

LEED-Untersuchungen von Au-induzierten Überstrukturen auf Si(111)

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

von Andreas Alexander Matrikelnummer: 956862 Osnabrück, den 2. Januar 2017 Erstgutachter: Prof. Dr. Joachim Wollschläger Zweitgutachter: Prof. Dr. Herbert Pfnür

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1		
2	Theoretische Grundlagen			
	2.1 Festkörper und Oberfläche	3		
	2.2 Reziproker Raum	5		
	2.3 Beugung an periodischen Strukturen	5		
	2.4 Elektronenbeugung	7		
	2.4.1 Vergleich von Experiment und Berechnung	10		
3	Materialsystem 1:			
	3.1 Silicium	13		
	3.2 Gold	14		
	3.3 $\operatorname{Si}(111)$ -5×2-Au	14		
4	Experimentelle Grundlagen			
	4.1 Ultrahochvakuum (UHV)	17		
	4.2 LEED-Aufbau	17		
	4.3 Probenpräparation	18		
	4.4 Extraktion der IV-LEED-Kurven	19		
5	Messergebnisse und Auswertung 23			
	5.1 Phasendiagramm	23		
	5.2 Vergleich der IV-LEED-Kurven	24		
	5.2.1 Vergleich untereinander	24		
	5.2.2 Vergleich mit CLEED	27		
	5.2.3 Vergleich mit Linearkombination aus den Modellen	32		
6	Zusammenfassung und Ausblick	33		
Li	Literatur			
\mathbf{A}	Anhang	37		

1 Einleitung

Diese Arbeit widmet sich der Gold-induzierten (5x2)-Rekonstruktion auf der Si
(111)-Oberfläche.

Die Si(111)- 5×2 -Au Überstruktur wurde zum ersten mal 1969 von Bishop und Riviere beobachtet [1]. Seitdem ist diese Rekonstruktion von großem wissenschaftlichem Interesse, weil sie als Prototyp für lineare metallische Ketten, so genannte Nanodrähte, dient.

Nanodrähte sind in vielerlei Hinsicht interessant. Sie könnten zum Beispiel die kleinstmögliche Einheit für elektronische Bauteile darstellen. Somit könnte man in Zukunft aus ihnen Bauteile für Anwendungen wie z.B. *atomic scale memory, plasmonic waveguides* oder auch *plasmonic resonators* in der Nanophotonik realisieren [2],[3]. Dementsprechend wird unter anderem die Erforschung der Leitfähigkeit dieser Strukturen von diesen Anwendungen motiviert.

Das Verständnis der physikalischen Eigenschaften setzt allerdings die Kenntnis der atomaren Struktur voraus, welche trotz der langen Forschungshistorie nicht eindeutig bestimmt ist. Es existieren drei gängige Modelle (EBH [4], AN [5], KK [6]) mit zum Teil unterschiedlichen Gold-Bedeckungen.

Aufgrund der hohen Oberflächensensitivität von niederenergetischen Elektronen werden im Rahmen dieser Arbeit quantitative Low Energy Electron Diffraction (LEED) Messungen als Funktion der Goldbedeckung durchgeführt. Durch den Vergleich zu den o.g. Modellen sollen einerseits weitere Erkenntnisse zu dem atomaren Aufbau der Si(111)-(5×2)-Au Rekonstruktion gewonnen und andererseits eine mögliche Bedeckungsabhängigkeit dieses überprüft werden.

In Kapitel 2 werden die nötigen theoretischen Grundlagen erläutert. Kapitel 3 und 4 beschäftigen sich mit den verwendeten experimentellen Methoden und Materialien. Die Messergebnisse und Auswertung werden in Kapitel 5 vorgestellt, worauf hin sie in Kapitel 6 zusammengefasst werden.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Festkörper und Oberfläche

Als Kristall wird ein Festkörper bezeichnet der eine Periodizität in alle drei Raumrichtungen aufweist. Er kann daher aus gleichen Einheitszellen aufgebaut werden. Man spricht von einer primitiven Einheitszelle, wenn ihr Volumen minimal ist. Das Gitter lässt sich durch die Translationsvektoren \vec{a}, \vec{b} und \vec{c} mathematisch beschreiben.

$$\vec{r} = n\vec{a} + m\vec{b} + o\vec{c} \qquad \qquad \text{mit}\,n, m, o \in \mathbb{Z} \tag{2.1}$$

Eine Oberfläche stellt eine Begrenzung dar, durch die die Periodizität in einer Raumrichtung gebrochen ist. Weil der Kristall dadurch ungesättigte Bindungen an der Oberfläche besitzt, kann dies zu einer Rekonstruktion der Oberfläche führen. Die Oberflächenstruktur kann daher eine andere sein als die Struktur einer äquivalenten Fläche im inneren des Festkörpers.

Im Vergleich zum Festkörper, für dessen Beschreibung aller möglichen Strukturen 14 BRA-VAIS-Gitter erforderlich sind, benötigt man bei einer Oberfläche nur 5 2D-BRAVAIS-Gitter, die in Abbildung 2.1 dargestellt werden.

In einem Kristall können verschiedene Ebenen auftreten. Die Orientierung einer Ebene



Abbildung 2.1: Die 5 BRAVAIS-Gitter, die zur Beschreibung zweidimensionaler Strukturen dienen. (1) schiefwinklig $[|\vec{a}| \neq |\vec{b}|, \gamma \neq 90^{\circ}]$, (2) quadratisch $[|\vec{a}| = |\vec{b}|, \gamma = 90^{\circ}]$, (3) rechtwinklig $[|\vec{a}| \neq |\vec{b}|, \gamma = 90^{\circ}]$, (4) hexagonal $[|\vec{a}| = |\vec{b}|, \gamma = 120^{\circ}]$, (5) rechtwinklig zentriert $[|\vec{a}| \neq |\vec{b}|, \gamma = 90^{\circ}]$. (5) ist kein primitives Gitter, wird aber öfter verwendet, weil es einfacher zu beschreiben ist.

wird durch die *Millerschen Indizes hkl* beschrieben. Zuerst werden die Schnittpunkte der Ebene mit den Achsen ermittelt und deren Kehrwert wird gebildet. Anschließend wird



Abbildung 2.2: Millersche Indizes für einige Ebenen im kubischen Kristallgitter.

von diesem Vektor ein Vielfaches gebildet, sodass alle Einträge ganze Zahlen sind. Dies ergibt die Millerschen Indizes hkl. Falls mit einer Achse kein Schnittpunkt vorliegt, dieser also im Unendlichen liegt, so ist der entsprechende Index 0 und wenn er negativ ist, wird dies durch einen Strich über dem Index deutlich gemacht: $(\bar{h}kl)$.

Beispielsweise besitzt eine Ebene die Schnittpunkte mit den Achsen $\{1, 1, \infty\}$, dann sind die Kehrwerte $\{1, 1, 0\}$. Daraus ergeben sich die Millerschen Indizes (110) (siehe Abb. 2.2).

Um eine Überstruktur zu beschreiben existieren zwei gängige Notationen. Dabei werden bei beiden Notationen die Translationsvektoren der Überstruktur $\vec{a'}$ und $\vec{b'}$ mit den Translationsvektoren der nicht-rekonstruierten Struktur darunter \vec{a} und \vec{b} in Verbindung gebracht.

Bei der Matrix-Notation bilden die Beziehungen zwischen den Translationsvektoren des Substrats und die der Überstruktur Matrixelemente.

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

Daraus ergibt sich die Matrix G, mit der die Überstruktur beschrieben werden kann.

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

In dieser Arbeit wird jedoch ausschließlich die WOOD-Notation verwendet. Hierbei wird das Längenverhältnis zwischen den Translationsvektoren der Überstruktur und des Substrates betrachtet.

$$|\vec{a'}| = m|\vec{a}|, \qquad |\vec{b'}| = n|\vec{b}|$$
(2.4)

Die Überstruktur wird nach der WOOD-Notation folgendermaßen angegeben

$$X(hkl)c(m \times n) - R\varphi - Ad \tag{2.5}$$

Dabei ist X das Substrat mit den Millerschen Indizes hkl. Der Winkel φ beschreibt die Drehung zwischen den Translationsvektoren der Überstruktur und des Substrates. Wenn der Rotationswinkel $\varphi = 0$ entspricht, wird er weggelassen. Wenn die Überstruktur durch ein Adsorbat induziert wurde, wird dessen chemisches Symbol am Ende angegeben, gegebenenfalls auch mit der Anzahl der Adsorbatatome in der Einheitszelle. Eine Zentrierung

wird durch c angegeben (z.B. Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3} - R30^{\circ} - 3Bi$).

Die WOOD-Notation kann jedoch nur verwendet werden, wenn der Winkel zwischen den Translationsvektoren der Überstruktur der selbe ist wie der zwischen den Translationsvektoren des Substrates. Andernfalls muss die Matrix-Notation verwendet werden.

2.2 Reziproker Raum

Das Konzept des Reziproken Raumes ist sehr nützlich bei der Interpretation von Beugungsexperimenten wie z.B. dem in dieser Arbeit verwendeten LEED. Jedem Punktgitter im Realraum kann ein reziprokes Gitter eindeutig zugeordnet werden. Dieses wird mithilfe des reziproken Gittervektors beschrieben.

$$\vec{G}_{hk} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \qquad \text{mit}\,h, k, l \in \mathbb{Z}$$

$$(2.6)$$

Analog zu Gleichung 2.1 sind \vec{a}^* , \vec{b}^* und \vec{c}^* die Translationsvektoren der primitiven Einheitszelle. Diese werden aus den Translationsvektoren des Realraumgitters

$$\vec{a}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \qquad \vec{b}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \qquad \vec{c}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \qquad (2.7)$$

gebildet. Da \vec{c}^* bei einem zweidimensionalen Gitter wegfällt, gilt

$$\vec{G}_{hk} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* \qquad \text{mit}\,h,k\in\mathbb{Z} \tag{2.8}$$

und

$$\vec{a}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{b} \times \vec{n}}{|\vec{a} \times \vec{b}|} , \qquad \qquad \vec{b}^* = 2\pi \cdot \frac{\vec{n} \times \vec{a}}{|\vec{a} \times \vec{b}|} .$$

$$(2.9)$$

Dabei ist \vec{n} ein Einheitsvektor senkrecht zu Oberfläche.

Daraus ergibt sich, dass die reziproken Vektoren \vec{a}^* und \vec{b}^* in der selben Ebene liegen wie die Realraumvektoren \vec{a} und \vec{b} . Außerdem steht \vec{a}^* senkrecht zu \vec{b} und \vec{b}^* senkrecht zu \vec{a} . Die Realraumvektoren besitzen die Dimension [Länge], die reziproken Translationsvektoren die Dimension [1/Länge].

Im Vergleich zum reziproken Raum eines 3D-Festkörpers, der aus Punkten besteht, besteht der reziproke Raum einer 2D-Oberfläche aus Stangen, da keine Periodizität in Richtung senkrecht zur Oberfläche im Realraum vorhanden ist und die Punkte im reziproken Raum somit unendlich nah zusammenrücken (siehe Abb. 2.3).

2.3 Beugung an periodischen Strukturen

Um Kristallstrukturen zu charakterisieren, können verschiedene Untersuchungsmethoden genutzt werden, unter anderem beugende Methoden. Bei diesen werden zumeist Elektronen oder Röntgenstrahlen verwendet. Aufgrund des Welle-Teilchen-Dualismus lässt sich auch den Elektronen eine (De-Broglie-)Wellenlänge $\lambda_{DB} = h/\sqrt{2m_e E_{kin}}$ zuordnen. Treffen die ebenen Wellen auf die Punkte eines Kristallgitters, deren Abstand durch den Vektor



Abbildung 2.3: Skizze des scharfen Punktgitters eines dreidimensionalen Festkörpers (a) und des Stangengitters einer Oberfläche (b) im reziproken Raum. Entnommen aus [7] und angepasst.



Abbildung 2.4: Herleitung der Beugungsbedingung von zwei benachbarten Atomen. Die relative Lage zueinander wird durch \vec{R} beschrieben, $\vec{k_0}$ und \vec{k} sind dabei die Wellenvektoren des einfallenden bzw. gebeugten Strahls. Entnommen aus [8] und angepasst.

 ${\cal R}$ beschrieben wird, werden sie elastisch gestreut und
es entstehen Interferenzen durch den Gangunterschied. Für konstruktive Interferenz
 gilt

$$\vec{R} \cdot \left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} - \frac{\vec{k_0}}{|\vec{k_0}|}\right) = m\lambda \qquad \text{mit}\, m \in \mathbb{Z} \ . \tag{2.10}$$

Dabei ist $\vec{k_0}$ der einfallende und \vec{k} der gestreute Wellenvektor.

Nimmt man nun einen beliebigen reziproken Gittervektor $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$, so kann Gleichung 2.10 in die Beugungsbedingung für einen dreidimensionalen Kristall umgeformt werden.

$$\left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} - \frac{\vec{k_0}}{|\vec{k_0}|}\right) = \frac{\lambda}{2\pi}\vec{G}$$
(2.11)



Abbildung 2.5: Ewald-Konstruktion für den dreidimensionalen Fall (links) und modifizierte Ewald-Konstruktion für Beugung an einem zweidimensionalen Oberflächengitter (rechts). Aufstellung der Ewald Konstruktion: 1) Konstruktion des reziproken Kristallgitters 2) Einzeichnen des einfallenden Wellenvektors $\vec{k_0}$, dabei sei der Ursprung so gewählt, dass der Wellenvektor einen reziproken Gitterpunkt trifft 3) Um den Ursprung wird eine Kugel mit dem Radius $k = 2\pi/\lambda$ gezeichnet 4) Zu allen Punkten, die auf der Kugeloberfläche liegen, bzw. Schnittpunkten der Stangen mit der Ewaldkugel werden die Streuvektoren \vec{k} gezeichnet (hier nur einer). Aus der Differenz beider Streuvektoren ergibt sich der reziproke Gittervektor \vec{G} . Die Gleichung 2.12 und die Energieerhaltung wird mit dieser Konstruktion erfüllt. Für den zweidimensionalen Fall sind nur noch die Komponenten der Wellenvektoren parallel zur Oberfläche relevant $(\vec{k} - \vec{k}_0^{\parallel} = G_{hk})$, da die Beugungsbedingung entlang der senkrechten Komponente für beliebige \vec{k} erfüllt ist.

Da für die Beträge von Wellenvektoren aufgrund der Energieerhaltung bei elastischer Streuung $|\vec{k}| = |\vec{k_0}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ gilt, ergibt dies die Laue-Bedingung

$$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k_0}$$
 (2.12)

Die Beugung kann mithilfe der *Ewald Konstruktion* graphisch verdeutlicht werden (siehe Abb. 2.5).

2.4 Elektronenbeugung

In dieser Arbeit wird Low Energy Electron Diffraction (LEED) verwendet. Hierbei werden Elektronen im Energiebereich 20-1000 eV an den Oberflächenatomen gebeugt. Die De-Broglie-Wellenlänge λ_{DB} beträgt hierbei etwa 0.4 Å bis 2.7 Å, was sich in der Größenordnung von atomaren Abständen in einem Festkörper befindet. Außerdem ist die mittlere freie Weglänge der Elektronen λ_{mfp} , aufgrund ihrer niedrigen Energie, gering und befindet sich in der Größenordnung weniger atomarer Schichten (siehe Abb. 2.6). Dementsprechend findet ein Großteil der Streuung in den obersten atomaren Schichten statt, wodurch diese



Abbildung 2.6: Mittlere freie Weglänge für Elektronen in einem Festkörper abhängig von ihrer kinetischen Energie. Im Energiebereich, der für LEED verwendet wird, (20-1000 eV) befindet sich λ_{mfp} im Bereich 0.3 nm bis 1.1 nm. Entnommen aus [9]

Methode sehr oberflächensensitiv ist. Das LEED liefert somit primär Informationen über die Oberflächenstruktur der Probe.

Bestünde die Probe nur aus einer gleichmäßig angeordneten Atomschicht, wäre die Intensität des gebeugten Elektronenstrahls bzw. der Stangen konstant in L-Richtung und unabhängig von der Energie des einfallenden Strahls. Da die Probe aber ein dreidimensionaler Festkörper ist und der einfallende Elektronenstrahl je nach Energie einige atomare Schichten tief in die Probe eindringt, bekommt man auch Informationen von tiefer liegenden Atomschichten. Die Elektronen können zudem nicht nur einmal sondern mehrfach gestreut werden, sowohl innerhalb einer Atomschicht als auch zwischen verschiedenen Schichten. Aufgrund von Interferenzen, die anschließend zwischen den verschiedenen Schichten entstehen, kommt es zu einer Änderung der Intensität des gebeugten Elektronenstrahls abhängig von der Energie des einfallenden Strahles (siehe Abb. 2.7).

Die Streuprozesse (inklusive Mehrfachstreuung) und Interferenz in einem Festkörper werden durch die dynamische Beugungstheorie beschrieben. Dabei betrachtet man zuerst die Streuung an nur einem Atom, anschließend wird aus den einzelnen Atomen eine Schicht gebildet und die Mehrfachstreuung zwischen den Atomen wird betrachtet. Im letzten Schritt werden die einzelnen Atomschichten zu einem Kristall gestapelt und die Streuung zwischen den Atomschichten wird berechnet (siehe Abb. 2.8). Das Kristallpotential wird durch das Muffin-Tin-Modell angenähert. Dieses besteht aus Kugeln, die sich nicht überschneiden und an den Atomen zentriert sind. Innerhalb der Kugeln befindet sich ein radialsymmetrisches Potential. Außerhalb der Kugeln wird es als konstant angenommen und durch den Realteil des inneren Potentials V_{0r} beschrieben (siehe Abb. 2.9). Aufgrund der Radialsymmetrie kann eine Partialwellenanalyse durchgeführt werden, sodass die einlaufenden und die gestreuten Wellen nach den Eigenzuständen des Drehimpulses entwickelt werden, die in der Ortsdarstellung den Kugelflächenfunktionen entsprechen. Somit



Abbildung 2.7: Aufgrund der Interferenz von Atomen aus verschiedenen atomaren Lagen, variiert die Intensität der Stangen als Funktion der Energie. Dadurch sind verschiedene Reflexe unterschiedlich stark ausgeprägt. Zudem ist die Intensität eines einzelnen Reflexes abhängig von der Energie.

kann die Streuung an einem Atom durch einen Satz von Phasensprüngen δ_l beschrieben werden, die von Teilchenart, dem Drehimpuls und der Elektronenenergie abhängen. Die Entwicklung wird nur bis zu einem Maximalwert l_{max} betrieben, da die Phasensprünge für größere Werte vernachlässigbar sind. Dieser Maximalwert kann abgeschätzt werden durch

$$l_{max} \approx \left| \vec{k_i} \right| \cdot r_{Atom} \;. \tag{2.13}$$

Dabei ist $|\vec{k_i}|$ der Betrag des einfallenden Wellenvektors und r_{Atom} der Atomradius. Die inelastische Streuung der Elektronen durch z.B. Plasmonanregung wird durch den imaginären Teil des inneren Potentials V_{0i} berücksichtigt. Dieser ist leicht energieabhängig ($V_{0i} \propto E^{1/3}$). Durch diesen Term ist das innere Potential V_0 komplex und somit hat der Wellenvektor eine komplexe Komponente. Dies folgt zu einer Dämpfung der Wellen. Die thermische Schwingung der Kristallatome kann durch einen Debye-Waller-Faktor beschrieben werden, der den atomaren Streufaktor für eine endliche Temperatur verringert. Für die Streuung innerhalb einer Atomschicht werden ebenso die nach den Kugelflächenfunktionen entwickelten Radialwellen verwendet. Die Elektronen können, nachdem sie am Ursprungsatom gestreut wurden, an weiteren Atomen gestreut werden. Hierbei kann es auch dazu kommen das die Elektronen weitere Male am Ursprungsatom gestreut werden. Daher bedarf es einer selbstkonsistenten Lösung des Problems, welche durch die Aufstellung einer Streumatrix gegeben ist. Die Inversion dieser Matrix vermittelt den Zusammenhang zwischen den einlaufenden und den gestreuten Wellen.

Anschließend werden die Matrizen von verschiedenen Schichten miteinander kombiniert und invertiert, um Mehrfachstreuung zwischen den Schichten zu berücksichtigen.



Abbildung 2.8: Hierarchie der Berechnung der LEED-Intensität im Rahmen der dynamischen Beugungstheorie. a) Streuung an einem Atom, beschrieben durch die Phasensprünge δ_l . b) Streuung innerhalb einer Atomschicht, Berechnung der Streumatrix $M_{gg'}^{\pm\pm}$. c) Streuung zwischen den Schichten, Berechnung der Gesamtstreumatrix R. Entnommen aus [10].



Abbildung 2.9: Muffin-Tin-Näherung. Entnommen aus [11] und [12]

2.4.1 Vergleich von Experiment und Berechnung

Um anhand von LEED-Aufnahmen auf die Atomstruktur schließen zu können, nimmt man die Intensitätskurven in einem bestimmten Energieintervall mit gleichen Energieschritten auf und erhält sogenannte *IV-Kurven*. Durch die Berechnung der Elektronenbeugung in Rahmen der *dynamischen Beugungstheorie* von möglichen Strukturmodellen, lassen sich die experimentell erhaltenen IV-Kurven mit diesen Modellen vergleichen. Aus den Übereinstimmungen von den beiden Kurven lässt sich somit auf die tatsächliche Struktur schließen.

Das Maß für die Übereinstimmung von zwei Kurven wird durch den sogenannten *reliability*oder auch R-Faktor ausgedrückt. In dieser Arbeit wird der Pendry R-Faktor verwendet, der die IV-Kurven in Form ihrer logarithmischen Ableitung behandelt.

$$L(E) = \frac{\left(\frac{dI}{dE}\right)}{I} \tag{2.14}$$

Daraus ergibt sich der Pendry-R-Faktor

$$R = \sum_{g} \int (Y_{\text{gth}} - Y_{\text{gexp}})^2 dE / \sum_{g} \int (Y_{\text{gth}}^2 - Y_{\text{gexp}}^2) dE.$$
(2.15)

Dabei ist $Y = L/(1 + L^2 \cdot V_{oi}^2)$ und V_{oi} ist der imaginäre Teil des inneren Potentials des Muffin-Tin-Potentials des Festkörpers. Der Pendry-R-Faktor hat den Vorteil, dass er nicht die absoluten Intensitäten, sondern die relativen sowie Eigenschaften wie Minima, Maxima, Sattelpunkte, etc. berücksichtigt, da die Berechnung der Intensität gute Übereinstimmung von Peak-Positionen liefert, aber die absolute Intensität keine gute Übereinstimmung liefert. Außerdem verzichtet er im Vergleich zu anderen R-Faktoren auf zweifache Ableitungen, was bei verrauschten IV-Kurven von Vorteil ist. Er ist 0, wenn die Kurven übereinstimmen, und 1 bei komplett verschiedenen Kurven. Dabei gilt $R \leq 0.2$ als eine gute, $R \approx 0.35$ als mittelmäßige und $R \geq 0.5$ als schlechte Übereinstimmung.

3 Materialsystem

3.1 Silicium

Silicium ist ein Element aus der 4. Hauptgruppe und hat die Ordnungszahl 14. Es ist ein Halbmetall und somit ein Heißleiter, d.h. die Leitfähigkeit nimmt bei steigender Temperatur zu. Seine Schmelztemperatur liegt bei 1407 °C und die Elektronenkonfiguration lautet [Ne] $3s^23p^2$ [13].

Das 2s-Orbital hybridisiert mit den drei 2p-Orbitalen und es entstehen vier sp³-Hybridorbitale, die tetraedrisch angeordnet sind. Dies führt dazu, dass Silicium in einer Diamantstruktur vorliegt, d.h. zwei fcc-Gitter, die um 1/4 in der Raumdiagonale gegeneinander verschoben sind (siehe Abb. 3.1). Die Basis ist (0,0,0) und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ und die kubische Gitterkonstante entspricht 5.43 Å.

Die in dieser Arbeit verwendete Si(111) Oberfläche entspricht einem Schnitt in Rich-



Abbildung 3.1: Kubische Silicium-Einheitszelle mit der Seitenlänge *a* und einer Diamantstruktur. Die blauen Kugeln stellen das fcc-Gitter dar und die roten Kugeln die um $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ verschobenen Basisatome des anderen Gitters. Die graue Fläche entspricht der Si(111) Oberfläche.

tung der Raumdiagonalen (siehe Abb. 3.1). Dies führt zu einer hexagonalen Einheitszelle mit einer Seitenlänge von $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ·5.43 Å=3.84 Å. Da jedes Oberflächenatom eine ungesättigte Bindung besitzt, ist dieser Zustand energetisch ungünstig und es kommt zu einer Rekonstruktion der Oberfläche (siehe Abb. 3.2). Hierbei bilden sich im wesentlichen die (2×1) und die (7×7) Rekonstruktionen. Die (2×1)-Struktur erhält man nur, wenn man das Substrat bricht. Außerdem ist sie metastabil und geht ab einer Temperatur von 400 °C irreversibel in die (7×7) über. Demnach ist sie für diese Arbeit nicht von Bedeutung. Die (7×7) wird durch das *dimer-adatom-stacking fault (DAS) model* beschrieben. Dieses Model enthält 12 Adatome, zwei dreieckige Untereinheiten, von denen eine einen Stapelfehler



Abbildung 3.2: a) Nichtrekonstruierte Si(111) Oberfläche mit hexagonaler Einheitszelle. b) Rekonstruierte Si(111)- 7×7 Überstruktur nach dem *DAS*-Modell. Entnommen aus [15].

besitzt, 6 Restatome, 9 Dimere, die die beiden dreieckigen Untereinheiten trennen, und ein sogenanntes *corner hole* pro Einheitszelle der Oberfläche [14](siehe Abb. 3.2).

3.2 Gold

Gold ist ein Element aus der 1. Nebengruppe und besitzt die Ordnungszahl 79. Der Schmelzpunkt liegt bei 1064.58 °C und der Siedepunkt bei 2855.85 °C [16]. Gold kommt mit den Oxidationszahlen +I und +III vor, wobei +III häufiger ist. Die Elektronenkonfiguration lautet [Xe] $4f^{14}5d^{10}6s$. Es existiert nur ein stabiles Isotop ¹⁹⁷Au, somit ist es eines von 22 Reinelementen. Gold ist ein sehr edles und reaktionsträges Metall, weshalb es sehr korrosionsbeständig ist. Außerdem ist es ein sehr guter elektrischer Leiter.

$3.3 Si(111)-5 \times 2-Au$

Seit ihrer Entdeckung durch Bishop und Rivier [1], ist die Si(111)-5×2-Au Überstruktur von großem wissenschaftlichem Interesse, weil sie als Prototyp für lineare metallische Ketten, so genannten Nanodrähten, dient. Da aus Nanodrähten die kleinstmöglichen elektronischen Bauteile realisiert werden könnten, ist deren Erforschung von großer Bedeutung. Gold eignet sich in dieser Weise auch besonders gut, weil die Si(111)-5×2-Au Überstruktur auch bei tiefen Temperaturen bis 20 K immer noch metallisch bleibt, im Vergleich anderen Metallen, die ähnliche Nanodrahtstrukturen bilden, aber bei tiefen Temperaturen eine Metall-zu-Isolator-Transformation durchführen [17],[18].

Jedoch existiert bisher kein einheitliches Modell für die atomare und die elektronische Struktur dieser Rekonstruktion, trotz vieler experimenteller und theoretischer Untersuchungen. Des Weiteren ist die Goldbedeckung nur in einem Bereich zwischen 0.6 und 0.7 ML eingegrenzt. Es wurde 2003 ein Modell von Erwin mit einer Goldbedeckung von



Abbildung 3.3: Schematischer Vergleich aller drei relevanten Modelle für die Si(111)-5x2-Au Überstruktur. Die roten Kugeln stellen die Goldatome dar, die weißen Kugeln die Siliciumatome. a) EBH-Modell von 2009 mit der Gold-Einfach- und Doppelkette und der Wabenstrukturkette. b) AN-Modell mit den eingezeichneten Y-Einheiten. c) KK-Modell, die zusätzlichen Si-Adatome pro Einheitszelle sind umrandet.

0.4 Monolagen (ML) vorgeschlagen, aber experimentelle Ergebnisse führten 2009 zu einer Goldbedeckung von 0.6 ML wodurch es zu einer Abänderung dieses Modells kam (EBH-Modell) [4], [19]. Goldatome ersetzen die Siliciumatome in der obersten Schicht und formen somit eine Au-Si-Einfach- und eine Au-Si-Doppelkette in [110] Richtung. Daneben befindet sich eine Wabenstruktur-Kette aus Silicium. Als Gegenstück dazu existiert seit 2013 das (AN-Modell) von Abukawa und Nishigaya. Die Goldbedeckung ist zwar gleich, aber die Goldatome bilden eine Kette in [110] Richtung aus sogenannten Y-Einheiten mit einer \times 2-Periodizität [5]. Des Weiteren wurde ein neues Modell von Kwon und Kang vorgeschlagen (KK-Modell) mit sieben Goldatomen in einer Einheitszelle (0.7 ML) [6]. Surface X-Ray Diffraction (SXRD) Experimente bevorzugen das KK-Modell gegenüber dem EBH-Modell und schließen das AN-Modell quasi aus [20].

Die Modelle unterscheiden sich im Wesentlichen dadurch, dass das EBH-Modell eine Gold-Einfach- und eine Doppelkette besitzt. Das KK-Modell weist noch ein weiteres Goldatom in der Einheitszelle auf und bei dem AN-Modell bilden die Goldatome Y-Einheiten. Ein schematischer Vergleich aller drei Modelle ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

4 Experimentelle Grundlagen

4.1 Ultrahochvakuum (UHV)

Da die LEED-Untersuchung sehr oberflächensensitiv ist (siehe Kapitel 2.4), wird eine Oberfläche benötigt, die frei von Adsorbaten ist und auch möglichst lange kontaminationsfrei bleibt.

Die Monolagenzeit τ , also die Zeit, in der im Mittel ein Oberflächenatom durch ein Gasatom getroffen wird, ergibt sich unter Einbezug der kinetischen Gastheorie zu

$$\tau = \frac{n_0}{j} = \frac{n_0 \sqrt{2\pi m k_B T}}{p} .$$
(4.1)

Dabei ist n_0 die Dichte der Oberflächenatome, j die Teilchenstromdichte, m die Gasteilchenmasse, T die Temperatur, k_B die Boltzmannkonstante und p der Druck.

Die LEED-Messungen erfordern, dass die Oberfläche einige Stunden frei von Adsorbaten bleibt. Für eine N₂-Atmosphäre, Raumtemperatur und eine quadratische Oberflächeneinheitszelle, benötigt man für eine Monolagenzeit von etwa 2 h einen Druck im Bereich von 10^{-10} mbar. Somit ist das Ultrahochvakuum unerlässlich.

Um den nötigen Druck von 10^{-10} mbar zu erreichen, wird ein dreistufiges Pumpsystem verwendet. Zuerst erzeugt eine Drehschieberpumpe einen Vordruck von 10^{-2} mbar. Anschließend pumpt eine Turbomolekularpumpe, die direkt mit der Hauptkammer und Schleuse verbunden ist, den Druck auf 10^{-8} mbar. Der gewünschte Enddruck in der Hauptkammer wird schließlich mit einer Ionengetter- und einer Titansublimationspumpe erreicht. Der schematische Aufbau der verwendeten Kammer wird in Abbildung 4.1 dargestellt.

4.2 LEED-Aufbau

Das LEED besteht aus drei wesentlichen Elementen (siehe Abb. 4.2)

- einer *Elektronenkanone*, die als Quelle für die niederenergetischen Elektronen dient,
- einem Probenhalter, in dem sich das zu untersuchende Substrat befindet, und
- einem *Fluoreszenzschirm* mit mehreren *Gittern*, auf dem das Beugungsmuster beobachtet werden kann.

Die Elektronenkanone besteht aus einem Filament (Kathode) mit einem Wehneltzylinder und elektrostatischen Linsen für die Bündelung und Fokussierung des Elektronenstrahls. An der Kathode liegt negative Spannung an, während die letzte Linse, das erste Gitter und die Probe geerdet sind, wodurch die Elektronen dorthin beschleunigt werden. Das zweite und dritte Gitter sind dazu da, die inelastisch gestreuten Elektronen aufzufangen, die nur zum Untergrundrauschen beitragen. Das vierte Gitter liegt auf Erdpotential und schirmt die anderen Gitter vom elektrischen Potentialfeld des Fluoreszenzschirms ab. An diesem liegt $+5 \,\text{kV}$ Hochspannung an, um die elastisch gestreuten Elektronen stark zu beschleunigen, damit Fluoreszenz auf dem Schirm sichtbar wird und man das Beugungsmuster beobachten kann.



Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau der verwendeten UHV-Kammer und des Tiegelverdampfers. a) Die Kammern sind durch Ventile voneinander separiert. Mithilfe eines Systems aus Transferstäben lässt sich die Probe zwischen der Schleuse, Präparationskammer I (Aufdampfen), Hauptkammer (LEED) und Präparationskammer II (Heizen/Flashen) bewegen. Entnommen aus [21] und angepasst. b) Die vom Filament emittierten Elektronen werden zum Tiegel, der auf positivem Potential liegt, beschleunigt und erhitzen das Gold im Tiegel. Der Shutter kann den Golddampfstrahl unterbrechen und die Quarzkristall-Mikrowaage (QCM) dient zur Bestimmung der Aufdampfmenge.

Mithilfe des Computerprogramms *Safire*, das mit dem LEED-Steuergerät gekoppelt ist, kann die Elektronenenergie durchfahren werden. Mit einer Kamera wird ein Bild pro Energieschritt vom Fluoreszenzschirm des LEED aufgenommen. Diese Bilder werden anschließend benötigt um die IV-Kurven zu erstellen.

4.3 Probenpräparation

18

Der Probenhalter ist so aufgebaut, dass die etwa $12 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ große Silicium-Probe mit Direktstrom geheizt werden kann. Nachdem die Si-Probe eingeschleust wurde, wird sie bei etwa 600 °C eine Nacht lang ausgegast, um Adsorbate zu entfernen. Da sich auf dem Substrat eine native SiO₂-Schicht befindet, wird bei der Probe anschließend das Verfahren des *flash annealing* angewendet. Dabei wird die Probe sehr schnell auf etwa 1200 °C gebracht. Nach etwa 10 s Heizen wird der Strom verringert, damit die Probe abkühlen kann. Dies wird insgesamt fünf mal durchgeführt. Hierbei muss darauf geachtet werden, dass der Druck 10^{-9} mbar nicht überschreitet. Anschließend wird im LEED überprüft ob eine 7×7 -Überstruktur des Siliciums vorliegt, da ihr Vorhandensein der Maßstab für eine saubere Oberfläche ist.

Das Gold wird mithilfe eines Verdampfers auf die Probe gebracht, der schematische Aufbau ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Dabei treten Elektronen durch den Glühelektrischen Effekt aus dem Filament aus. Daraufhin werden sie zum Tiegel, in dem sich das Gold befindet, beschleunigt, da dieser auf positiver Hochspannung liegt. Beim Auftreffen auf den Tiegel geben die Elektronen ihre kinetische Energie in Form von Wärme ab, die das Gold zum Schmelzen bringt. Die Menge des verdampften Goldes wird mit einem wassergekühlten Schwingquarz gemessen. Die Frequenzänderung Δf ist eine Funktion der



Abbildung 4.2: Schematischer Aufbau des LEED. Entnommen aus [14].

Massenänderung Δm , die durch das verdampfte Gold zustande kommt. Ist f_0 die Eigenfrequenz des Schwingquarzes, μ_q sein Schermodul, ρ_q seine Dichte und A ist die Fläche des Quarzes, auf dem das Gold adsorbiert, gilt für kleine relative Frequenzänderungen $\frac{\Delta f}{f_0}$

$$|\Delta f| = \frac{2 \cdot f_0^2}{A \cdot \sqrt{\rho_q \cdot \mu_q}} \cdot \Delta m .$$
(4.2)

Mithilfe des Shutters lässt sich der Dampfstrahl des Goldes unterbrechen, sodass die Probe nicht bedampft wird.

4.4 Extraktion der IV-LEED-Kurven

Aus Safire lassen sich die Einzelbilder von einer Aufnahme exportieren. Diese können in ein MATLAB-Script geladen werden, das eigens für diese Auswertung geschrieben wurde. Zunächst wird eine Maske erstellt, die den Bereich eingrenzt, der ausgewertet werden soll. Dies bedeutet, dass nur der Fluoreszenzschirm betrachtet wird und Bereiche, in denen sich "tote Flecken" befinden oder die von der Elektronenkanone verdeckt werden, herausgeschnitten werden. Anschließend muss das LEED-Bild anhand einer Aufnahme entzerrt werden. Dabei werden in dem Bild die Pixelkoordinaten der Reflexe mit den berechneten Positionen verglichen. Die Positionen erhält man dadurch, dass die Abmessungen der Einheitszelle $(\vec{a'}, \vec{b'}, \measuredangle)$ bekannt sind und daraus die reziproken Gittervektoren berechnet werden. Diese wird anschließend in Pixelkoordinaten umgewandelt. Anhand dieser Daten lässt sich eine Verzerrungsmatrix erstellen, mit der man für die anschließende Untersuchung die Verzerrung des Bildes entfernen kann (siehe Abb. 4.3).

Beim eigentlichen Script zur Auswertung der LEED-Aufnahmen werden in jedem Bild die Positionen der Peaks gesucht. Anfangs werden die Koordinaten für mindestens 3 Peaks



Abbildung 4.3: Entzerrung der LEED-Bilder anhand einer Aufnahme der Si(111)-7×7. a) Die Maske grenzt den auszuwertenden Bereich ein. b) Radiale Verzerrung wird entfernt. c) Der Restunterschied zwischen theoretischer (weiß) und realer Position der Peaks (schwarz) wird entfernt. d) Entzerrtes Bild mit Maske. Nicht alle sichtbaren Spots auf dem Schirm sind als Peak eingezeichnet, da sie zum Beispiel entweder außerhalb der Maske liegen oder bestimmt Kriterien für einen Peak nicht erfüllen.

für ein bestimmtes Bild übergeben. Anhand dessen wird das Koordinatensystem zur Berechnung der Peakpositionen orientiert. Daraufhin wird an den berechneten Positionen je ein Kreis für den Peak und den Untergrund gelegt und eine Gaußfunktion an den größeren Kreis angefittet. Falls der "echte" Peak innerhalb des Untergrundkreises liegt, seine Halbwertsbreite in beide Richtungen kleiner ist als der Radius des Peak-Kreises und die Intensität um mindestens 20% höher als der Untergrund ist, wird die Position des Peaks angepasst. Andernfalls wird seine berechnete Position angenommen. Die Intensität des Peaks errechnet sich, indem der Untergrund von der Gesamtintensität abgezogen wird (siehe Abb. 4.4 links).

Anschließend muss jedes Bild manuell überprüft werden, ob Peaks falsch gesetzt wurden, fehlerhaft sind ("tote Flecken") oder übersteuern. Solche Peaks besitzen unbrauchbare Informationen und müssen entweder per Hand an die richtige Stelle verschoben oder gelöscht



Abbildung 4.4: Links: Peak wird angefittet. Er besteht aus dem Peak selber (weißer Innenkreis) und dem Untergrund (roter Außenkreis). Rechts: LEED-Bild nach Durchlauf des Peak-Suchalgorithmus. Es gibt verschiedene Arten von Peaks: gefundener (roter Rand), nicht gefundener, d.h. theoretische Position, (schwarzer Rand), übersteuerter Peak (gelber Rand) und fehlerhafter Peak (roter Innenkreis), z.B. Intensität kleiner 0. In diesem Fall wird nur eine Rotationsdomäne ausgewertet.

werden (siehe Abb. 4.4 rechts). Sind alle Peaks richtig gesetzt, werden die Intensitätskurven erstellt, indem der Intensitätsverlauf eines Peaks gegen die Energie aufgetragen wird. Alle Kurven werden noch einmal manuell überprüft, ob beispielsweise Intensitäten kleiner 0 vorhanden sind oder man starke "Ausreißer" hat, und gegebenenfalls korrigiert. Das Messintervall von 50-260 eV ist in vier Teilbereiche aufgeteilt, da die Linseneinstel-

lungen nicht für den kompletten Bereich so eingestellt werden können, dass die Peaks in allen Bereichen scharf sind. Darum werden erst die Intensitätskurven für alle Teilbereiche erstellt. Danach werden zuerst die einzelnen Teilintervalle zusammengefügt und anschließend die beiden Aufnahmen mit den unterschiedlichen Elektronenströmen. Dies geschieht dadurch, dass in den Energiebereichen, die überlappen, das geometrisches Mittel gebildet wird und man somit einen Skalierungsfaktor bekommt, der die Kurven angleicht. Diese werden anschließend mit dem Savitzky-Golay-Filter geglättet, weil die experimentellen Daten ein Untergrundrauschen besitzen, die das Messergebnis verfälschen können (siehe Abb. 4.5). Der Savitzky-Golay-Filter leistet eine polynomiale Regression 5-ten Grades über einen Bereich von 11 Werten und glättet somit jeden Punkt. Diese Kurven können schließlich verglichen werden.

Für die Vergleiche wurde jeweils nur eine Rotationsdomäne verwendet, da sie stärker ausgeprägt war als die anderen beiden (siehe Kapitel 5.1). Jedoch ist für die Auswertung der Hauptreflexe das Intensitätsverhältnis aller drei Domänen wichtig, da sich die Intensität der Hauptreflexe aus der Summe der Intensitäten aller drei Domänen zusammensetzt. Dazu wurden alle drei Domänen ausgewertet und ein Skalierungsfaktor für die Intensitätskurven gleichwertiger Reflexe errechnet.



Abbildung 4.5: Glättung der Kurve des Reflexes (-4,-2). Durch das Glätten wird das Untergrundrauschen entfernt.

5 Messergebnisse und Auswertung

In diesem Kapitel werden die Methoden, die zur Auswertung der durchgeführten Messungen dienen, erläutert und die Ergebnisse vorgestellt.

Die Versuchsreihe wurde mit dem selben Siliciumsubstrat durchgeführt, das aus einem Si(111)-Wafer ($\pm 0.1^{\circ}$) gefertigt wurde. Das Gold musste während der Versuchsreihe nicht nachgefüllt werden.

Zu Beginn wurde ein Phasendiagramm erstellt, um zu erfahren, wie sich die goldinduzierten Überstrukturen auf der Si(111)-Oberfläche abhängig von Temperatur und Aufdampfmenge verhalten.

Bei der anschließenden Auswertung wurden die IV-Kurven von drei verschiedenen Bedeckungen erst untereinander verglichen, um zu überprüfen, ob sich die Atomstruktur abhängig von der Aufdampfmenge verändert. Anschließend wurde ein Vergleich mit den drei theoretischen Modellen, deren IV-Kurven mit CLEED berechnet wurden, und Kombinationen von diesen durchgeführt.

5.1 Phasendiagramm

Als Vorarbeit wurde untersucht, wie sich die Oberflächenstruktur in Abhängigkeit der Aufdampfmenge des Goldes und der Probentemperatur verhält. Dabei wurde, anders als bei der eigentlichen Arbeit, das Gold auf eine beheizte Probe aufgedampft.

Zuerst wurde die Probe mithilfe des *flash annealing* gereinigt und im LEED auf die Si(111)-7×7 Überstruktur überprüft, die charakteristisch für eine saubere Si(111)-Oberfläche ist. War dies der Fall, so wurde die Probe durch Direktstrom auf eine bestimmte Temperatur gebracht, die mit einem Pyrometer eingestellt wurde, und eine bestimmte Menge Gold wurde auf die Probe verdampft. Anschließend wurde die Probe im LEED qualitativ auf die Oberflächenstruktur untersucht. Daraufhin wurde das Experiment mit einer anderen Aufdampfmenge wiederholt, bis man die Ober- und Untergrenze für eine reine Si(111)-5×2-Au Struktur hatte. Dies wurde für Substrattemperaturen von 425, 530, 625 und 710 °C durchgeführt. Diese Vorgehensweise wurde im späteren Experiment abgeändert, weil die Probe beim Heizen mit Direktstrom nicht senkrecht vom Goldstrahl getroffen werden kann. Dadurch war die Goldbedeckung auf dem Substrat nicht homogen verteilt. Dem entsprechen erwies es sich als äußerst schwierig ein Ergebnis zu reproduzieren, da man zusätzlich aufgrund des Manipulators nie exakt die selbe Position einstellen kann.

Ohne Bedeckung liegt eine reine 7×7 -Struktur vor. Diese geht ab einer bestimmten Goldbedeckung in die zu untersuchende 5×2 -Struktur über und anschließend in die $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. Dazwischen existieren Zwischenstufen, bei denen eine Koexistenz von zwei Strukturen vorliegt. Eine "gute" 5×2 -Struktur erkennt man an den Streaks, die die $\times 2$ -Periodizität darstellen (siehe Abb. 5.1). Aus diesem Grund können nur die Beugungsreflexe der $\times 5$ -Periodizität ausgewertet werden.

Daraus ergibt sich dann ein Phasendiagramm, das in Abbildung 5.2 zu sehen ist. Es ist erkennbar, dass der Bereich, bei dem eine reine $Si(111)-5\times 2$ -Au Struktur vorliegt, mit steigender Substrattemperatur kleiner wird und sich zu höheren Bedeckungen verschiebt. Eine mögliche Begründung dafür wäre, dass die Adsorption des Substrats bei höheren

Temperaturen geringer ist, sodass man mehr Gold aufdampfen muss, damit die selbe Menge adsorbiert werden kann.

Bei der Versuchsreihe wurde das Substrat aus einem planaren Siliciumwafer gefertigt, daher müssten alle drei Rotationsdomänen gleich stark ausgeprägt sein. Dies ist aber nicht der Fall, da eine Domäne viel stärker ausgeprägt ist als die anderen beiden. Das könnte an Elektromigration liegen. Durch den Stromfluss beim Heizen werden Siliciumatome mitgerissen und ordnen sich neu an, sodass eine Domäne abhängig von der Stromrichtung auf Kosten der anderen beiden Domänen anwächst.

5.2 Vergleich der IV-LEED-Kurven

Bei einer gleichmäßigen Aufdampfrate von 60 Hz/min werden 110 Hz verdampft. Anschließend wird die Probe bei etwa 800 °C (per Direktstrom) eine Minute lang geheizt, einerseits damit den adsorbierten Goldatomen die zur Rekonstruktion der Oberfläche notwendige thermische Energie zugeführt wird und andererseits damit die überschüssigen Goldatome desorbieren. Daraufhin wird die Probe im LEED untersucht und es wird eine Aufnahme gemacht, falls eine "reine" Si(111)-5×2-Au Rekonstruktion der Oberfläche zu sehen ist, d.h. ohne die Koexistenz einer (7×7) - oder einer $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Struktur. Das sukzessive Verringern des Bedeckungsgrades durch Heizen wird so oft wiederholt, bis man eine $Si(111)-7 \times 7$ Struktur erkennen kann. Insgesamt konnten somit 3 unterschiedliche Bedeckungsgrade aufgenommen werden, nach einer, nach zwei und nach drei Minuten Heizen. Der Energiebereich (50-260 eV) wurde in vier Intervalle (50-110, 100-160, 150-210 und 200-260 eV) aufgeteilt, um die Bilder mithilfe der Linsen besser scharf stellen zu können. Es wurde in 1 eV Schritten zweimal aufgenommen. Einmal mit einem höheren Elektronenstrom, um ein besseres Signal zu Rausch Verhältnis zu bekommen, und einmal mit einem niedrigeren, bei dem kein Peak übersteuert, um somit die Übersteuerung herauszurechnen. Die Rotationsdomänen treten im Verhältnis [0.7:0.15:0.15] auf.

Es wurden summiert über alle drei Aufnahmen 355 Reflexe mit einem Energiebereich von 48633 eV ausgewertet (siehe Abb. 5.3 und Tab. 5.1). Da mit jeder Aufnahme die Gold-

	"1-Min-Heizen"	"2-Min-Heizen"	"3-Min-Heizen"
Energiebereich (in eV)	16970	16262	15401
Anzahl der Reflexe	126	117	112

Tabelle 5.1: Vergleich der Energiebereiche und der Anzahl der gemessenen Reflexe für die drei unterschiedlichen Messungen.

bedeckung abnimmt, ist im Folgenden mit Aufnahme "1-Min-Heizen" die Aufnahme mit der höchsten und mit Aufnahme "3-Min-Heizen" die mit der niedrigsten Bedeckung gemeint. Für die Benennung der Reflexe wird die Oberflächennotation verwendet. Außerdem besitzen die Intensitätskurven ein Offset zur besseren Übersichtlichkeit.

5.2.1 Vergleich untereinander

Zunächst werden die IV-Kurven der drei Messreihen untereinander verglichen, um zu sehen, ob sich die Kurven und dementsprechend auch die Atomstrukturen mit der Bede-



Abbildung 5.1: Übergänge der verschiedenen Strukturen ineinander mit steigender Goldbedeckung. a) Adsorbatfreie 7×7-Struktur. b) Die 5×2-Struktur bildet sich allmählich, Koexistenz mit der 7×7. c) Nur die 5×2-Struktur liegt vor, die ×2-Periodizität ist durch die Streaks erkennbar. d) Bei einer höheren Bedeckung fängt sich die $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur an zu bilden, sie ist um $\varphi = 30^{\circ}$ gedreht. e) Ist die Bedeckung hoch genug verwindet die 5×2 und es bleibt nur noch die $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur übrig.

ckung verändern. In Abbildung 5.4 werden die IV-Kurven der drei Messungen für eine Auswahl an Reflexen dargestellt. Die Kurven ähneln sich zwar, aber weisen trotzdem meh-



Abbildung 5.2: Phasendiagramm.

rere Unterschiede auf, die in den Abbildungen kenntlich gemacht wurden. Beispielsweise sieht man bei den Reflexen (-2,2), (5,1), und (-8,-1), dass die Aufnahme "3-Min-Heizen" bei manchen Peaks eine Schulter bildet, oder die Peaks liegen wie bei Reflex (-10,2) nicht genau übereinander. Ein Vergleich der Kurven anhand des Pendry-R-Faktors ergibt Tabelle 5.2.

Wie auch erwartet, stimmen die Kurven nicht ganz überein. Die Übereinstimmung nimmt

	"3-Min-Heizen"	"2-Min-Heizen"
"1-Min-Heizen"	0.1958	0.1401
"2-Min-Heizen"	0.1807	

Tabelle 5.2: Vergleich der Kurven untereinander anhand des Pendry-R-Faktors.

zudem mit steigendem Bedeckungsunterschied ab, d.h. Aufnahmen "1-Min-Heizen" und "2-Min-Heizen" stimmen besser überein als "1-Min-Heizen" und "3-Min-Heizen", genauso wie "2-Min-Heizen" und "3-Min-Heizen".



Abbildung 5.3: Darstellung aller ausgewerteten Reflexe.

5.2.2 Vergleich mit CLEED

Um zu Überprüfen welches der drei theoretischen Modelle (siehe Kapitel 3.3) am besten mit dem Experiment übereinstimmt, wurden von jedem Modell IV-Kurven erstellt. Diese wurden mit dem CLEED-Programm berechnet. Dabei war der Phase Shift $l_{max} = 8$, der Energie Shift $V_{0r} = -3 \text{ eV}$ und der imaginäre Anteil des Potentials $V_{0i} = 4.5 \text{ eV}$. Die Phase Shifts wurden mithilfe des Barbieri/Van Hove Phase Shift Packages berechnet. Die Kurven der Hauptreflexe wurden durch die gewichteten Intensitäten der drei Rotationsdomänen errechnet. Die Modelle der Rekonstruktion wurden auf drei atomaren Lagen beschränkt. Manche Reflexe, wie z.B. (-6,2) oder (-10,0), passen vergleichsweise gut mit den Modellen

R-Faktor	AN	KK	EBH
"1-Min-Heizen"	0.8245	0.5259	0.6639
"2-Min-Heizen"	0.8218	0.5384	0.6659
"3-Min-Heizen"	0.8196	0.5370	0.6594

Tabelle 5.3: Vergleich der Kurven mit den drei möglichen Modellen anhand des Pendry-R-Faktors.

überein, der (7,-2) Reflex beispielsweise aber so gut wie gar nicht (siehe Abb. 5.5-5.7).



Abbildung 5.4: Vergleich der IV-Kurven untereinander für eine Auswahl an Reflexen. Erkennbare Unterschiede wie Schultern oder Abweichungen der Peaks sind gekennzeichnet.



Abbildung 5.5: Vergleich der IV-Kurven aus der Aufnahme "1-Min-Heizen" mit den CLEED-Daten für eine Auswahl an Reflexen.



Abbildung 5.6: Vergleich der IV-Kurven aus der Aufnahme "2-Min-Heizen" mit den CLEED-Daten für eine Auswahl an Reflexen.



Abbildung 5.7: Vergleich der IV-Kurven aus der Aufnahme "3-Min-Heizen" mit den CLEED-Daten für eine Auswahl an Reflexen.

Die R-Faktoren für die gesamten Aufnahmen sind in Tabelle 5.3 aufgeführt.

Der Vergleich zeigt für alle drei Messungen, dass das KK-Modell am besten von den drei Modellen mit dem Experiment übereinstimmt. Jedoch ist diese Übereinstimmung nur mittelmäßig ($R \approx 0.53$). Das EBH-Modell passt etwas schlechter ($R \approx 0.66$) und das AN-Modell so gut wie gar nicht ($R \approx 0.82$).

Alle Kurven für die Aufnahme "2-Min-Heizen" befinden im Anhang.

5.2.3 Vergleich mit Linearkombination aus den Modellen

Es ist vorstellbar, dass die 5×2-Rekonstruktion als, von der Bedeckung abhängige, Superposition von verschiedenen Modelle vorliegt. Da das AN-Modell aufgrund der gefundenen Ergebnisse am unwahrscheinlichsten ist, wurde sich nur auf eine Linearkombination aus dem KK- und EBH-Modell beschränkt. Die Intensität der theoretischen IV-Kurven hat somit die Form

$$I_{qes} = aI_{KK} + (1-a)I_{EBH} \qquad \text{mit } 0 \le a \le 1.$$
(5.1)

Um die bestmögliche Kombination zu erzielen, wurden die Kurven für jedes a mit $\Delta a = 0.001$ mit den experimentellen Kurven verglichen und der Anteil a mit dem minimalen R-Faktor gesucht.

Es fällt auf, dass der Anteil des KK-Modells mit steigender Heizdauer, die gleichbedeu-

	"1-Min-Heizen"	"2-Min-Heizen"	"3-Min-Heizen"
%KK	91.3	89.8	86.7
Nominelle Au-Bedeckung (in ML)	0.6913	0.6898	0.6867
R _{min}	0.5219	0.5337	0.5319
ΔR	0.0040	0.0047	0.0051

Tabelle 5.4: Anteil des KK-Modells für die Kombination mit dem minimalen R-Faktor für alle drei Aufnahmen und die Verbesserung des R-Faktors im Vergleich zum KK-Modell alleine.

tend mit niedrigerer Bedeckung ist, kleiner wird (siehe Tabelle 5.4). Dies ist nicht verwunderlich, da das KK-Modell mehr Goldatome pro Einheitszelle beinhaltet und somit bei höheren Bedeckungen auch wahrscheinlicher sein sollte. Jedoch verbessert sich dabei der R-Faktor im Vergleich zum "reinen" KK-Modell gering (<1%), weshalb dieses Ergebnis nur mit Vorsicht zu betrachten ist.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die bedeckungsabhängige Untersuchung der atomaren Struktur der $Si(111)-5\times 2$ -Au Rekonstruktion. Dabei wurden bei drei unterschiedlichen Goldbedeckungen IV-LEED-Aufnahmen gemacht und mit drei möglichen Strukturmodellen verglichen. Der Vergleich der Kurven mit verschiedenen Bedeckungen untereinander ergab, dass das sich das Strukturmodell mit der Bedeckung ändert, obwohl jedes mal eine (5×2) -Uberstruktur vorliegt. Aus dem Vergleich mit den drei möglichen Modellen (EBH, AN, KK) folgt, dass in allen drei Fällen das KK-Modell bevorzugt ist und das AN-Modell eher unwahrscheinlich ist bzw. beinahe keine Übereinstimmung hat (R < 0.8). Jedoch ist selbst beim KK-Modell die beste Übereinstimmung anhand des Pendry-R-Faktors nur mittelmäßig ($R \approx 0.53$). Somit wurden keine neuen Erkenntnisse über das Strukturmodell der Si(111)- 5×2 -Au Rekonstruktion gewonnen, sondern lediglich die Ergebnisse von Shirasawa bestätigt, dass das KK-Modell am wahrscheinlichsten ist [20]. Die Minimierung des R-Faktors, als Funktion der Kombination aus EBH- und KK-Modell, weist für Anteile von 85-90% des KK-Modells (10-15% EBH-Modell) die höchste Übereinstimmung auf. Außerdem nimmt der "optimale Anteil" des KK-Modells bei dieser Betrachtung mit steigender Bedeckung zu, was sich mit der Tatsache der höheren nominellen Bedeckung des KK-Modells (0.7 ML) gegenüber der des EBH-Modells (0.6 ML) deckt.

Für weitere Analysen könnte eine Temperaturabhängigkeit überprüft werden. Der Strukturvergleich könnte verbessert werden, indem die Parameter der theoretischen IV-LEED-Kurven angefittet werden. Außerdem werden für die verwendete Berechnung nur die obersten drei atomaren Schichten in Betracht gezogen. Man könnte also gegebenenfalls das Ergebnis dadurch verbessern, dass man tiefer liegende Schichten berücksichtigt. Des Weiteren sollte der Verdampfer mittels spektroskopischer Methoden kalibriert werden, damit aus der Aufdampfmenge auf die tatsächliche Goldbedeckung geschlossen werden kann.

Literatur

- H. E. Bishop and J. C. Riviere. Segregation of gold to the silicon (111) surface observed by Auger emission spectroscopy and by LEED. *Journal of Physics D: Applied Physics 2*, 1635, (1969).
- [2] R. Bennewitz, J.N. Crain, A. Kirakosian, J.L. Lin, J.L. McChesney, D.Y. Petrovykh, and F.J. Himpsel. Atomic scale memory at a silicon surface. *Nanotechnology* 13, 499, (2002).
- [3] T. Nagao, G. Han, C. Hoang, J.S. Wi, A. Pucci, D. Weber, F. Neubrech, V.M. Silkin, D. Enders, and O. Saito. Plasmons in nanoscale and atomic-scale systems. *Science and Technology of Advanced Materials* 11, 054506, (2010).
- [4] S.C.Erwin, I. Barke, and F.J. Himpsel. Structure and energetics of Si(111)-(5x2)-Au. Physical Review B 80, 155409, (2009).
- [5] T. Abukawa and Y. Nishigaya. Structure of the Si(111)-(5 x 2)-Au Surface. *Physical Review Letters* 110, 036102, (2013).
- [6] S.G. Kwon and M.H. Kang. Identification of the Au Coverage and Structure of the Au/Si(111)-5x2 Surface. *Psysical Review Letters* 113, 086101, (2014).
- [7] J. Bahlmann. SPA-LEED-Untersuchungen an quasi-eindimensionalen Dysprosiumsilizidstrukturen auf Si(001). Bachelorarbeit, Universität Osnabrück, (2015).
- [8] Laue-Bedingung. *https://de.wikipedia.org/wiki/Laue-Bedingung*. Internet, Stand: 23.11.2016.
- [9] Universelle Kurve. $https://de.wikipedia.org/wiki/Datei:E-IMFP_universal de.svg.Internet, Stand: 19.12.2016.$
- [10] Dynamische LEED Theorie. https://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/dissonline/05/05H034/t4.pdf. Internet, Stand: 16.12.2016.
- [11] Muffin Tin N\"aherung. http://webdoc.sub.gwdg.de/ebook/diss/2003/fuberlin/1998/6/kap2.pdf. Internet, Stand: 16.12.2016.
- [12] Muffin Tin Modell. http://www.jara.org/de/research/jarahpc/forschung/details/simlab-ai/performance-modeling-for-linear-algebra-in-fleur/. Internet, Stand: 16.12.2016.
- [13] Silicium. http://www.periodensystem.info/elemente/silicium/. Internet, Stand: 23.11.2016.
- [14] K. Oura, V.G. Lifshits, A.A. Saranin, A.V. Zltov, and M. Katayama. Surface Science-An Introduction. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2003).
- [15] A.V. Zotov and A.A. Saranin. DAS Model. http://eng.thesaurus.rusnano.com/wiki/article14156, Stand: 23.11.2016.

- [16] Gold. http://www.periodensystem.info/elemente/gold/. Internet, Stand: 23.11.2016.
- [17] H.V. Chung, C.J. Kubber, G. Han, S. Rigamonti, D. Sanchez-Portal, D. Enders, A. Pucci, and T. Nagao. Optical detection of plasmonic and interband excitations in 1-nm-wide indium atomic wires. *Applied Physics Letters 96*, 243101, (2010).
- [18] F. Hotzel, K. Seino, C. Huck, O. Skibbe, F. Bechstedt, and A. Pucci. Metallic Properties of the Si(111) 5x2 Au Surface from Infrared Plasmon Polaritons and Ab Initio Theory. *Nano Letters* 15, 4155, (2015).
- [19] S.C. Erwin. Self-Doping of Gold Chains on Silicon: A New Structural Model for Si(111)-5x2-Au. *Physical Review Letters 91*, 206101, (2003).
- [20] T. Shirasawa, W. Voegeli, T. Nojima, Y. Iwasawa, Y. Yamaguchi, and T. Takahashi. Identification of the Structure Model of the Si(111)(5x2)Au Surface. *Physical Review Letters* 113, 165501, (2014).
- [21] T. Nordmann. Epitaxy of ultrathin nickel ferrite films on MgO(001) and SrTiO3(001). Masterarbeit, Universität Osnabrück, (2016).

A Anhang









Anhang









Anhang

























Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Menschen danken, die es mir ermöglicht haben, dass diese Arbeit überhaupt gelingen konnte.

Besonders danken möchte Prof. Dr. Joachim Wollschläger für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe *Dünne Schichten und Grenzflächen* und für die Möglichkeit diese Arbeit anzufertigen.

Ein großer Dank gilt Frederic Timmer für seine Betreuung, das Korrekturlesen dieser Arbeit und vor allem für seine Geduld. Er half mir stets mit Antworten auf alle meine Fragen.

Vielen Dank an die gesamte Arbeitsgruppe, die mich freundlich aufgenommen und für eine sehr angenehme Arbeitsatmosphäre gesorgt hat.

Zu guter Letzt danke ich meiner Familie und meinen Freunden dafür, dass sie mich unterstützt und zu mir gehalten haben. Ganz besonders danke ich Lilly, die immer für mich da war und stets ein offenes Ohr für mich hatte.

Vielen Dank!

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

Osnabrück, den 2. Januar 2017

(Andreas Alexander)