung NiO/MgO/Ag(100) . . . . .	80
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>83</b>
5.1	Zusammenfassung . . . . .	83
5.2	Ausblick . . . . .	87

# Einleitung

In nahezu allen Technologien schreitet die Miniaturisierung von Bauteilen immer weiter voran. Gerade im Informations- und Kommunikationsbereich sind die Strukturgrößen inzwischen auf wenige Nanometer reduziert.

Für die Konzeption solcher Bauteile ist es nötig, dünne Isolatorschichten herstellen zu können. An diese werden höchste Ansprüche bezüglich der kristallinen Qualität gestellt. Finden sich zu viele Defekte, kommt es zu Leckströmen und anderen unerwünschten Effekten.

Als Isolator bieten sich viele Oxide an. Jedoch gibt es, im Vergleich zu Untersuchungen bei Halbleitern und Metallen, noch immer zu wenige Ergebnisse über das Wachstum und die Eigenschaften sehr dünner Oxidschichten im Bereich weniger Monolagen.

Magnesiumoxid eignet sich hierbei als ultradünne Isolatorschicht für kleine elektronische Bauteile.

Nickeloxid ist kein guter Isolator, bietet sich auf Grund seiner antiferromagnetischen Eigenschaften aber für ein anderes Anwendungsgebiet an.

In der Magnetoelektronik wird die Information nicht mehr, wie bei der herkömmlichen Elektronik, durch Elektronenfluss beschrieben, sondern durch ihren magnetischen Spin. Die theoretische Grundlage elektronischer Bauteile auf dieser Basis bilden sogenannte magnetoresistive Effekte. Dabei ändert sich der elektrische Widerstand dünner ferromagnetischer Schichten abhängig von ihrer Magnetisierungsrichtung oder eines äußeren magnetischen Feldes.

Als erste Anwendungen sind Festplattenköpfe und Magnetfeldsensoren auf dem Markt, die den GMR-Effekt (Giant Magneto Resistance, Riesenmagnetowiderstand) nutzen. Geplant ist die Serienfertigung von MRAMs (Magnetoresistive Random Access Memory), die als nicht-flüchtige Speicher zukünftig DRAMs und SRAMs ersetzen sollen.

In dieser Arbeit werden dünne Magnesiumoxid- und Nickeloxidschichten als Modelloxide mit fcc-Struktur betrachtet. Es soll hierbei das Wachstum dieser Oxide auf einem Silbersubstrat untersucht und charakterisiert werden. Von besonderem Interesse ist hierbei die Frage, in wieweit es bei den genutzten Materialien zu epitaktischem Wachstum kommt.



# Kapitel 1

## Theorie

Um einen Zusammenhang zwischen den Messdaten und physikalischen Größen herzustellen, wird zunächst der theoretische Hintergrund in Grundzügen dargestellt. Dabei wird auf bekannte Theorien zur Epitaxie, sowie auf die Messmethoden der Auger-Elektronen-Spektroskopie und der hochaufgelösten Beugung langsamer Elektronen (SPA-LEED) eingegangen.

### 1.1 Wachstum

Je nach Temperatur des Substrates gibt es verschiedene Ansätze, das Wachstum eines dünnen Filmes zu beschreiben. Für hinreichend hohe Temperaturen befindet sich das System annähernd im thermodynamischen Gleichgewicht und man kann eine Energiebilanz für die freie Grenzflächen- und Oberflächenenergie aufstellen [1]. Bei tieferen Temperaturen, also weit weg vom thermodynamischen Gleichgewicht, ist ein kinetischer Ansatz notwendig. In der „mean-field“ Theorie von Venables [2] werden Ratengleichungen für die grundlegenden atomaren Prozesse aufgestellt und die resultierenden Differentialgleichungen gelöst.

#### 1.1.1 Ratengleichungen nach Venables

Bei der Keimbildung der Adsorbate auf dem Substrat finden verschiedene Prozesse statt. Aufgebrachte Atome können entweder auf dem Substrat oder auf bereits vorhandenen Adsorbat-Inseln auftreffen. Sie können auf dem Substrat diffundieren, sich so mit anderen Atomen zu neuen Clustern zusammenschließen, oder sich an bereits vorhandene Cluster anlagern. Dadurch können auch bereits vorhandene Inseln zusammenwachsen (Koaleszenz).

Ausgehend von diesen Überlegungen ergeben sich für die Monomerdichte  $n_1$  und die Dichte der stabilen Cluster  $n_x$  folgende Ratengleichungen<sup>1</sup>:

$$\frac{dn_1}{dt} = R - 2D\sigma_1 n_1^2 - D\sigma_x n_1 n_x - R(Rt - n_1) - 10Rn_1, \quad (1.1)$$

$$\frac{dn_x}{dt} = D\sigma_1 n_1^2 + 5Rn_1 + U_c. \quad (1.2)$$

Hierbei ist  $D$  die Diffusionskonstante,  $\sigma_1$  und  $\sigma_x$  sind die Wirkungsquerschnitte der Monomere und Cluster für den Einfang von Atomen, und  $U_c$  ist ein Koaleszenzterm.

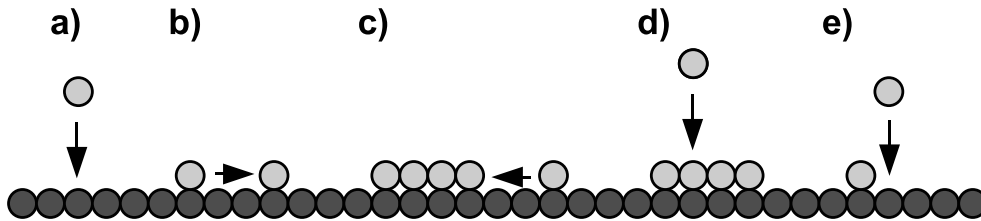


Abbildung 1.1: Möglichkeiten der Adatome auf dem Substrat. a) Atom trifft auf das Substrat, b) Atom diffundiert auf dem Substrat und bildet mit einem Monomer einen Dimer, c) Atom diffundiert auf dem Substrat und wird von einem Cluster eingebaut, d) Atom trifft auf einem bestehenden Cluster auf, e) Atom trifft auf oder neben einem Monomer auf und bildet einen Dimer.

Im ersten Term in Gleichung 1.1 steigt die Monomerdichte linear mit der Depositionsrate  $R$  an (siehe **a** in Abb. 1.1). Reduziert wird die Monomerdichte durch das Zusammenstoßen zweier Atome, die dann einen Dimer bilden (2. Term, **b**); den Einbau von diffundierenden Monomeren in bereits vorhandene Cluster (3. Term, **c**); das Auftreffen von Atomen auf Clustern und der direkte Einbau (4. Term, **d**); und das Auftreffen von Atomen auf oder neben Monomeren und die direkte Dimer-Bildung (5. Term, **e**). Der vierte und fünfte Term sind eine Erweiterung der Ratengleichung durch Nedelmann [3]. Im vierten Term wird das Auftreffen auf Nachbarplätzen der Inseln vernachlässigt, im fünften Term ist ein quadratisches Gitter vorausgesetzt. Der Vorfaktor im fünften Term resultiert aus den vier möglichen Nachbarplätzen und dem direkten Auftreffen auf einem Monomer. Diese fünf Möglichkeiten müssen noch verdoppelt werden, da zwei Monomere zur Dimer-Bildung nötig sind.

<sup>1</sup>Als kritische Keimgröße wird hier  $i = 1$  angenommen, ein Dimer ist also die kleinste stabile Insel.



Durch Dimerbildung diffundierender Adatome (1. Term in Gl. 1.2) und direkte Dimerbildung (2. Term) wird die Dichte der stabilen Inseln erhöht, durch Koaleszenz (3. Term) wird sie reduziert. Für den Koaleszenzterm gilt nach Venables

$$U_c = 2n_x \left( -\frac{dn_1}{dt} + R \right). \quad (1.3)$$

Als Lösung für die Differentialgleichung der Dichte der stabilen Inseln findet man [4]

$$n_x \propto \exp \left( \frac{iE_D + E_i}{(i+2)k_B T} \right), \quad (1.4)$$

mit der Diffusionsenergie  $E_D$ , der Bindungsenergie zwischen Atomen in Clustern  $E_i$  und der Keimgröße  $i$ .

### 1.1.2 Wachstumsarten

Ist die Substrattemperatur hoch genug damit sich das System nahe dem thermodynamischen Gleichgewicht befindet, lassen sich über die Energiebilanz der freien Oberflächen- und Grenzflächenenergien [1] verschiedene Wachstumsmodi angeben (siehe Abb. 1.2):

- Frank - van der Merve (Lage für Lage - Wachstum)
- Volmer - Weber (3D Insel - Wachstum)
- Stranski - Krastanov (3D Insel - Wachstum auf einer oder mehreren benetzenden Lagen)

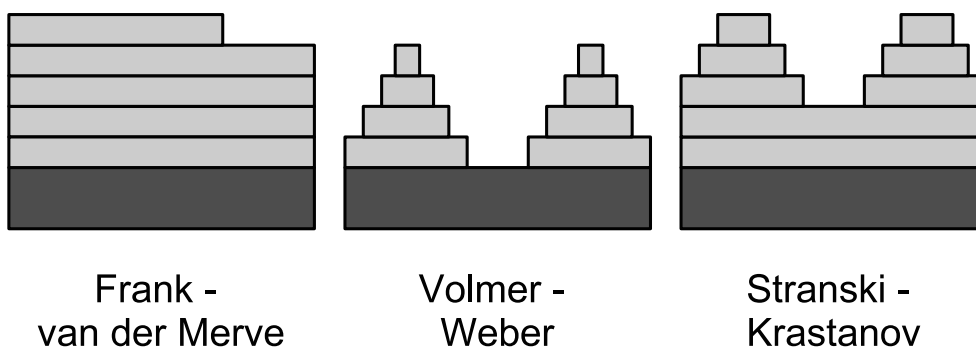


Abbildung 1.2: Die verschiedenen Wachstumsmodi im thermodynamischen Gleichgewicht.

Lässt man den Einfluß der Größe und der Gestalt der Inseln auf die Oberflächenenergie und die Kantenenergien unberücksichtigt ergibt sich folgende Gleichung:

$$\Delta_\gamma = \gamma_A - \gamma_S + \gamma_i. \quad (1.5)$$

$\gamma_A$  bzw.  $\gamma_S$  sind die freien Oberflächenenergien des Adsorbates bzw. des Substrates,  $\gamma_i$  ist die freie Grenzflächenenergie zwischen den einzelnen Schichten. Ist  $\Delta_\gamma \geq 0$  kommt es zu Volmer - Weber - Wachstum. Das Adsorbat wächst in 3D-Inseln auf dem Substrat eher in die Höhe als in die Breite. Wenn hingegen  $\Delta_\gamma \leq 0$  für jede neue Schicht ist, ergibt sich Frank - van der Merwe - Wachstum. Dieses ist bei einer hohen freien Oberflächenenergie des Substrates der Fall. Ändert sich im Verlauf des Wachstums allerdings der Wert der Grenzflächenenergie  $\gamma_i$ , zum Beispiel durch wachsende Verspannungen, kann das Wachstum von Lage für Lage zu 3D Insel - Wachstum wechseln. Dieses ist dann der Fall wenn  $\Delta_\gamma$  das Vorzeichen von negativ zu positiv ändert. Auf der letzten geschlossenen Adsorbatschicht bilden sich dann Inseln, die in die Höhe wachsen.

### 1.1.3 Versetzungen

Im Falle der Heteroepitaxie, also des Aufwachsens eines Adsorbates auf einem Substrat unterschiedlichen Materials, ist ein weiterer für das Wachstum wichtiger Faktor die Gitterfehlانpassung  $m$

$$m = \frac{b - a}{\frac{1}{2}(a + b)}, \quad (1.6)$$

mit der Gitterkonstante  $a$  des Substrates und der Gitterkonstante  $b$  des Adsorbates.

Die folgenden Betrachtungen über die Energie beim Wachstum lehnen sich an die Betrachtungen von Ibach [5] an.

Wenn die Bindung zwischen Substrat und Adsorbat groß genug ist, wächst zunächst ein pseudomorph verspannter Film auf. Das heisst, dass das Adsorbat die laterale Gitterkonstante des Substrates annimmt. Für die hierbei auftretende Verspannung ist eine Energie  $\Delta H_{elastic}$  notwendig:

$$\Delta H_{elastic} = -\frac{Y_f}{1 - \nu_f} m^2. \quad (1.7)$$

Hierbei ist  $Y_f$  der Youngsche Modul und  $\nu_f$  die Poisson-Zahl des Films. Die Verspannungsenergie ist negativ, da sie dem System zugefügt werden muß.

Ab einem bestimmten Wert ist es für den Film energetisch günstiger, Versetzungen einzubauen. Die Energie der Versetzungen  $\Delta H_{disloc}$  ist gegeben durch

$$\Delta H_{disloc} = \frac{Cb}{\pi} \left( \ln \left( \frac{t}{b} \right) + 1 \right) |m|, \quad (1.8)$$

mit dem Burgersvektor  $b$ , der Filmdicke  $t$  und dem effektiven Schermodul  $C$ . Für eine Energiebilanz muss nun noch die freie Oberflächenenergie  $\gamma$  und der Oberflächenstress  $\tau^{(s)}$  des Films berücksichtigt werden:

$$\Delta H_s = 2 (\tau^{(s)} - \gamma) m. \quad (1.9)$$

Somit ergibt sich die Gesamtenergie des Films zu

$$\begin{aligned} \Delta H &= \Delta H_{elastic} + \Delta H_{disloc} + \Delta H_s \\ &= -\frac{Y_f}{1 - \nu_f} m^2 + \frac{Cb}{\pi} \left( \ln \left( \frac{t}{b} \right) + 1 \right) |m| + 2 (\tau^{(s)} - \gamma) m. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Mit Kenntnis der genutzten Konstanten läßt sich hieraus die Zahl der Versetzungen und die Stärke der Verspannungen bei Heteroepitaxie angeben.

## 1.2 Auger-Elektronen-Spektroskopie

Neben der Untersuchung der Geometrie der erzeugten Schichten ist es auch nötig, Aussagen über deren Chemie zu machen. Hierzu wird in dieser Arbeit die Auger-Elektronen-Spektroskopie genutzt. Diese basiert auf dem Auger-Effekt, einem strahlungslosen Übergang von Elektronen in der Atomhülle. Dieser Prozess wird auch als innerer Photoeffekt bezeichnet. Man kann sich vorstellen, dass dabei ein Photon emittiert und direkt im gleichen Atom wieder absorbiert wird.

Durch externe Anregung (hier ein Primärelektron) wird ein Elektron aus einer inneren Schale eines Atoms ausgelöst. Beim Auger-Effekt rekombiniert nun ein Elektron einer höheren Schale mit dem entstandenen Loch und durch die frei werdende Energie wird ein zusätzliches Elektron einer höheren Schale aus dem Atom entfernt. Dieses zusätzliche Elektron wird Auger-Elektron genannt.

Findet dieser Prozess innerhalb weniger Angström unterhalb der Oberfläche statt, verlassen die Auger-Elektronen diese nahezu verlustfrei. Ihre Energie ist von den Energiedifferenzen der Schalen und den Bindungsenergien, und somit vom Element und Ionisationsgrad, abhängig.

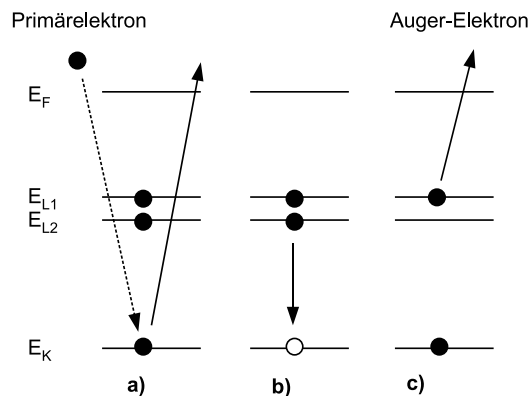


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung des KLL-Auger-Prozesses.  $E_K$  und  $E_L$  bezeichnen die Energieniveaus der entsprechenden Schalen,  $E_F$  das Fermi-niveau.

Die Benennung der Auger-Prozesse richtet sich nach den Schalen aus denen die Elektronen ursprünglich stammen. So bezeichnet ein KLL-Auger-Prozess (Abb. 1.3) die Entfernung eines Elektrons aus der K-Schale (a), das Auffüllen des entstandenen Loches mit einem Elektron aus der L-Schale (b) und die Emission eines Auger-Elektrons aus der L-Schale (c).

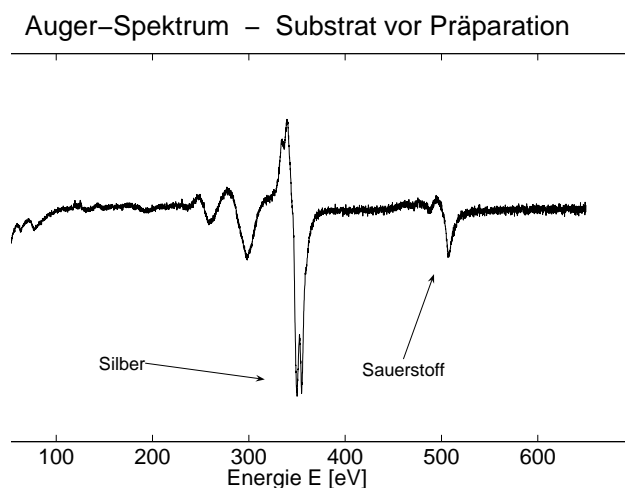


Abbildung 1.4: Exemplarisches Auger-Spektrum des Silberkristalls vor Präparation.

Da die Auger-Peaks von einem großen Hintergrund überlagert werden, lassen sie sich einfacher bestimmen, wenn man die Ableitung der Energieverteilung  $\frac{dN(E)}{dE}$  darstellt. Abbildung 1.4 zeigt exemplarisch das gemessene Auger-Spektrum des Silbersubstrates vor der Präparation.

## 1.3 SPA-LEED

Zur Untersuchung von Oberflächenmorphologien unterscheidet man prinzipiell zwischen mikroskopischen und beugenden Messmethoden.

Zu den mikroskopischen Verfahren zählen zum Beispiel die Rastertunnelmikroskopie (STM) oder die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM). Hierbei erhält man ein detailliertes, räumliches Bild eines Teils der Oberfläche mit bis zu atomarer Auflösung. Allerdings erhält man damit keine statistischen Angaben über die Oberfläche, so dass Statistiken durch wiederholte Messungen erzielt werden müssen.

Bei Beugungsmethoden, wie zum Beispiel der Beugung langsamer Elektronen (LEED) oder der Röntgenbeugung (XRD), erhält man hingegen gemittelte Aussagen über große Bereiche der Oberfläche. Somit ist eine Statistik implizit enthalten. Allerdings geht bei der Beugung die Phaseninformation verloren und man bekommt keine Abbildung der realen Oberfläche, das Beugungsbild ist ein Abbild des reziproken . Es ist also eine komplexe Theorie nötig, um daraus Aussagen über die reale Oberflächenmorphologie zu machen.

In dieser Arbeit wird zur Analyse der Oberfläche der hergestellten Schichten die hochaufgelöste Elektronenbeugung (SPA-LEED, **S**pot **P**rofile **A**nalysis **L**ow **E**nery **E**lectron **D**iffraction) genutzt. Diese Messmethode arbeitet mit Elektronen im Energiebereich von 20 bis 500 eV und ist daher besonders oberflächensensitiv, da die Eindringtiefe für Elektronen in diesem Bereich zwischen 3 und 10 Å liegt [6]. Die de Broglie - Wellenlänge beträgt hierbei etwa 0,5 bis 3 Å wodurch atomare Auflösung gewährleistet ist.

### 1.3.1 Beugung am Kristallgitter

Da die Abstände zwischen Elektronenkanone und Probe, sowie zwischen Probe und Detektor, sehr groß sind im Vergleich zur Wellenlänge der Elektronenstrahlen, kann man die Theorie der Fraunhoferschen Beugung anwenden. Dabei wird die gestreute Welle als ebene Welle beschrieben.

Mit den Bezeichnungen  $\vec{k}_i$  für den Wellenvektor der einfallenden, und  $\vec{k}_f$  für den Wellenvektor der gestreuten Welle, ergibt sich für die vom 0. Atom ausgehende Streuwelle

$$\psi_0(\vec{k}_i, \vec{k}_f, \vec{r}) = f_0(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \cdot e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}. \quad (1.11)$$

Es wird nur elastische Einfachstreuung betrachtet, und somit ist  $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|$ . In Gleichung 1.11 bezeichnet  $f_0$  die Streuamplitude des 0. Atoms.

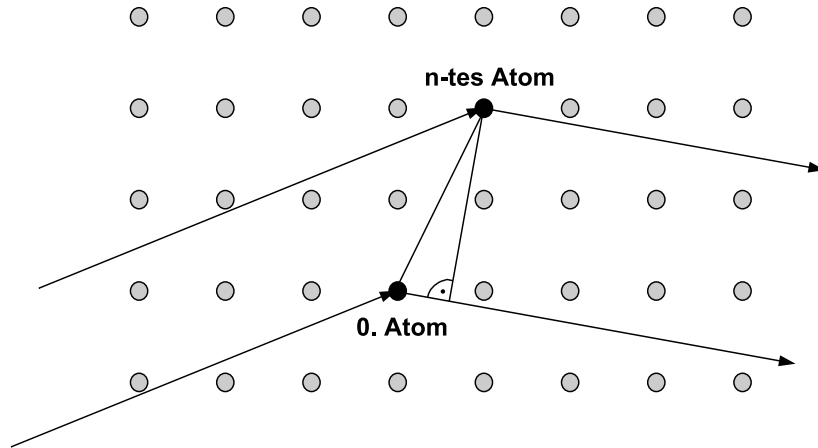


Abbildung 1.5: Die am n-ten Atom gestreute Welle erfährt eine Phasenverschiebung gegenüber der am 0. Atom gestreuten Welle.

Jede am n-ten Atom gestreute Welle erfährt eine Phasenverschiebung bezüglich  $\psi_0$  (Abb. 1.5). Mit Hilfe des Streuvektors  $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$  ergibt sich für die vom n-ten Atom ausgehende Streuwelle

$$\psi_n(\vec{k}_i, \vec{K}, \vec{r}) = f_n(\vec{k}_i, \vec{K}) \cdot e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \cdot e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_n}. \quad (1.12)$$

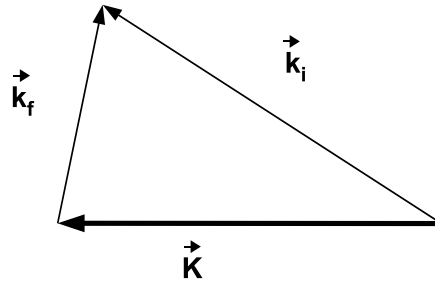


Abbildung 1.6: Definition des Streuvektors  $\vec{K}$ .

Die im Experiment messbare Größe ist die Gesamtintensität  $I$ . Diese ergibt sich als Summe der Einzelintensitäten  $I_n = |\psi_n|^2$  der gestreuten Wellen zu

$$\begin{aligned} I(\vec{k}_i, \vec{K}) &= \left| \sum_n \psi_n(\vec{k}_i, \vec{K}, \vec{r}) \right|^2 = \left| \sum_n f_n(\vec{k}_i, \vec{K}) \cdot e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \cdot e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_n} \right|^2 \\ &= \underbrace{\left| e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \right|^2}_{=1} \cdot \left| \sum_n f_n(\vec{k}_i, \vec{K}) \cdot e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_n} \right|^2. \end{aligned} \quad (1.13)$$

### 1.3.2 Kinematische Näherung

In der kinematischen Näherung wird eine Vereinfachung dahingehend gemacht, dass die Oberfläche, wie in Abb. 1.7 gezeigt, in Einheitszellen unterteilt wird, die in das Volumen hineinreichen. Diese Zellen können auch durchaus mehratomig sein.

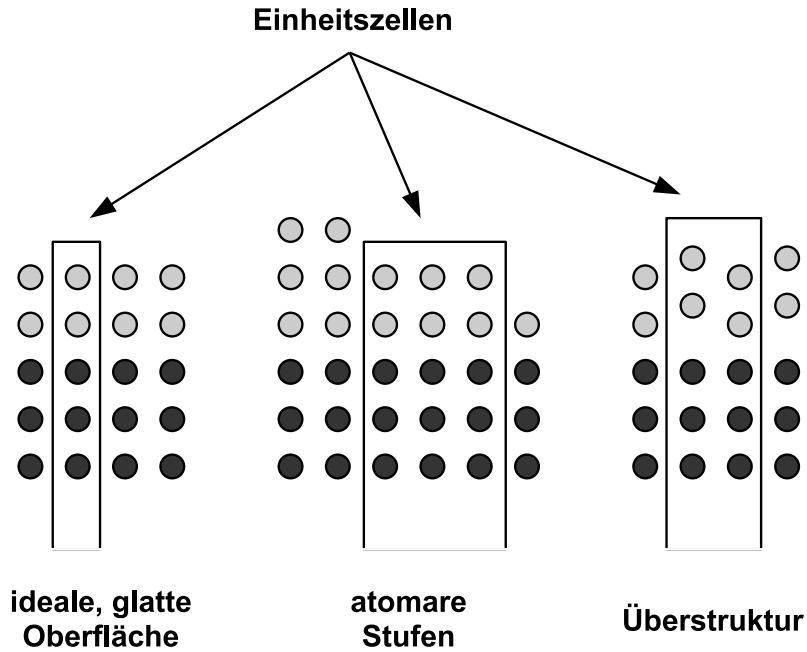


Abbildung 1.7: In der kinematischen Näherung wird die Oberfläche in Einheitszellen unterteilt, die in das Volumen hinabreichen. Das Rückstreuverhalten aller Einheitszellen wird gleichgesetzt.

Setzt man für das Rückstreuverhalten der Einheitszellen

$$\psi_{\vec{n}}^{unit}(\vec{k}_i, \vec{K}) = \sum_j f_j(\vec{k}_i, \vec{K}) \cdot e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_j}, \quad (1.14)$$

mit  $\vec{r}_j$  als Position des j-ten Atoms in der Einheitszelle, erhält man für die Intensität des gebeugten Elektronenstrahls

$$I(\vec{k}_i, \vec{K}) = \left| \psi(\vec{k}_i, \vec{K}, \vec{r}) \right|^2 = \left| \sum_{\vec{n}} \psi_{\vec{n}}^{unit}(\vec{k}_i, \vec{K}) \cdot e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_{\vec{n}}} \right|^2. \quad (1.15)$$

Nun wird das Rückstreuverhalten für alle Einheitszellen gleichgesetzt, also  $\psi_{\vec{n}}^{unit} = \psi^{unit}$  für alle  $\vec{n}$ . Damit vereinfacht sich die Intensität weiter und ergibt sich somit aus zwei Teilen:

$$I(\vec{k}_i, \vec{K}) = \underbrace{\left| \psi^{unit}(\vec{k}_i, \vec{K}) \right|^2}_{F(\vec{k}_i, \vec{K})} \cdot \underbrace{\left| \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_{\vec{n}}} \right|^2}_{G(\vec{K})}. \quad (1.16)$$

Hierbei ist F der dynamische Formfaktor und G der Gitterfaktor. Der Formfaktor hängt nur schwach von  $\vec{K}_{\parallel}$  ab, variiert aber stark mit  $\vec{K}_{\perp} \propto \sqrt{E}$ . Somit erhält man

$$I(\vec{K}, E) = F(E) \cdot G(\vec{K}). \quad (1.17)$$

Da der Formfaktor für alle Einheitszellen gleichgesetzt wird, werden alle Effekte, die durch unterschiedliche lokale Geometrien der Atome in den Einheitszellen (zum Beispiel Stufenatome) entstehen, vernachlässigt. Normierung der gemessenen Intensität auf die Gesamtintensität in der Brillouinzone ergibt [7]

$$\frac{I(\vec{K})}{\int_{BZ} dK_{\parallel} I(\vec{K})} = \frac{F \cdot G(\vec{K})}{\int_{BZ} dK_{\parallel} F \cdot G(\vec{K})} = \frac{F}{\langle F \rangle} G(\vec{K}) \approx G(\vec{K}). \quad (1.18)$$

Die Form des Reflexprofiles ergibt sich also im wesentlichen aus dem Gitterfaktor G.

### 1.3.3 Korrelationen

Da den Beugungsprofilen lediglich Informationen über Abstände von Streuern entnommen werden können, braucht man eine Funktion, die die Wahrscheinlichkeit angibt, zwei Streuer im Abstand  $\vec{r}$  zu finden.

Hierzu formt man den Gitterfaktor G um [8]:

$$\begin{aligned} G(\vec{K}) &= \sum_{\vec{n}} \sum_{\vec{m}} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{r}_{\vec{n}} - \vec{r}_{\vec{m}})} \\ &= \sum_{\vec{n}} \sum_{\vec{m}} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{r}_{\vec{n}+\vec{m}} - \vec{r}_{\vec{m}})} \\ &= \sum_{\vec{n}} \left\langle e^{i\vec{K} \cdot (\vec{r}_{\vec{n}+\vec{m}} - \vec{r}_{\vec{m}})} \right\rangle_{\vec{m}}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

$\vec{r}_{\vec{n}}$  und  $\vec{r}_{\vec{m}}$  sind hier die Positionen der  $\vec{n}$ -ten bzw.  $\vec{m}$ -ten Einheitszelle. Man erhält also eine Summation über die Abstände aller Einheitszellen.



Mit Hilfe der Paarkorrelationsfunktion  $C(\vec{r})$  läßt sich schreiben

$$G(\vec{K}) = \int d^3r C(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}. \quad (1.20)$$

Die Paarkorrelationsfunktion  $C(\vec{r})$ , die die Oberflächenmorphologie beschreibt, ist also die Fouriertransformierte des Gitterfaktors  $G(\vec{K})$ .

Die Profile werden bei einer festen Energie gemessen, also bei festem  $\vec{K}_\perp$  und variablem  $\vec{K}_\parallel$ . Um den Gitterfaktor in Abhängigkeit dieser Größen darzustellen, teilt man alle Vektoren in einen lateralen und einen vertikalen Anteil bezüglich der Oberfläche. Mit der Stufenhöhe  $d$ , dem Einheitsvektor senkrecht zur Fläche  $\vec{e}_\perp$  und den Gittervektoren in der Ebene des Gitters  $\vec{a}_i$  läßt sich (mit  $n_3 = h$ ) der Ortsvektor der  $n$ -ten Einheitszelle schreiben als

$$\vec{r}_{\vec{n}} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + h_{\vec{n}}d\vec{e}_\perp. \quad (1.21)$$

Setzt man weiter ein quadratisches Grundgitter voraus, also  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a$  mit der Gitterkonstante  $a$ , erhält man

$$\vec{r}_{\vec{n}} = \vec{n}a + h_{\vec{n}}d\vec{e}_\perp. \quad (1.22)$$

Eingesetzt in Gleichung 1.19 ergibt sich mit  $\vec{K}_\perp \cdot \vec{n} = 0$  und  $\vec{K}_\parallel \cdot \vec{e}_\perp = 0$  für den Gitterfaktor

$$\begin{aligned} G(\vec{K}) &= \sum_{\vec{n}} \left\langle e^{i(\vec{K}_\perp + \vec{K}_\parallel)((n+m)\vec{a} + h_{\vec{n}+\vec{m}}d\vec{e}_\perp - \vec{m}a - h_{\vec{m}}d\vec{e}_\perp)} \right\rangle_{\vec{m}} \\ &= \sum_{\vec{n}} \left\langle e^{i\vec{K}_\perp d\vec{e}_\perp (h_{\vec{n}+\vec{m}} - h_{\vec{m}})} \cdot e^{i\vec{K}_\parallel n\vec{a}} \right\rangle_{\vec{m}} \\ &= \sum_{\vec{n}} \left\langle e^{ik_\perp d (h_{\vec{n}+\vec{m}} - h_{\vec{m}})} \right\rangle_{\vec{m}} \cdot e^{i\vec{K}_\parallel n\vec{a}} \\ &= \sum_{\vec{n}} \phi(\vec{n}, \vec{K}_\perp) \cdot e^{i\vec{K}_\parallel n\vec{a}}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

$\phi(\vec{n}, \vec{K}_\perp)$  ist die Phasenkorrelation und hängt mit der Paarkorrelation  $C(\vec{r})$  zusammen über

$$\phi(\vec{n}, \vec{K}_\perp) = \sum_h C(\vec{n}, h) \cdot e^{i\vec{K}_\perp dh}. \quad (1.24)$$

Bei einer idealen, glatten Oberfläche gibt es keine Höhenunterschiede. Es ist  $C(\vec{n}, h) = \delta(h)$  und somit  $\phi = 1$ . Daraus folgt für den Gitterfaktor

$$G_{ideal}(\vec{K}_{\parallel}) = \sum_{\vec{G}_{\parallel}} \delta(\vec{K}_{\parallel} - \vec{G}_{\parallel}), \quad (1.25)$$

mit dem reziproken Gittervektor  $\vec{G}_{\parallel} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}$  ( $g_1$  und  $g_2$  ganze Zahlen). Gleichung 1.25 beschreibt den sogenannten „Stangenwald“ im reziproken Raum.

### 1.3.4 Instrumentelle Verbreiterung

Bislang sind alle Überlegungen zum Beugungsprofil  $G(\vec{K})$  ausgehend von einem perfekten Elektronenstrahl.

In der Realität ist es aber nötig, eine Verbreiterung auf Grund elektronenoptischer Einflüsse mit einzubeziehen. Dazu wird das Profil mit einer Instrumentenfunktion  $T(\vec{K})$  gefaltet, die sich aus der Summe aller unabhängigen Teilbündel zusammensetzt:

$$G_{exp}(\vec{K}) = \int d^3 K' \cdot T(\vec{K}') \cdot G(\vec{K} - \vec{K}'). \quad (1.26)$$

Die Verbreiterung der zentralen Spitze ist umgekehrt proportional zur Transversenweite. Diese ist definiert als die Breite der Oberfläche, die bei idealer Elektronenkanone die gleiche Verbreiterung des Reflexes erzeugt wie die gegebene Elektronenkanone bei einem idealen, unendlich grossen Kristall [9]. Sie gibt ein Maß dafür, welcher maximale Bereich auf der Oberfläche von einer Elektronenwelle ausgeleuchtet werden kann, so dass die gestreute Welle noch kohärent ist. Also in welchem Abstand Strukturen auf der Oberfläche noch aufgelöst werden können.

### 1.3.5 Streuphase S

Aus praktischen Gründen gibt man bei der Profilanalyse statt der Energie häufig die Streuphase  $S$  an. Sie ist ein Maß für den Gangunterschied zwischen zwei, an verschiedenen Bereichen der Oberfläche gestreuten, Wellen und besitzt bei konstruktiver Interferenz ganzzahlige Werte.

Die Streuphase ist folgendermaßen definiert:

$$S = \frac{\Delta s}{\lambda}. \quad (1.27)$$

Dabei ist  $\Delta s$  der Gangunterschied zwischen zwei Wellen, die an verschiedenen Terrassen mit dem Höhenunterschied  $d$  gestreut werden. Es gilt die Bragg-Beziehung

$$\Delta s = 2d \cos \theta. \quad (1.28)$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned} S &= \frac{2d \cos \theta}{\lambda} \\ \Leftrightarrow \lambda &= \frac{2d \cos \theta}{S}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Mit der Definition des Betrages des Streuvektors  $|\vec{K}| = \frac{2\pi}{\lambda}$  erhält man für die zur Oberfläche senkrechte Komponente des Streuvektors

$$\begin{aligned} K_{\perp} &= 2 \left| \vec{K} \right| \cos \theta = \frac{4\pi \cos \theta}{\lambda} \\ &= \frac{2\pi S}{d}. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Einen Zusammenhang zwischen Energie und Streuphase erhält man, wenn man für die Elektronen die De Broglie Wellenlänge  $\lambda = \frac{h}{p}$  nimmt und den Impuls der Elektronen einsetzt:

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar}{\sqrt{2m_e E}}. \quad (1.31)$$

Für die Streuphase ergibt sich somit nach Gleichung 1.29

$$\begin{aligned} S &= \frac{d \cos \theta \sqrt{2m_e E}}{\pi \hbar} \\ \Leftrightarrow E &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e} \left( \frac{S}{d \cos \theta} \right)^2. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Setzt man die Zahlenwerte der Konstanten ein, erhält man

$$E[\text{eV}] = 37,6 \left( \frac{S}{d[\text{\AA}] \cos \theta} \right)^2. \quad (1.33)$$

### 1.3.6 Gestufte Oberfläche

Bei einer gestuften Oberfläche ergeben sich im Beugungsbild Reflexe an den Stellen, die durch die ideale Oberfläche vorgegeben sind. Diese Reflexe lassen sich in zwei Anteile aufspalten: eine zentrale Spitze und eine diffuse Schulter [10].

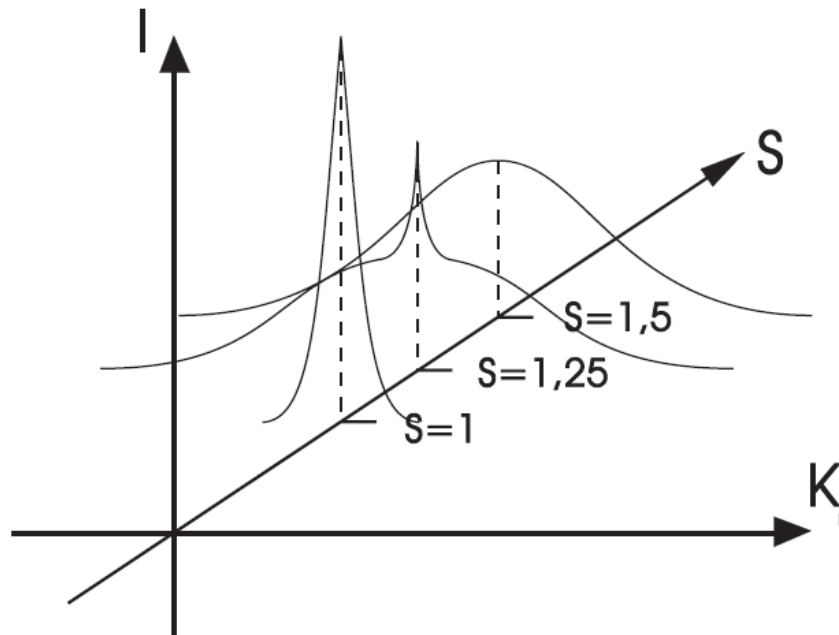


Abbildung 1.8: Bei einer gestuften Oberfläche ändert sich das Profil des Zentralreflexes mit der Streuphase  $S$  (aus [11]).

Durch konstruktive Interferenz erhält man den Anteil des Reflexes, der die zentrale Spitze darstellt. Diese ist lediglich instrumentell verbreitert. Da bei ganzzahliger Streuphase (In-Phase) nur konstruktive Interferenz auftritt, besitzt die Spitze hier maximale Intensität. Aus ihr lassen sich Aussagen über die vertikale Rauigkeit der Oberfläche gewinnen.

Bei halbzahliger Streuphase (Gegenphase) steckt die gesamte Intensität in der Schulter. An Stelle der konstruktiven Interferenz erhält man hier für den zentralen Reflex destruktive Interferenz und die Schulter ergibt sich aus der diffusen Streuung. Aus ihr lassen sich Aussagen über die laterale Rauigkeit der Oberfläche gewinnen.

### 1.3.6.1 Analyse der zentralen Spitze

Die Rauigkeit der Oberfläche wird durch die Untersuchung der Abhängigkeit des Gitterfaktors  $G(S)$  von der Streuphase  $S$  analysiert.

Eine Charakterisierung der Oberfläche läßt sich mit folgenden Parametern vornehmen:

- Die relative Bedeckung der  $h$ -ten Schicht  $\Theta_h$ . Diese ist der Anteil der Gesamtbedeckung, der in der  $h$ -ten Schicht aufgebracht wurde. Für die Gesamtbedeckung  $\Theta$  gilt:  $\Theta = \sum_h \Theta_h$ .
- Die sichtbare Bedeckung der  $h$ -ten Schicht  $p_h$ . Sie gibt den Anteil der sichtbaren Oberfläche der  $h$ -ten Schicht an und damit die Wahrscheinlichkeit einen Streuer in der  $h$ -ten Schicht zu finden. Also  $p_h = \theta_h - \theta_{h+1}$ . Es gilt:  $\sum_h p_h = 1$ .

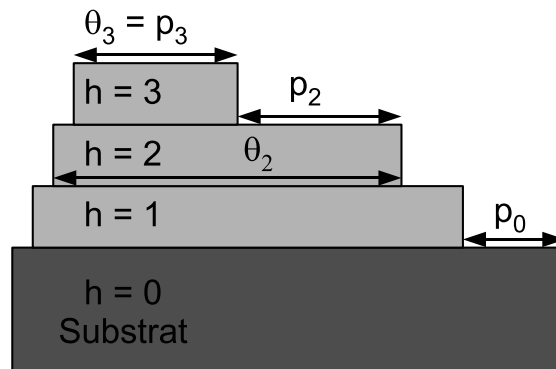


Abbildung 1.9: Die Oberfläche läßt sich über die relative Bedeckung  $\Theta_h$  und die sichtbare Bedeckung  $p_h$  der  $h$ -ten Schicht charakterisieren.

Nach Lent et al. [10] gilt in der horizontalen Projektion ( $K_{\parallel} = 0$ )

$$\begin{aligned}
 G(S) &= \left| \sum_h p_h e^{i2\pi h S} \right|^2 \\
 &= \sum_h C_h e^{i2\pi h S},
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

mit der vertikalen Paarkorrelation

$$C_h = \sum_k p_{k+h} p_k.$$

Diese ergibt sich durch Fouriertransformation aus der  $G(S)$ -Kurve. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, zwei Streuer zu finden, die einen Höhenunterschied  $h$  haben.

Eine Umkehrung von Gleichung 1.34 ist wegen des Betragsquadrates nicht möglich. Dennoch kann man die Schichtverteilung bestimmen, wenn man folgende Randbedingungen vorgibt:

- Die Gesamtbedeckung  $\Theta$  muß bekannt sein,
- Überwachsene Löcher müssen ausgeschlossen werden, also:  $\Theta_h \geq \Theta_{h+1}$ ,
- $\Theta = \sum_h \Theta_h$ ,
- $1 = \sum_h p_h$ .

Des Weiteren lässt sich aus der G(S)-Analyse die Rauhtiefe, oder RMS-Rauhigkeit,  $\Delta$ , als Standardabweichung der Höhenverteilung, bestimmen. Für diese gilt [10]

$$\Delta = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2} = \sqrt{\sum_{h \geq 0} C_h h^2}. \quad (1.35)$$

Aus der zweiten Ableitung nach S, also der Krümmung der G(S)-Kurve, lässt sich analytisch die Rauhtiefe bestimmen:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial S^2} = -4\pi^2 \sum_h C_h h^2 = -4\pi^2 \Delta^2. \quad (1.36)$$

Entwickelt man den Gitterfaktor G(S) in der Nähe von In-Phase-Bedingungen  $S_0$  in eine Taylorreihe, so ergibt sich in zweiter Ordnung eine Gauß-Kurve:

$$G(S) = e^{-\Delta^2(2\pi(S-S_0))^2} + O(\Delta S^4). \quad (1.37)$$

Mit dieser Näherung ergibt sich die Rauhtiefe direkt aus der Halbwertsbreite  $\Delta S$  [12]:

$$\Delta = \frac{\sqrt{\ln 2}}{2\pi \Delta S}. \quad (1.38)$$

Da im Experiment nur die Intensität  $I(\vec{K}, E) = F(E) \cdot G(\vec{K})$  zugänglich ist, muss der Formfaktor durch die Normierung der integralen Spitzenintensität auf die integrale Gesamtintensität in der Brillouinzone eliminiert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\int_{Spitze} d\vec{K}_{\parallel} I}{\int_{BZ} d\vec{K}_{\parallel} I} &= \frac{F}{\underbrace{\langle F \rangle}_{\approx 1}} \frac{\int_{Spitze} d\vec{K}_{\parallel} G(\vec{K}_{\parallel}, \vec{K}_{\perp})}{\underbrace{\int_{BZ} d\vec{K}_{\parallel} G(\vec{K}_{\parallel}, \vec{K}_{\perp})}_{=1}} \\ &= \int_{Spitze} d\vec{K}_{\parallel} G(\vec{K}_{\parallel}, \vec{K}_{\perp}) =: G(S). \end{aligned} \quad (1.39)$$

### 1.3.6.2 Analyse der diffusen Schulter

Während die Spitze die maximale Intensität bei In-Phase-Bedingungen hat, hat die Schulter oft maximale Intensität bei Gegenphase-Bedingungen, also bei halbzahligen Streuphasen  $S$ . Hierbei liegt für die gestreuten Wellen an Terrassen mit dem Höhenunterschied  $d$ , der Stufenhöhe, konstruktive Interferenz vor. Da es nur auf den relativen Höhenunterschied benachbarter Terrassen ankommt, lässt sich nicht sagen welche absolute Höhe diese Terrassen haben. Dadurch ergibt sich in Projektion ein Zwei-Schicht-System.

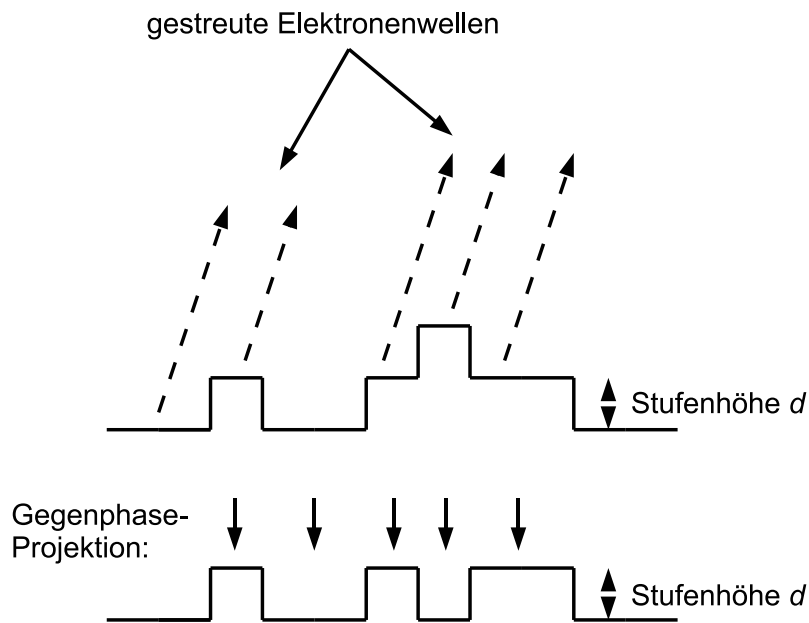


Abbildung 1.10: Bei Gegenphase kommt es zu destruktiver Interferenz zwischen den, an Terrassen mit dem Höhenunterschied  $d$ , gestreuten Elektronenwellen. Hierdurch ergibt sich in der Projektion ein Zwei-Schicht-System.

Für ein Zwei-Schicht-System ist das Profil der Schulter gegeben durch [13]

$$G(K_{\parallel}) = \frac{1}{\langle \Gamma_A \rangle \langle \Gamma_B \rangle} \frac{1}{2 [1 - \cos(K_{\parallel} a)]} \left[ \frac{(1 - \alpha)(1 - \beta)}{(1 - \alpha\beta)} + \frac{(1 - \bar{\alpha})(1 - \bar{\beta})}{(1 - \bar{\alpha}\bar{\beta})} \right]. \quad (1.40)$$

mit den mittleren Terrassenlängen des Substrates  $\langle \Gamma_A \rangle$  bzw. des Adsorbates  $\langle \Gamma_B \rangle$ .

Diese ergeben sich aus den entsprechenden Terrassenlängenverteilungen  $P_A(\Gamma)$  bzw.  $P_B(\Gamma)$  folgendermaßen:

$$\langle \Gamma_A \rangle = \sum_{\Gamma=1}^{\infty} P_A(\Gamma), \quad (1.41)$$

$$\langle \Gamma_B \rangle = \sum_{\Gamma=1}^{\infty} P_B(\Gamma). \quad (1.42)$$

$\alpha$  und  $\beta$  bezeichnen die Fouriertransformierten der Terrassenlängenverteilungen:

$$\alpha(K_{\parallel}) = \sum_{\Gamma=1}^{\infty} P_A(\Gamma) e^{iK_{\parallel} a \Gamma}, \quad (1.43)$$

$$\beta(K_{\parallel}) = \sum_{\Gamma=1}^{\infty} P_B(\Gamma) e^{iK_{\parallel} a \Gamma}. \quad (1.44)$$

$\bar{\alpha}$  und  $\bar{\beta}$  sind deren komplex konjugierte.

### Geometrische Terrassenlängenverteilung

Ausgehend von einer geometrischen Terrassenlängenverteilung

$$P(\Gamma) = N e^{-\frac{\Gamma}{\bar{\Gamma}}}, \quad (1.45)$$

erhält man für das Profil der Schulter eine Lorentzfunktion [13]:

$$G(K_{\parallel}) \sim \frac{1}{\kappa^2 + (aK_{\parallel})^2}, \quad (1.46)$$

mit

$$\kappa = \frac{1}{\langle \Gamma_A \rangle} + \frac{1}{\langle \Gamma_B \rangle}.$$

Die Halbwertsbreite beträgt

$$a\Delta K_{\parallel} = 2\kappa = \frac{2}{\langle \Gamma_A \rangle} + \frac{2}{\langle \Gamma_B \rangle}, \quad (1.47)$$

und in %BZ umgerechnet

$$FWHM[\%BZ] = a\Delta K_{\parallel} \frac{100\%BZ}{2\pi} = \frac{100\%BZ}{\pi} \left( \frac{1}{\langle \Gamma_A \rangle} + \frac{1}{\langle \Gamma_B \rangle} \right). \quad (1.48)$$

Somit wird die Halbwertsbreite der Schulter durch die kleinere der beiden mittleren Terrassenlängen dominiert.



Ist das Profil der Schulter isotrop, so ergibt sich im zweidimensionalen eine Lorentzfunktion mit Exponent  $3/2$ :

$$G(K_{\parallel}) \sim \frac{1}{\left[\kappa^2 + (aK_{\parallel})^2\right]^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.49)$$

Der Zusammenhang zwischen Halbwertsbreite und Terrassenlänge ergibt sich damit aus

$$a\Delta K_{\parallel} = 2\kappa\sqrt{2^{\frac{2}{3}} - 1}. \quad (1.50)$$

Wenn das Substrat nun mit einer halben Monolage bedeckt ist, also  $\langle\Gamma_A\rangle = \langle\Gamma_B\rangle = \langle\Gamma\rangle$ , so erhält man für die mittlere Terrassenlänge

$$\begin{aligned} \langle\Gamma\rangle &= \frac{4\sqrt{2^{\frac{2}{3}} - 1}}{a\Delta K_{\parallel}} \cdot \frac{100}{2\pi} \\ &\approx \frac{49[\%BZ]}{\Delta K_{\parallel}}. \end{aligned} \quad (1.51)$$

### Rauhe Oberfläche

Bei nicht ideal glatten Oberflächen erhält man zusätzlich zur Variation der Terrassenlänge eine Verteilung der Höhe der Stufen  $P(h)$ .

Im Grenzfall unendlicher Rauhtiefe ergibt sich damit für den Gitterfaktor

$$G(\vec{K}) = \frac{1}{2(1 - \cos ak_{\parallel})} \left[ \frac{(1 - \alpha_S)(1 - \alpha_T)}{1 - \alpha_S\alpha_T} + \frac{(1 - \bar{\alpha}_S)(1 - \bar{\alpha}_T)}{1 - \bar{\alpha}_S\bar{\alpha}_T} \right], \quad (1.52)$$

mit der Fouriertransformierten der Terrassenlängenverteilung  $\alpha_T$  und der Fouriertransformierten der Stufenhöhenverteilung  $\alpha_S$ :

$$\alpha_S = \sum_{h=1}^{\infty} P(h)e^{idk_{\perp}h}. \quad (1.53)$$

Für eine geometrische Terrassenlängenverteilung erhält man nun für den Gitterfaktor, bei Annahme einer symmetrischen Stufenhöhenverteilung ( $\alpha_S$  ist reell), eine Lorentzfunktion

$$G(\vec{K}) \sim \frac{1}{\kappa^2 + (ak_{\parallel})^2}, \quad (1.54)$$

mit

$$\kappa = \frac{1 - \alpha_S(k_{\perp})}{\langle\Gamma\rangle}.$$

Bei Stufen mit einer Höhe von einer atomaren Lage gilt  $\alpha_S = \cos dk_\perp$  und es folgt [8]

$$a\Delta k_\parallel = 2\kappa = \frac{2(1 - \cos dk_\perp)}{\langle \Gamma \rangle} \quad (1.55)$$

bzw.

$$FWHM[\%BZ] = \frac{100\%BZ}{\pi} \cdot \frac{1 - \cos 2\pi S}{\langle \Gamma \rangle}. \quad (1.56)$$

Die Halbwertsbreite oszilliert also mit der Phase  $S$ .

### Gammaverteilung

Gibt es eine Terrassenlänge die besonders häufig auftritt, läßt sich die Terrassenlängenverteilung durch eine Gammaverteilung  $P(\Gamma)$  beschreiben:

$$P(\Gamma) = \frac{\lambda^\mu}{\Gamma(\mu)} \Gamma^{\mu-1} e^{-\lambda\Gamma}. \quad (1.57)$$

Der Term im Nenner,  $\Gamma(\mu)$ , ist die Gammafunktion, die Parameter  $\mu$  und  $\lambda$  sind durch die mittlere Terrassenlänge  $\langle \Gamma \rangle$  und die Varianz  $\sigma^2 = \langle \Gamma^2 \rangle - \langle \Gamma \rangle^2$  gegeben:

$$\lambda = \frac{\langle \Gamma \rangle}{\sigma^2}, \quad (1.58)$$

$$\mu = \frac{\langle \Gamma \rangle^2}{\sigma^2}. \quad (1.59)$$

Den Zusammenhang zwischen geometrischer Verteilung und Gammaverteilung erhält man mit  $\mu = 1$ , also  $\langle \Gamma \rangle = \sigma$ . Damit folgt aus der Gammaverteilung direkt die geometrische Verteilung.

Bei scharfen Terrassenlängenverteilungen ergeben sich ringartige Intensitäten um den Reflexen in den 2D-Aufnahmen, sogenannte „Henzler Ringe“.

Für die Profilanalyse lassen sich diese Strukturen durch die Summe zweier Lorentzfunktionen beschreiben, die gleichermaßen nach links und rechts verschoben sind [14]. Man erhält dadurch eine sogenannte „Ringlorentzfunktion“

$$G(K_\parallel) \sim \frac{1}{\left(\frac{\Delta K_\parallel}{2}\right)^2 + (K_\parallel - \delta)^2} + \frac{1}{\left(\frac{\Delta K_\parallel}{2}\right)^2 + (K_\parallel + \delta)^2}. \quad (1.60)$$

Sie ist charakterisiert durch ihre Halbwertsbreite

$$a\Delta K_{\parallel} \langle \Gamma \rangle = \frac{\pi^2}{2 \langle \Gamma \rangle} \left( \frac{\sigma}{\langle \Gamma \rangle} \right)^2 \quad (1.61)$$

und ihre Verschiebung

$$a\delta \langle \Gamma \rangle = \frac{\pi}{\langle \Gamma \rangle} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{6} \left( \frac{\sigma}{\langle \Gamma \rangle} \right)^4 \right]. \quad (1.62)$$

Hieraus lassen sich die mittlere Terrassenlänge  $\langle \Gamma \rangle$  und die Varianz  $\sigma$  bestimmen [8]:

$$\sigma = \sqrt{\chi} \cdot \langle \Gamma \rangle, \quad (1.63)$$

$$\langle \Gamma \rangle = \frac{\pi^2}{a\Delta K_{\parallel}} \cdot \chi. \quad (1.64)$$

mit

$$\gamma = \frac{\delta}{\Delta K_{\parallel}}$$

und

$$\chi = -\frac{3\gamma}{\pi} + \sqrt{\left( \frac{3\gamma}{\pi} \right)^2 + \left( \frac{6}{\pi^2} \right)}.$$

### 1.3.7 Mosaik

Mosaik sind Oberflächendefekte, bei denen einzelne Bereiche gegenüber der ebenen Oberfläche um einen Winkel  $\vartheta$  verkippt sind. Die Atome sitzen dabei, anders als zum Beispiel bei Facetten, nicht auf Gitterplätzen.

Schwanken die Mosaikwinkel um einen mittleren Winkel  $\vartheta = 0$ , so spricht man von Mosaiken ohne Vorzugsrichtung. Diese sind zumeist unerwünschte Effekte durch Präparationsfehler oder durch Verspannungen des Substrates. Bei Heteroepitaxie können sich zusätzlich auf der Oberfläche Mosaik mit Vorzugsrichtungen ausbilden. Durch ihren Einbau können Verspannungen auf Grund der Gitterfehlpassung abgebaut werden. Aus der Analyse dieser Mosaik lassen sich Aussagen über das Wachstum machen.

Als Beispiele seien hier die Epitaxie von NiO und MgO auf Ag(100) [15], von NaCl auf Ag(100) [16] und von ZnSe auf GaAs(001) [17] genannt.

### 1.3.7.1 Mosaik ohne Vorzugsrichtung

Im reziproken Raum führen Mosaik zu einer Verbreiterung der Reflexprofile.

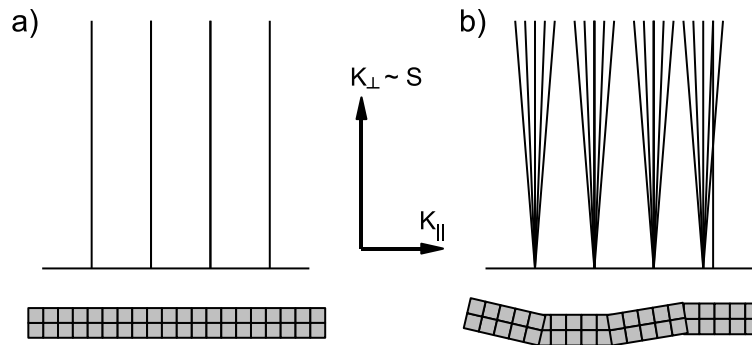


Abbildung 1.11: a) Ideale Oberfläche führt zu idealen Stangen im reziproken Raum. b) Oberfläche mit Mosaiken ergibt proportional zur Phase verbreiterte Stangen im reziproken Raum.

Ist die Oberfläche glatt bis auf Mosaik, hat man also insbesondere keine Stufen, steigt die Halbwertsbreite der Beugungsprofile linear mit der Phase an. Die konstante Halbwertsbreite aus Kapitel 1.3.6.2 geht über in eine Funktion  $H(S)$ .

Aus Abbildung 1.12 liest man direkt

$$\frac{\frac{\Delta K_{\parallel}}{2}}{K_{\perp}} = \tan \frac{\Delta \vartheta}{2} \quad (1.65)$$

ab.

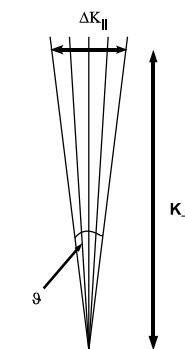


Abbildung 1.12: Skizze zur Herleitung von Formel 1.65

Für kleine Winkel ist  $\tan \vartheta \approx \vartheta$ , und mit Gleichung 1.48 und 1.30 erhält man

$$\frac{\Delta\vartheta}{2} = \frac{1}{2} \frac{\frac{2\pi \cdot H(S)}{100 \cdot a}}{\frac{2\pi S}{d}} = \frac{d}{a} \frac{H(S)}{200 \cdot S}. \quad (1.66)$$

Bei (100)-Orientierung eines fcc-Kristalls gilt  $d = \frac{a_0}{2}$  und  $a = \frac{a_0}{\sqrt{2}}$  (siehe Kapitel 2.1.1). Man erhält für die Varianz der Mosaikwinkel

$$\Delta\vartheta = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{H(S)}{100 \cdot S}. \quad (1.67)$$

Ist die Oberfläche ohne Mosaik nicht glatt, sondern enthält atomare Stufen, setzt sich die Halbwertsbreite aus zwei Teilen zusammen. Man erhält Oszillationen durch die atomaren Stufen (Gl. 1.56) und durch Mosaik einen linearen Anstieg mit der Phase  $S$  (Gl. 1.67):

$$\begin{aligned} H(S) &= H_{\text{Stufen}}(S) + H_{\text{Mosaik}}(S) \\ &= 100 \left[ \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1 - \cos 2\pi S}{\langle \Gamma \rangle} + \sqrt{2} \Delta\vartheta S \right]. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Die Halbwertsbreite  $H(S)$  ist hier ebenfalls in %BZ angegeben.

### 1.3.7.2 Mosaik mit Vorzugsrichtung

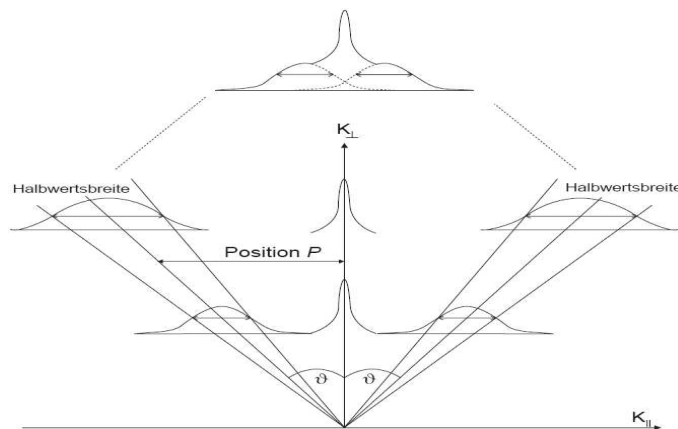


Abbildung 1.13: Bei Mosaiken mit Vorzugsrichtung steigen sowohl deren Halbwertsbreiten  $H(S)$  als auch deren Positionen  $P(S)$  linear mit der Phase  $S$  an (aus [7]).

Durch Mosaik mit Vorzugsrichtungen ergeben sich im Beugungsbild Satellitenreflexe. Diese lassen sich durch ihre Halbwertsbreite  $H(S)$  und ihre Position  $P(S)$  charakterisieren, welche beide linear mit der Phase ansteigen. Die Position der Satellitenreflexe ist hierbei deren Abstand vom Hauptreflex. Abb. 1.13 zeigt die Situation im reziproken Raum.

Analog zur Herleitung von Gl. 1.67 ergibt sich hier aus der Position  $P(S)$  der mittlere Mosaikwinkel  $\vartheta$ :

$$\tan \vartheta = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{P(S)}{100 \cdot S}. \quad (1.69)$$

Aus der Halbwertsbreite  $H(S)$  der Satellitenreflexe läßt sich die Halbwertsbreite  $\Delta\vartheta$  der Winkelverteilung bestimmen (siehe Abb. 1.14).

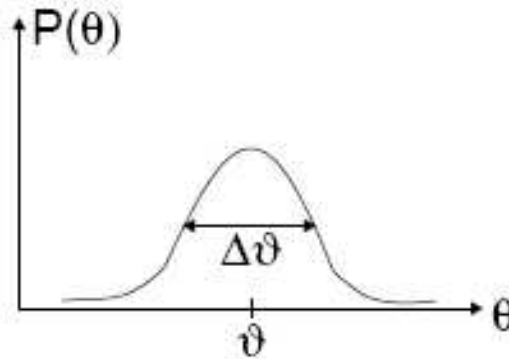


Abbildung 1.14: Die Halbwertsbreite der Satellitenreflexe gibt die Halbwertsbreite der Winkelverteilung  $P(\theta)$ . Diese ist ein Maß für die Schwankung der Mosaikwinkel um  $\vartheta$  (aus [7]).

Man erhält für die Schwankung der Mosaikwinkel  $\Delta\vartheta$  um  $\vartheta$

$$\tan \left( \vartheta + \frac{\Delta\vartheta}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{P(S) + \frac{H(S)}{2}}{100 \cdot S}. \quad (1.70)$$

Für kleine Winkel ( $\tan \vartheta \approx \vartheta$ ) ergibt sich mit Gl. 1.69

$$\Delta\vartheta = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{H(S)}{100 \cdot S}. \quad (1.71)$$

Dieser Ausdruck ist der gleiche wie bei Mosaiken ohne Vorzugsrichtung, jedoch wird hier die Halbwertsbreite der Satellitenreflexe betrachtet.

In der Praxis werden für die Profilanalyse die gemessenen Profile mit Ringlorntzfunktionen mit Exponent  $\frac{3}{2}$  gefittet, wie sie in Kapitel 1.3.6.2 für die Analyse von Profilen bei gammaverteilten Terrassenlängen beschrieben wurden. In den Profilen ergeben sich durch beide Effekte gleiche Strukturen, wenn man die Phasenabhängigkeit bei den Mosaiken vernachlässigt.

## 1.3.7.3 quasi-G(S)-Kurven

Auf der Oberfläche wechseln sich ebene Bereiche mit Mosaiken, verkippten Bereichen, ab. Die verkippten Bereiche haben die Längen  $\Lambda$  und bedecken insgesamt einen Teil  $\theta$  der Oberfläche. Die ebenen Bereiche haben die Längen  $\Gamma$  und bedecken einen Teil  $(1 - \theta)$  der Oberfläche, vorausgesetzt die Gesamtbedeckung ist  $\Theta = 1$  (Abb. 1.15).

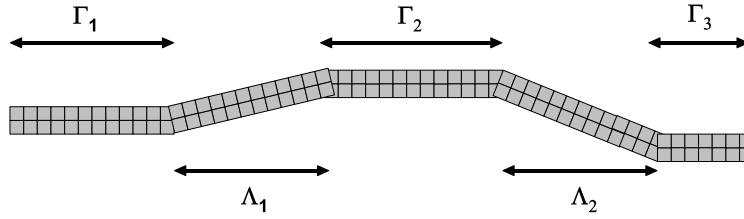


Abbildung 1.15: Auf der Oberfläche wechseln sich ebene Bereiche der Länge  $\Gamma$  und verkippte Bereiche der Länge  $\Lambda$  ab.

Im Beugungsbild sind die verkippten Bereiche als Satellitenreflexe zu sehen, die ihre Position mit der Phase ändern.

Die ebenen Bereiche ergeben eine zentrale Spitze mit Schulter, deren Intensität mit der Phase oszilliert.

Zusätzlich entsteht durch eine stark repräsentierte mittlere Terrassenlänge ein Satellit, dessen Position phasenunabhängig ist.

Betrachtet man nur einen Bereich nahe  $K_{\parallel} = 0$ , so hat der Anteil der Satelliten durch Mosaiken hier kein Gewicht. Im Vergleich zu Kapitel 1.3.6.1 ist allerdings nicht die gesamte Oberfläche mit ebenen Bereichen bedeckt, sondern nur ein Teil  $(1 - \theta)$ . Dadurch erreichen die Intensitätsschwankungen im Maximum einen geringeren Wert als in Kapitel 1.3.6.1 für eine gestufte Oberfläche.

Im Bereich um  $K_{\parallel} \approx 0$  gilt für die Gesamtintensität  $I_{gesamt}$  und die Intensität der Spitze  $I_0$  [7]

$$I_{gesamt}(K_{\parallel} \approx 0) = \langle |f|^2 \rangle = |f|^2 (1 - \theta), \quad (1.72)$$

$$\begin{aligned} I_0(K_{\parallel} \approx 0) &= |\langle f \rangle|^2 \\ &= |f|^2 \left| \sum_h p_h e^{2\pi i S h} \right|^2 \\ &= |f|^2 (1 - \theta)^2 \left| \sum_h p'_h e^{2\pi i S h} \right|^2, \end{aligned} \quad (1.73)$$

mit

$$p'_h = \frac{p_h}{1 - \theta}.$$

Normiert man nun die Intensität der Spitze auf die Gesamtintensität, erhält man einen mit quasi-G(S) bezeichneten Ausdruck:

$$q - G(S) = \frac{I_0}{I_{gesamt}} = (1 - \theta) \left| \sum_h p'_h e^{2\pi i S h} \right|^2. \quad (1.74)$$

$\left| \sum_h p'_h e^{2\pi i S h} \right|^2$  ist hier die aus Kapitel 1.3.6.1 bekannte herkömmliche G(S)-Kurve.

Insgesamt erhält man also eine oszillierende Intensität, deren Maximum, im Vergleich zu einer gestuften Oberfläche, um den Faktor  $(1 - \theta)$  gestaucht ist. Im Grenzfall einer Oberfläche ohne Mosaike ( $\theta = 0$ ) ergibt sich hieraus wieder Gleichung 1.34.



# Kapitel 2

## Materialeigenschaften und Präparation

Als Substrat wird für diese Arbeit ein Silberkristall mit (100)-Orientierung verwendet. Auf diesen werden reaktiv dünne Magnesiumoxid- und Nickeloxidfilme aufgewachsen.

In diesem Kapitel werden die Eigenschaften der genutzten Materialien vorgestellt. Außerdem werden Präparationstechniken zur Vorbereitung des Substrates und zum Aufwachsen der Adsorbate erläutert.

### 2.1 Materialeigenschaften

#### 2.1.1 Silber

Silber ist ein weißglänzendes, polierfähiges Edelmetall. Es kristallisiert in kubisch-flächenzentrierter (fcc) Struktur mit einatomiger Basis (Abbildung 2.1) und einer Volumengitterkonstante von  $a_0 = 4,09 \text{ \AA}$  [18].

Von allen Metallen besitzt es mit  $\sigma = 62 \cdot 10^6 \text{ S/m}$  die größte elektrische Leitfähigkeit [19]. Der Schmelzpunkt von Silber liegt bei 1234,93 K [18].

Für diese Arbeit wird als Substrat eine Silberprobe mit (100)-Orientierung gewählt. Die Oberfläche weist eine (1x1)-Struktur auf (Abbildung 2.2, 2.3).

Es ergibt sich eine Stufenhöhe von  $d = 2,05 \text{ \AA}$  und ein Abstand zum nächsten Nachbarn von  $a = 2,89 \text{ \AA}$ .

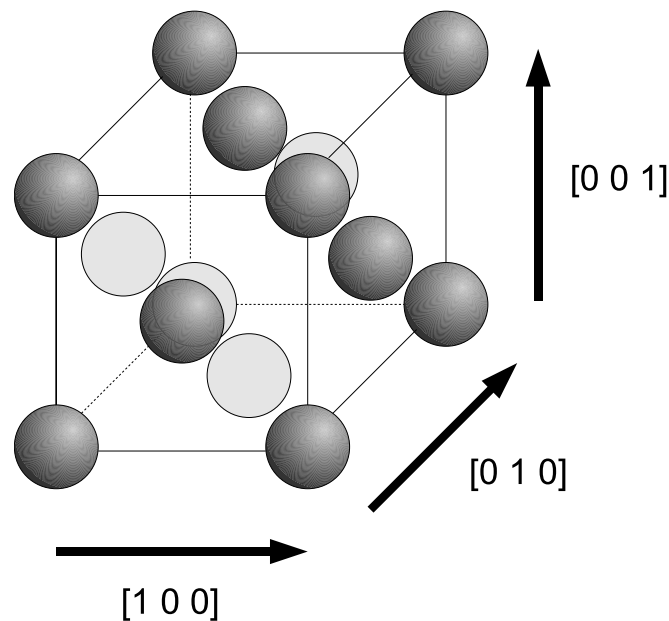


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Einheitszelle eines fcc-Kristalls.

### 2.1.2 Magnesiumoxid

Magnesiumoxid (MgO) ist ein Salz, welches bei der Oxidation von Magnesium entsteht. Mit einer Bandlücke von 7,77 eV [20] gehört es zur Gruppe der Isolatoren. Der Schmelzpunkt von Magnesiumoxid liegt bei etwa 3100 K [21] und damit weit über dem von Silber. Grund dieser hohen Schmelztemperatur ist die vorliegende Ionenbindung zwischen  $\text{Mg}^{2+}$  und  $\text{O}^{2-}$  Ionen auf Grund der großen Differenz der Elektronegativitäten der beiden Elemente (1,2 für Magnesium und 3,5 für Sauerstoff auf der Pauling-Skala [22]).

Genau wie Silber kristallisiert auch MgO in der fcc-Struktur, allerdings mit zweiatomiger Basis (sogenannte NaCl-Struktur). Dominiert durch die Sauerstoffionen ergibt sich hierbei eine Volumengitterkonstante von  $a_0 = 4,21 \text{ \AA}$  und damit eine Stufenhöhe von  $d = 2,11 \text{ \AA}$  sowie der Abstand zum nächsten Nachbarn von  $a = 2,98 \text{ \AA}$ .

Substanz	Gitterkonstante $a_0$ [ $\text{\AA}$ ]	N.N. Abstand $a$ [ $\text{\AA}$ ]	Stufenhöhe $d$ [ $\text{\AA}$ ]
Ag	4,09	2,89	2,05
MgO	4,21	2,98	2,11
NiO	4,18	2,96	2,09

Tabelle 2.1: Zusammenfassung der geometrischen Eigenschaften der (100)-Orientierung der verwendeten Materialien.

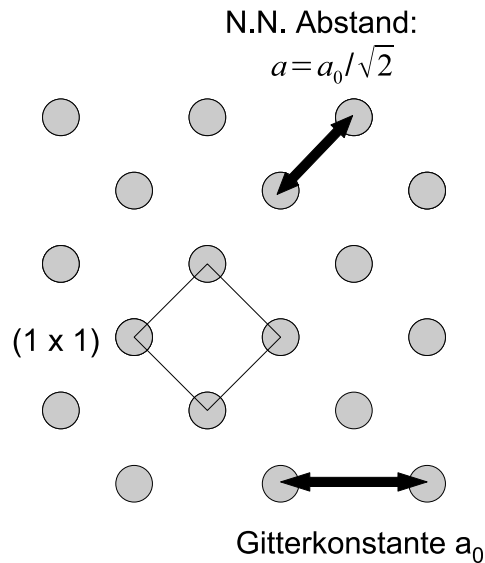


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der (100)-Orientierung eines fcc-Kristalls von oben.

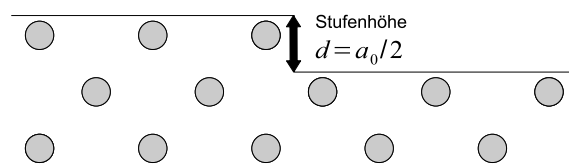


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der (100)-Orientierung eines fcc-Kristalls von der Seite.

### 2.1.3 Nickeloxid

Nickel(II)oxid (NiO) ist ein schwarzer Feststoff, der bei der Oxidation von Nickel entsteht. Im Gegensatz zu MgO kann man bei NiO nicht mehr von einem guten Isolator sprechen, denn mit einer Bandlücke von 3,7 eV [23] findet man schon Ähnlichkeiten zu Halbleitern.

Der Schmelzpunkt liegt mit 2230 K [24] unter dem von MgO, aber immer noch deutlich über dem von Silber. Durch die hohe Elektronegativitätsdifferenz (Elektronegativität für Nickel: 1,8 [22]) liegt auch hier eine Ionenbindung zwischen  $\text{Ni}^{2+}$  und  $\text{O}^{2-}$  vor und es ergibt sich wie beim Magnesiumoxid eine fcc-Kristallstruktur mit zweiatomiger Basis. Die Volumengitterkonstante beträgt  $a_0 = 4,18 \text{ \AA}$ , womit sich der Abstand zum nächsten Nachbarn zu  $a = 2,96 \text{ \AA}$  und die Stufenhöhe zu  $d = 2,09 \text{ \AA}$  ergibt.

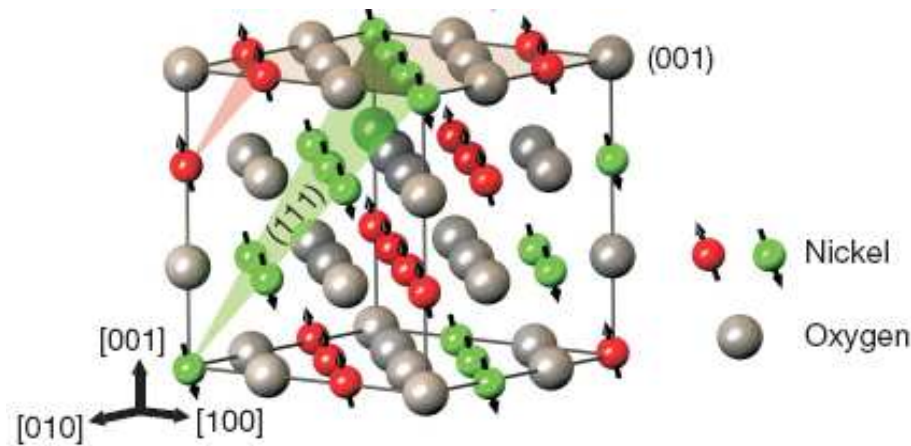


Abbildung 2.4: Orientierung der Spins in antiferromagnetischem Nickeloxid [25].

Von großem Interesse ist Nickeloxid auf Grund seiner magnetischen Eigenschaften. NiO ist ein zentrosymmetrischer Antiferromagnet mit einer Néel-Temperatur von  $T_N = 523\text{K}$ . Die Spins sind dabei ferromagnetisch entlang (111)-Flächen angeordnet, wobei benachbarte Flächen jeweils entgegengesetzt orientiert sind [26] (siehe Abb. 2.4).

## 2.2 Präparation

### 2.2.1 ex-situ Präparation des Substrates

Es wird eine Silberprobe verwendet, die per Funkenerosion aus einem Silber-Einkristall herausgeschnitten wurde. Um die dabei entstandenen Schäden an der Oberfläche zu beheben, wurde der Kristall zunächst mit einem Ätzbad aus mittelsaurer Salpetersäure ( $\text{HNO}_3$ ) behandelt, anschließend orientiert und mittels eines Verfahrens von Ammer et al. [27] poliert. Die (100)-Orientierung der Oberfläche wurde mittels Röntgenbeugung auf  $\pm 0,07^\circ$  genau nachgewiesen.

### 2.2.2 in-situ Präparation des Substrates

Um Verunreinigungen (zum Beispiel adsorbierte Wassermoleküle und Oxide durch den Transport durch Luft) vollständig zu entfernen, und um bereits aufgedampfte MgO-/NiO-Schichten wieder zu entfernen, wird der Silberkristall gesputtert. Hierbei wird die Oberfläche mit  $\text{Ar}^+$ -Ionen beschossen, wodurch Stoßkaskaden durch den Kristall laufen, die am Ende Oberflächenatome ablösen.

Als optimale Parameter haben sich hier ein Ar-Partialdruck von  $1 \cdot 10^{-6}$  mbar, ein Sputterstrom von  $2 \mu\text{A}$ , eine Energie von  $3\text{keV}$  und eine Substrattemperatur von  $440\text{ K}$  herausgestellt [28]. Um dabei entstehende Oberflächendefekte wieder auszuheilen, ist es nötig den Kristall nach dem Sputtern zu tempern. Es wird eine Maximaltemperatur von  $750\text{ K}$  und eine mittlere Rampe von  $50\text{ K/min}$  beim Heizen genutzt. Um beim Abkühlen eine homogene Kristallstruktur zu erhalten, wird die Temperatur im Mittel um  $20\text{ K/min}$  heruntergefahren. Diese Zyklen von Sputtern / Ausheilen werden solange wiederholt bis das Augerspektrum keinerlei Verunreinigungen des Substrates, vor allem durch Adsorbatreste und Bulk-Sauerstoff, mehr aufweist.

### 2.2.3 Oxidation der Adsorbate

Für das Herstellen einer dünnen Metalloxidschicht gibt es mehrere Möglichkeiten.

Zum einen kann man die Oberfläche eines Metall-Einkristalls oxidieren. Untersuchungen an Nickel in diese Richtung ergaben auf Grund der sehr hohen Gitterfehlpassung ( $m_{\text{NiO}/\text{Ni}} = 17,1\%$ ,  $a_{0\text{Ni}} = 3,52\text{ \AA}$  [29]) eine relativ kleine Kristallitgröße von  $50\text{ \AA}$  und einen großen Mosaikwinkel von etwa  $8,1^\circ$  [30].

Weitaus bessere NiO-Filme erzielt man durch reaktives Aufwachsen des NiO-Films in Sauerstoffatmosphäre. Hierbei wird metallisches Nickel verdampft und reagiert mit dem Sauerstoff zu Nickeloxid, welches dann auf dem Substrat aufwächst. Abbildung 2.5 zeigt schematisch das Prinzip des reaktiven Wachstums. Für Raumtemperatur ergab sich als optimaler Sauerstoffpartialdruck  $p_{\text{O}_2} = 1 \cdot 10^{-6}$  mbar [31] für die Epitaxie von Nickeloxid auf Silber.

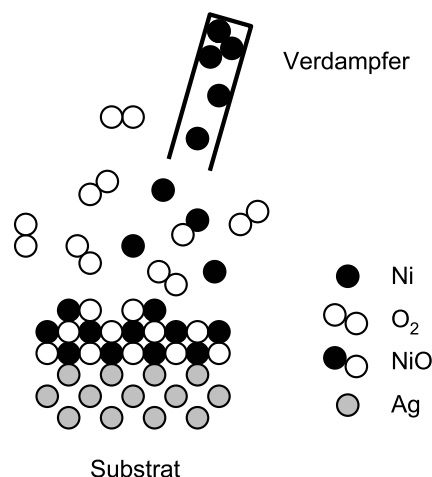


Abbildung 2.5: Schema des reaktiven Wachstums am Beispiel von NiO auf Ag. Zur Vereinfachung sind alle Atomsorten in der gleichen Größe dargestellt.

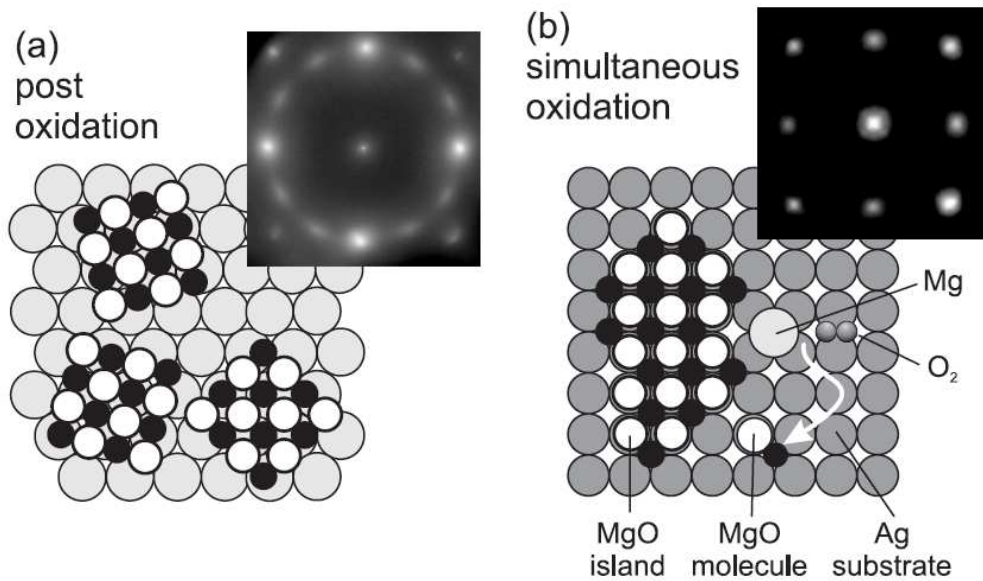


Abbildung 2.6: LEED-Aufnahmen und daraus entwickelte Modelle der erhaltenen MgO-Schichten bei Oxidation einer Magnesiumschicht auf Silber (a) und bei reaktivem Wachstum von Magnesiumoxid auf Silber (b) [32].

Eine weitere Methode zur Herstellung dünner Oxidschichten ist das Aufwachsen eines metallischen Filmes und anschließendes Oxidieren in Sauerstoffatmosphäre. Aufbringen einer Magnesiumschicht auf Silber und anschließendes Oxidieren führt jedoch zu einer Schicht, die nicht nur aus Magnesiumoxid, sondern auch aus Teilen metallischen Magnesiums besteht. Anschließendes Heizen wandelt zwar den Film komplett in Magnesiumoxid um, allerdings liegen dann MgO-Domänen in drei verschiedenen Orientierungen vor (jeweils um  $120^\circ$  verdreht) (siehe Abb. 2.6). Im Vergleich dazu erhält man bei reaktiv aufgewachsenem Magnesiumoxid nur eine Orientierung und außerdem perfekte Stöchiometrie [32].

Für diese Arbeit wird folglich das reaktive Wachstum von Magnesium- und Nickeloxid benutzt, um möglichst perfekte Filme herzustellen.

## 2.3 Motivation für das System

Ein wichtiges Kriterium bei der Wahl des Substrates ist eine möglichst geringe Gitterfehlانpassung zwischen Substrat und Adsorbat. Sie bestimmt in großem Maße, ob es überhaupt zu epitaktischem Wachstum kommt.

Mit den oben gegebenen Werten der Gitterkonstanten erhält man für die Heteroepitaxie von Magnesiumoxid auf Silber nach Formel 1.6 eine Gitterfehlانpassung von  $m_{MgO/Ag} = 2,9\%$ , für Nickeloxid auf Silber  $m_{NiO/Ag} = 2,2\%$  und für Nickeloxid auf Magnesiumoxid  $m_{NiO/MgO} = -0,7\%$ . Dieses sind die geringsten möglichen Werte zwischen MgO bzw. NiO und einem Metall mit fcc-Struktur.

	Ag	MgO	NiO
Ag	—	2,9 %	2,2 %
MgO	2,9 %	—	0,7 %
NiO	2,2 %	0,7 %	—

Tabelle 2.2: Zusammenfassung der Beträge der Gitterfehlانpassungen der verwendeten Materialien untereinander.

Des weiteren ist bekannt, dass Oxide metallische Substrate sehr gut benetzen, da ihre Oberflächenenergien im allgemeinen geringer sind als die von Metallen [1]. Zudem machen metallische Substrate Untersuchungen mit geladenen Teilchen (wie z.B. SPA-LEED, AES, STM, ...) an isolierenden Oxidschichten erst möglich, da sie ein Aufladen der Probe verhindern. Somit eignet sich Silber als Substrat für MgO- und NiO-Filme also ausgezeichnet.

Auch das reaktive Aufwachsen der Filme stellt kein Problem dar, denn die Reaktionskinetik von Silber mit Sauerstoff ist sehr gering im Vergleich zu Magnesium mit Sauerstoff [33]. Es kommt also nicht zur Oxidation des Substrates.

Zum Wachstum von Magnesiumoxid und Nickeloxid auf Silber gibt es bereits einige Veröffentlichungen ([15], [32], [34] - [41]).

Als Ergebnis läßt sich festhalten, dass sowohl MgO als auch NiO auf Silber zunächst als zweistöckige Inseln aufwächst. Diese Doppellage wächst pseudomorph, also mit der lateralen Gitterkonstante des Substrates. Im weiteren Verlauf des Wachstums findet man Lage-für-Lage - Wachstum, wobei sich die Gitterkonstante innerhalb von etwa 10 ML auf den Wert des Oxides verändert. Um die Energie der Verspannungen dabei zu kompensieren, bilden sich ab etwa 2ML (MgO) bzw. 5 ML (NiO) Mosaike auf der Oberfläche, deren Winkel sich mit steigender Bedeckung immer weiter verringern.

Beim reaktiven Wachstum von Nickeloxid auf Silber findet man jedoch auch eine Legierungsbildung zwischen dem Silbersubstrat und den aufgedampften Nickelatomen, vor allem bei hohen Temperaturen. Dieses ist bei der Epitaxie von Nickel auf Silber von Aufray et al. ebenfalls beobachtet worden [42].

Um diese Legierungsbildung zu verhindern, aber dennoch die Eigenschaften des Silbersubstrates zu nutzen, wird in dieser Arbeit eine MgO-Buffer-Schicht verwendet. In dem System Fe/MgO/NiO/Ag(001) ist bereits erfolgreich eine MgO-Buffer-Schicht genutzt worden, um Reaktionen zwischen dem Eisen und dem Nickeloxid zu unterbinden [43].

Als Orientierung wird hier die (100)-Oberfläche genutzt, da diese einer nicht-polaren Oberfläche der Adsorbate entspricht. Die polare (111)-Oberfläche dieser Materialien besteht entweder nur aus Kationen oder nur aus Anionen, und ist somit auf Grund sehr hoher Oberflächenenergie nicht stabil [44]. Bei MgO ergeben sich hierbei, je nach Umgebungsbedingungen, Rekonstruktionen der Oberfläche [45] oder es bilden sich Facetten [46]. Für NiO ergeben sich zur Stabilisierung der (111)-Oberfläche Rekonstruktionen [47]. Dadurch ist es nicht möglich, glatte dünne Filme herzustellen.

Hier muß angemerkt werden, dass es Kiguchi et al. gelungen ist, einen stabilen, nicht rekonstruierten MgO(111)-Film auf Ag(111) zu wachsen, jedoch nicht mit üblichen MBE-Methoden [48]. Dieser wies dann aber auch keine Isolator-Eigenschaften mehr auf.



# Kapitel 3

## Experimenteller Aufbau

In dieser Arbeit wird die Epitaxie von kristallinen Isolatorschichten auf Silber untersucht. Epitaxie (griech: „epi“ - „auf“, „über“ und „taxis“ im Sinne von „ordnen“ bzw. „ausrichten“ [49]) bezeichnet das geordnete Wachstum von Kristallen.

Um hierbei Verunreinigungen durch Restgasatome zu vermeiden, ist es notwendig, alle Experimente unter Ultrahochvakuum-Bedingungen (UHV  $p \cong 1 \cdot 10^{-10}$  mbar) durchzuführen. Nimmt man einen Haftkoeffizienten von 1 für die Restgasatome an, beträgt die Experimentierzeit, in der die Fremdatome nur einen vernachlässigbaren Teil der Oberfläche bedecken, mehrere Stunden.

Zur Präparation und Analyse stehen in der Kammer zur Verfügung:

- verschiedene Pumpen zur Erzeugung des Vakuums
- Massenspektrometer zur Restgasanalyse
- Sputterkanone zum Säubern des Substrates
- Magnesium- und Nickelverdampfer zum Aufbringen der Adsorbate
- Auger Elektronen Spektroskopie zur Analyse der Stöchiometrie der aufgedampften Filme
- SPA-LEED als Primärmethode zur Analyse der Morphologie der aufgewachsenen Schichten

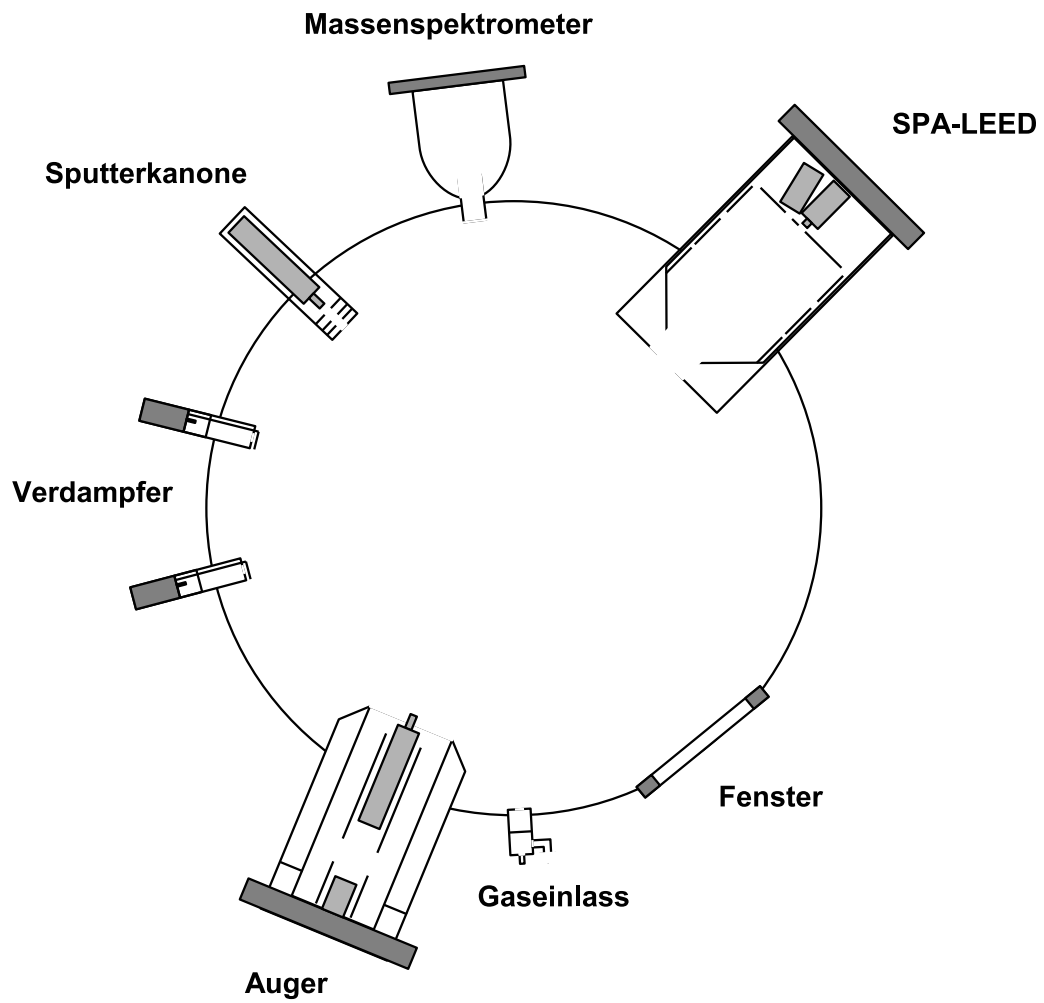


Abbildung 3.1: Skizze des Versuchsaufbaus.

## 3.1 Vakuumpumpen und Ultrahochvakuum

Mit einer Drehschieberpumpe wird ein Abgasdruck von etwa  $3 \cdot 10^{-3}$  mbar hergestellt. Dieser ist nötig, damit mit einer Turbomolekularpumpe weitergearbeitet werden kann. Diese pumpt die Kammer auf einen Druck von etwa  $3 \cdot 10^{-10}$  mbar. Durch ein Ventil läßt sich die Hauptkammer von diesen beiden Pumpen trennen. In der Hauptkammer wird ein Basisdruck  $< 1 \cdot 10^{-10}$  mbar durch eine Ionengetter- und eine Titansublimationspumpe aufrecht erhalten. Diesen Druck erhält man jedoch erst nachdem die komplette Anlage ein paar Tage bei etwa 450K „ausgeheizt“ wurde. Dabei desorbieren Gasmoleküle, die sich beim Belüften auf den Geräten und an der Kammerwand abgesetzt haben.

Zum Sputtern der Probe kann man durch ein Feindosierventil Argon einlassen. Ebenso läßt sich zur Oxidation der Adsorbate Sauerstoff einlassen. Durch das Feindosierventil kann der nötige Partialdruck hierbei exakt eingestellt werden.

## 3.2 Massenspektrometer (QMS)

Zur Analyse des Restgases in der Kammer wird ein Quadrupolmassenspektrometer (QMS) eingesetzt.

Durch Glühemission werden Elektronen erzeugt und durch eine Hochspannung beschleunigt. Dabei ionisieren sie Atome des Restgases. Diese Ionen werden durch ein Quadrupolfeld abgelenkt und mittels einen Multipliers nachgewiesen.

Je nach Verhältnis von Masse zur Ladung  $\frac{m}{q}$  der Ionen werden diese unterschiedlich stark abgelenkt. Somit erhält man, abhängig von der Quadrupolspannung, ein massenselektives Spektrum des Restgases.

Für atomaren Sauerstoff (Atommasse: 16u) erhält man zum Beispiel  $(\frac{m}{q})_O = 16 \text{ Th}^1$  und für atomaren Kohlenstoff (Atommasse: 12u)  $(\frac{m}{q})_C = 12 \text{ Th}$ . Jedoch kommt es auch zu Mehrfachionisationen und man erhält zum Beispiel für Argon (Atommasse: 40u) jeweils einen Peak bei 40 Th ( $\text{Ar}^+$ ) und bei 20 Th ( $\text{Ar}^{2+}$ ).

---

<sup>1</sup>Th (Thomson) ist die Einheit des Verhältnis von Masse zu Ladung. Ein Thomson ist definiert als  $Th = \frac{u}{e}$ .

### 3.3 Probenhalter

Der ovale Silberkristall ist vorne von einem Silberblech und hinten von einem Molybdänblech mit jeweils runder Aussparung eingefasst, die das Präparieren und Analysieren der Oberfläche ermöglichen. Damit er nicht eingeklemmt wird ist der Kristall von weiteren Molybdänblechen mit rechteckiger Öffnung eingefasst. Diese federn und stabilisieren zugleich. Somit ist er kräftefrei im Halter verankert und es kommt beim Erhitzen nicht zu Verspannungen. In der Nähe des Kristalls ist ein Thermoelement zwischen den Molybdänblechen platziert, um die Temperatur der Probe zu überwachen.

Das ganze ist an einen Kupferblock geschraubt, der über eine Saphirplatte elektrisch gegen den Rest des Manipulators isoliert ist. Über einen elektrischen Kontakt läßt sich dadurch am Kristall der Probenstrom messen.

In den Kupferblock ist hinter der Probe ein Filament eingebaut, welches genutzt wird um den Kristall zu heizen. Hierbei reicht die Strahlungshitze bereits aus um Temperaturen von 750K zu erhalten, die zum Präparieren des Kristalls benötigt werden (siehe Abschnitt 2.2.2).

Der Kupferblock ist nun am Manipulatorkopf befestigt. Dieser läßt sich in alle Raumrichtungen verschieben, sowie um zwei Achsen kippen. Dadurch kann die Probe in der Kammer, und insbesondere vor den Präparations- und Analysegeräten, positioniert werden.

### 3.4 Sputterkanone

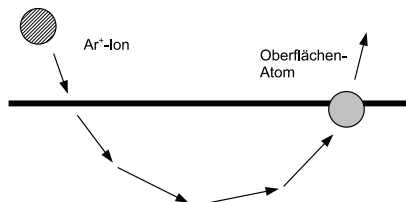


Abbildung 3.2: Beim Sputtern mit  $\text{Ar}^+$ -Ionen werden Verunreinigungen und Störstellen von der Oberfläche entfernt.

Um das Substrat von Verunreinigungen zu befreien und um aufgedampfte Schichten wieder zu entfernen, wird der Silberkristall gesputtert und anschließend geheizt (siehe Abschnitt 2.2.2).

Zum Sputtern wird in die Kammer Argon eingelassen. Durch Glühemission erzeugte Elektronen werden beschleunigt und ionisieren dabei Argon-Atome. Durch eine Hochspannung werden die  $\text{Ar}^+$ -Ionen auf die Probe beschleunigt. Dort treffen sie auf die Oberfläche und lösen Stoskaskaden aus, die durch den Kristall laufen. Treten diese Kaskaden an der Oberfläche des Kristalls wieder aus, können sie von dort Oberflächenatome ablösen. Abb. 3.2 zeigt dieses Prinzip.

## 3.5 Verdampfer

Mit dem Nickel- bzw. Magnesiumverdampfer (Abb. 3.3) wird metallisches Nickel bzw. Magnesium verdampft. In Sauerstoffatmosphäre wächst somit reaktiv auf dem Substrat eine Oxidschicht auf.

Als Verdampfergut wird ein Nickel- bzw. Magnesiumstab mit einer Reinheit von 99,9% verwendet. Dieser wird jeweils per Elektronenstoß geheizt. Aus einem stromdurchflossenen Wolframfilament treten Elektronen aus und werden auf das Verdampfergut beschleunigt. Bei einer Leistung von 12W (Magnesium) bzw. 33W (Nickel) sublimiert dabei das Metall. Die nötige Temperatur liegt dabei noch unter der Schmelztemperatur der Materialien (Magnesium: 908K, Nickel: 1726K), denn für Magnesium beträgt bei 598K der Dampfdruck bereits  $10^{-4}$  mbar [6]. Für Nickel ist dies bei 1550K der Fall.

Verdampfergut und Filament befinden sich in einem wassergekühlten Kupferkörper. Durch die Kühlung wird verhindert dass aus der Umgebung unerwünschte Moleküle desorbieren.

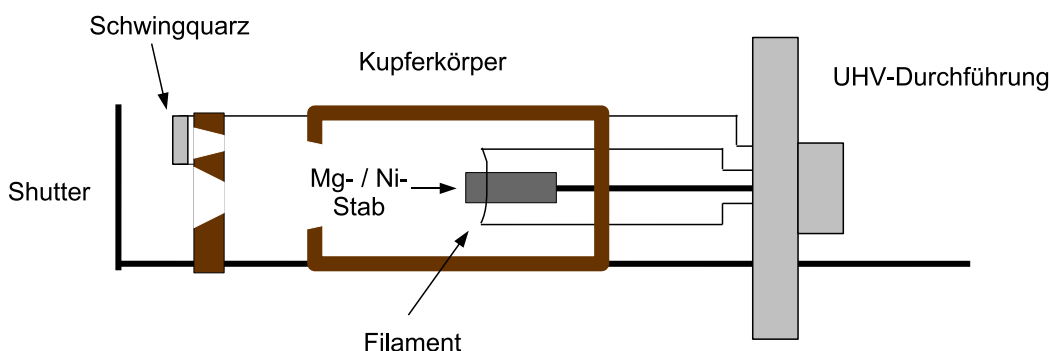


Abbildung 3.3: Schematischer Aufbau der genutzten Verdampfer.

Es ergibt sich ein Molekularstrahl, der durch eine Öffnung auf die Probe trifft. Durch einen Shutter läßt sich diese Öffnung verschließen und somit das Aufdampfen auf der Probe steuern.

Zusätzlich gibt es eine zweite Öffnung, vor der ein Schwingquarz positioniert ist. Dieser hat eine Grund-Eigenfrequenz von 10 MHz. Auch der Quarz wird mit bedampft und ändert mit der Bedeckung seine Schwingfrequenz, da sich seine Masse ändert. Da diese Frequenzänderung proportional zur Bedeckung ist, läßt sich, unter Berücksichtigung des Geometriefaktors, somit die Menge des aufgedampften Materials messen.

### 3.6 Auger Elektronen Spektroskopie (AES)

Zur Bestimmung der auf der Probe befindlichen Elemente wird die Auger Elektronen Spektroskopie genutzt. Sie gibt Aufschluß darüber, wie rein die Probe vor dem Aufdampfen ist und was letztendlich aufgedampft wurde (siehe Abschnitt 1.2). Es wird hiermit also die chemische Zusammensetzung der Probe untersucht.

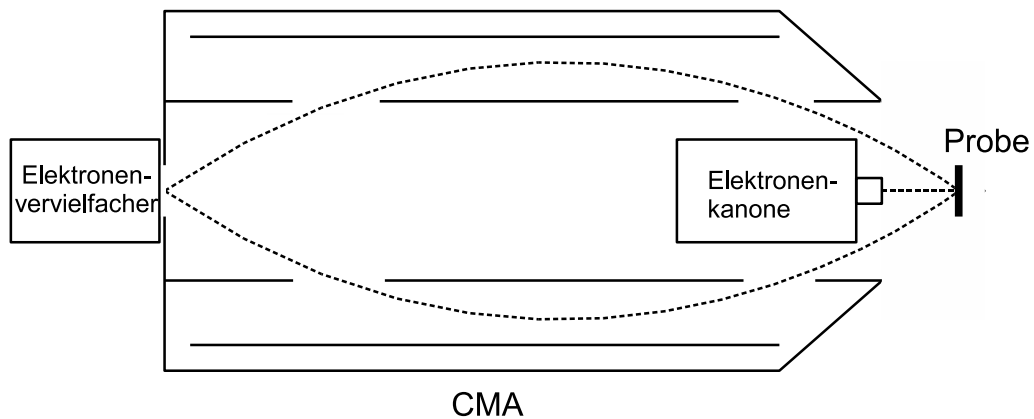


Abbildung 3.4: Vereinfachte Darstellung der Auger-Optik.

Ein Elektronenstrahl mit einer Energie von bis zu 5 keV wird auf die Probe geschossen. Die zurückgestreuten Augerelektronen laufen zwischen zwei konzentrischen Metallzylindern (CMA, cylindrical mirror analyzer), an denen unterschiedliche Spannungen liegen, durch (siehe Abb. 3.4). Dadurch werden nur Elektronen mit einer bestimmten Energie durchgelassen. Der CMA dient also als Geschwindigkeitsfilter. Die Augerelektronen werden dann durch einen Elektronenvervielfacher detektiert und über die Ableitung der Zustandsdichte  $\frac{dN}{dE}$  erhält man ein Spektrum, welches für jedes Element charakteristisch ist.

### 3.7 SPA-LEED

Beim SPA-LEED (**S**pot **P**rofile **A**nalysis **L**ow **E**nergy **E**lectron **D**iffraction) handelt es sich um ein von Henzler et al. [50] weiterentwickeltes LEED-System. Es dient hier zur quantitativen Analyse der Oberflächenmorphologie der erzeugten dünnen Schichten.

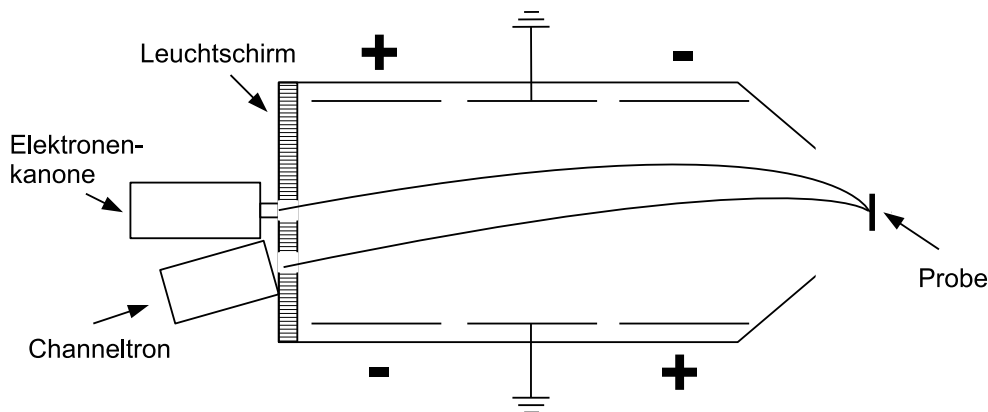


Abbildung 3.5: Vereinfachte Darstellung der SPA-LEED - Optik.

In einer Elektronenkanone wird ein Elektronenstrahl niedriger Energie (20 - 500 eV) erzeugt und fokussiert. Danach durchläuft er das Feld dreier Oktopole (siehe Abb. 3.5), von denen der mittlere geerdet ist und zur Vergrößerung des Scanbereichs dient. Diese Anordnung dient dazu, den Einfallswinkel auf der Probe zu variieren. Dadurch dass der vordere und hintere Oktopol wechselseitig gepolt sind ist gewährleistet, dass der Auftreffpunkt des Elektronenstrahls, und somit der untersuchte Bereich auf der Probe, konstant bleibt. An der Probe wird der Elektronenstrahl gebeugt und durchläuft danach wieder die Oktopole.

Zur groben Justierung hat man einen Leuchtschirm, wie man ihn von VIS-LEED-Systemen kennt, die eigentliche Datenaufnahme erfolgt hier allerdings über ein Channeltron. Damit können 2D-Beugungsbilder aufgenommen werden, die Hauptaufgabe ist hier jedoch die Profilanalyse. Dabei werden 1D-Schnitte durch die Beugungsreflexe aufgenommen.





# Kapitel 4

## Ergebnisse und Diskussion

Für diese Arbeit werden mehrere Messreihen durchgeführt und es wird eine Vielzahl an unterschiedlichen Ergebnissen erzielt, die einer genaueren Diskussion bedürfen.

Zunächst wird das reine Substrat, die Oberfläche eines Silber-Einkristalls in (100)-Orientierung, mittels SPA-LEED charakterisiert.

Auf dieses Substrat werden dann unterschiedlich dicke Magnesiumoxidschichten aufgebracht und deren Wachstum mit SPA-LEED untersucht.

In einer letzten Messreihe wird das Wachstum verschieden dicker Nickeloxidschichten wiederum mit SPA-LEED charakterisiert. Diese Schichten werden auf einer vorher definierten Schichtdicke Magnesiumoxid auf dem Silbersubstrat aufgebracht, so dass zwischen dem Silber und dem Nickeloxid eine Zwischenschicht Magnesiumoxid liegt.

Am Ende der Messreihen erfolgt jeweils eine Zusammenfassung, in der das Wachstum der entsprechenden Schicht auf dem Substrat von der Inselbildung bis zur relaxierten Schicht beschrieben wird, so wie es sich anhand der erzielten Messergebnisse darstellt.

## 4.1 Messungen am Substrat

Um überhaupt den Silberkristall als Substrat nutzen zu können ist es nötig, ihn durch wiederholte Sputter- und Heizzyklen so lange zu präparieren, bis keine Verunreinigungen im Auger-Spektrum mehr zu sehen sind. Diese Prozedur ist in Kapitel 2.2.2 beschrieben. Abbildung 4.1 zeigt das Auger-Spektrum des präparierten Silbers. Bei 351 eV bzw. 356 eV sieht man den charakteristischen Doppelpeak des Silbers. Eine Verunreinigung würde einen weiteren Peak (durch Sauerstoff zum Beispiel bei 503 eV, siehe Abb. 1.4) hervorrufen.

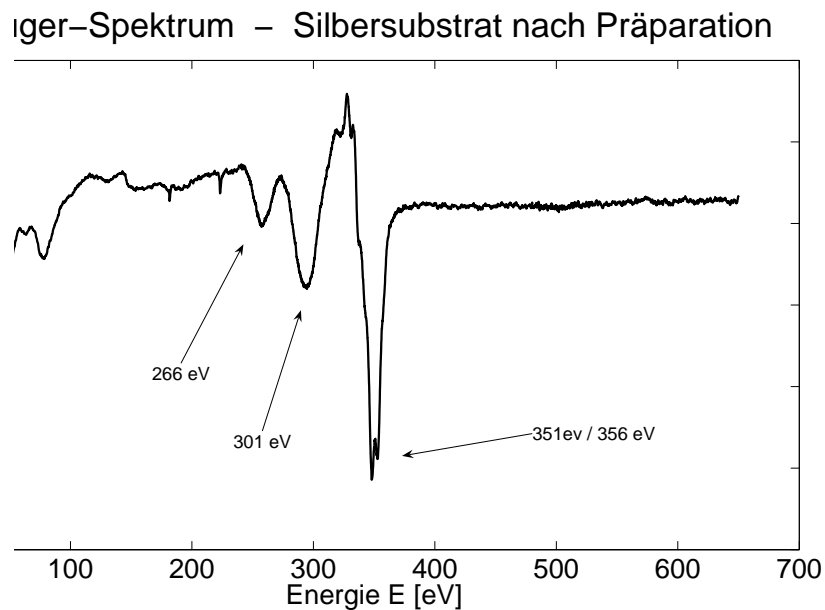


Abbildung 4.1: Im Auger-Spektrum des präparierten Silberkristalls sieht man deutlich den charakteristischen Silber-Doppelpeak bei 351 bzw. 356 eV. Die Peaks bei 266 eV und 301 eV gehören ebenfalls zum Silber. Das Fehlen von zum Beispiel dem charakteristischen Kohlenstoff-Peak bei 272 eV, oder des charakteristischen Sauerstoff-Peaks bei 503 eV, zeugt von einer guten Präparation des Substrates.

Zudem wurde durch ein 2D-LEED-Bild die Kristallinität des Silbers überprüft. In Abbildung 4.2 sieht man in der Mitte den (00)-Reflex. Dazu sieht man weitere Reflexe unterschiedlicher Ordnungen an den Stellen, die durch das fcc-Gitter vorgegeben werden.

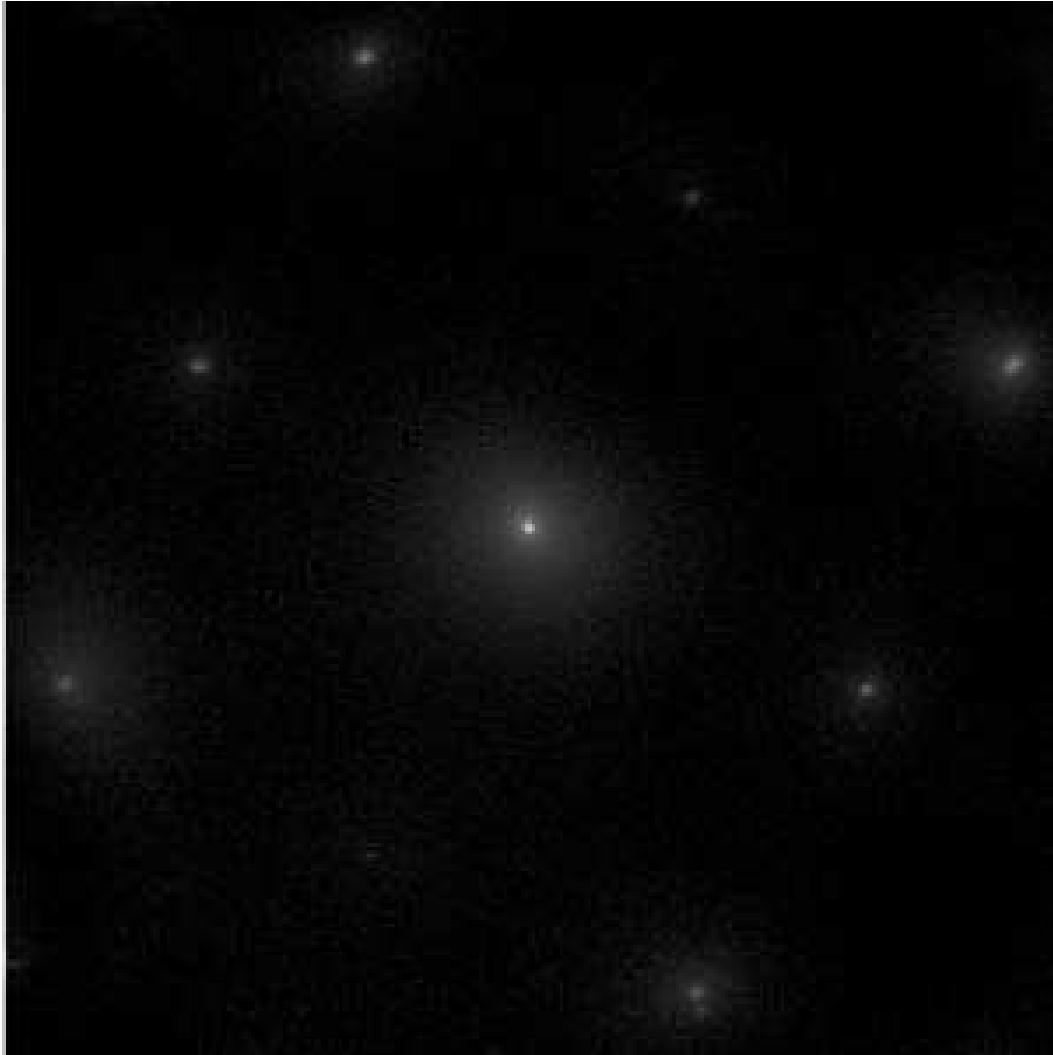


Abbildung 4.2: Eine 2D-LEED-Aufnahme des präparierten Silberkristalls zeigt Reflexe an den durch das fcc-Gitter vorgegebenen Positionen.

Nachdem die Präparation des Substrates abgeschlossen ist, wird dieses mit dem SPA-LEED untersucht. Es werden bei verschiedenen Energien Profile des (00)-Reflexes aufgenommen und mit Lorentz-Funktionen angefitet.

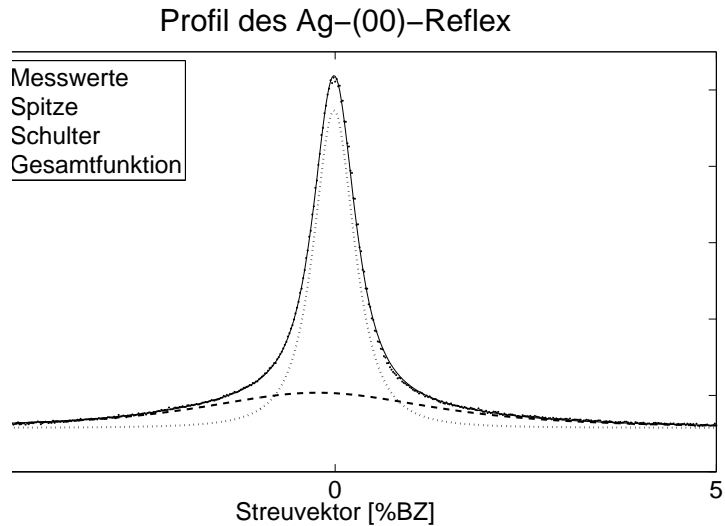


Abbildung 4.3: Die Profile des (00)-Reflexes des Substrates lassen sich durch eine lorentzförmige Schulter und eine lorentzförmige zentrale Spitze anfiten. Daraus ergibt sich die dargestellte Gesamtfunktion.

Abbildung 4.3 zeigt beispielhaft das Profil bei einer Energie von 117,7 eV, was beim Silber einer Streuphase von  $S = 3,6$  entspricht.

Im Verlauf des Fitprozesses zeigt sich, dass sich die Profile am besten durch einen Untergrund, eine breite Schulter und eine zentrale Spitze darstellen lassen. Die Halbwertsbreite der Schulter verläuft dabei nahezu konstant über der Streuphase, mit einem Wert von etwa 4% BZ. Die Analyse der Halbwertsbreite der zentralen Spitze zeigt eine sinusförmige Oszillation mit der Streuphase. Gleichung 1.68 folgend lässt sich dieser Verlauf für niedrige Energien anfiten und es ergibt sich das in Abbildung 4.4 gezeigte Bild.

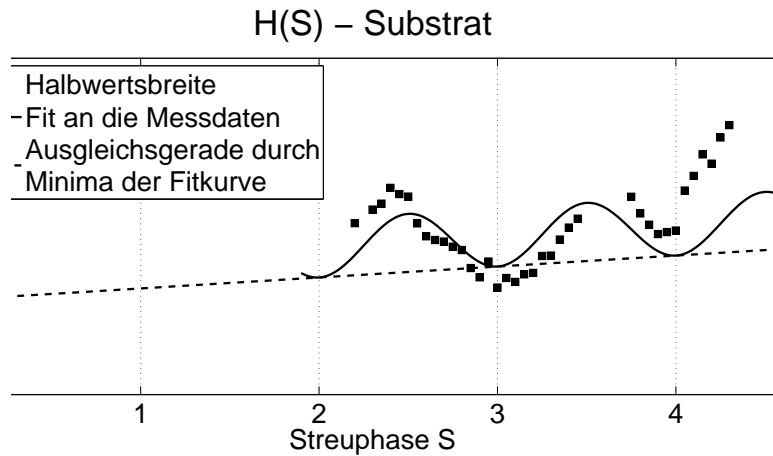


Abbildung 4.4: Aus der gefitteten  $H(S)$ -Kurve des Substrates lassen sich die mittlere Terrassenlänge sowie der mittlere Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält hier für die mittlere Terrassenlänge  $\Gamma = 409\text{\AA}$  und für den mittleren Mosaikwinkel  $\vartheta = 0,026^\circ$ .

Aus dem so erhaltenen  $H(S)$ -Verlauf lassen sich einige Aussagen über die Qualität des Substrates machen.

Zunächst betrachtet man die Ausgleichsgerade durch die Minima der Fitkurve. Aus ihrem Schnittpunkt mit der  $y$ -Achse ergibt sich, für das verwendete Instrument und die benutzten Einstellungen, eine Transferweite von etwa  $516\text{\AA}$ . Dieser Wert liegt weit unter dem theoretischen Wert von  $1500\text{\AA}$ , ließ sich aber im Verlauf dieser Arbeit nicht weiter verbessern.

Eine weitere Größe die sich ergibt ist der Mosaikwinkel des Substrates (genauer: die Schwankung des Mosaikwinkels um  $\vartheta = 0^\circ$ ). Aus der Steigung der Geraden erhält man mit Gleichung 1.67 einen Wert von  $\vartheta = 0,026^\circ$ .

Zuletzt lässt sich aus dem oszillatorischen Anteil der  $H(S)$ -Kurve die mittlere Terrassenlänge  $\Gamma$  des Substrates anhand Gleichung 1.51 bestimmen. Diese ergibt sich zu  $\Gamma = 409\text{\AA}$ .

Der Silberkristall erweist sich also mit einer relativ hohen Terrassenlänge (vor allem im Vergleich zur Transferweite) und einem geringen Mosaikwinkel als durchaus geeignet als Substrat für die folgenden Aufdampfmessungen. Um etwas über die Rauigkeit des Substrates aussagen zu können wird nun eine  $G(S)$ -Analyse durchgeführt. Dazu wird die integrale Intensität der Spitze normiert auf die Gesamtintensität in der Brillouin-Zone, und gegen die Streuphase aufgetragen. Es ergibt sich das in Abbildung 4.5 gezeigte Bild.

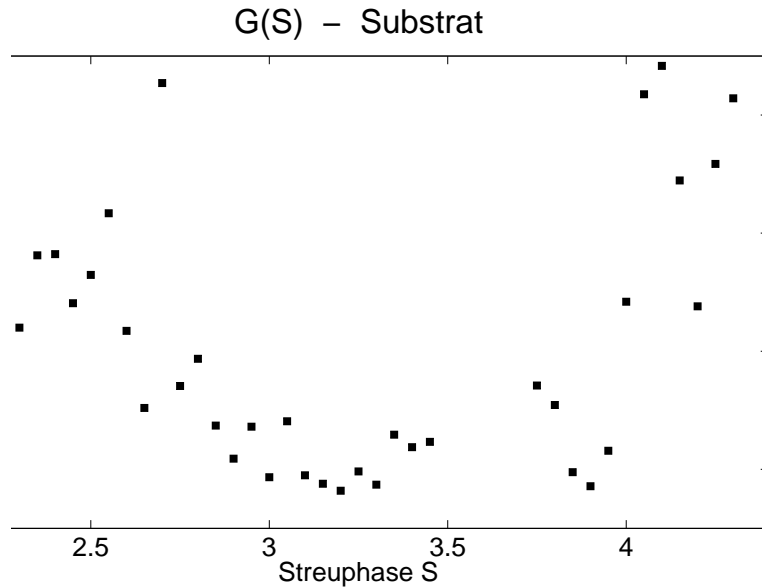


Abbildung 4.5: Der Verlauf der  $G(S)$ -Kurve zeigt keinen Verlauf, wie er für eine durch atomare Stufen aufgeraute Oberfläche zu erwarten ist. Somit liegt der Grund für die Rauigkeit des Substrates hier bei Punktdefekten.

Bei Annahme einer Oberfläche, deren Rauigkeit durch atomare Stufen bestimmt ist, erwartet man einen Verlauf, der mit der Streuphase oszilliert. Die  $G(S)$ -Kurve sollte bei in-phase-Bedingungen den Wert 1 erreichen (gesamte Intensität in der Spitze), und bei Gegenphase auf 0 fallen (gesamte Intensität in der Schulter).

Dieses Verhalten ist hier nicht festzustellen. Die  $G(S)$ -Kurve des Substrates folgt in ihrem Verlauf in etwa der  $H(S)$ -Kurve. Die integrale Intensität der Spitze ist also im Wesentlichen durch die Halbwertsbreite bestimmt. Folglich bleibt die normierte Spitzenintensität der SPA-LEED-Profile des Substrates nahezu konstant. Daraus lässt sich schließen, dass die Rauigkeit des Substrates nicht durch atomare Stufen bestimmt wird. Vielmehr kann man von Punktdefekten auf der Oberfläche ausgehen, die zu dem erhaltenen  $G(S)$ -Verlauf führen.

## 4.2 MgO/Ag(100)

Nachdem die Präparation und Charakterisierung des Substrates abgeschlossen ist, wird mit dem Aufwachsen der ersten MgO-Schicht begonnen. Die optimalen Parameter hierfür können Kapitel 2.2.3 entnommen werden.

Das Ziel in diesem Teil der Arbeit ist, eine Schichtdicke für die Magnesiumoxid-Zwischenschicht zu bestimmen. Als Vorgaben sollen hier gelten, dass die Schicht einige wenige Monolagen betragen soll, jedoch noch keine Mosaik aufweisen darf.

Leider steht für diese Arbeit keine Möglichkeit zur Verfügung, die Schichtdicke des aufgetragenen Materials direkt zu bestimmen. Es befindet sich jedoch im Verdampfer ein Schwingquarz, aus dessen Frequenzänderung beim Aufdampfen die aufgetragene Menge bestimmt werden kann. Berechnet man anhand des Geometriefaktors die Frequenzänderung des Quarzes, welche etwa einer Monolage aufgedampften Materials entspricht, erhält man einen Wert von etwa 120 Hz pro Monolage. Dieser Wert deckt sich auch mit Erfahrungen aus anderen Arbeiten [7].

Aus diesen Überlegungen geht hervor, dass eine Menge von 300 Hz MgO schon in etwa der geforderten Schichtdicke von zwei bis drei Monolagen entspricht, die als Zwischenschicht optimal wären. Somit wird auch mit dieser Schichtdicke für das Wachstum von Magnesiumoxid auf Silber begonnen.

### 4.2.1 300 Hz MgO

Als erste Schicht werden 300 Hz Magnesiumoxid auf das Silbersubstrat aufgebracht. Direkt nach dem Aufdampfen wird ein Auger-Spektrum der erhaltenen Schicht aufgenommen, welches in Abbildung 4.6 zu sehen ist.

In diesem Spektrum findet man, im Vergleich zum Spektrum des Substrates (Abbildung 4.1), drei Merkmale, die direkt auffallen. Zwei davon lassen sich eindeutig der Bildung von Magnesiumoxid zuordnen. Zum einen ist dies ein Peak bei 32 eV, der dem Magnesium zuzuordnen ist, zum anderen der Sauerstoff-Peak bei 503 eV<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Für alle Auger-Spektren gilt, dass die Angabe der Lage der Peaks der jeweilige Literaturwert ist. Durch Offsets bei der Energiebestimmung können diese in den gemessenen Spektren jeweils um einige wenige eV verschoben sein.

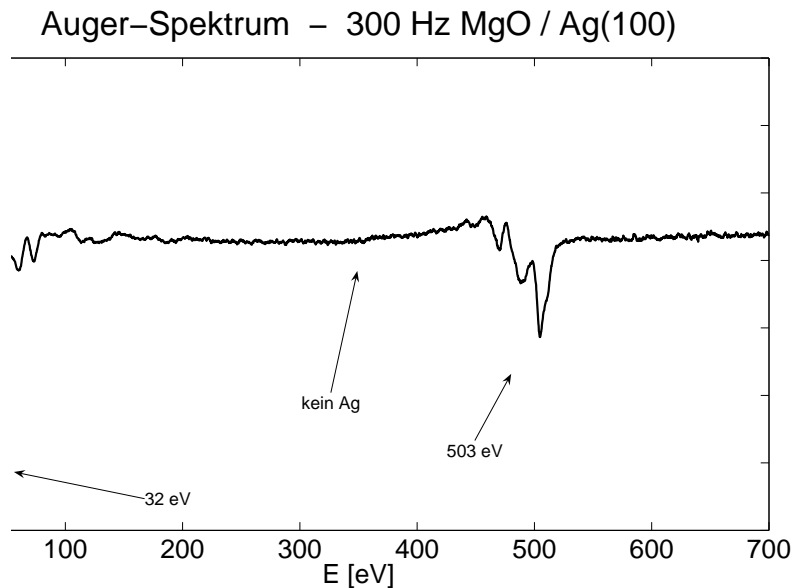


Abbildung 4.6: Im Auger-Spektrum der 300 Hz dicken MgO-Schicht auf dem Silbersubstrat sieht man bei 32 eV den Peak des Magnesium-Ions, und bei 503 eV den Sauerstoffpeak, welche beide zeigen, dass sich MgO gebildet hat. Allerdings sieht man den charakteristischen Silber-Doppelpack überhaupt nicht mehr, was auf eine sehr dicke Magnesiumoxid-Schicht schließen lässt.

Deutlich fällt auch direkt das Fehlen des Silber-Doppelpacks auf. Legt man zugrunde, dass die Auger-Messungen etwa die obersten 10 - 15 Lagen der Probe betreffen, kann man hier direkt folgern, dass die aufgebrachten 300 Hz MgO deutlich mehr sind als die zunächst erwarteten 2 - 3 Monolagen. Der Grund hierfür liegt einfach im Aufbau der Verdampfer. Da der Schwingquarz nur durch einen dünnen Draht gehalten wird, lässt sich dieser nur sehr ungenau im Strahl des Verdampfers platzieren. Man kann deshalb leider nie vorhersagen, wieviel der Fläche des Quarzes man wirklich trifft. Die obigen Berechnungen bezüglich der Frequenzänderung pro Monolage gehen allerdings davon aus, dass der Quarz voll getroffen wird, was die Abweichungen hier erklärt.

Für die Profilanalyse werden wieder bei verschiedenen Energien SPA-LEED-Profilen aufgenommen. Jedoch ist das Verhältnis von Daten zu Rauschen bei dieser Schichtdicke sehr gering, was zu sehr wenigen auswertbaren Daten führt. Zurückzuführen ist dies auf eine große Rauigkeit, die die Oberfläche bei dieser Dicke bereits angenommen hat.



Für die Auswertung der Profile werden diese wieder gefittet. Hier ergibt sich die beste Übereinstimmung, wenn man zum einen eine zentrale Spitze und einen ortsfesten Satelliten, und zum anderen je nach Streuphase weitere Satelliten annimmt. Der ortsfeste Satellit wird im Folgenden mit „Satellit 0“, die weiteren, nicht ortsfesten Satelliten, mit „Satellit 1“ usw. bezeichnet. Es zeigt sich, dass mit steigender Phase immer mehr Satelliten auftreten, deren Position jeweils mit steigender Phase wächst. Im Bereich unterhalb von  $S = 2,5$  findet man neben dem ortsfesten Satelliten einen weiteren Satelliten, im Bereich von  $S = 2,5$  bis  $S = 3,5$  neben dem ortsfesten zwei weitere Satelliten, und im Bereich oberhalb von  $S = 3,5$  findet man einen weiteren dritten Satelliten.

Eine Auftragung der Satellitenpositionen  $P$  über der Streuphase  $S$  zeigt, dass die Satellitenpositionen jeweils linear mit der Phase anwachsen (siehe Abbildung 4.7). Dieses lässt auf Mosaik schließen. Aus der Steigung der jeweiligen Ausgleichsgeraden lässt sich mit Gleichung 1.69 der zugehörige Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“ einen Mosaikwinkel von  $\vartheta = 2,78^\circ$ , und für „Satellit 2“ einen Mosaikwinkel von  $\vartheta = 1,57^\circ$ . Für „Satellit 3“ ist es, auf Grund von nur zwei Messwerten, nicht möglich, einen Mosaikwinkel zu bestimmen.

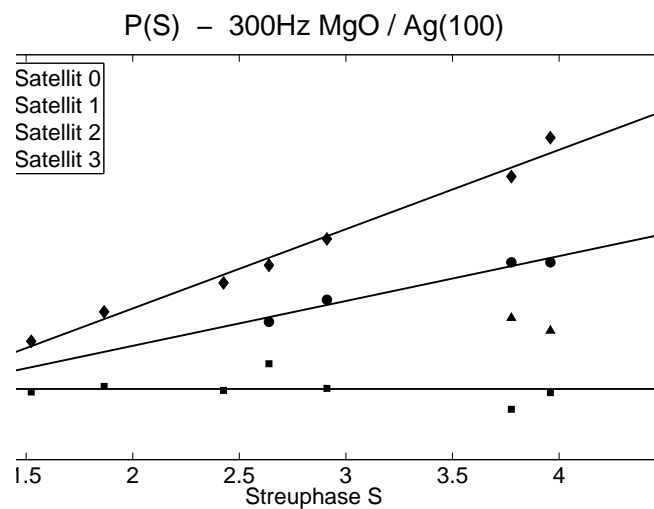


Abbildung 4.7: Aus den Steigungen der Geraden der Satellitenpositionen lassen sich die Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“  $\vartheta = 2,78^\circ$  und für „Satellit 2“  $\vartheta = 1,57^\circ$ .

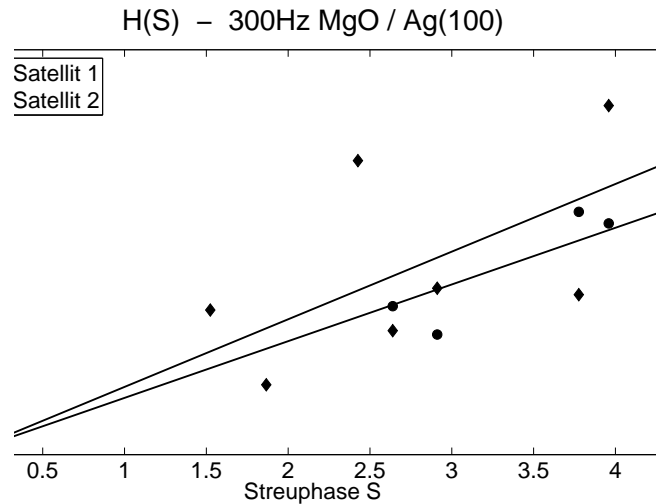


Abbildung 4.8: Aus den Steigungen der Geraden der Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich die Varianzen der Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“  $\Delta\vartheta = 1,35^\circ$  und für „Satellit 2“  $\Delta\vartheta = 1,13^\circ$ .

Die Schwankung der Mosaikwinkel um die oben angegebenen Werte lässt sich aus den Halbwertsbreiten der Satelliten gemäß Gleichung 1.70 bestimmen. Die Halbwertsbreiten der einzelnen Satelliten aufgetragen gegen die Phase zeigt Abbildung 4.8.

Für „Satellit 1“ erhält man  $\Delta\vartheta = 1,35^\circ$  und für „Satellit 2“  $\Delta\vartheta = 1,13^\circ$ . Tabelle 4.1 fasst diese Ergebnisse noch einmal zusammen.

Satellit	$\vartheta \pm \Delta\vartheta$
„Satellit 1“	$2,78^\circ \pm 1,35^\circ$
„Satellit 2“	$1,57^\circ \pm 1,13^\circ$

Tabelle 4.1: Mosaikwinkel und deren Varianzen der 300 Hz dicken MgO-Schicht.

Es ist anzumerken, dass die Varianzen der Mosaikwinkel im Vergleich zu den zugehörigen Mosaikwinkeln viel zu gross erscheinen. Dieses lässt sich darauf zurückführen, dass nicht genügend Datenpunkte vorhanden sind, um eine ausreichende Statistik zu erstellen. Aus dem gleichen Grund ist es auch nicht möglich, für diese Schichtdicke eine G(S)-Analyse durchzuführen.

Zusammenfassend lässt sich über diese Schichtdicke sagen, dass sie sich nicht als Zwischenschicht für weitere Messungen im Rahmen dieser Arbeit eignet. Es ist zuviel Magnesiumoxid aufgebracht, so dass sich bereits Mosaike zum Abbau der Verspannungen durch die Gitterfehlanspassung gebildet haben.

Im nächsten Schritt wird also konsequenterweise eine geringere Schichtdicke hergestellt.

### 4.2.2 100 Hz MgO

Da die zuerst hergestellte Schicht mit einer Menge von 300 Hz MgO schon zu dick ist um als Zwischenschicht zu gebrauchen zu sein, wird jetzt ein Drittel der Menge an Magnesiumoxid aufgedampft.

Nach dem Aufdampfen wird wieder direkt ein Auger-Spektrum erstellt (siehe Abbildung 4.9). In diesem ist auch der Silberpeak zu erkennen.

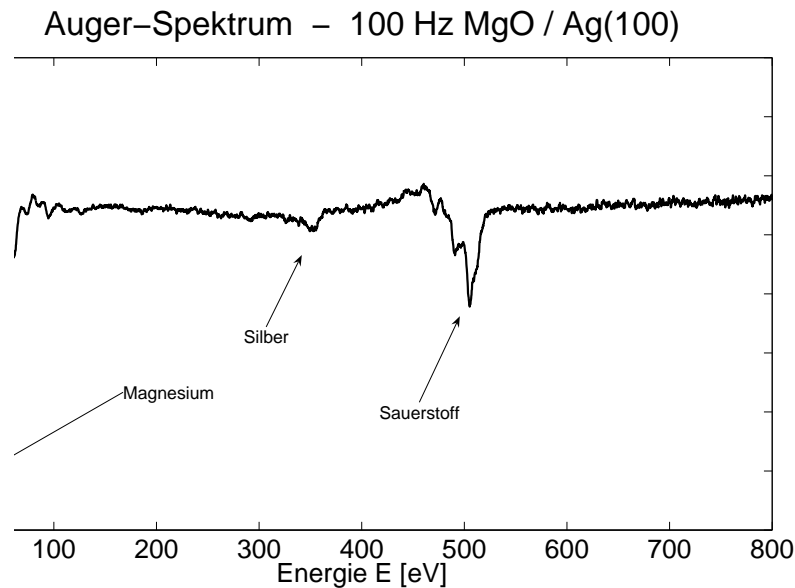


Abbildung 4.9: Im Auger-Spektrum der 100 Hz dicken MgO-Schicht sieht man, im Gegensatz zum Auger-Spektrum der 300 Hz dicken Schicht, wieder schwach den Silber-Peak.

Um die hergestellte Schicht zu charakterisieren werden wieder SPA-LEED-Profile aufgenommen. Diese werden im Anschluss gefittet, wobei sich auch hier zeigt, dass sich die Profile am besten mit einer zentralen Spitze, einem ortsfesten Satelliten, und mehreren Satelliten, die ihre Position mit der Phase ändern, darstellen lassen. Abbildung 4.10 zeigt drei Profile für drei verschiedene Streuphasen, die verdeutlichen, wie die Satellitenpositionen mit der Streuphase ansteigen.

Die Benennung der Satelliten erfolgt analog zu den Messungen bei 300 Hz MgO mit „Satellit 0“, „Satellit 1“ usw.

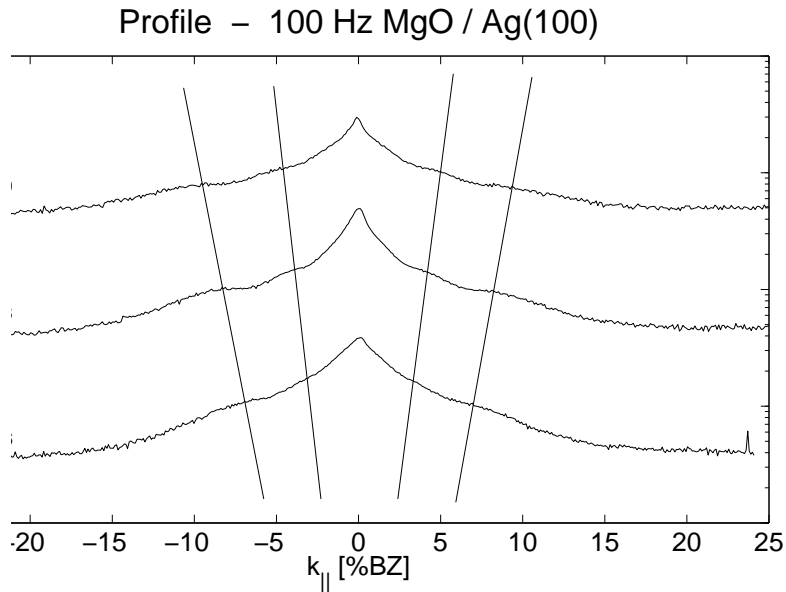


Abbildung 4.10: In den Reflexprofilen der 100 Hz dicken MgO-Schicht zeigen sich Satelliten, deren Positionen mit steigender Streuphase anwachsen.

Die Auftragung der Satellitenpositionen gegen die Streuphase  $S$  zeigt, dass der ortsfeste „Satellit 0“ seine Position mit der Streuphase nicht ändert, die Positionen der übrigen Satelliten jedoch linear mit der Phase ansteigen. Aus der Steigung der Ausgleichsgeraden lassen sich auch hier die zugehörigen Mosaikwinkel bestimmen. Ebenso lassen sich aus den Ausgleichsgeraden der gegen die Streuphase aufgetragenen Halbwertsbreiten der Satelliten (siehe Abbildung 4.12) die Varianzen der zugehörigen Mosaikwinkel bestimmen.

Die erhaltenen Ergebnisse sind in Tabelle 4.2 aufgeführt.

Satellit	$\vartheta \pm \Delta\vartheta$
„Satellit 1“	$4,93^\circ \pm 2,97^\circ$
„Satellit 2“	$2,85^\circ \pm 1,01^\circ$

Tabelle 4.2: Mosaikwinkel und deren Varianzen der 100 Hz dicken MgO-Schicht.

Leider ist auch diese Schicht extrem rau, so dass eine sinnvolle Auswertung der  $G(S)$ -Kurve (Abbildung 4.13) hier nicht möglich ist.

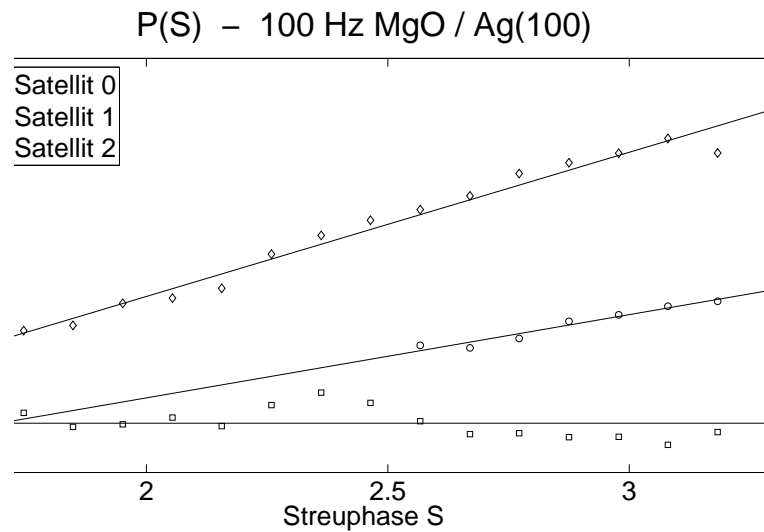


Abbildung 4.11: Aus den Steigungen der Geraden der Satellitenpositionen über die Streuphase S lassen sich die Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“  $\vartheta = 4,93^\circ$  und für „Satellit 2“  $\vartheta = 2,85^\circ$ .

Die Mosaikwinkel für die 100 Hz MgO-Schicht sind deutlich größer als die Mosaikwinkel der 300 Hz MgO-Schicht. Die Mosaik entstehen, um Verspannungen durch die Gitterfehlanspassung abzubauen. Zu Beginn des Wachstums wächst der MgO-Film auf dem Silbersubstrat pseudomorph verspannt auf, also mit der Gitterkonstante des Silber in lateraler Richtung. Ab einer bestimmten kritischen Schichtdicke, die sich in dieser Arbeit leider nicht genau bestimmen lässt, bilden sich Mosaik. Ein Modell dieser Mosaik lässt sich der Diplomarbeit von Daniel Erdös entnehmen [7]. Im weiteren Verlauf gleicht sich die laterale Gitterkonstante des aufgewachsenen Filmes immer mehr der Volumen-Gitterkonstante von Magnesiumoxid an, was zur Folge hat, dass sich auch die oberen Schichten des Filmes zu glätten beginnen. Dieses führt dazu, dass mit zunehmender Schichtdicke die Mosaikwinkel abnehmen, und zwar so lang, bis der Film vollständig relaxiert ist.

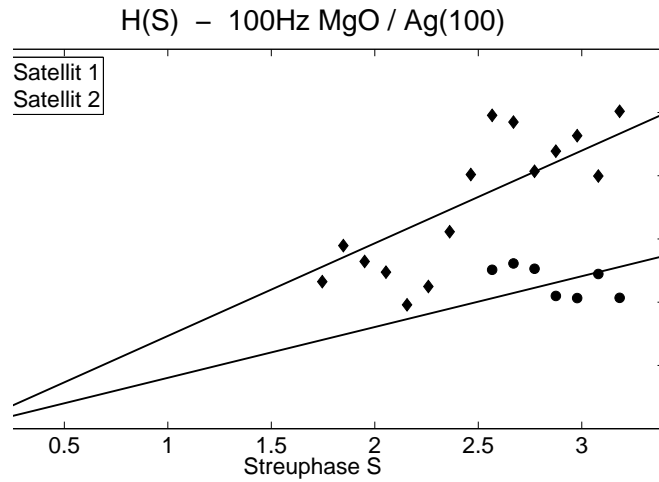


Abbildung 4.12: Aus den Steigungen der Geraden der Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich die Varianzen der Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“  $\vartheta = 2,97^\circ$  und für „Satellit 2“  $\vartheta = 1,01^\circ$ .

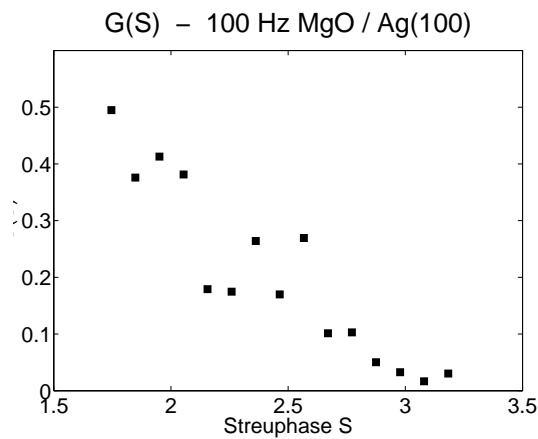


Abbildung 4.13: Aus der G(S)-Kurve der 100 Hz dicken MgO-Schicht lässt sich ableiten, dass auch diese Schicht sehr rauh ist.

### 4.2.3 50 Hz MgO

Da die vorherige Schicht mit 100 Hz MgO noch zu dick ist, und demzufolge für diese Arbeit unerwünschte Mosaik aufweist, wird die Schichtdicke noch einmal halbiert.

Nach dem Aufwachsen von 50 Hz MgO wird die Schicht wieder mit dem Außer kontrolliert. Es zeigen sich die typischen Merkmale des MgO, ausserdem sieht man deutlich den charakteristischen Silber-Doppelpeak.

Um das Wachstum dieser sehr dünnen Magnesiumoxidschicht zu charakterisieren, werden SPA-LEED-Profile des Hauptreflexes aufgenommen. Diese Profile zeigen keinerlei Anzeichen von Mosaiken, so dass die erzielte Schichtdicke scheinbar unter der kritischen Schichtdicke für die Mosaikbildung zum Spannungsausgleich liegt.

Der Fitprozess zeigt, dass sich die erhaltenen Profile am besten durch eine breite Schulter, eine schmale Schulter mit einer konstanten Halbwertsbreite von 9,55% BZ, und eine zentrale Spitze anfitzen lassen. Die Halbwertsbreite der breiten Schulter steigt linear mit der Phase, sie wird zurückgeführt auf Defekte der Substratoberfläche.

Abbildung 4.14 zeigt das für  $S = 3,1$  erhaltene Profil.

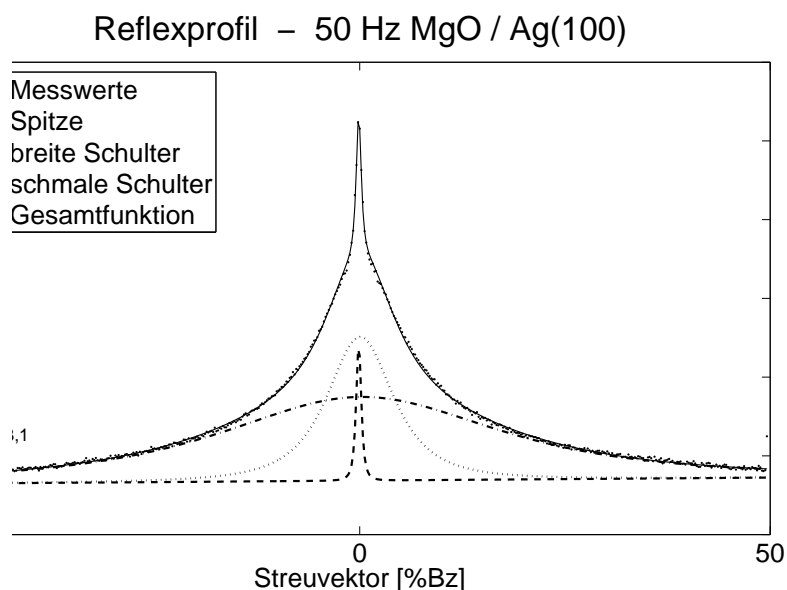


Abbildung 4.14: Die Reflexprofile der 50 Hz dicken MgO-Schicht zeigen keinerlei Satelliten. Sie lassen sich am besten durch eine breite Schulter, eine schmale Schulter und eine zentrale Spitze anfitzen.

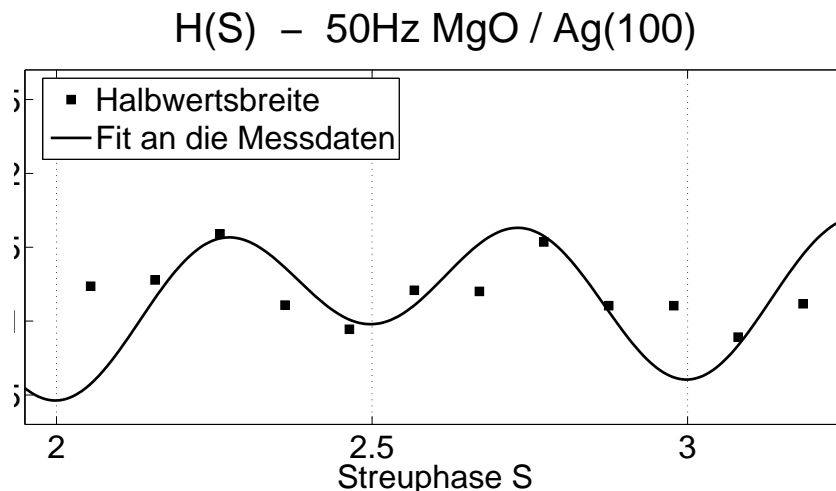


Abbildung 4.15: Die H(S)-Kurve der 50 Hz dicken MgO-Schicht zeigt eine Überlagerung aus Streuung an monoatomaren Stufen und Stufen mit der doppelten Stufenhöhe.

Trägt man die Halbwertsbreite der zentralen Spitze gegen die Streuphase auf, ergibt sich der in Abbildung 4.15 gezeigte Verlauf. Man erkennt hier Oszillationen der Halbwertsbreite, jedoch nicht mit einer kompletten Streuphase als Periode. Vielmehr lässt sich an die Messwerte eine Kurve entsprechend Gleichung 1.68 anfitzen, wenn man zu dem mit der Streuphase oszillierenden Term einen Term gleicher Struktur hinzufügt, der mit halber Streuphase oszilliert.

Der Theorie folgend oszilliert die H(S)-Kurve mit ganzen Streuphasen so, dass jeweils bei Gegenphase-Bedingungen ein Minimum auftritt. Nimmt man hier Minima bei ganzen und halben Streuphasen an, so bedeutet dies einen Verlauf, wie er bei doppelt so großen Stufenhöhen auftreten würde (siehe Gleichung 1.29, die Streuphase ist proportional zur Stufenhöhe).

Allerdings sind die Minima bei Gegenphase-Bedingungen in Abbildung 4.15 nicht so tief, wie die bei ganzen Streuphasen. Den gezeigten Verlauf erhält man, wenn man die zentrale Spitze aus zwei Teilen zusammensetzt: zum einen, wie gehabt, einen Teil, der durch monoatomare Stufen zustande kommt, zum anderen einen Teil, der durch Stufen mit der doppelten Höhe zustande kommt. Überlagert man nun diese beiden Teile der zentralen Spitze, ergibt sich die Halbwertsbreite in erster Näherung als Mittelwert der beiden einzelnen Halbwertsbreiten.

Nimmt man den Teil der zentralen Spitze der sich aus den monoatomaren Stufen ergibt, erhält man hier eine Terrassenlänge von  $\Gamma = 164\text{\AA}$ . Aus der Halbwertsbreite der schmalen Schulter, welche durch Streuung an MgO-Inseln gebildet wird, lässt sich eine mittlere Inselgröße für das Magnesiumoxid von  $15,3\text{\AA}$  angeben.



Aus dem linearen Anstieg der Halbwertsbreiten der Minima der Fitfunktion ergibt sich der mittlere Mosaikwinkel für Mosaik ohne Vorzugsrichtung zu  $\vartheta = 0,05^\circ$ .

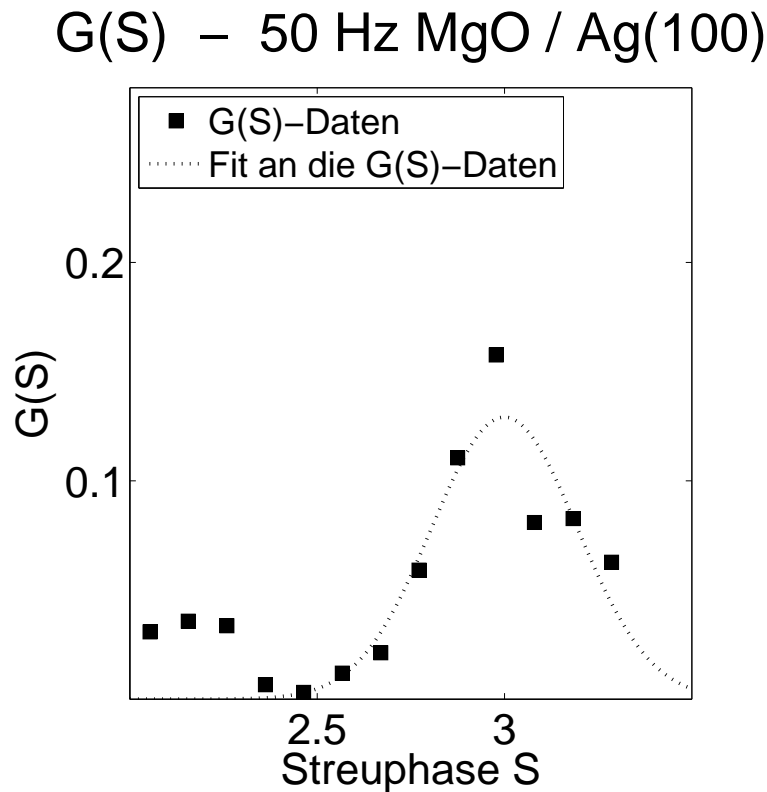


Abbildung 4.16: Die G(S)-Kurve der 50 Hz dicken MgO-Schicht zeigt qualitativ den Verlauf, den man bei einer gestuften Oberfläche theoretisch erwartet. Es ergibt sich eine RMS-Rauigkeit von 0,23.

Für diese Schichtdicke zeigt die G(S)-Kurve das für atomare Stufen erwartete Verhalten (Abbildung 4.16). Ihr Verlauf lässt sich mit einer Gauß-Kurve anfitzen, aus deren Halbwertsbreite sich nach Gleichung 1.38 die Rauhtiefe der Oberfläche ergibt. Man erhält hier als Ergebnis  $\Delta = 0,23$ .

Für das weitere Vorgehen in dieser Arbeit wurde nun die Schichtdicke auf einen Wert zwischen den gerade charakterisierten 50 Hz und den davor aufgeführten 100 Hz geändert. Die Schicht mit 100 Hz MgO war bereits zu dick, die Schicht mit 50 Hz MgO ist nun bereits zu dünn, um als Zwischenschicht in Frage zu kommen, da hier die Schicht nicht komplett geschlossen ist (siehe Kapitel 4.2.5).

#### 4.2.4 75 Hz MgO

Da die Schicht mit 100 Hz MgO zu dick ist, die Schicht mit 50 Hz MgO aber bereits zu dünn, wird nun als Zwischenwert 75 Hz MgO auf das Silbersubstrat aufgebracht.

Das Auger-Spektrum liefert ein zufriedenstellendes Ergebnis und es werden SPA-LEED-Profile aufgenommen.

Die erhaltenen Profile lassen sich am besten durch eine zentrale Spitze, eine breite Schulter und eine schmale Schulter anfitten. Die Halbwertsbreite der breiten Schulter steigt dabei linear mit der Streuphase an, die Halbwertsbreite der schmalen Schulter bleibt konstant.

Trägt man die Halbwertsbreite der zentralen Spitze gegen die Streuphase  $S$  auf, ergeben sich die bereits bekannten Oszillationen mit der Streuphase. Es ergibt sich eine mittlere Terrassenlänge von  $\Gamma = 217\text{\AA}$  und ein mittlerer Mosaikwinkel von  $\vartheta = 0,17^\circ$ .

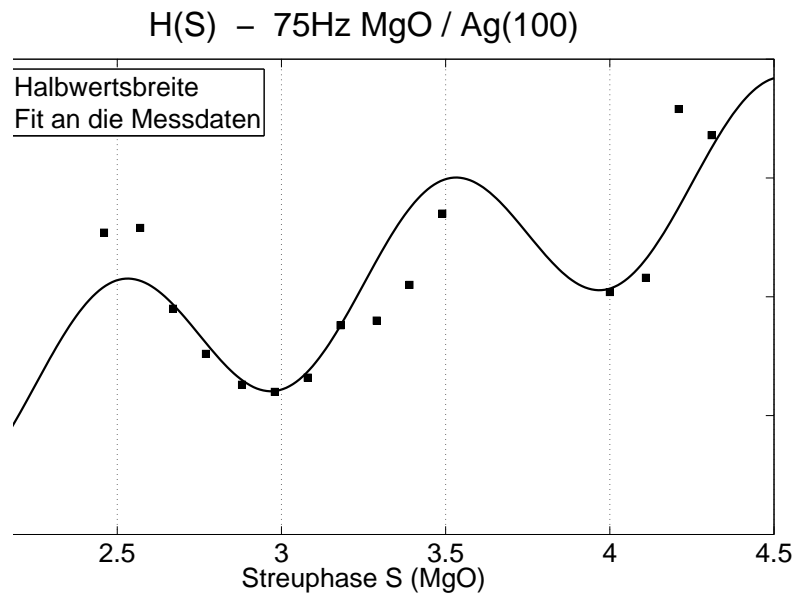


Abbildung 4.17: Aus der  $H(S)$ -Kurve der 75 Hz dicken MgO-Schicht ergibt sich eine mittlere Terrassenlänge von  $\Gamma = 217\text{\AA}$  und ein mittlerer Mosaikwinkel von  $\vartheta = 0,17^\circ$ .

Anzumerken ist, und das gilt für alle bereits charakterisierten Schichten, dass alle Daten bezüglich der Streuphase des Magnesiumoxides geplottet sind. Die Übereinstimmungen, beispielsweise der Minima der Halbwertsbreiten mit den Gegenphase-Bedingungen des MgO, zeigen, dass das Magnesiumoxid in lateraler Richtung mit der Gitterkonstante des Silbers aufwächst. Die Gitterkonstante in vertikaler Richtung ist jedoch in der Größenordnung der Magnesium-Gitterkonstante. Die Einheitszelle des Magnesiumoxids ist in diesen Schichten also verzerrt.

Der Verlauf der  $G(S)$ -Kurve für diese Schichtdicke lässt sich sehr gut durch eine Gauss-Kurve darstellen. Für die RMS-Rauhigkeit ergibt sich aus deren Halbwertsbreite ein Wert von  $\Delta = 0,28$ .

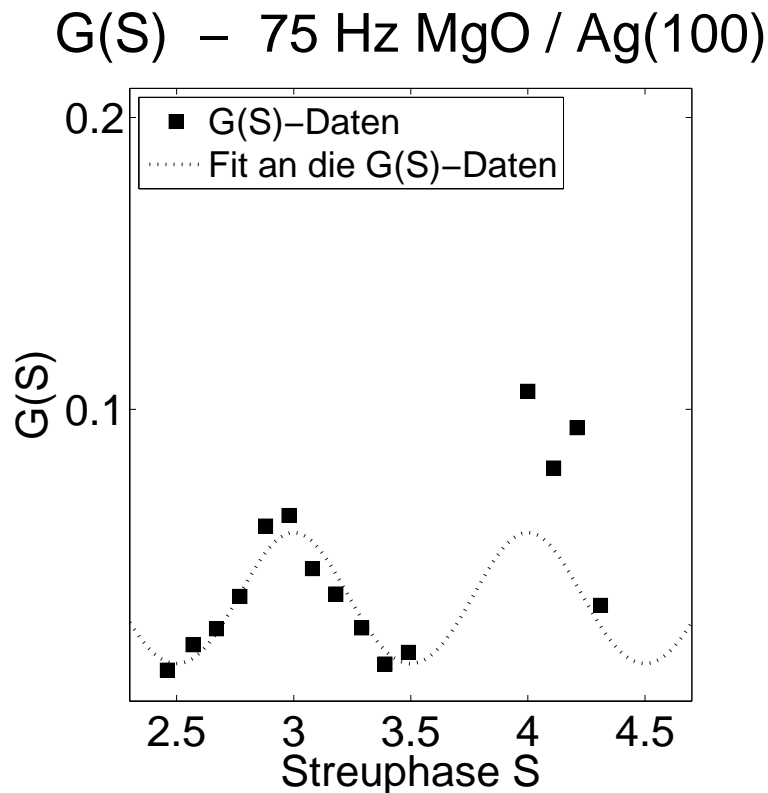


Abbildung 4.18: Aus der  $G(S)$ -Kurve der 75 Hz dicken MgO-Schicht ergibt sich eine Rauhtiefe von  $\Delta = 0,28$ .

Diese Schichtdicke zeigt keinerlei Mosaik. Außerdem ist die Schicht geschlossen. Damit eignet sie sich sehr gut als Zwischenschicht, die im weiteren Verlauf der Arbeit das Nickeloxid vom Silber trennen soll.

### 4.2.5 Zusammenfassung MgO/Ag(100)

In diesem Kapitel soll ein Überblick gegeben werden über die verschiedenen Stufen des Wachstums von MgO auf Silber, welche anhand der hier erzielten Ergebnisse zu sehen sind.

Tabelle 4.3 fasst dazu alle quantitativen Ergebnisse über die verschiedenen MgO-Schichten zusammen.

„Schichtdicke“	Inselgröße bzw. Terr.länge $\langle \Gamma \rangle$	mittl. Mosaikwinkel $\vartheta$	Rauhtiefe $\Delta$	Mosaikwinkel $\vartheta \pm \Delta\vartheta$
50 Hz	15,3 Å	0,05°	0,23	
75 Hz	217 Å	0,17°	0,28	
100 Hz				4,93° ± 2,97° 2,85° ± 1,01°
300 Hz				2,78° ± 1,35° 1,57° ± 1,13°

Tabelle 4.3: Zusammenfassung der quantitativen Ergebnisse für die einzelnen MgO-Schichten.

Aus der dünnsten hergestellten Schicht lassen sich Aussagen über das initiale Wachstum machen. Zunächst bilden sich demzufolge auf dem Substrat zwei-stöckige Magnesiumoxid-Inseln. Diese haben bei der hier vermessenen 50 Hz - Schicht eine mittlere Größe von 15,3Å und wachsen auf einem Substrat mit einer mittleren Terrassenlänge von 159Å. Es ergibt sich das in Abbildung 4.19 schematisch dargestellte Bild.

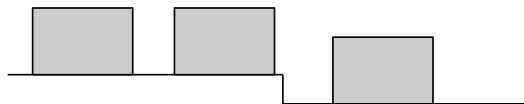


Abbildung 4.19: Zu Beginn des Wachstums bilden sich auf dem Substrat zwei-stöckige Magnesiumoxid-Inseln.

Sobald sich diese Monolage geschlossen hat, wachsen weitere Lagen Magnesiumoxid Schicht für Schicht auf. Diese wachsen, wie auch zuvor die zwei-stöckigen Inseln, pseudomorph verspannt auf dem Substrat.

Ab einer bestimmten kritischen Schichtdicke<sup>2</sup> ist es energetisch günstiger, die Verspannungen, verursacht durch das pseudomorphe Wachstum, abzubauen. Dabei entstehen Kippmosaiken und die Gitterkonstante relaxiert auf den Wert für Volumen-Magnesiumoxid.

<sup>2</sup>Die kritische Schichtdicke kann auf Grund der fehlenden Verdampferkalibration in dieser Arbeit nicht bestimmt werden. Es ist lediglich zu sagen, dass in der „100 Hz dicken“ Schicht bereits Mosaiken auftreten.

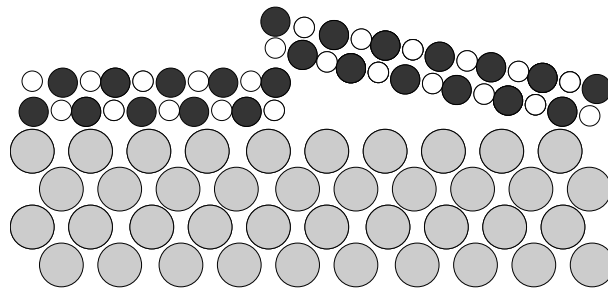


Abbildung 4.20: Ab einer bestimmten Schichtdicke bilden sich Mosaik.

Mit weiter steigender Schichtdicke nehmen die Mosaikwinkel immer weiter ab. Dadurch werden die Mosaikflächenelemente zunehmend flacher und die Oberfläche zunehmend glatter, bis ein Film entstanden ist, der die geometrischen Eigenschaften von Volumen-Magnesiumoxid besitzt.

### 4.3 NiO/MgO/Ag(100)

Nachdem die optimale Schichtdicke für die Magnesiumoxid-Zwischenschicht in der vorherigen Messreihe bestimmt wurde, wird nun begonnen, sukzessiv dickere Nickeloxidschichten auf das MgO/Ag-System aufzubringen.

Zunächst wird mit einer Schichtdicke von 50 Hz NiO gestartet, da diese sich beim Magnesiumoxid als eine Schichtdicke erwiesen hat, die in etwa bei einer Monolage aufgebrachtem Material liegt.

Danach wird in sinnvollen Schritten die Dicke der Nickeloxidschicht jeweils erhöht.

Zu erwähnen ist zusätzlich, dass alle Messungen bei Raumtemperatur durchgeführt wurden.

### 4.3.1 50 Hz NiO

Als erste Schichtdicke für Nickeloxid auf 75 Hz Magnesiumoxid auf einem Silbersubstrat werden 50 Hz gewählt. Das Aufdampfen erfolgt mit den in Kapitel 2.2.3 angegebenen Parametern. Diese wurden im Vorfeld als optimal erachtet.

Direkt nach dem Aufbringen der Schicht wird ein Auger-Spektrum aufgenommen (Abbildung 4.21). Dieses zeigt, im Vergleich zum Spektrum der 75 Hz MgO-Schicht, einen weiteren kleinen Peak bei 61 eV, welcher dem Nickel zuzuordnen ist. Außerdem hat sich der Sauerstoff-Peak vergrößert. Diese beiden Features zeigen, dass sich Nickeloxid gebildet hat<sup>3</sup>.

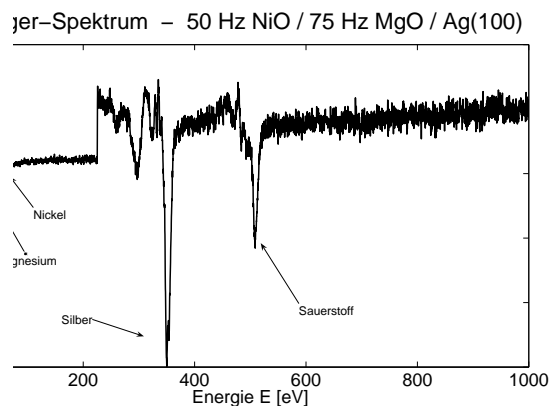


Abbildung 4.21: Das Auger-Spektrum zeigt nach dem Aufdampfen von 50 Hz Nickeloxid zusätzlich einen Peak bei 61 eV, der dem Nickel zuzuordnen ist.

Nach den Auger-Messungen werden SPA-LEED-Profile aufgenommen. Diese lassen sich, analog zu den Profilen bei 50 Hz MgO, am besten mit einer breiten Schulter, einer schmalen Schulter und einer zentralen Spitze anfitzen. Auch bei diesen Profilen zeigen sich keinerlei Satelliten-Reflexe.

Eine Auftragung der Halbwertsbreite der zentralen Spitze gegen die Streuphase ergibt den in Abbildung 4.22 gezeigten Verlauf. Man sieht deutliche Oszillationen mit der Phase. Am besten lässt sich der Verlauf anfitzen, wenn man wieder eine Überlagerung aus zwei unterschiedlichen Stufenhöhen annimmt, nämlich die einfache, monoatomare Stufenhöhe und wieder die doppelte Stufenhöhe. Dieses lässt auch hier auf das Vorhandensein von doppelstöckigen Inseln schließen.

Aus der Halbwertsbreite des Anteils, der von monoatomaren Stufen kommt, erhält man eine mittlere Terrassenlänge von  $\Gamma = 164\text{\AA}$ . Außerdem ergibt sich aus der Steigung der Ausgleichsgeraden durch die Minima der Fitfunktion ein

<sup>3</sup>Der Sprung in den Auger-Daten bei etwa 223 eV ist hervorgerufen durch eine zu starke Erwärmung des Steuergerätes. Dadurch gibt es leider immer wieder Fehler bei den Auger-Messungen, und so erklärt sich auch das immer stärker werdende Rauschen in den Auger-Spektren im Verlauf dieser Arbeit. Leider hat sich bis heute keine zufriedenstellende Lösung zur Behebung des Problems gefunden.

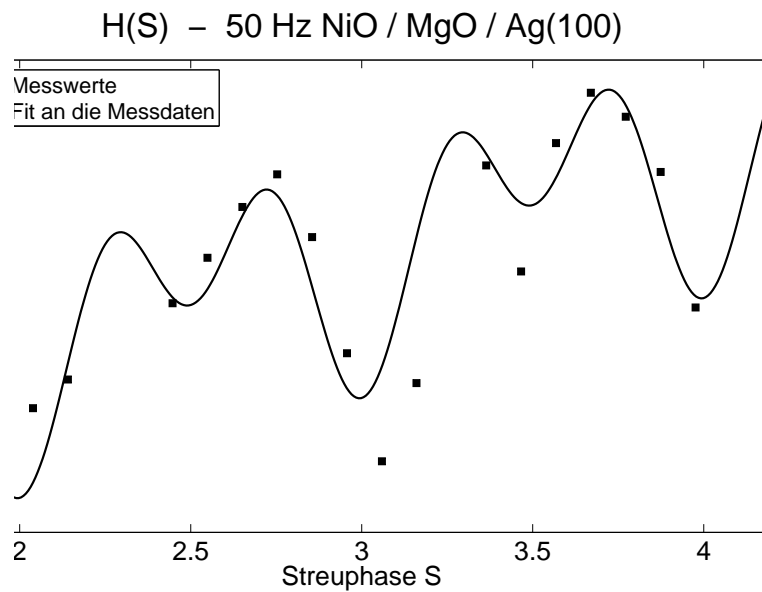


Abbildung 4.22: Die  $H(S)$ -Kurve zeigt für diese Schicht Oszillationen mit der halben Streuphase als Periode. Daraus lässt sich wieder auf das Vorhandensein von doppelstöckigen Inseln auf dem Substrat schliessen.

mittlerer Mosaikwinkel von  $\vartheta = 0,17^\circ$ . Dieser Winkel stimmt sehr gut mit dem mittleren Mosaikwinkel der zugrundeliegenden MgO-Schicht überein. Zusätzlich zu der Terrassenlänge und dem Mosaikwinkel lässt sich auch hier aus der Halbwertsbreite der schmalen Schulter eine mittlere Inselgröße angeben. Sie beträgt für die Nickeloxidinseln  $13,4\text{\AA}$ .

Eine Analyse der  $G(S)$ -Kurve zeigt den erwarteten Verlauf. Jedoch sind die Maxima zu kleineren Streuphasen verschoben, wodurch man eine größere Gitterkonstante für das Adsorbat erhält, als für die Berechnung der Streuphasen angenommen<sup>4</sup>. Indem die laterale Gitterkonstante also auf den Wert des Silbers verringert wird, vergrößert sich die vertikale Gitterkonstante. Außerdem nimmt die Intensität der Maxima mit steigender Streuphase ab.

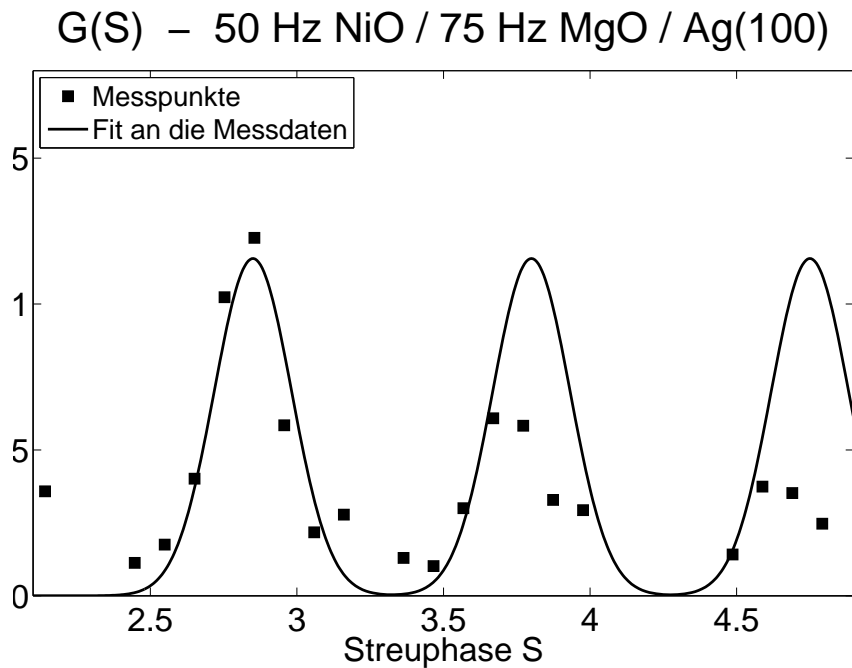


Abbildung 4.23: Die  $G(S)$ -Kurve lässt sich durch Gauss-Kurven anfiten. In der Abbildung ist die bei  $S = 3$  gefittete Kurve wiederkehrend eingezeichnet.

Aus der Halbwertsbreite der an die  $G(S)$ -Kurve gefitteten Gauss-Kurve erhält man eine RMS-Rauhigkeit von  $\Delta = 1,00$ .

<sup>4</sup>Für die Berechnung der Streuphasen wird in diesem Teil der Arbeit die Volumen-Gitterkonstante von Nickeloxid angenommen.



### 4.3.2 100 Hz NiO

Als nächstes werden auf die bereits hergestellten 50 Hz NiO weitere 50 Hz NiO aufgebracht, so dass sich insgesamt eine Schichtdicke von 100 Hz NiO ergibt.

Das direkt aufgenommene Auger-Spektrum zeigt, dass sich der Nickel-Peak vergrößert hat, dafür sind die Magnesium- und Silber-Peaks kleiner geworden. Es ist weiterhin NiO auf der Oberfläche aufgewachsen.

Die mit dem SPA-LEED aufgenommenen Profile zeigen bei dieser Schichtdicke Satellitenreflexe. Sie lassen sich am besten fitten durch eine zentrale Spitze, eine breite Schulter, einen ortsfesten Satelliten („Satellit 0“) bei 2,91 %BZ mit konstanter Halbwertsbreite ( $FWHM_{Sat0} = 6,39$  %BZ), und, je nach Streuphase, bis zu drei Satelliten mit variabler Position („Satellit 1“ - „Satellit 3“).

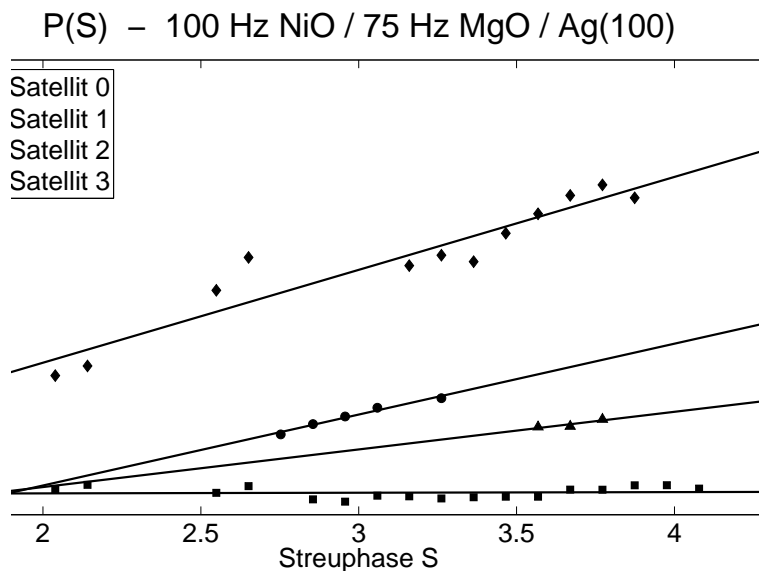


Abbildung 4.24: Aus den Positionen der Satelliten bei 100 Hz NiO ergeben sich die in Tabelle 4.4 aufgeführten Mosaikwinkel.

Trägt man die Positionen der einzelnen Satelliten gegen die Streuphase auf, zeigt sich zum einen, dass der innerste Satellit ortsfest ist, zum anderen sieht man, dass die Positionen der anderen Satelliten linear mit der Phase ansteigen. Aus der Steigung der Ausgleichsgeraden lässt sich der zugehörige Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält die in Tabelle 4.4 zusammengefassten Werte.

Satellit	$\vartheta$
„Satellit 1“	4,96°
„Satellit 2“	3,78°
„Satellit 3“	2,01°

Tabelle 4.4: Mosaikwinkel der 100 Hz dicken NiO-Schicht.

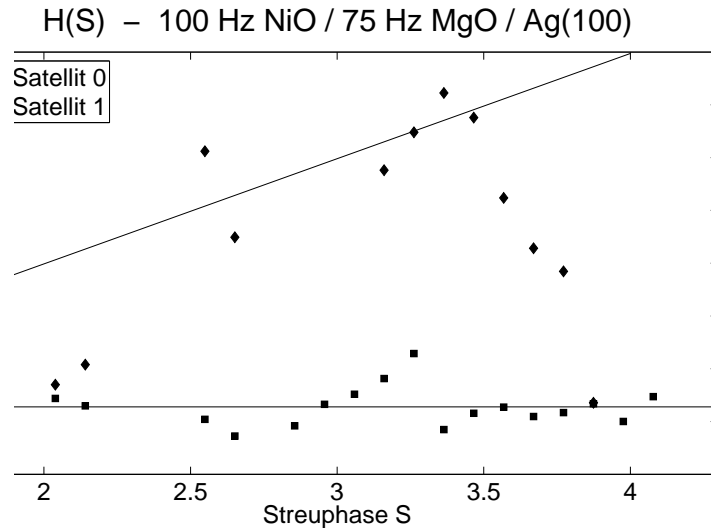


Abbildung 4.25: Eine Analyse der Halbwertsbreiten zur Bestimmung der Varianz der zugehörigen Mosaikwinkel ist bei dieser Schichtdicke nur für den äußersten Satelliten („Satellit 1“) möglich.

Aus den Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich die zu den Mosaikwinkeln zugehörigen Varianzen berechnen. Eine Auftragung der Halbwertsbreiten der Satelliten (Abbildung 4.25) ergibt aber nur für „Satellit 0“ und „Satellit 1“ einen Verlauf der annähernd linear zu beschreiben ist. Die Halbwertsbreite des innersten Satelliten bleibt dabei, wie seine Position, konstant. Die Halbwertsbreite des äußersten Satelliten lässt sich im Bereich von  $S = 2,5$  bis  $S = 3,5$  durch eine Gerade beschreiben. Es ergibt sich aus deren Steigung eine Varianz des Mosaikwinkels von  $\Delta\vartheta = 1,70^\circ$ .

Aus der Position und der Halbwertsbreite des innersten Satelliten ergibt sich für die ebenen Bereiche eine bevorzugte mittlere Terrassenlänge von  $33,3 \pm 22,5 \text{ \AA}$ .

Auch aus der  $G(S)$ -Kurve dieser Schicht lassen sich keine quantitativen Aussagen über die Rauigkeit machen. Zu sehen ist jedoch, dass die Maxima (abgesehen von einem Ausreisser) alle etwa den Wert 0,02 erreichen. Mit dem Konzept der quasi- $G(S)$ -Kurven (Kapitel 1.3.7.3) lässt sich folgern, dass etwa 98% der Oberfläche mit Mosaiken bedeckt sind.

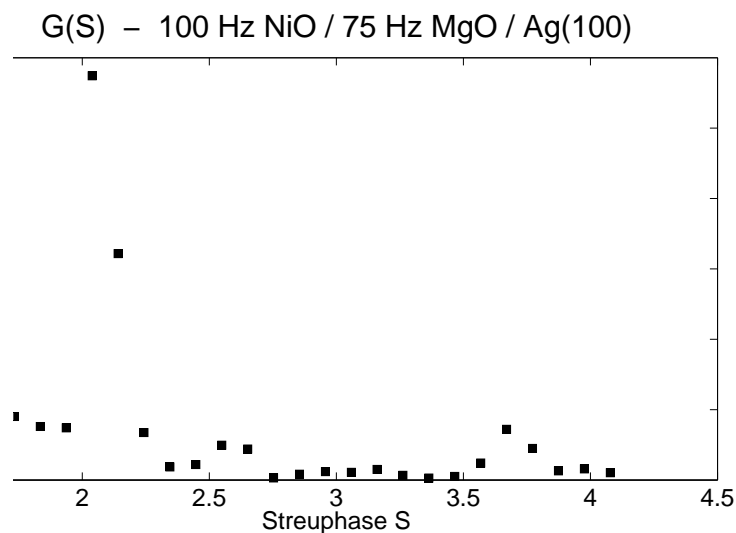


Abbildung 4.26: Aus der  $G(S)$ -Kurve lässt sich hier folgern, dass etwa 98% der Oberfläche mit Mosaiken bedeckt sind.

### 4.3.3 200 Hz NiO

Da bei der Schicht mit 100 Hz NiO bereits Mosaiken vorhanden sind, wird die Schrittweite jetzt erhöht und es werden weitere 100 Hz NiO aufgebracht. Somit ergibt sich eine Schichtdicke von 200 Hz NiO.

Das Auger-Spektrum dieser Schicht ist leider wieder sehr verrauscht. Man sieht jedoch einen weiter gewachsenen Sauerstoff-Peak, sowie den inzwischen größer gewordenen Nickel-Peak.

Bei der Analyse der SPA-LEED-Profile stellt man fest, dass es nur noch bei wenigen Streuphasen auswertbare Daten gibt.

Um die Streuphase  $S = 2$  herum lassen sich die Profile am besten durch eine breite Schulter und eine zentrale Spitze anfitzen. Man kann in den Profilen zwar Satelliten-Reflexe erahnen, diese sind aber von zu geringer Intensität als dass sie aufgelöst werden könnten.

Um die Streuphase  $S = 3$  erhält man Profile, bei denen man die Satelliten deutlicher erkennen kann. Hier ist es möglich, die Profile mit einer zentralen Spitze und drei Ring-Lorentz-Funktionen für die Satelliten anzufitzen. Abbildung 4.28 zeigt die Profile des (00)-Reflexes bei den Streuphasen  $S = 2$  und  $S = 3$ .

Eine Auftragung der Satellitenpositionen  $P$  gegen die Streuphase  $S$  ist in Abbildung 4.29 gezeigt. Der innerste Satellit erweist sich wieder als ortsfest. Die Position des äußersten Satelliten steigt mit wachsender Phase an. Die Position des „Satellit 2“ scheint sich jedoch mit der Phase nicht zu ändern. Dies könnte bedeuten, dass er durch ein regelmäßiges Versetzungsnetzwerk hervorgerufen wird. Allerdings ist es wahrscheinlicher, dass, auf Grund der wenigen Datenpunkte für die der Satellit überhaupt anfitbar ist, es einfach nicht zu sehen ist, dass sich seine Position mit der Phase ändert.

Für den äußersten Satelliten bekommt man aus der Steigung der Ausgleichsgeraden einen Mosaikwinkel von  $\vartheta = 12,07^\circ$ .

Auch der Verlauf der Halbwertsbreiten der Satelliten mit der Phase ergibt nur für „Satellit 1“ eine auswertbare Ausgleichsgerade. Man erhält hier eine Varianz des Mosaikwinkels von  $\Delta\vartheta = 3,45^\circ$ .

Sowohl der Mosaikwinkel als auch dessen Varianz ist bei dieser Schichtdicke extrem groß. Eine abschließende Erklärung hierfür lässt sich im Rahmen dieser Arbeit nicht finden. Möglich ist, dass während des Aufdampfens eine Schicht aus Nickel aufgewachsen ist und diesen großen Mosaikwinkel verursacht. Im weiteren Verlauf zeigt sich jedoch, dass die erhaltenen Daten der nächsten Schichtdicken dieses nicht bestätigen können.

Eine andere Möglichkeit ist, dass es, auf Grund der sehr geringen Intensitäten der Satelliten, bei der Bestimmung der Satellitenpositionen und deren Halbwertsbreiten zu großen Fehlern kommt.

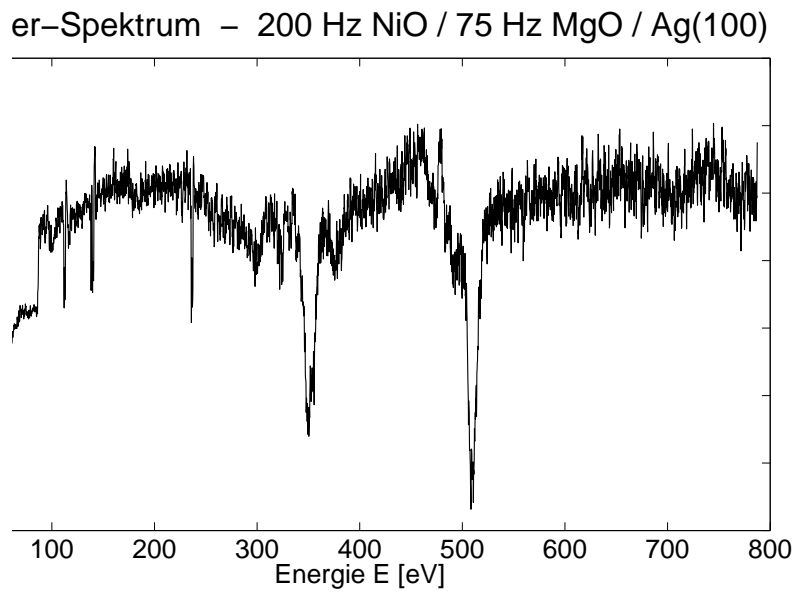


Abbildung 4.27: Auger-Spektrum der 200 Hz dicken NiO-Schicht.

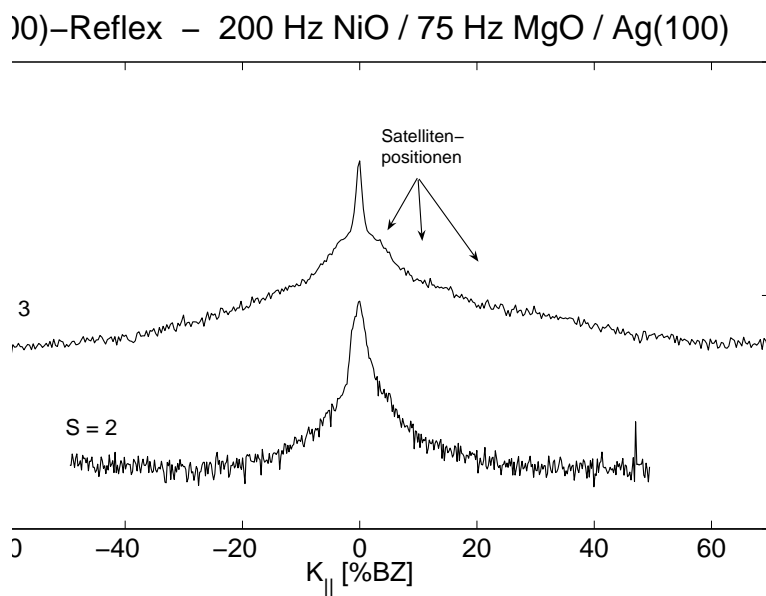


Abbildung 4.28: Profile des (00)-Reflexes der 200 Hz dicken NiO-Schicht für zwei verschiedene Streuphasen.

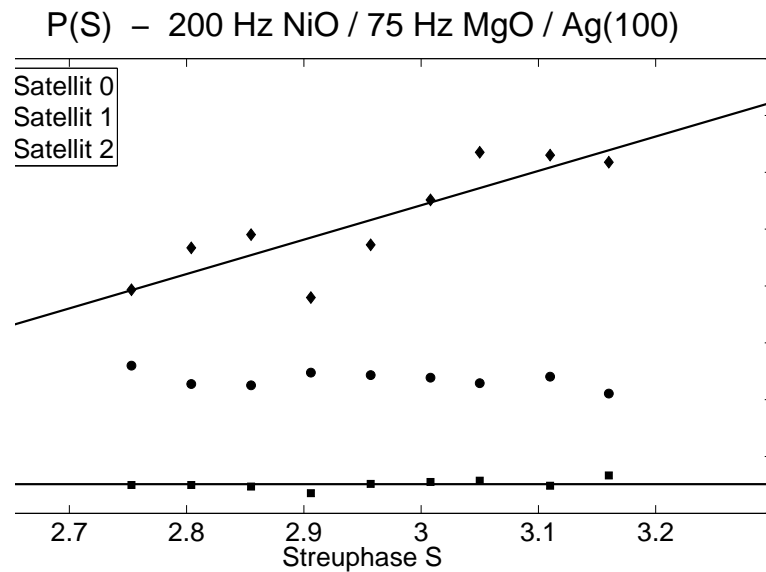


Abbildung 4.29: Nur für „Satellit 1“ lässt sich bei dieser Schichtdicke ein Ansteigen der Position mit der Streuphase feststellen. Ob „Satellit 2“ ortsfest ist lässt sich auf Grund der geringen Datenmenge nicht sagen.

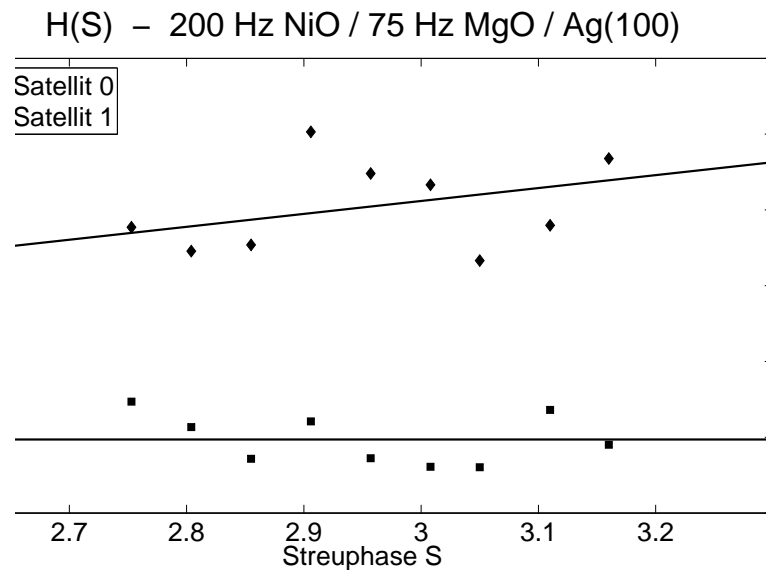


Abbildung 4.30: Auch die Halbwertsbreiten der Satelliten dieser Schichtdicke lassen sich nur für „Satellit 1“ quantitativ auswerten.

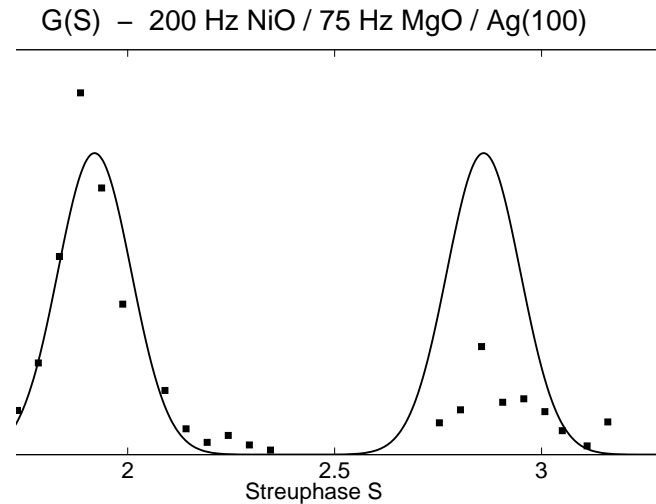


Abbildung 4.31: Die  $G(S)$ -Kurve wird bei dieser Schichtdicke nur im Bereich  $S = 2$  gefittet.

In Abbildung 4.31 ist die  $G(S)$ -Kurve für diese Schichtdicke aufgetragen. Im Bereich von  $S = 2$  wird sie aus den Daten der zwei Lorentzfunktionen für Spitze und Schulter gewonnen, im Bereich von  $S = 3$  aus den Daten der zentralen Spitze und des innersten Satelliten.

Fittet man die  $G(S)$ -Kurve im Bereich von  $S = 2$  mit einer Gauss-Kurve, ergibt sich für die RMS-Rauhigkeit ein Wert von  $\Delta = 1,49$ . Auch dieser Wert ist sehr hoch, und es bleibt hier unklar, woher diese große Abweichung zu den Werten der zugrunde liegenden MgO-Schicht kommt. Zudem ist das Maximum der Gauss-Kurve nicht bei dem ganzzahligen Wert  $S = 2$ , sondern leicht zu einem kleineren Wert verschoben. Dadurch ergibt sich für die erhaltene Schicht eine von dem Wert für NiO abweichende Gitterkonstante.

Aus dem Wert des Maximums um  $S = 3$  lässt sich abschätzen dass etwa 95% der Oberfläche mit Mosaiken bedeckt sind.

#### 4.3.4 350 Hz NiO

Im nächsten Schritt wird die NiO-Schicht weiter erhöht. Es werden zusätzlich 150 Hz aufgedampft, wodurch sich eine NiO-Schichtdicke von insgesamt 350 Hz ergibt.

Das Auger-Spektrum zeigt den erwarteten Verlauf und es werden SPA-LEED-Profile aufgenommen.

Wie bereits bei der vorherigen Schicht lassen sich die Profile im Bereich von  $S = 2$  am besten durch eine zentrale Spitze und eine breite Schulter fitten. Im Bereich von  $S = 3$  zeigen sich bei dieser Schichtdicke die Satelliten deutlicher als zuvor, und die Profile lassen sich durch eine zentrale Spitze und drei Satelliten fitten (siehe Abbildung 4.32).

0)–Reflex – 350 Hz NiO / 75 Hz MgO / Ag(100)

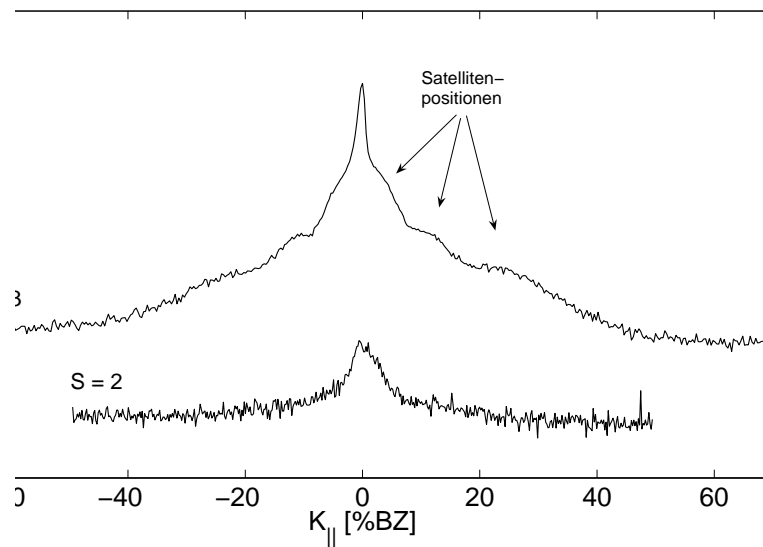


Abbildung 4.32: Die Profile der 350 Hz dicken NiO-Schicht zeigen bei  $S = 3$  deutlicher die Satellitenreflexe als bei den vorherigen Schichten.

Bei dieser Schichtdicke lassen sich aus der Analyse der Satellitenpositionen für beide nicht ortsfesten Satelliten Mosaikwinkel bestimmen. Jedoch ist es nicht möglich, aus dem Verlauf der Halbwertsbreiten die zugehörigen Varianzen der Mosaikwinkel zu ermitteln. Auch hier reicht die Datenmenge wieder nicht aus um aussagekräftige Ausgleichsgeraden zu ermitteln. Man erhält für die Mosaikwinkel die in Tabelle 4.5 aufgeführten Werte.

Satellit	$\vartheta$
„Satellit 1“	3,85°
„Satellit 2“	2,71°

Tabelle 4.5: Mosaikwinkel der 350 Hz dicken NiO-Schicht.

Die  $G(S)$ -Kurve dieser Schicht besteht wieder aus den zwei Teilen, wie es sie schon bei der vorherigen Schicht gab. Fittet man die Daten um  $S = 2$  mit einer Gauss-Kurve, ergibt sich für die Rauftiefe ein Wert von  $\Delta = 0,90$ . Zudem lässt sich über die Mosaik sagen, dass diese etwa 85% der Oberfläche bedecken.



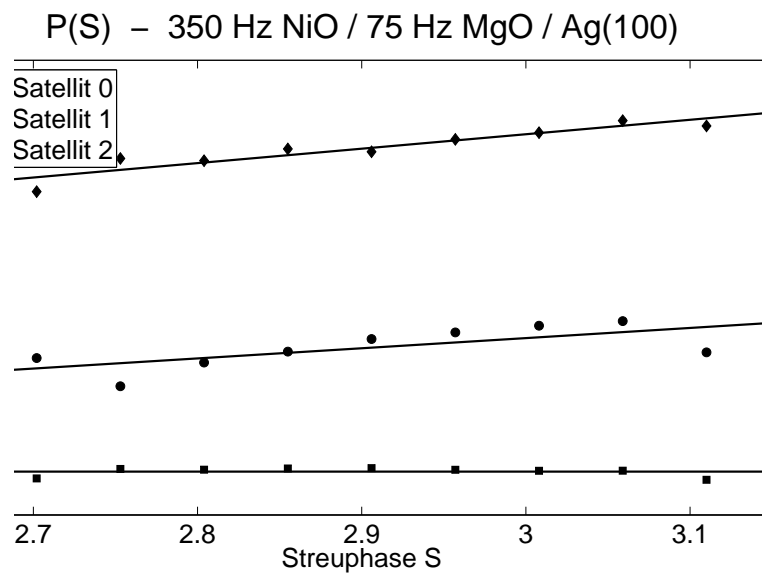


Abbildung 4.33: Die Positionen der Satelliten bei dieser Schichtdicke lassen sich sehr gut linear anfitten.

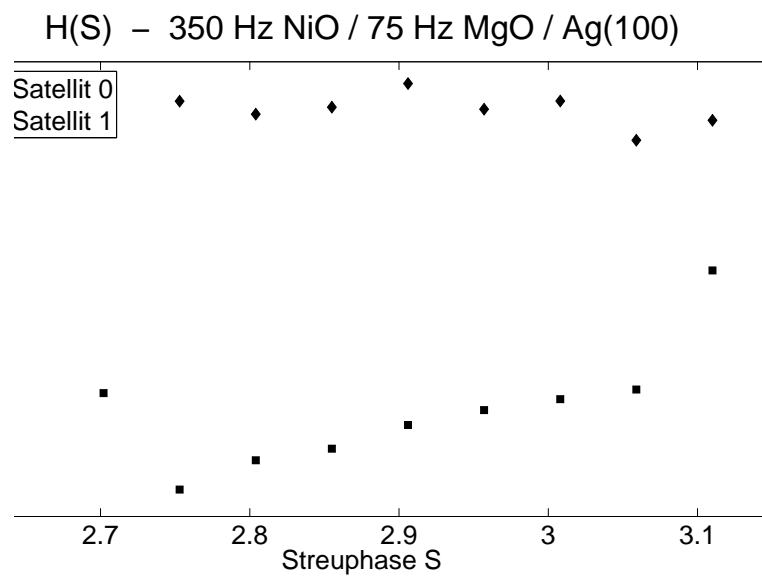


Abbildung 4.34: Die H(S)-Kurve ergibt für die 350 Hz dicke NiO-Schicht keine auswertbaren Ausgleichsgeraden.

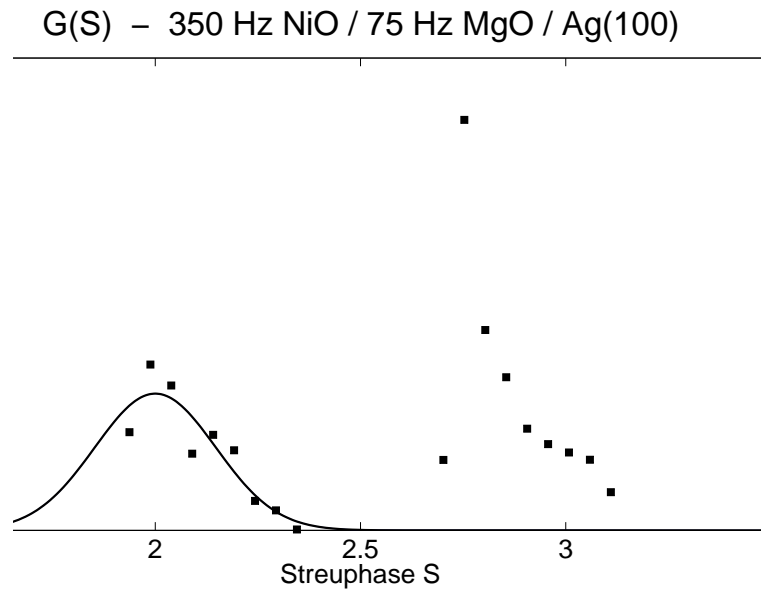


Abbildung 4.35: Um  $S = 2$  lässt sich die  $G(S)$ -Kurve gut mit einer Gauss-Kurve beschreiben und liefert eine RMS-Rauhgigkeit von  $\Delta = 0,9$ .

#### 4.3.5 500 Hz NiO

Als letzte Schichtdicke wird ein Wert von 500 Hz ausgewählt, es werden weitere 150 Hz aufgedampft, um diesen Wert zu erreichen.

Nach einem überprüfenden Auger-Spektrum werden SPA-LEED-Profile aufgenommen.

Es ergibt sich das bereits bekannte Bild, dass sich die Daten um  $S = 2$  mit einer zentralen Spitze und einer breiten Schulter, und um  $S = 3$  mit einer zentralen Spitze und drei Satelliten fitten lassen. Die Intensität der Profile ist allerdings nahezu überall sehr gering, so dass sich nur für ein paar wenige Energien überhaupt die Daten fitten lassen. Abbildung 4.36 zeigt die so erhaltenen, sehr wenigen, Positionen der Satelliten um  $S = 3$ , Abbildung 4.37 zeigt die zugehörigen Halbwertsbreiten.

Wieder lässt sich nur der äußere „Satellit 1“ quantitativ auswerten und es ergibt sich ein Mosaikwinkel von  $\vartheta = 3,75^\circ \pm 3,14^\circ$ .

Passt man die  $G(S)$ -Kurve im Bereich von  $S = 2$  mit einer Gauss-Kurve an, ergibt sich aus deren Halbwertsbreite für die Rauhtiefe ein Wert von  $\Delta = 2,09$ .

Aus den  $G(S)$ -Werten um  $S = 3$  lässt sich schließen, dass die Bedeckung mit Mosaiken auf etwa 40% der Oberfläche zurückgegangen ist.

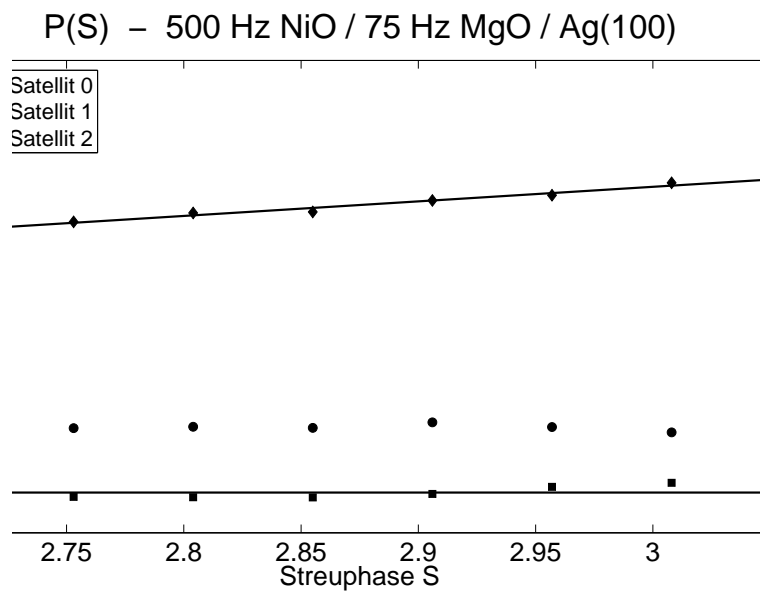


Abbildung 4.36: Die Position der beiden innersten Satelliten scheint konstant zu sein. Für den äußersten Satelliten ergibt sich ein Mosaikwinkel von  $\vartheta = 3,75^\circ$ .

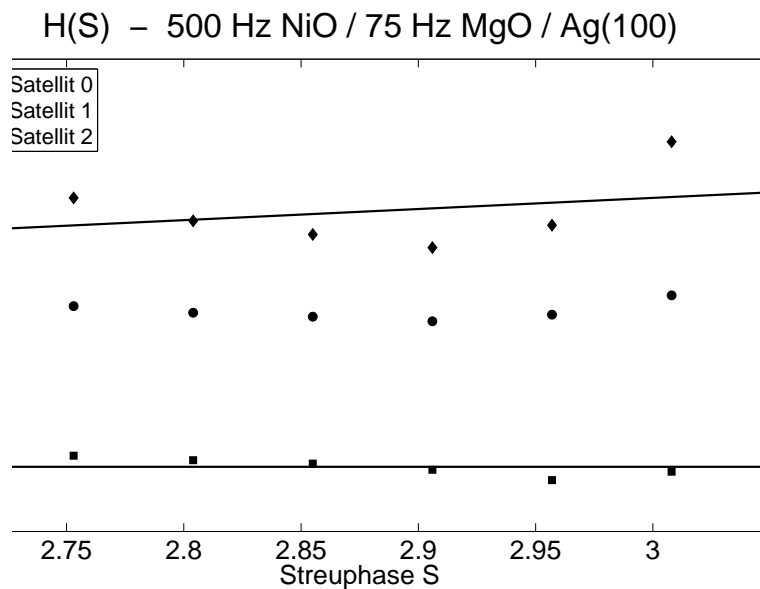


Abbildung 4.37: Die Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich bei dieser Schichtdicke wieder nur für den äußersten Satelliten sinnvoll fiten.

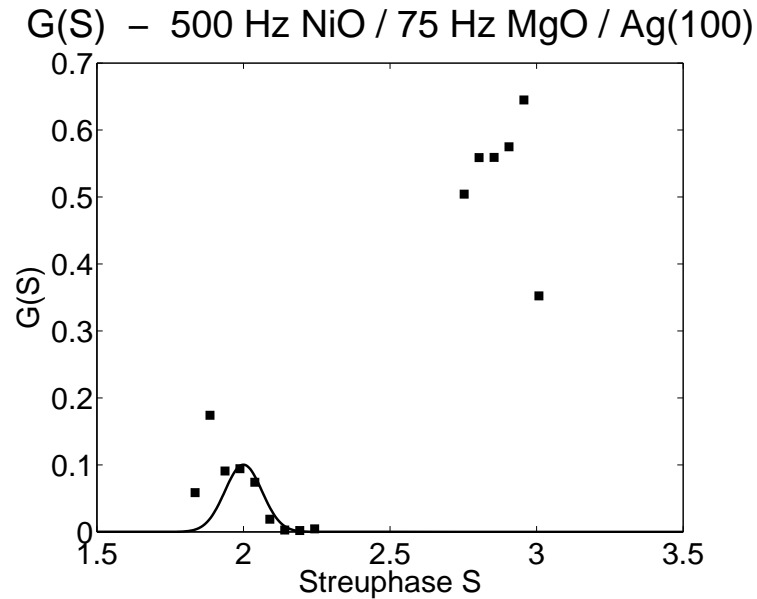


Abbildung 4.38: Um die Streuphase  $S = 2$  lässt sich die  $G(S)$ -Kurve durch eine Gauss-Kurve fitten und man erhält für die Rauhtiefe  $\Delta = 2,09$ .

#### 4.3.6 Zusammenfassung NiO/MgO/Ag(100)

Für das initiale Wachstum der Nickeloxid-Schicht auf den 75 Hz MgO auf Silber zeigt sich ein ähnliches Verhalten, wie für die Magnesiumoxid-Schicht auf dem Silber. Bei einer Schichtdicke von 50 Hz NiO erhält man zweistöckiges Wachstum mit einer mittleren Inselgröße von  $13,4\text{\AA}$  und einem mittleren Mosaikwinkel von  $0,17^\circ$ .

Bei den weiteren Schichtdicken zeigen sich Satellitenreflexe in den SPA-LEED-Profilen, die auf Mosaik mit Vorzugsrichtung hinweisen. Aus diesen ergeben sich die in Tabelle 4.6 zusammengefassten Werte für die Mosaikwinkel.

„Schichtdicke“	Mosaikwinkel $\vartheta \pm \Delta\vartheta$	Rauhtiefe $\Delta$	Bedeckung mit Mosaiken $\Theta$
100 Hz	$4,96^\circ \pm 1,70^\circ$ $3,78^\circ$ $2,01^\circ$		98%
200 Hz	$12,07^\circ \pm 3,45^\circ$	1,49	95%
350 Hz	$3,85^\circ$ $2,71^\circ$	0,9	85%
500 Hz	$3,75^\circ \pm 3,14^\circ$	2,09	40%

Tabelle 4.6: Zusammenfassung der quantitativen Ergebnisse für die einzelnen NiO-Schichten.

Lässt man die extrem hohen Werte für Mosaikwinkel und Rauhtiefe für die 200 Hz dicke NiO-Schicht außen vor, ergibt sich auch hier ein deutliches Bild.

Die Mosaikwinkel nehmen mit zunehmender Bedeckung von  $4,96^\circ$  bei 100 Hz zu  $3,75^\circ$  bei 500 Hz ab, während die zugehörigen Varianzen mit steigender Bedeckung zunehmen. Analog zu den Varianzen der Mosaikwinkel, nimmt auch die RMS-Rauhigkeit mit steigender Bedeckung zu.

Während die Mosaikwinkel mit zunehmender Bedeckung immer kleiner werden, nimmt auch der Anteil der Oberfläche ab, der mit Mosaiken bedeckt ist: während bei 100 Hz NiO 98% der Oberfläche mit Mosaiken bedeckt sind, sind es bei 500 Hz NiO nur noch 40% der Oberfläche.

Mit zunehmender Schichtdicke erhält man also auch hier für die Nickeloxid-Schicht, ebenso wie bei dem Wachstum von Magnesiumoxid auf Silber, immer glattere Oberflächen, deren geometrische Eigenschaften sich immer mehr denen von Volumen-Nickeloxid annähern.



# Kapitel 5

## Zusammenfassung und Ausblick

### 5.1 Zusammenfassung

Zur Epitaxie von Nickeloxid auf Silber gibt es bereits seit längerem einige Arbeiten (z.B. [39] - [41]). Jedoch ergibt sich dabei stets das Problem einer Legierungsbildung zwischen dem Nickeloxid als Adsorbat und dem Silber als Substrat.

In dieser Arbeit gibt es einen neuen Ansatz, um Nickeloxid als Adsorbat auf einem Silbersubstrat zu nutzen, und dabei epitaktisches Wachstum zu erzielen: es wird eine Zwischenschicht aus Magnesiumoxid genutzt.

Magnesiumoxid bietet sich vor allem an, da es annähernd die gleiche Gitterkonstante hat wie Nickeloxid ( $a_{MgO} = 4,21\text{\AA}$ ,  $a_{NiO} = 4,18\text{\AA}$ ). Dadurch ist gewährleistet, dass die Gitterfehlpassung gering ist, was ein entscheidendes Kriterium für gutes epitaktisches Wachstum ist. Zudem ist bekannt, dass Magnesiumoxid bei einer bestimmten Schichtdicke pseudomorph verspannt auf einem Silbersubstrat aufwächst[34].

Hierauf soll dann das Nickeloxid aufgewachsen werden.

Nach der Präparation und Charakterisierung des Substrates wurde Magnesiumoxid auf das Silber aufgedampft. Ziel war hierbei, eine Schichtdicke zu finden, die die Vorgabe erfüllt, möglichst glatt zu sein. Zum einen muss also die oberste Schicht geschlossen sein, zum anderen dürfen sich keine Mosaik auf der Oberfläche bilden.

Es wurden bei Raumtemperatur verschiedene Schichtdicken aufgebracht<sup>1</sup> und mittels SPA-LEED deren Oberflächenmorphologie charakterisiert.

---

<sup>1</sup>Leider steht für diese Arbeit keine Methode zur Verfügung, die Schichtdicken in-situ zu messen. Die Angabe der Schichtdicken erfolgt hier mittels der Angabe der aufgetragenen Menge in Hz, also der Frequenzänderung des Schwingquarzes im Verdampfer bei der entsprechenden Menge.

Die Ergebnisse lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- 50 Hz MgO / Ag(100):  
Auf dem Substrat haben sich zweistöckige Magnesiumoxidinseln mit einer mittleren Größe von  $\langle \Gamma \rangle = 15,3\text{\AA}$  gebildet. Der mittlere Mosaikwinkel beträgt  $\vartheta = 0,05^\circ$  und die Rauhtiefe  $\Delta = 0,23$ .
- 75 Hz MgO / Ag(100):  
Die oberste Lage Magnesiumoxid ist glatt, mit einer mittleren Terrassenlänge von  $\langle \Gamma \rangle = 217\text{\AA}$ . Der mittlere Mosaikwinkel beträgt  $\vartheta = 0,17^\circ$  und die Rauhtiefe  $\Delta = 0,28$ .
- 100 Hz MgO / Ag(100):  
Es haben sich Mosaike mit Vorzugsrichtung gebildet. Die Mosaikwinkel betragen  $\vartheta_1 = 4,93^\circ \pm 2,97^\circ$  und  $\vartheta_2 = 2,85^\circ \pm 1,01^\circ$ .
- 300 Hz MgO / Ag(100):  
Es sind weiterhin Mosaike vorhanden und die Mosaikwinkel betragen  $\vartheta_1 = 2,78^\circ \pm 1,35^\circ$  und  $\vartheta_2 = 1,57^\circ \pm 1,13^\circ$ .

Hieraus ergibt sich für das Wachstum von Magnesiumoxid auf Silber ein Modell, das in Abbildung 5.1 dargestellt ist.

In der initialen Phase des Wachstums bilden die ersten Magnesiumoxidmoleküle zweistöckige Inseln auf dem Substrat. Diese zweistöckigen Inseln wachsen solange, bis etwa das Material für eine komplette Monolage ( $\Theta \approx 1$ ) aufgebracht ist. (siehe **a** in Abb. 5.1)

Danach beginnen sich die Lücken zwischen den Inseln zu füllen und die Doppellage Magnesiumoxid schließt sich bei einer Bedeckung von  $\Theta = 2$ . (**b - c**) Nun wachsen wenige Monolagen Magnesiumoxid pseudomorph verspannt auf der ersten Doppellage Magnesiumoxid. Dieses Wachstum erfolgt hierbei Lage-für-Lage.

Ab einer bestimmten kritischen Schichtdicke ist es energetisch günstiger, statt des pseudomorphen Wachstums, welches Energie kostet, Defekte einzubauen. In diesem Fall entstehen Kippmosaike um die Verspannungen des Filmes abzubauen. (**d**) Auf Grund der fehlenden Informationen über die reale Schichtdicke lässt sich hier kein exakter Wert für die kritische Schichtdicke angeben, ab der sich Mosaike bilden.

Im weiteren Verlauf des Wachstums nehmen die Mosaikwinkel immer weiter ab, dadurch wird der Film mit zunehmender Schichtdicke ebener. (**e**)

Den Gesamtverlauf betrachtend erhält man also einen Film, der zunächst mit der lateralen Gitterkonstante des Silbers aufwächst, dann im weiteren Verlauf, durch die Bildung von Kippmosaikern, weitestgehend relaxiert, bis am Ende eine Magnesiumoxidschicht vorliegt, die die Gitterkonstante von Volumen-Magnesiumoxid aufweist. (**f**)



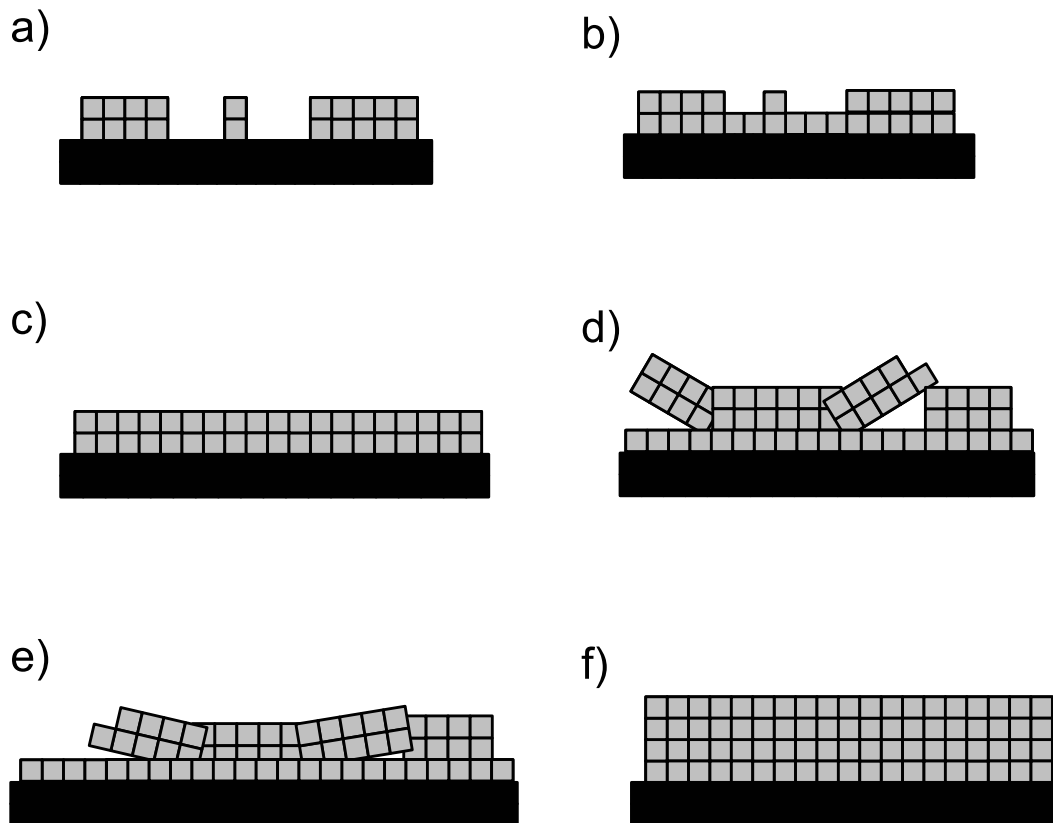


Abbildung 5.1: Modell des Wachstums von Magnesiumoxid auf Silber.

In dieser Arbeit wurde, basierend auf den bisherigen Ergebnissen, eine Schichtdicke für die Magnesiumoxid-Zwischenschicht von 75 Hz gewählt. Diese Schicht weist keine Magnesiuminseln mehr, und noch keine Mosaikbildung auf. Die kritische Schichtdicke für den Abbau von Verspannungen ist also noch nicht erreicht.

Auf diese Magnesiumoxidschicht wurden bei Raumtemperatur 50 Hz Nickeloxid aufgewachsen. Im Anschluss wurde die Nickeloxidschicht bei Raumtemperatur sukzessive erhöht und mittels SPA-LEED charakterisiert, so dass auch für das Wachstum von Nickeloxid auf einer Magnesiumoxid-Zwischenschicht auf Silber ein Modell erstellt werden konnte.

Die Auswertung der SPA-LEED-Profile ergab folgende Ergebnisse:

- 50 Hz NiO / MgO / Ag(100):  
Auf dem Magnesiumoxid bilden sich doppelstöckige Inseln mit einer mittleren Größe von  $\langle \Gamma \rangle = 13,4\text{\AA}$ . Der mittlere Mosaikwinkel beträgt  $\vartheta = 0,17^\circ$  und die Rauhtiefe  $\Delta = 1,00$ .
- 100 Hz NiO / MgO / Ag(100):  
Es haben sich bereits Mosaiken mit Vorzugsrichtung gebildet. Diese bedecken etwa 98% der Oberfläche. Die Mosaikwinkel betragen  $\vartheta_1 = 4,96^\circ \pm 1,70^\circ$ ,  $\vartheta_2 = 3,78^\circ$  und  $\vartheta_3 = 2,01^\circ$ .
- 350 Hz NiO / MgO / Ag(100):  
Sowohl die Mosaikwinkel, als auch die Bedeckung der Oberfläche haben abgenommen. Man erhält für die Mosaikwinkel  $\vartheta_1 = 3,85^\circ$  und  $\vartheta_2 = 2,71^\circ$  und für die Bedeckung 85%. Die Rauhtiefe beträgt hier  $\Delta = 0,90$ .
- 500 Hz NiO / MgO / Ag(100):  
Eine weitere Abnahme der Mosaikwinkel ist zu sehen, man erhält  $\vartheta_1 = 3,75^\circ \pm 3,14^\circ$ . Ebenso hat die Bedeckung mit Mosaiken abgenommen auf einen Wert von 40%. Die Rauhtiefe beträgt  $\Delta = 2,09$ .

Diese Ergebnisse zeigen, dass sich auch für das Wachstum von Nickeloxid auf einer dünnen Zwischenschicht aus Magnesiumoxid auf einem Silbersubstrat das bereits entwickelte, und in Abbildung 5.1 für Magnesiumoxid auf Silber gezeigte, Modell verwenden lässt.

In der initialen Phase des Wachstums bilden sich doppelstöckige Nickeloxid-Inseln auf dem Substrat. Ab einer Bedeckung von etwa  $\Theta = 1$  fangen die Lücken zwischen den Inseln an, zuzuwachsen.

Bei einer Bedeckung von  $\Theta = 2$  ist dann die Doppellage geschlossen und weitere Schichten wachsen Lage-für-Lage.

Ist eine bestimmte kritische Schichtdicke erreicht, bilden sich auch hier Kippmosaiken, um die Verspannungen durch das pseudomorphe Wachstum abzubauen.

Mit zunehmender Bedeckung nehmen die Mosaikwinkel immer weiter ab, und so wird die Oberfläche zunehmend ebener. Ebenso nehmen die Bereiche, die mit Mosaiken bedeckt sind, mit zunehmender Bedeckung ab.

Somit relaxiert auch die Gitterkonstante der Nickeloxid-Schicht auf diesem Substrat, von dem Wert der beim pseudomorphen Wachstum angenommenen lateralen Gitterkonstante des Silbers, zu einem Wert, der dem von Volumen-Nickeloxid entspricht.

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen zusammenfassend, dass es mit den gewählten Methoden und zugehörigen Parametern möglich ist, bei Raumtemperatur Nickeloxid auf einem Silbersubstrat epitaktisch aufzuwachsen, wenn man eine dünne Zwischenschicht aus Magnesiumoxid wählt.

## 5.2 Ausblick

In dieser Arbeit wird als Ergebnis festgehalten, dass es mit den gewählten Parametern möglich ist, Nickeloxid auf einer Zwischenschicht aus Magnesiumoxid auf Silber epitaktisch zu wachsen. Dennoch ist dies nur ein erster Schritt auf diesem Gebiet, denn die Varianten an möglichen Parametern ist sehr groß.

Für die Zukunft sollte sicherlich als erstes eine Kalibration der genutzten Verdampfer durchgeführt werden. Damit wäre es möglich, die Schichtdicken direkt anzugeben und es könnten wichtige Daten, wie zum Beispiel die kritische Schichtdicke zur Bildung von Mosaiken, exakt benannt werden.

Des Weiteren muß in einem nächsten Schritt die Messreihe ausgeweitet werden auf höhere Schichtdicken. Somit können dann Aussagen getroffen werden über die Schichtdicke, bei der der Film völlig relaxiert ist.

Ausserdem ist es notwendig, die Messreihen bei anderen Temperaturen durchzuführen. Dies ist, gerade bei höheren Temperaturen, wichtig in Bezug auf die Legierungsbildung zwischen Adsorbat und Substrat. Generell ist es in dieser Arbeit nicht möglich, Aussagen darüber zu machen, inwieweit es auch hier zu einer Legierungsbildung kommt. Dieser Punkt muß weiter, vor allem mit anderen Methoden wie beispielsweise XPS oder XRD, untersucht werden.

Letztendlich sollte man auch über andere Materialkombinationen nachdenken. So ist es sicherlich sinnvoll mit Eisen ein ferromagnetisches Material mit einzubeziehen. Zudem eignet sich Eisen als weiteres Material, da auch hier die Gitterfehlpassung gering wäre.

Es bleibt also festzuhalten, dass diese Arbeit nur der Anstoss sein kann für eine lange Reihe von weiterführenden Arbeiten zu den Grundlagen der Epitaxie der verwendeten Materialien.



# Literaturverzeichnis

- [1] E. Bauer. **Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen**, Z. Kristallogr. **110** (1958) 372
- [2] J.A. Venables, G.D.T. Spiller, M. Hanbücken. **Nucleation and growth of thin films**, Rep. Prog. Phys. **47** (1984) 399
- [3] L.P. Nedelmann. **Nucleation, growth and strain relief in copper heteroepitaxie on nickel(100)**, Dissertation, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (1997)
- [4] D. Walton. **Nucleation of vapor deposits**, J. Chem. Phys **37** (1962) 2182
- [5] H. Ibach. **The role of surface stress in reconstruction, epitaxial growth and stabilization of mesoscopic structures**, Surf. Sci. Rep. **29** (1997) 193
- [6] M. Henzler, W. Göpel. **Oberflächenphysik des Festkörpers**, Teubner Studienbücher (1994)
- [7] D. Erdös. **Messungen zum reaktiven epitaktischen Wachstum von MgO auf Ag(100)**, Diplomarbeit, Universität Hannover (1996)
- [8] T. Schmidt. **Strukturelle Untersuchungen zur Homoepitaxie auf Pt(111)**, Dissertation, Universität Hannover (1994)
- [9] Internetseite. **AG Horn-von Hoegen, Universität Essen**, <http://www.ilp.physik.uni-essen.de/hvh/methodik/spaleed/spaleed.htm> (2007)
- [10] C.S. Lent, P.I. Cohen. **Diffraction from stepped surfaces**, Surf. Sci. **139** (1984) 121
- [11] R. Höpken. **Morphologie von NiO-Schichten auf Ag(100)**, Examensarbeit, Universität Hannover (2000)
- [12] J. Wollschläger, J. Falta, M. Henzler. **Electron Diffraction at Stepped Homogeneous and Inhomogeneous Surfaces**, Appl. Phys. A **50** (1990) 57

- [13] J. Wollschläger. **Ordnungsvorgänge in einatomaren Metallschichten auf hochindizierten Metallflächen**, Dissertation, Universität Hannover (1990)
- [14] J. Wollschläger. **Simple analysis of spot splitting due to diffraction at surfaces with atomic steps**, Surf. Sci. **383** (1997) 103
- [15] J. Wollschläger, D. Erdös, H. Goldbach, R. Höpken, K.M. Schröder. **Growth of NiO and MgO Films on Ag(100)**, Thin Solid Films **400** (2001) 1
- [16] J. Kramer, C. Tegenkamp, H. Pfnür. **The growth of NaCl on flat and stepped silver surfaces**, J. Phys.: Condens. Matter **15** (2003) 6473
- [17] W. Weigand, C. Kumpf, M. Sokolowski, A. Bader, C. Schumacher, A. Möglinger, W. Faschinger, L.W. Molenkamp, E. Umbach. **Discrete Mosaic „Spread“ at the Surface of ZnSe Layers on GaAs(001)**, phys. stat. sol. (b) **229** (2002) 117
- [18] Internetseite. **Chemistry: WebElements periodic table**, <http://www.webelements.com/webelements/elements/text/Ag/> (2007)
- [19] Internetseite. **Wikipedia: Silber**, <http://de.wikipedia.org/wiki/Silber> (2007)
- [20] Internetseite. **Professor Marshall Stoneham's Crystal Data**, <http://www.oxmat.co.uk/Crysdata/mgo.htm> (2000)
- [21] Internetseite. **Chemistry: WebElements periodic table**, <http://www.webelements.com/webelements/compounds/text/Mg/Mg1O1-1309484.html> (2007)
- [22] Internetseite. **Wikipedia: Elektronegativität**, <http://de.wikipedia.org/wiki/Elektronegativität> (2007)
- [23] Internetseite. **Professor Marshall Stoneham's Crystal Data**, <http://www.oxmat.co.uk/Crysdata/nio.htm> (2000)
- [24] Internetseite. **Chemistry: WebElements periodic table**, <http://www.webelements.com/webelements/compounds/text/Ni/Ni1O1-1313991.html> (2007)
- [25] U. Kaiser, A. Schwarz, R. Wiesendanger. **Magnetic exchange force microscopy with atomic resolution**, Nature **446** (2007) 522
- [26] W.L. Roth. **Neutron and Optical Studies of Domains in NiO**, J. Appl. Phys. **31** 2000 (1960)

- [27] Ch. Ammer, K. Meinel, M. Klaua. **High quality Ag crystal surfaces for investigating the initial stages of Ag homoepitaxy**, Phys. Status Solidi **150A** (1995) 507
- [28] G. Costantini, S. Rusponi, R. Gianotti, C. Boragno, U. Valbusa. **Temperature evolution of nanostructures induced by Ar<sup>+</sup> sputtering on Ag(001)**, Surf. Sci. **416** (1998) 245
- [29] Ch. Kittel. **Einführung in die Festkörperphysik**, Oldenbourg (2006)
- [30] M. Bäumer, D. Cappus, H. Kuhlenbeck, H.-J. Freund, G. Wilhelmi, A. Brodde, H. Neddermeyer. **The structure of thin NiO(100) films grown on Ni(100) as determined by low-energy-electron diffraction and scanning tunneling microscopy**, Surf. Sci. **253** (1991) 116
- [31] K. Marre, H. Neddermeyer. **Growth of ordered thin films of NiO on Ag(100) and Au(111)**, Surf. Sci. **287/288** (1993) 995
- [32] J. Wollschläger, J. Viernow, C. Tegenkamp, D. Erdös, K.M. Schröder, H. Pfnür. **Stoichiometry and morphology of MgO films grown reactively on Ag(100)**, Appl. Surf. Sci. **142** (1999) 129
- [33] C.S. Ares Fang. **Suface structural transition of adsorption of oxygen on Ag(100)**, Surf. Sci. **235** (1990) L291
- [34] J. Wollschläger, D. Erdös, K.-M. Schröder. **The formation of mosaics during the reactive growth of MgO films on Ag(100)**, Surf. Sci. **402-404** 1998 272
- [35] S. Valeri, S. Altieri, A. di Bona, P. Luches, C. Giovanardi, T.S. Moia. **Thickness-dependent strain in epitaxial MgO layers on Ag(001)**, Surf. Sci. **507-510** (2002) 311
- [36] M. Kiguchi, T. Goto, K. Saiki, T. Sasaki, Y. Iwasawa, A. Koma. **Atomic and electronic structures of MgO/Ag(001) hetero-interface** Surf. Sci. 512 (2002) 97
- [37] S. Schintke, S. Messerli, M. Pivetta, F. Patthey, L. Libioulle, M. Stengel, A. De Vita, W.-D. Schneider. **Insulator at the Ultrathin Limit: MgO on Ag(001)**, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 276801
- [38] S. Valeri, S. Altieri, U. del Pennino, A. di Bona, P. Luches, A. Rota. **Scanning tunnelling microscopy of MgO ultrathin films on Ag(001)**, Phys. Rev. B **65** (2002) 245410
- [39] Th. Bertrams, H. Neddermeyer. **Growth of NiO(100) layers on Ag(100): Characterization by scanning tunneling microscopy**, J. Vac. Sci. Technol. B **14** (1995) 1141

- [40] I. Sebastian, Th. Bertrams, K. Meinel, H. Neddermeyer. **Scanning tunnelling microscopy on the growth and structure of NiO(100) and CoO(100) thin films**, Faraday Discuss. **114** (1999) 129
- [41] H. Goldbach. **Epitaktisches Wachstum von Metall- und Oxidschichten**, Dissertation, Universität Hannover (2001)
- [42] B. Aufray, H. Giordano, B. Legrand, G. Tréglia. **On a „surfactant-like“ behaviour of Ni/Ag(100) deposit**, Surf. Sci. **307-309** (1994) 531
- [43] R. de Masi, D. Reinicke, F. Müller, P. Steiner, S. Hüfner. **The suppression of NiO reduction in Fe/NiO systems by use of an ultrathin MgO buffer layer, investigated by photoemission and low energy electron diffraction**, Surf. Sci. 516 (2002) L515
- [44] P.W. Tasker. **The stability of ionic crystal surfaces**, J. Phys. C: Solid State Phys. **12** (1979) 4977
- [45] F. Finocchi, A. Barbier, J. Jupille, C. Noguera. **Stability of Rock-salt (111) Polar Surfaces: Beyond the Octopole**, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 136101
- [46] R. Plass, J. Feller, M. Gajdardziska-Josifovska. **Morphology of MgO(111) surfaces: artifacts associated with the faceting of polar oxide surfaces into neutral surfaces**, Surf. Sci. **414** (1998) 26
- [47] A. Barbier, C. Mocuta, G. Renaud. **Structure, transformation, and reduction of the polar NiO(111) surface**, Phys. Rev. B **62** (2000) 16056
- [48] M. Kiguchi, S. Entani, K. Saiki, T. Goto, A. Koma. **Atomic and electronic structure of an unreconstructed polar MgO(111) thin film on Ag(111)**, Phys. Rev. B **68** (2003) 115402
- [49] Internetseite. **Wikipedia: Epitaxie**, <http://de.wikipedia.org/wiki/Epitaxie> (2007)
- [50] U. Scheithauer, G. Meyer, M. Henzler. **A new LEED instrument for quantitative spot profile analysis**, Surf. Sci. **178** (1986) 441



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Möglichkeiten der Adatome auf dem Substrat. a) Atom trifft auf das Substrat, b) Atom diffundiert auf dem Substrat und bildet mit einem Monomer einen Dimer, c) Atom diffundiert auf dem Substrat und wird von einem Cluster eingebaut, d) Atom trifft auf einem bestehenden Cluster auf, e) Atom trifft auf oder neben einem Monomer auf und bildet einen Dimer. . . . .	4
1.2	Die verschiedenen Wachstumsmodi im thermodynamischen Gleichgewicht. . . . .	5
1.3	Schematische Darstellung des KLL-Auger-Prozesses. $E_K$ und $E_L$ bezeichnen die Energieniveaus der entsprechenden Schalen, $E_F$ das Fermi-niveau. . . . .	8
1.4	Exemplarisches Auger-Spektrum des Silberkristalls vor Präparation. . . . .	8
1.5	Die am n-ten Atom gestreute Welle erfährt eine Phasenverschiebung gegenüber der am 0. Atom gestreuten Welle. . . . .	10
1.6	Definition des Streuvektors $\vec{K}$ . . . . .	10
1.7	In der kinematischen Näherung wird die Oberfläche in Einheitszellen unterteilt, die in das Volumen hinabreichen. Das Rückstreuverhalten aller Einheitszellen wird gleichgesetzt. . . . .	11
1.8	Bei einer gestuften Oberfläche ändert sich das Profil des Zentralreflexes mit der Streuphase S (aus [11]). . . . .	16
1.9	Die Oberfläche läßt sich über die relative Bedeckung $\Theta_h$ und die sichtbare Bedeckung $p_h$ der h-ten Schicht charakterisieren. . . . .	17
1.10	Bei Gegenphase kommt es zu destruktiver Interferenz zwischen den, an Terrassen mit dem Höhenunterschied d, gestreuten Elektronenwellen. Hierdurch ergibt sich in der Projektion ein Zweischicht-System. . . . .	19
1.11	a) Ideale Oberfläche führt zu idealen Stangen im reziproken Raum. b) Oberfläche mit Mosaiken ergibt proportional zur Phase verbreiterte Stangen im reziproken Raum. . . . .	24
1.12	Skizze zur Herleitung von Formel 1.65 . . . . .	24
1.13	Bei Mosaiken mit Vorzugsrichtung steigen sowohl deren Halbwertsbreiten $H(S)$ als auch deren Positionen $P(S)$ linear mit der Phase S an (aus [7]). . . . .	25
1.14	Die Halbwertsbreite der Satellitenreflexe gibt die Halbwertsbreite der Winkelverteilung $P(\theta)$ . Diese ist ein Maß für die Schwankung der Mosaikwinkel um $\vartheta$ (aus [7]). . . . .	26

1.15	Auf der Oberfläche wechseln sich ebene Bereiche der Länge $\Gamma$ und verkippte Bereiche der Länge $\Lambda$ ab. . . . .	27
2.1	Schematische Darstellung der Einheitszelle eines fcc-Kristalls. . . . .	30
2.2	Schematische Darstellung der (100)-Orientierung eines fcc-Kristalls von oben. . . . .	31
2.3	Schematische Darstellung der (100)-Orientierung eines fcc-Kristalls von der Seite. . . . .	31
2.4	Orientierung der Spins in antiferromagnetischem Nickeloxid [25]. . . . .	32
2.5	Schema des reaktiven Wachstums am Beispiel von NiO auf Ag. Zur Vereinfachung sind alle Atomsorten in der gleichen Größe dargestellt. . . . .	33
2.6	LEED-Aufnahmen und daraus entwickelte Modelle der erhaltenen MgO-Schichten bei Oxidation einer Magnesiumschicht auf Silber (a) und bei reaktivem Wachstum von Magnesiumoxid auf Silber (b) [32]. . . . .	34
3.1	Skizze des Versuchsaufbaus. . . . .	38
3.2	Beim Sputtern mit $\text{Ar}^+$ -Ionen werden Verunreinigungen und Störstellen von der Oberfläche entfernt. . . . .	40
3.3	Schematischer Aufbau der genutzten Verdampfer. . . . .	41
3.4	Vereinfachte Darstellung der Auger-Optik. . . . .	42
3.5	Vereinfachte Darstellung der SPA-LEED - Optik. . . . .	43
4.1	Im Auger-Spektrum des präparierten Silberkristalls sieht man deutlich den charakteristischen Silber-Doppelpeak bei 351 bzw. 356 eV. Die Peaks bei 266 eV und 301 eV gehören ebenfalls zum Silber. Das Fehlen von zum Beispiel dem charakteristischen Kohlenstoff-Peak bei 272 eV, oder des charakteristischen Sauerstoff-Peaks bei 503 eV, zeugt von einer guten Präparation des Substrates. . . . .	46
4.2	Eine 2D-LEED-Aufnahme des präparierten Silberkristalls zeigt Reflexe an den durch das fcc-Gitter vorgegebenen Positionen. . . . .	47
4.3	Die Profile des (00)-Reflexes des Substrates lassen sich durch eine lorentzförmige Schulter und eine lorentzsförmige zentrale Spitze anfitzen. Daraus ergibt sich die dargestellte Gesamtfunktion. . . . .	48
4.4	Aus der gefitteten $H(S)$ -Kurve des Substrates lassen sich die mittlere Terrassenlänge sowie der mittlere Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält hier für die mittlere Terrassenlänge $\Gamma = 409\text{\AA}$ und für den mittleren Mosaikwinkel $\vartheta = 0,026^\circ$ . . . . .	49
4.5	Der Verlauf der $G(S)$ -Kurve zeigt keinen Verlauf, wie er für eine durch atomare Stufen aufgerauhte Oberfläche zu erwarten ist. Somit liegt der Grund für die Rauigkeit des Substrates hier bei Punktdefekten. . . . .	50
4.6	Im Auger-Spektrum der 300 Hz dicken MgO-Schicht auf dem Silbersubstrat sieht man bei 32 eV den Peak des Magnesium-Ions, und bei 503 eV den Sauerstoffpeak, welche beide zeigen, dass sich MgO gebildet hat. Allerdings sieht man den charakteristischen Silber-Doppelpeak überhaupt nicht mehr, was auf eine sehr dicke Magnesiumoxid-Schicht schließen lässt. . . . .	52

4.7	Aus den Steigungen der Geraden der Satellitenpositionen lassen sich die Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“ $\vartheta = 2,78^\circ$ und für „Satellit 2“ $\vartheta = 1,57^\circ$ . . . . .	53
4.8	Aus den Steigungen der Geraden der Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich die Varianzen der Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“ $\Delta\vartheta = 1,35^\circ$ und für „Satellit 2“ $\Delta\vartheta = 1,13^\circ$ . . . . .	54
4.9	Im Auger-Spektrum der 100 Hz dicken MgO-Schicht sieht man, im Gegensatz zum Auger-Spektrum der 300 Hz dicken Schicht, wieder schwach den Silber-Peak. . . . .	55
4.10	In den Reflexprofilen der 100 Hz dicken MgO-Schicht zeigen sich Satelliten, deren Positionen mit steigender Streuphase anwachsen. . . . .	56
4.11	Aus den Steigungen der Geraden der Satellitenpositionen über die Streuphase S lassen sich die Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“ $\vartheta = 4,93^\circ$ und für „Satellit 2“ $\vartheta = 2,85^\circ$ . . . . .	57
4.12	Aus den Steigungen der Geraden der Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich die Varianzen der Mosaikwinkel bestimmen. Man erhält für „Satellit 1“ $\vartheta = 2,97^\circ$ und für „Satellit 2“ $\vartheta = 1,01^\circ$ . . . . .	58
4.13	Aus der G(S)-Kurve der 100 Hz dicken MgO-Schicht lässt sich ableiten, dass auch diese Schicht sehr rauh ist. . . . .	58
4.14	Die Reflexprofile der 50 Hz dicken MgO-Schicht zeigen keinerlei Satelliten. Sie lassen sich am besten durch eine breite Schulter, eine schmale Schulter und eine zentrale Spitze anfitten. . . . .	59
4.15	Die H(S)-Kurve der 50 Hz dicken MgO-Schicht zeigt eine Überlagerung aus Streuung an monoatomaren Stufen und Stufen mit der doppelten Stufenhöhe. . . . .	60
4.16	Die G(S)-Kurve der 50 Hz dicken MgO-Schicht zeigt qualitativ den Verlauf, den man bei einer gestuften Oberfläche theoretisch erwartet. Es ergibt sich eine RMS-Rauhigkeit von 0,23. . . . .	61
4.17	Aus der H(S)-Kurve der 75 Hz dicken MgO-Schicht ergibt sich eine mittlere Terrassenlänge von $\Gamma = 217\text{\AA}$ und ein mittlerer Mosaikwinkel von $\vartheta = 0,17^\circ$ . . . . .	62
4.18	Aus der G(S)-Kurve der 75 Hz dicken MgO-Schicht ergibt sich eine Rauhtiefe von $\Delta = 0,28$ . . . . .	63
4.19	Zu Beginn des Wachstums bilden sich auf dem Substrat zweistöckige Magnesiumoxid-Inseln. . . . .	64
4.20	Ab einer bestimmten Schichtdicke bilden sich Mosaik. . . . .	65
4.21	Das Auger-Spektrum zeigt nach dem Aufdampfen von 50 Hz Nickeloxid zusätzlich einen Peak bei 61 eV, der dem Nickel zuzuordnen ist. . . . .	66
4.22	Die H(S)-Kurve zeigt für diese Schicht Oszillationen mit der halben Streuphase als Periode. Daraus lässt sich wieder auf das Vorhandensein von doppelstöckigen Inseln auf dem Substrat schliessen. . . . .	67
4.23	Die G(S)-Kurve lässt sich durch Gauss-Kurven anfitten. In der Abbildung ist die bei $S = 3$ gefittete Kurve wiederkehrend eingezeichnet. . . . .	68
4.24	Aus den Positionen der Satelliten bei 100 Hz NiO ergeben sich die in Tabelle 4.4 aufgeführten Mosaikwinkel. . . . .	69

4.25	Eine Analyse der Halbwertsbreiten zur Bestimmung der Varianz der zugehörigen Mosaikwinkel ist bei dieser Schichtdicke nur für den äußersten Satelliten („Satellit 1“) möglich. . . . .	70
4.26	Aus der G(S)-Kurve lässt sich hier folgern, dass etwa 98% der Oberfläche mit Mosaiken bedeckt sind. . . . .	71
4.27	Auger-Spektrum der 200 Hz dicken NiO-Schicht. . . . .	73
4.28	Profile des (00)-Reflexes der 200 Hz dicken NiO-Schicht für zwei verschiedene Streuphasen. . . . .	73
4.29	Nur für „Satellit 1“ lässt sich bei dieser Schichtdicke ein Ansteigen der Position mit der Streuphase feststellen. Ob „Satellit 2“ ortsfest ist lässt sich auf Grund der geringen Datenmenge nicht sagen. . . .	74
4.30	Auch die Halbwertsbreiten der Satelliten dieser Schichtdicke lassen sich nur für „Satellit 1“ quantitativ auswerten. . . . .	74
4.31	Die G(S)-Kurve wird bei dieser Schichtdicke nur im Bereich $S = 2$ gefittet. . . . .	75
4.32	Die Profile der 350 Hz dicken NiO-Schicht zeigen bei $S = 3$ deutlicher die Satellitenreflexe als bei den vorherigen Schichten. . . .	76
4.33	Die Positionen der Satelliten bei dieser Schichtdicke lassen sich sehr gut linear anfitten. . . . .	77
4.34	Die H(S)-Kurve ergibt für die 350 Hz dicke NiO-Schicht keine auswertbaren Ausgleichsgeraden. . . . .	77
4.35	Um $S = 2$ lässt sich die G(S)-Kurve gut mit einer Gauss-Kurve beschreiben und liefert eine RMS-Rauhigkeit von $\Delta = 0,9$ . . . .	78
4.36	Die Position der beiden innersten Satelliten scheint konstant zu sein. Für den äußersten Satelliten ergibt sich ein Mosaikwinkel von $\vartheta = 3,75^\circ$ . . . . .	79
4.37	Die Halbwertsbreiten der Satelliten lassen sich bei dieser Schichtdicke wieder nur für den äußersten Satelliten sinnvoll fitten. . . .	79
4.38	Um die Streuphase $S = 2$ lässt sich die G(S)-Kurve durch eine Gauss-Kurve fitten und man erhält für die Rauhtiefe $\Delta = 2,09$ . . .	80
5.1	Modell des Wachstums von Magnesiumoxid auf Silber. . . . .	85

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei einigen Leuten bedanken, die sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

An erster Stelle ist hier Herr Prof. Dr. J. Wollschläger zu nennen, der mir durch die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe diese Arbeit überhaupt erst ermöglicht hat.

Prof. Dr. M. Neumann danke ich, dass er sich als Zweitgutachter dieser Arbeit zur Verfügung stellt.

Allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Wollschläger sei gedankt für ein sehr angenehmes Gruppenklima. Besonderer dank gilt hier Bernd Zimmermann für unermüdliche Betreuung. Außerdem danke ich Oliver Höfert, der bei allen Fragen und Problemen rund um die Verdampfer stets Rat wußte.

Ein großer Dank geht auch an die Mannschaft der Feinmechanischen Werkstatt um Uwe Kling und an die Elektronik-Werkstatt um Werner Schniederberend. Ebenso an die Sekretärinnen und alle anderen Mitarbeiter im Fachbereich, ohne die das Studium so nicht möglich wäre.

Des Weiteren bedanke ich mich bei meinen Eltern für die Unterstützung während des gesamten Studiums, und bei meinen Geschwistern für deren Verständnis, speziell in den letzten Wochen. Zu nennen ist vor allem Rafael, der mir die letzten Tage seinen Rechner zur Verfügung gestellt hat.

Ein ganz besonderer Dank geht an meine Freundin Bianca, die immer wieder Motivation und Antrieb ist.



# Erklärung

Ich erkläre hiermit,  
gemäß der Diplomprüfungsordnung,  
die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst  
und ausschließlich die angegebenen  
Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

Osnabrück, 2. Oktober 2007