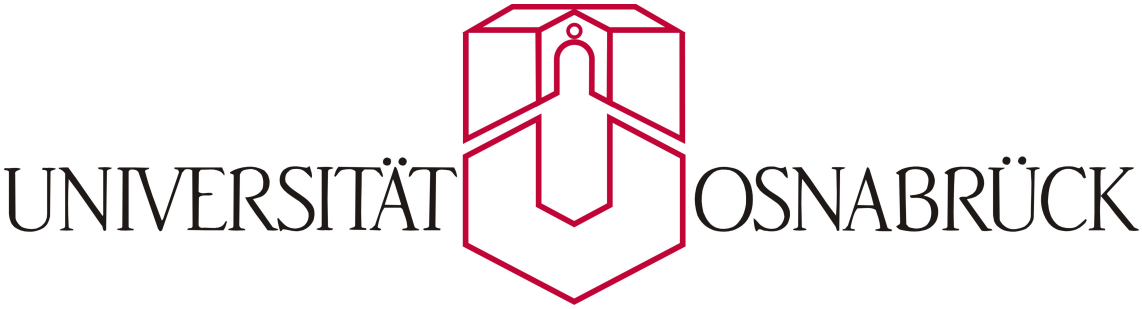


SPA-LEED-Untersuchungen der Ordnung von Au-induzierten Nanodrähten auf Si(553)

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

Matrikel-Nummer: 974412
Osnabrück, 28. September 2021

Autor: Lena Debbrecht

Erstprüfer: Prof. Dr. Joachim Wollschläger

Zweitprüfer: Prof. Dr. Simone Sanna

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung **1**

2. Theoretische Grundlagen **3**

2.1. Struktur idealer Kristalle . . . 3
2.2. Kristallstrukturen . . . 3
2.3. Millersche Indizes . . . 4
2.4. Überstrukturen durch Rekonstruktionen . . . 5
2.5. Beugung an periodischen Strukturen . . . 6
2.5.1. Reziprokes Gitter für eine Oberfläche . . . 6
2.5.2. Laue-Bedingung . . . 7
2.5.3. Ewald-Konstruktion . . . 9
2.6. Elektronenbeugung . . . 10
2.6.1. kinematische Beugungstheorie . . . 10
2.6.2. Streuphase . . . 13
2.7. Morphologie vicinaler Oberflächen . . . 15
2.8. Analyse von Spot Profilen für vicinale Oberflächen . . . 18

3. Experimentelle Grundlagen **21**

3.1. SPA-LEED und modifizierte Ewald-Konstruktion . . . 21
3.2. Ultra-Hochvakuum-Kammer . . . 23
3.3. Probenpräparation . . . 24

4. Materialsystem **27**

4.1. Das Substrat: Silizium . . . 27
4.1.1. Si(111) . . . 27
4.1.2. Si(553) . . . 29
4.2. Gold auf Silizium . . . 31
4.2.1. Si(111)-Au . . . 31
4.2.2. Si(553)-Au . . . 32

5. Ergebnisse der Messungen **35**

5.1. Messprinzip und Auswertungsmethodik . . . 35
5.2. Bedeckungsserie Si(553)-Au . . . 38
5.2.1. Das Substrat Si(553) . . . 38
5.2.2. Probentemperatur 600 °C . . . 41

5.2.3. Probentemperatur 750 °C 51
5.2.4. Probentemperatur 850 °C 60
5.3. Vergleich der Temperaturen 62

6. Zusammenfassung **67**

Literaturverzeichnis **69**

A. Anhang zu 600°C **75**

B. Anhang zu 750°C **83**

1. Einleitung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung von Oberflächenstrukturen mit Hilfe der SPA-LEED (***S**pot **P**rofil **A**nalysis- **L**ow **E**nergy **E**lectron **D**iffraction*) Messmethode. SPA-LEED beruht auf dem Prinzip der niederenergetischen Elektronenbeugung und ermöglicht es, Informationen der Struktur einer Oberfläche zu gewinnen. Die Oberfläche bezeichnet hier die ersten Atomlagen, dessen Struktur und Eigenschaften von der Struktur des Festkörpers abweichen kann.
Das in dieser Arbeit verwendete Substrat ist Si(553) und gehört zu der Familie der Halbleiter. Halbleiter werden in vielen Gebieten eingesetzt, wie zum Beispiel in integrierten Schaltungen wie Mikoprozessoren und anderen Bauelementen aus der Leistungselektronik. Des Weiteren finden Halbleiter auch in der Photovoltaik, sowie in Detektoren in der Optik ihren Einsatz. Durch den vielschichtigen Einsatz von Halbleitern stellen sie eine interessante Schnittstelle zwischen Grundlagenforschung und Technologie dar.
Eine besondere Eigenschaft der Si(553) Oberfläche ist, dass die Oberfläche atomare Stufen besitzt. Wird diese Oberfläche mit Gold bedeckt, so bilden sich auf den Terrassen der Oberfläche atomare Drähte, auch Nanodrähte genannt. Nanodrähte sind feine, lange Drähte, die einen Durchmesser bis zu wenigen 100 nm besitzen.
Ziel dieser Arbeit ist die Analyse des Einflusses der Bedeckung und Substrattemperatur auf die Bildung atomarer Drähte, um die optimalen Wachstumsbedingungen zu charakterisieren. Die aufgenommenen Daten werden anhand unterschiedlicher Parameter, wie zum Beispiel der Halbwertsbreite oder Position einzelner Reflexe, ausgewertet. Anhand dessen kann auf die Entwicklung der Nanodrähte sowie die Abschätzung in Form und Größe von Domänen geschlossen werden. Es wird sich zeigen, dass die Probentemperatur beim Bedampfen des Goldes eine Rolle für die Beschaffenheit der Nanodrähte auf der Si-Oberfläche spielt. Außerdem kann mit Hilfe der Daten eine Aussage über die Bedeckung, etwa der „Low Coverage Wire“- oder „High Coverage Wire“-Phase, getroffen werden.
In Kapitel 2 werden zunächst allgemeine Informationen über die Geometrie einer kristallinen Struktur angesprochen, die als Grundlage dieser Arbeit dienen. Im folgenden Kapitel 3 wird der für diese Arbeit verwendete experimentelle Aufbau, sowie die wichtigen Messinstrumente vorgestellt. Das Substrat Silizium wird in Kapitel 4 besprochen und wichtige Eigenschaften genannt. Des Weiteren wird der aktuelle Forschungsstand zu dem Materialsystem Si(553)-Au dargestellt. Im letzten Kapitel 5 werden die Messdaten ausgewertet und die Ergebnisse der Messungen gezeigt.

2. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zur Anfertigung dieser Arbeit notwendigen theoretischen Grundlagen näher erläutert. Zunächst wird auf die relevante Physik der Oberflächenstrukturen von kristallinen Festkörpern eingegangen. Des Weiteren wird das reziproke Gitter und die Beugung an periodischen Strukturen erklärt, sowie die in dieser Arbeit verwendeten Messmethoden mit niederenergetischer Elektronenbeugung.

2.1. Struktur idealer Kristalle

In der Festkörperphysik wird streng zwischen der Oberfläche und des Volumens des Kristalls unterschieden. Das Kristallvolumen ist eine dreidimensionale periodische Anordnung von Atomen oder Atomgruppen. Jedes einzelne Atom oder jede Atomgruppe wird als *Basis* des Kristalls bezeichnet, wobei die Atome der Basis gleicher oder unterschiedlicher Art sein können [6]. Wird jeder Basis ein Gitterpunkt zugeordnet, so entsteht ein *Raumgitter*. Eine kristalline Struktur wird somit durch die Struktur des Raumgitters und der Basis beschrieben.

2.2. Kristallstrukturen

Das Raumgitter kann mit drei Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, den sog. *primitiven Translationsvektoren*, angegeben werden. Von jedem dieser Punkte des Raumgitters können über die Translation

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \tag{2.1}$$

andere Gitterpunkte erreicht werden [6]. Das Gitter kann außer der Translationssymmetrie auch Dreh- und Spiegelsymmetrie aufweisen. Bei der Betrachtung dieser Symmetrien lassen sich im Dreidimensionalen 14 solcher Gittertypen finden, die nach A. Bravais die 14 *Bravais-Gitter* genannt werden [6]. Die Bravais-Gitter unterscheiden sich durch ihre Symmetrieeigenschaften und können in sieben Kristallsysteme eingeordnet werden, wobei die Elementarzelle aus einem oder mehreren Atomen besteht. Für die Beschreibung von Symmetrieeigenschaften wird ein bestimmtes Bezugssystem gewählt. Dieses Bezugssystem wird durch drei Kristallachsen $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ mit Längeneinheiten a, b, c und Achsenwinkeln α, β, γ gebildet. Durch die Vektoren $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ wird ein Parallelipiped aufgespannt, welches als *Einheitszelle* bezeichnet wird. Die Kantenlängen der Einheitszelle sind a, b, c und werden als *Gitterkonstanten* bezeichnet.

Ähnlich zum Kristallvolumen kann auch die Oberfläche, wie oben beschrieben, erklärt werden. Durch die Oberfläche wird die Periodizität in einer Raumrichtung gebrochen, sodass die Oberfläche als zweidimensionaler Kristall aufgefasst werden kann. Im Zweidimensionalen lassen sich fünf Bravais-Gitter finden, diese sind in Abbildung 2.1 dargestellt. In zwei Dimensionen reduzieren sich die Kristallachsen auf zwei Achsen $\vec{a'}, \vec{b'}$, mit denen die fünf Bravais-Gitter beschrieben werden. Analog zu dem Translationsvektor $\vec{R}$ aus Gleichung 2.1 kann der Translationsvekor $\vec{r}$ des Gitters der Oberfläche mit den primitiven Translationsvektoren $\vec{a_1}', \vec{a_2}'$ mit

$$\vec{r} = n_1' \vec{a_1}' + n_2' \vec{a_2}' \quad n_1', n_2' \in \mathbb{Z} \tag{2.2}$$

beschrieben werden.

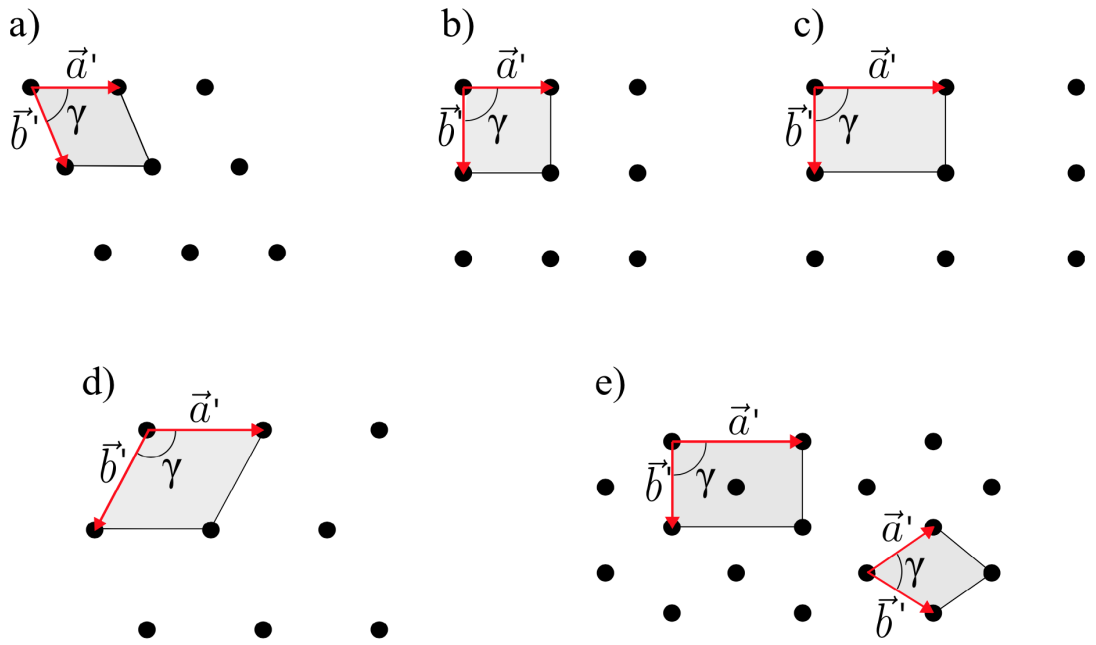


Abbildung 2.1.: Die fünf Bravais-Gitter der Oberfläche, beschrieben durch zwei Kristallachsen $\vec{a}', \vec{b}'$. a) schiefwinklig: $|\vec{a}'| \neq |\vec{b}'|$, $\gamma \neq 90°$, b) quadratisch: $|\vec{a}'| = |\vec{b}'|$, $\gamma = 90°$, c) rechtwinklig: $|\vec{a}'| \neq |\vec{b}'|$, $\gamma = 90°$, d) hexagonal $|\vec{a}'| = |\vec{b}'|$, $\gamma = 120°$, e) zentriert rechtwinklig: $|\vec{a}'| \neq |\vec{b}'|$, $\gamma = 90°$ mit zentriertem Basisatom oder $|\vec{a}'| = |\vec{b}'|$, $\gamma \neq 90° \neq 120°$. In e) links handelt es sich nicht um ein primitives Gitter, da es in der Einheitszelle ein Atom einschließt, in e) rechts ist das Gitter primitiv. Entnommen aus [5] und bearbeitet.

2.3. Millersche Indizes

Eine mit Gitterpunkten besetzte Ebene im Kristall wird *Netzebene* genannt. Ihre Orientierung im Kristall ist gegeben durch die Schnittpunkte mit den Kristallachsen $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, wobei die Achsenabschnitte in Einheiten der Gitterkonstanten a, b, c ausgedrückt werden. Für

die Kennzeichnung dieser Netzebene werden die sog. *Millerschen Indizes* (*hkl*) verwendet, die folgendermaßen bestimmt werden: Zunächst werden die Schnittpunkte der Ebene mit den Achsen $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ in Einheiten der Gitterkonstanten ermittelt. Anschließend werden die Kehrwerte der Schnittpunkte gebildet und so multipliziert, dass ein kleinstmögliches ganzzahliges Tripel entsteht. Man erhält dann ein Tripel von ganzen Zahlen (*hkl*), die eine Schar paralleler Netzebene definiert. Wenn eine Ebenenschar parallel zu einer Kristallachse verläuft, so liegt der Schnittpunkt im Unendlichen. Der Index wäre in diesem Fall null. Liegt der Schnittpunkt im negativen Bereich, wird der Index mit einem Minuszeichen über dem jeweiligen Index beschrieben. Millersche Indizes in geschweiften Klammern beziehen sich auf alle äquivalenten Ebenen des Kristalls, eckige Klammern geben Kristallrichtungen an und runde Klammern Kristallebenen, wobei Richtungen mit identischen Zahlentripeln senkrecht auf der entsprechenden Ebene stehen. In Abbildung 2.2 sind drei verschiedene Beispiele für Millersche Indizes gezeigt.
Es ist darauf zu achten, dass sich die Millerschen Indizes auf die Kristallachsen $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ beziehen und nicht auf die primitiven Translationen $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$.

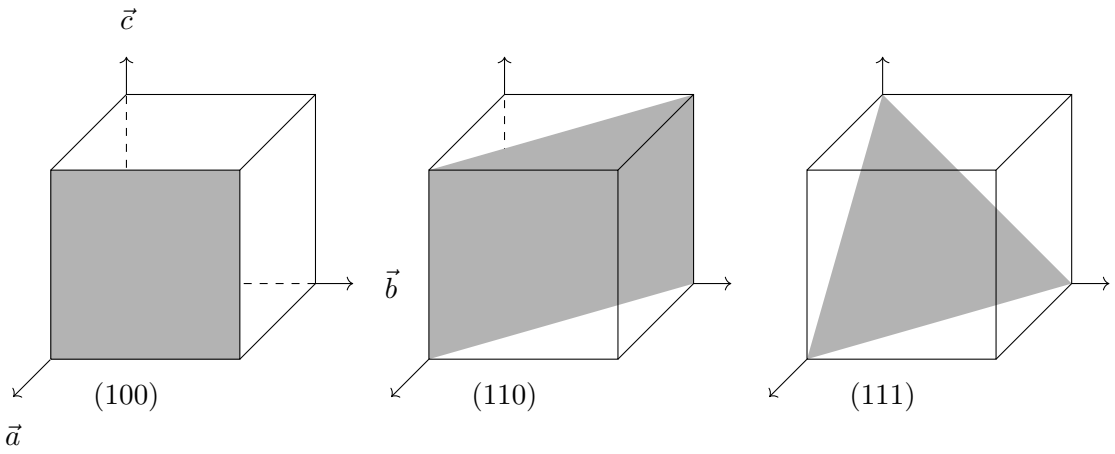


Abbildung 2.2.: Drei Beispiele für die Millerschen Indizes.

2.4. Überstrukturen durch Rekonstruktionen

Die Struktur der Oberfläche kann sich von der Struktur der inneren Kristallebenen unterscheiden. Auf der Oberfläche einer kristallinen Struktur können beispielsweise ungesättigte Bindungen der Oberflächenatome zu Rekonstruktionen führen. Die Folge dieser Rekonstruktionen können *Überstrukturen* sein. Seien $\vec{a}', \vec{b}'$ die Kristallachsen in zwei Dimensionen und $\vec{a_s}$,$\vec{b_s}$ die Translationsvektoren der Überstruktur, dann können sie über die Matrix G der Überstruktur

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

zu

$$\vec{a_{\mathrm{s}}} = G_{11}\vec{a'} + G_{12}\vec{b'} \tag{2.3}$$

$$\vec{b_{\mathrm{s}}} = G_{21}\vec{a'} + G_{22}\vec{b'} \tag{2.4}$$

verbunden werden [9]. Eine weitere Notation zur Beschreibung der Überstruktur ist die Notation nach *Wood* und wird in der Wissenschaft häufiger verwendet [9]: Die Basisvektoren der Überstruktur $\vec{a_{\mathrm{s}}}, \vec{b_{\mathrm{s}}}$ werden als Vielfaches der Kristallachsen $\vec{a'}, \vec{b'}$ des Grundgitters angegeben. Liegt bei der Überstruktur eine Rotation vor, so wird dies mit einem R und dem Drehwinkel φ angegeben. Die Längenverhältnisse werden dabei wie folgt angegeben:

$$|\vec{a_{\mathrm{s}}}| = m|\vec{a'}| \quad \text{und} \quad |\vec{b_{\mathrm{s}}}| = n|\vec{b'}| \quad m, n \in \mathbb{R}, \tag{2.5}$$

wobei m, n reelle Zahlen sind, die das Verhältnis der Vektoren zueinander bilden. Für ein beliebiges Substrat X mit Orientierung (hkl) wird die Überstruktur folgendermaßen angegeben:

$$X(hkl)(m \times n) - R\varphi^{\circ}. \tag{2.6}$$

$R\varphi^{\circ}$ gibt dabei den Winkel der Rotation der Überstruktur an, wobei bei einem Winkel von $\varphi = 0^{\circ}$ in der Notation nicht weiter spezifiziert wird.

2.5. Beugung an periodischen Strukturen

Treffen Materiewellen oder elektromagnetische Wellen auf einen Kristall, so werden diese am Kristallgitter gebeugt, wenn ihre Wellenlänge der gleichen Größenordnung wie die der Gitterkonstanten entspricht. Für die Untersuchung der Struktur von Kristallen haben sich Beugungsmethoden mit Elektronen oder Röntgen-Strahlen bewährt, die besonders durch M. v. Laue *et al.* 1912 [6] bekannt geworden sind. Über die räumliche Verteilung der gebeugten Strahlen lassen sich Informationen über das Kristallgitter finden.

2.5.1. Reziprokes Gitter für eine Oberfläche

Zur Beugungsuntersuchung der Struktur eines Festkörpers wird anstelle des Real-Raum Kristallgitters das *reziproke Gitter* verwendet. Das reziproke Gitter ist nicht wie das reale Gitter eine Ortsdarstellung, sondern eine Darstellung im Impulsraum, kurz: k-Raum. Die reziproken Translationsvektoren $\vec{b_1}', \vec{b_2}'$ stehen mit den Real-Raum Translationsvektoren $\vec{a_1}', \vec{a_2}'$ der Kristalloberfläche in folgender Beziehung:

$$\vec{b_1}' = 2\pi \frac{\vec{a_1}' \times \vec{n}}{|\vec{a_1}' \times \vec{a_2}'|}, \quad \vec{b_2}' = 2\pi \frac{\vec{n} \times \vec{a_2}'}{|\vec{a_1}' \times \vec{a_2}'|}, \tag{2.7}$$

wobei $\vec{n}$ der Normalenvektor ist, der senkrecht zur Oberfläche des Kristalls steht. Jeder der reziproken Gitterpunkte kann über die Translation

$$\vec{G}_{\mathrm{hk}} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2, \quad h,k \in \mathbb{Z} \tag{2.8}$$

von jedem Punkt im Gitter erreicht werden. Der Vektor $\vec{b_1}'$ steht dabei senkrecht auf $\vec{a_1}'$ und $\vec{b_2}'$ steht senkrecht auf $\vec{a_2}'$. Die Vektoren $\vec{b_1}'$ und $\vec{b_2}'$ stehen senkrecht auf $\vec{n}$. Während der Real-Raum die Dimension [Länge] besitzt, ist die Dimension im reziproken Raum 1/[Länge].

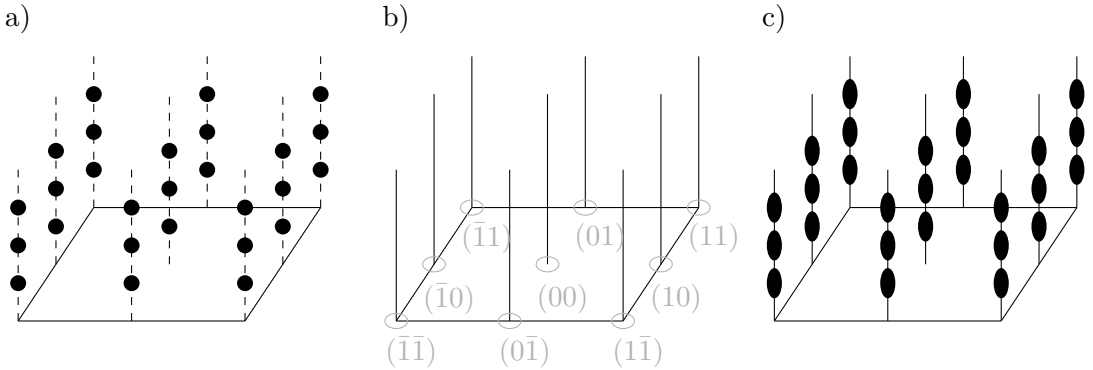


Abbildung 2.3.: Schematische Darstellung des reziproken Gitters in verschiedenen Dimensionen. a) Beugungspunkte eines dreidimensionalen Gitters und b) Beugungsstangen des reziproken Raums eines zweidimensionalen Kristallgitters. In c) ist der Realfall gezeigt, dieser ist ein Mischfall aus den beiden Gittern a) und b).

In drei Dimensionen besteht das reziproke Gitter aus Punkten, wie es in Abbildung 2.3 a) gezeigt ist. Das zweidimensionale reziproke Gitter besteht hingegen aus Beugungsstangen, siehe Abbildung 2.3 b). Dies rührt daher, dass bei der Oberfläche nur eine Ebene betrachtet wird und somit der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten senkrecht zur Oberfläche unendlich groß ist. Auf den reziproken Raum bezogen rücken die Gitterpunkte zusammen und bilden dadurch Stangen.
In der Realität ist die Periodizität senkrecht zur Oberfläche aufgrund von Rekonstruktionen nicht perfekt. Bei der Verwendung von Elektronen zur Untersuchung der Struktur werden nur die ersten Atomlagen erreicht. Aus diesem Grund kommt es zu einem Mischfall aus den beiden oben genannten Fällen. Dieser Mischfall ist in Abbildung 2.3 c) grafisch dargestellt. Hier ist die Intensität nicht, wie in 2.3 a), an einzelnen Punkten konzentriert, sondern verteilt sich um die jeweiligen ausgedehnten Stellen. Bezogen auf die Intensität folgt, dass sie davon abhängig ist, wo die Beugungsstange getroffen wird.

2.5.2. Laue-Bedingung

Die Laue-Bedingung nach M. v. Laue [6] beschreibt die Beugungseffekte an Kristallen und gibt Auskunft über das Auftreten von Beugungsreflexen. Sie beschreibt im Wesentli-

chen die (Quasi-)Impulserhaltung, indem der Streuvektor einem reziproken Gittervektor entsprechen muss. Abbildung 2.4 zeigt eine schematische Darstellung zur Herleitung der Laue-Bedingungen.

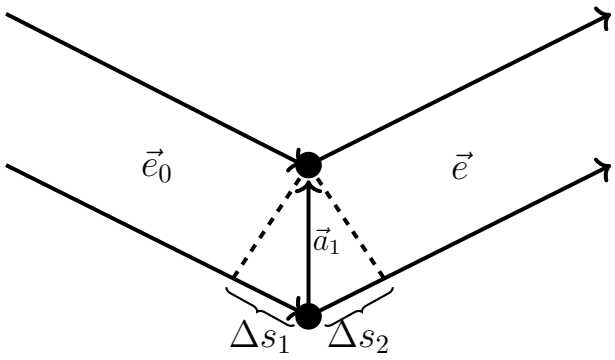


Abbildung 2.4.: Grafische Darstellung zur Herleitung der Laue-Bedingung. Δs ist der Gangunterschied, $\vec{e}_0$ der Einheitsvektor in Richtung des einfallenden Strahls und $\vec{e}$ der Einheitsvektor in Richtung des gebeugten Strahls, $\vec{a_1}$ ist der Netzebenenabstand.

Die einfallenden Strahlen werden an zwei benachbarten Gitterpunkten des Kristalls gebeugt, wobei der relative Abstand zweier einzelner Gitterpunkte dem primitiven Translationsvektor $\vec{a}_1$ entspricht. Aufgrund des Gangunterschiedes Δs der Strahlen kommt es zur Interferenz. Der Gangunterschied des einfallenden Strahls wird durch $\Delta s_1 = \vec{a_1} \cdot \vec{e}_0$ beschrieben und der des gebeugten Strahls durch $\Delta s_2 = \vec{a_1} \cdot \vec{e}$. Der Gangunterschied Δs setzt sich dann aus der Summe der einzelnen Gangunterschiede Δs_1 und Δs_2 zusammen. $\vec{e}_0$ ist der Einheitsvektor in Richtung des einfallenden Strahls und $\vec{e}$ der des gebeugten Strahls, $\vec{a}_1$ ist der Translationsvektor. Für konstruktive Interferenz muss der Gangunterschied ein Vielfaches der Wellenlänge sein, also

$$\Delta s = \vec{a_1} \cdot (\vec{e} - \vec{e}_0) = h\lambda \quad h \in \mathbb{Z}. \tag{2.9}$$

In zwei Dimensionen gilt zusätzlich

$$\vec{a}_2 \cdot (\vec{e} - \vec{e}_0) = k\lambda \quad k \in \mathbb{Z} \tag{2.10}$$

mit dem Translationsvektor $\vec{a}_2$. Gleichungen 2.9, und 2.10 werden als *Lauesche Gleichungen* bezeichnet und sind hinreichende Bedingungen für ein Intensitätsmaximum [6].
Mit Hilfe des Translationsvektors $\vec{G}_{\mathrm{hk}}$ des reziproken Gitters aus Gleichung 2.8 können die Laueschen Gleichungen zu

$$(\vec{e} - \vec{e}_0) = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \vec{G}_{\mathrm{hk}} \tag{2.11}$$

umgeformt werden. Zum Beweis multipliziert man Gleichung 2.11 mit $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ und erhält mit Hilfe von Gleichung 2.7 und 2.8 die Bedingungen für die konstruktive Interferenz aus Gleichungen 2.9 und 2.10 zurück. Gleichung 2.11 kann unter Einführung der Wellenzahlvektoren

$$\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_0 \quad \text{und} \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}, \tag{2.12}$$

mit dem Wellenvektor $\vec{k}_{0,\parallel}$ des einfallenden und $\vec{k}_{\parallel}$ des gebeugten Strahls, zu der sog.

Laue Bedingung für zwei Dimensionen

$$\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}_{0,\parallel} = \vec{G}_{\mathrm{hk}} \tag{2.13}$$

vereinfacht werden. Da es sich hier um die Laue-Bedingungen in zwei Dimensionen handelt, gehen in diesem Fall nur die Anteile der Wellenvektoren ein, die parallel zur Oberfläche stehen. Da die Teilchen elastisch am Kristallgitter gestreut werden, ändert sich der Impuls der Teilchen nicht. Daraus folgt, dass die Beträge des eintreffenden und gebeugten Strahls gleich sind und es gilt: $|\vec{k}_0| = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$.

2.5.3. Ewald-Konstruktion

Eine anschauliche Darstellung der Laue-Bedingungen bietet die sog. *Ewald-Konstruktion* nach P. Ewald [6]. Eine grafische Darstellung dieser Konstruktion ist in Abbildung 2.5 gezeigt und wird wie folgt konstruiert: Es wird der reziproke Raum des zu untersuchenden Substrats gezeichnet und dort der einfallende Wellenvektor $\vec{k}_0$ so eingezeichnet, dass er im Ursprung des reziproken Raumes endet. Wie zuvor in Abschnitt 2.5.1 erläutert, besteht das reziproke Gitter und somit die Ewald-Konstruktion für eine Oberfläche aus Beugungsstangen. Um den Ursprung von $\vec{k}_0$ wird dann eine Kugel gezeichnet dessen Radius dem Betrag des Wellenvektors $|\vec{k}_0| = \frac{2\pi}{\lambda(E)}$ entspricht und somit abhängig von der Energie ist. Konstruktive Interferenz ist möglich, wenn Gleichung 2.13 erfüllt ist, dann schneiden die Beugungsstangen den Rand der Ewald-Konstruktion. Der Parallelanteil des Wellenzahlvektors $\vec{k}$ des gebeugten Strahls zeigt dann in Richtung $\vec{k}_{\parallel} = \vec{k}_{0,\parallel} + \vec{G}_{\mathrm{hk}}$ und ist somit ein im Beugungsbild zu erwartender Reflex.

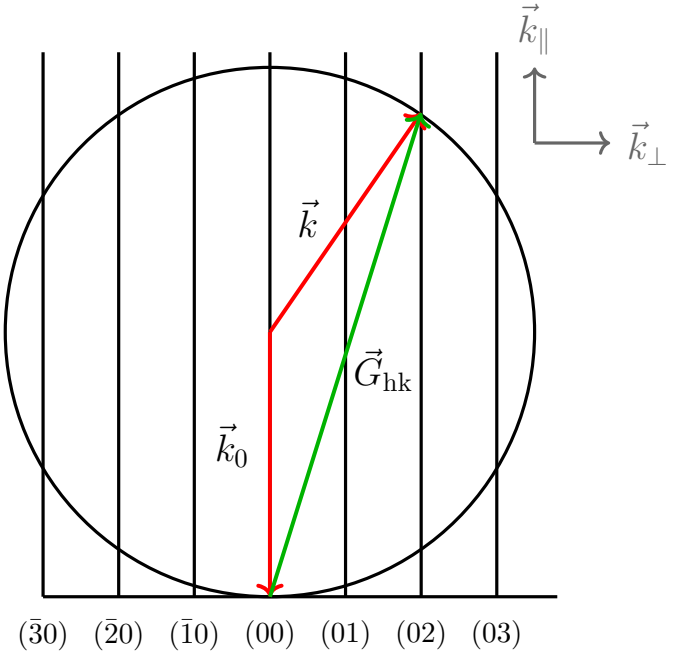


Abbildung 2.5.: Schnitt durch die Ewald-Konstruktion für ein zweidimensionales Gitter für den Reflex (20) für senkrechten Einfall. $\vec{k}$ ist der Wellenzahlvektor des gebeugten Strahls und $\vec{k}_0$ ist der Wellenvektor des einfallenden Strahls. $\vec{G}$ beschreibt einen Gittervektor im reziproken Raum.

2.6. Elektronenbeugung

In dieser Arbeit werden kristalline Strukturen mit Hilfe von Beugung von niederenergetischen Elektronen untersucht, diese Methode wird ***L**ow **E**nergy **E**lectron **D**iffraction* (LEED) genannt. Für Elektronen gilt der Welle-Teilchen-Dualismus, weshalb für die Wellenlänge der Elektronen die *de Broglie*-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_\mathrm{e}E}} \tag{2.14}$$

verwendet werden kann [6]. h ist das Plancksche Wirkungsquantum, p der Impuls des Elektrons, m_e die Masse eines Elektrons und E die Elektronenenergie. Die Energie der Elektronen umfasst einen Bereich von $20 - 1000$eV, was einer Wellenlänge von $0.4 - 2.7$Å entspricht. Diese Bedingung ist die Voraussetzung für Beugung an atomaren Strukturen, da die Wellenlänge in der Größenordnung der Gitterkonstanten der Kristalle liegt. Außerdem beträgt die mittlere freie Weglänge der niederenergetischen Elektronen nur ein paar Atomlagen und ist dementsprechend kurz. Dies begünstigt, dass die Beugung hauptsächlich an der Oberfläche stattfindet und so eine hohe Oberflächensensitivität besteht [9].

2.6.1. kinematische Beugungstheorie

Bei der Beugung von Elektronen an einer Oberfläche treten, aufgrund des großen Wirkungsquerschnittes von Elektronen an Atomen, Mehrfachstreuung auf. Eine exakte Berechnung der Amplitude der gebeugten Strahlung bietet die *dynamische Streutheorie* an. Diese Theorie ist jedoch mit einem sehr hohen Rechenaufwand verbunden und für reale Kristalle sehr zeitintensiv. Zur mathematischen Vereinfachung wird meist die *kinematische Beugungstheorie* genutzt. Sie dient zur Berechnung der Amplitude und somit auch die Intensität der gebeugten Strahlung. Die Intensität enthält Informationen über Struktur innerhalb der Einheitszelle. Für diese Theorie wird die Oberfläche in periodische Säuleneinheitszellen aufgeteilt, die beliebig weit in den Kristall hineinreichen, dies ist in Abbildung 2.6 schematisch dargestellt.

In der kinematischen Beugungstheorie werden seitliche Streuprozesse vernachlässigt und nur Einfachstreuung innerhalb einer Säuleneinheitszelle berücksichtigt. Aufgrund der großen Entfernung zwischen der Elektronenkanone, der Probe und dem Detektor im Vergleich zur Wellenlänge, können die Elektronen als ebene Welle angenommen werden. Diese Näherung wird *Fraunhofer-Näherung* genannt. Eine ebene Wellen, die an der 0-ten Säuleneinheitszelle am Ort $\vec{r}$ gestreut wird, kann mit

$$\Psi_0(\vec{k}_0, \vec{k}, \vec{r}) = f_0(\vec{k}_0, \vec{k}) \cdot \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} \tag{2.15}$$

beschrieben werden. Wie auch in Abschnitt 2.5.2 ist $\vec{k}_0$ der Wellenvektor des einfallenden und $\vec{k}$ des gebeugten Strahls, f_0 ist der Formfaktor der 0-ten Säuleneinheitszelle. Wird

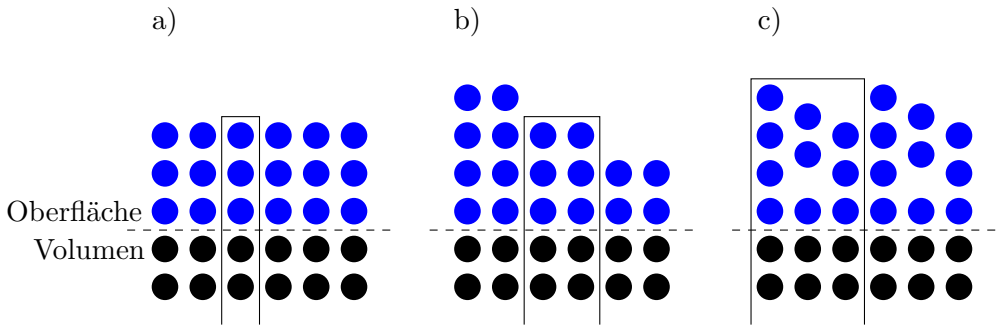


Abbildung 2.6.: Die periodischen Strukturen der Oberfläche basierend auf Säuleneinheitszellen, die sich auf der Volumenstruktur befinden. In a) wird eine ideale Oberfläche gezeigt, in b) eine gestufte Oberfläche und in c) ist eine Oberfläche mit Überstruktur dargestellt.

die Streuung eines Elektrons an einer beliebigen Position $\vec{r}_n$ an einer Säuleneinheitszelle n betrachtet, dann führt die Phasenverschiebung

$$\Delta\varphi = \vec{K} \cdot \vec{r}_n \quad \text{mit} \quad \vec{K} = \vec{k}_0 - \vec{k} \tag{2.16}$$

zu der allgemeinen Wellenfunktion:

$$\Psi_n(\vec{k}_0, \vec{k}, \vec{r}_n) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot f_n(\vec{k}_0, \vec{k}) \cdot \mathrm{e}^{i\vec{K}\vec{r}_n}, \tag{2.17}$$

mit dem Formfaktor f_n der n-ten Säuleneinheitszelle und dem Streuvektor $\vec{K}$. Die Intensität I wird mit Hilfe des Absolutquadrats der Superposition der einzelnen Teilwellen ermittelt:

$$I(\vec{k}_0, \vec{k}, \vec{r}_n) = \frac{I_0}{N} \cdot \underbrace{\left|\mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}}\right|^2}_{=1} \cdot \left|\sum_{n=0}^{N} f_n(\vec{k}_0, \vec{k}) \cdot \mathrm{e}^{i\vec{K}\vec{r}_n}\right|^2 \tag{2.18}$$

wobei N die Anzahl der Säuleneinheitszellen ist. Es wird nun davon ausgegangen, dass der Formfaktor für alle Säuleneinheitszellen gleich ist und demnach $f_n = f_0$ gilt. Es ergibt sich für die Intensität folgende Vereinfachung:

$$I(\vec{k}_0, \vec{k}, \vec{r}_n) = \frac{I_0}{N} \cdot \underbrace{\left|f_0(\vec{k}_0, \vec{k})\right|^2}_{\mathrm{F}} \cdot \underbrace{\left|\sum_{n=0}^{N} \mathrm{e}^{i\vec{K}\vec{r}_n}\right|^2}_{\mathrm{G}} \tag{2.19}$$

$$\Rightarrow I(\vec{k}_0, \vec{k}) = \frac{I_0}{N} \cdot \left|F(\vec{k}_0, \vec{k})\right|^2 \cdot \left|G(\vec{K})\right|^2 \tag{2.20}$$

mit dem dynamischen Strukturfaktor F und dem Gitterfaktor G. F ist aufgrund der kinematischen Näherung für alle Säuleneinheitszellen immer gleich. Dieser beschreibt die absolute Intensität der Beugungsmuster und berücksichtigt die Streuprozesse innerhalb einer Einheitszelle. Der Gitterfaktor ist abhängig von der Morphologie der Oberfläche und

bestimmt das Profil der Beugungsreflexe. Aus Gleichung 2.20 kann G folgendermaßen beschrieben werden:

$$\left|G(\vec{K})\right|^2 = G(\vec{K})G(\vec{K})^* = \sum_n \sum_m \mathrm{e}^{i\vec{K}\vec{r}_n} \mathrm{e}^{-i\vec{K}\vec{r}_m} = \sum_{n,m} \mathrm{e}^{i\vec{K}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)}. \tag{2.21}$$

Hier wird eine weitere Summe mit Laufindex m eingeführt, der sich aus der Quadrierung ergibt, n und m indizieren die Säuleneinheitszellen. Die Gitterpositionen

$$\vec{r}_{\vec{n}} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + h(n_1, n_2)\vec{d} \quad n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \tag{2.22}$$

geben dabei die Position der Säulen an, mit den Gittervektoren der Oberfläche $\vec{a}, \vec{b}$ und einem senkrecht zur Oberfläche stehenden Vektor $\vec{d}$, der dem Betrag eines Lagenabstandes entspricht. $h(n_1, n_2)$ ist eine Höhenfunktion der Einheitszelle am Ort $\vec{n}$. Die Gleichung für die Position der Streuzentren aus 2.22 vereinfacht sich im Falle einer idealen und ungestuften Oberfläche zu

$$\vec{r}_{\vec{n},\mathrm{ideal}} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} \quad n_1, n_2 \in \mathbb{Z}, \tag{2.23}$$

Außerdem kann der Streuvektor $\vec{K}$ in seinen senkrechten und parallelen Anteil separiert werden: $\vec{K} = \vec{K}_\perp + \vec{K}_\parallel$. Für eine ideale Oberfläche ohne Stufen kann $\vec{K}_\perp$ nach der Laue-Bedingung für konstruktive Interferenz willkürlich gewählt werden [6]. Der Streuvektor reduziert sich dann auf $\vec{K} = \vec{K}_\parallel$, wodurch Gleichung 2.21 sich zu

$$\left|G(\vec{K})\right|^2_{\mathrm{ideal}} = \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{i\vec{K}_\parallel \cdot \vec{r}_{\vec{n},\mathrm{ideal}}} = \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{i\vec{K}_\parallel \cdot (n_1\vec{a} + n_2\vec{b})} \tag{2.24}$$

vereinfacht. Aus den Laue-Gleichungen ist bekannt, dass sich das Skalarprodukt aus den primitiven Einheitsvektoren des Real-Raums und des reziproken Raumes aus

$$\vec{a} \cdot \vec{K}_\parallel = 2\pi h \tag{2.25}$$

$$\vec{b} \cdot \vec{K}_\parallel = 2\pi k \tag{2.26}$$

ergibt [6], mit den Millerschen Indizes h, k. Aus Gleichung 2.24 folgt:

$$\left|G(\vec{K})\right|^2_{\mathrm{ideal}} = \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{2\pi i(n_1 h + n_2 k)} \quad n_1, n_2, h, k \in \mathbb{Z}. \tag{2.27}$$

Es handelt sich hierbei um eine Funktion mit einem ganzzahligen Vielfachen von π, sodass die Exponentialfunktion für alle Gitterplätze, also für alle Werte von $\vec{n} = (n_1, n_2)$, eins ergibt. In Gleichung 2.27 handelt es sich demnach um eine δ-Distribution der gebeugten Intensität. Diese δ-Distribution repräsentiert das zu erwartende Reflexprofil einer idealen Oberfläche.

2.6.2. Streuphase

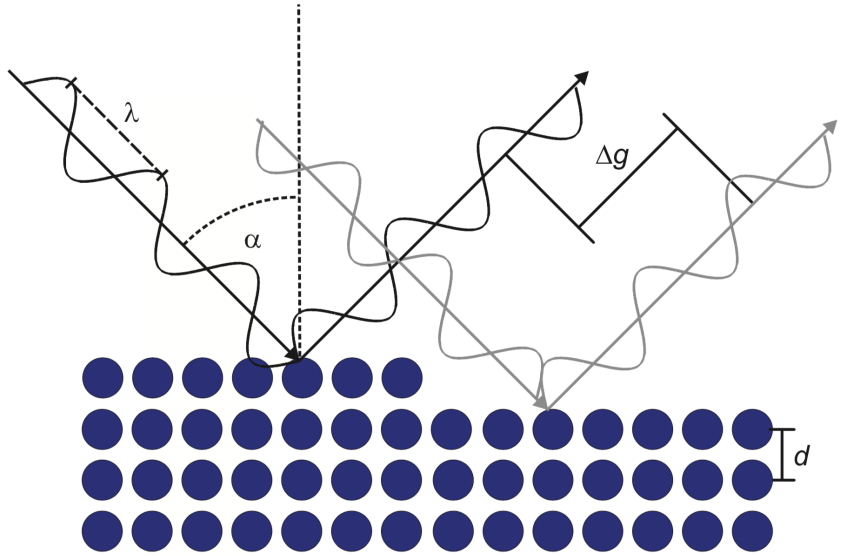


Abbildung 2.7.: Schematische Darstellung zur Herleitung der Streuphase. Die Elektronenwelle mit der de Broglie-Wellenlänge λ fallen utner einem Winkel α auf die Stufenkante ein. Der resultierende Gangunterschied ist mit Δg gekennzeichnet, der Lagenabstand mit d. Entnommen aus [2].

In dieser Arbeit werden keine idealen Oberflächen untersucht, wie im vorherigen Kapitel zunächst angenommen. Bei der Probenuntersuchung mit Elektronenbeugung können Elektronen an unterschiedlichen Terrassen gebeugt werden, die durch atomare Stufen getrennt sind. Dadurch wird ein Gangunterschied hervorgerufen, der entweder zu einer konstruktiven oder destruktiven Interferenz führt. Die *Streuphase* S gibt Auskunft darüber, wann konstruktive oder destruktive Interferenz auftritt und beschreibt den Gangunterschied in Einheiten der Elektronenwellenlänge. Abbildung 2.7 zeigt eine schematische Darstellung zur Herleitung der Streuphase. Der Gangunterschied Δg zwischen den gebeugten Strahlen kann in 0-ter Ordnung aus geometrischen Gründen mit

$$\Delta g = S\lambda = 2d\cos(\alpha) \tag{2.28}$$

beschrieben werden, wobei d der Lagenabstand und α der Einfallswinkel ist. Aus Kapitel 2.5.2 ist die Wellenzahl $|\vec{k}|$ bereits bekannt. Mit ihrem senkrechten Anteil $|\vec{K}_\perp| = 2|\vec{k}|\cos(\alpha)$ kann Gleichung 2.28 zu

$$S = \frac{|\vec{K}_\perp|d}{2\pi} \tag{2.29}$$

umgeformt werden.
Entsprechend Gleichung 2.28 findet konstruktive Interferenz für ganzzahlige Werte von S statt, diese wird *in-Phase* genannt. Für destruktive Interferenz muss S entsprechend

einen halbzahligen Wert annehmen, diese Phase wird *out-Phase* genannt. Im Bezug auf das Experiment ist es von Interesse, die Beziehung zwischen der Streuphase S und der Elektronenenergie zu beschreiben, da die Intensitätsverteilung des Beugungsbildes von der Elektronenenergie abhängt. Setzt man die de Broglie-Wellenlänge aus Kapitel 2.6 in Gleichung 2.28 ein, so ergibt sich ein von der Elektronenenergie abhängiger Ausdruck für die Streuphase

$$S = \frac{d\cos(\alpha)\sqrt{2m_{\mathrm{e}}E}}{\pi\hbar}. \tag{2.30}$$

In Kapitel 2.6.1 wurde bereits gezeigt, dass sich die Form der Intensität der Beugungsreflexe wie eine δ-Funktion verhält. Aufgrund der Interferenzeffekte durch die gestufte Oberfläche kommt es zu einer Reflexverbreiterung, die im Beugungsbild sichtbar wird. Man unterscheidet zwischen zwei verschiedenen gestuften Oberflächen, die eine Verbreiterungen der Peaks im Beugungsmuster hervorrufen. Bei einer Oberfläche mit zwei unbedeckten Lagen teilen sich die Peaks im Beugungsmuster in zwei Teile: Der erste Teil wird δ-Peak genannt und entspricht einer Elektronenbeugung an einer Terrasse auf einer perfekten flachen Oberfläche. Der zweite Teil besteht aus einer breiten Schulter, die durch den Einfluss der Stufungen hervorgerufen wird. In Abbildung 2.8 ist das zu beobachtende Reflexprofil in Abhängigkeit einer in- oder out-Phase gezeigt. Die Beugungsbedingungen entscheiden über das Verhältnis von scharfen δ-Peaks und breiten Schultern im Beugungsmuster. Während in einer in-Phase nur ein δ-Peak zu erkennen ist, zeigt sich bei einer out-Phase eine breite Schulter. Zwischen der in- und out-Phase ergibt sich ein Beugungsmuster aus der Superposition von δ-Peak und Schulter, siehe Abbildung 2.8.

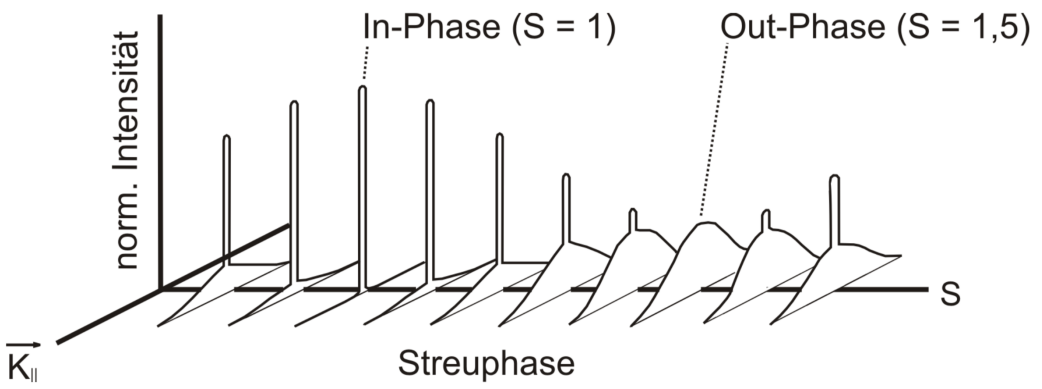


Abbildung 2.8.: Grafische Darstellung der Relfex-Profile einer gestuften Oberfläche. Es ist $\vec{K}_{\parallel}$ und die Streuphase S gegen die normierte Intentensität in willkürlichen Einheiten aufgetragen. Nach Referenz [14].

2.7. Morphologie vicinaler Oberflächen

In den vorherigen Kapiteln wurden ausschließlich perfekte Kristalloberflächen betrachtet, die aber im Realfall nicht zu beobachten sind. Reale Oberflächen weisen meist Stufen, Versetzungen oder andere Defekte auf. Eine gestufte Oberfläche kann als Faltung einer Terrasse und ihrem Übergitter beschrieben werden, dies ist in Abbildung 2.9 grafisch dargestellt.

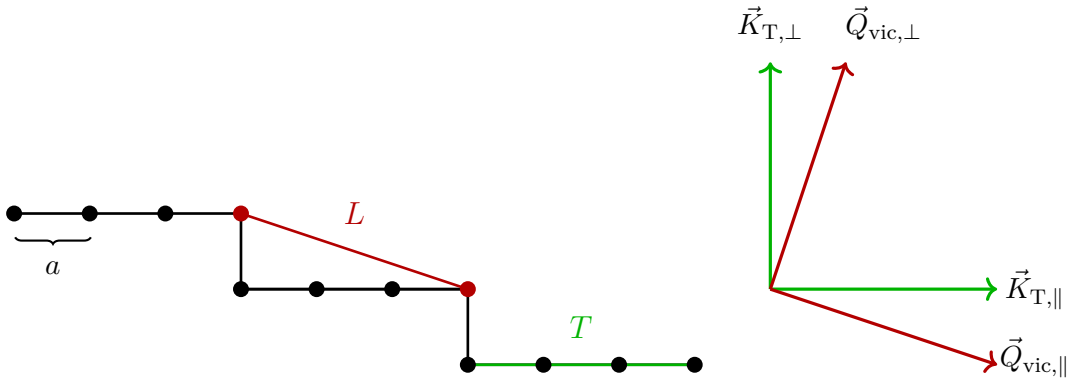


Abbildung 2.9.: Links: Skizze einer gestuften Oberfläche. a ist eine Gitterkonstante, L die Periode und T die Terrassenweite. Rechts: Koordinatensystem der Orientierungen der Oberflächen auf einer gestuften Oberfläche. Das in Grün eingezeichnete System bezieht sich auf die Terrassen und das in Rot eingezeichnete System auf die Periode.

L gibt dabei die Periodizität an und T die Terrassenweite. Der Vektor $\vec{K}_{\mathrm{T},\perp}$ gibt die Richtung senkrecht zur Terrasse und $\vec{K}_{\mathrm{T},\parallel}$ parallel dazu an. $\vec{Q}_{\mathrm{vic},\perp}$ beschreibt die Richtung senkrecht und $\vec{Q}_{\mathrm{vic},\parallel}$ parallel zur vicinalen Oberfläche. Die beiden Systeme stehen daher in folgender Beziehung zueinander:

$$\begin{aligned} K_{\mathrm{T},\parallel} &= Q_{\mathrm{vic},\parallel}\sin\theta + Q_{\mathrm{vic},\perp}\cos\theta \\ K_{\mathrm{T},\perp} &= -Q_{\mathrm{vic},\parallel}\cos\theta + Q_{\mathrm{vic},\perp}\sin\theta \end{aligned} \tag{2.31}$$

Eine einzelne Terrasse kann durch eine Fouriertransformation mit Hilfe der Mehrfachspalt-Interferenzfunktion

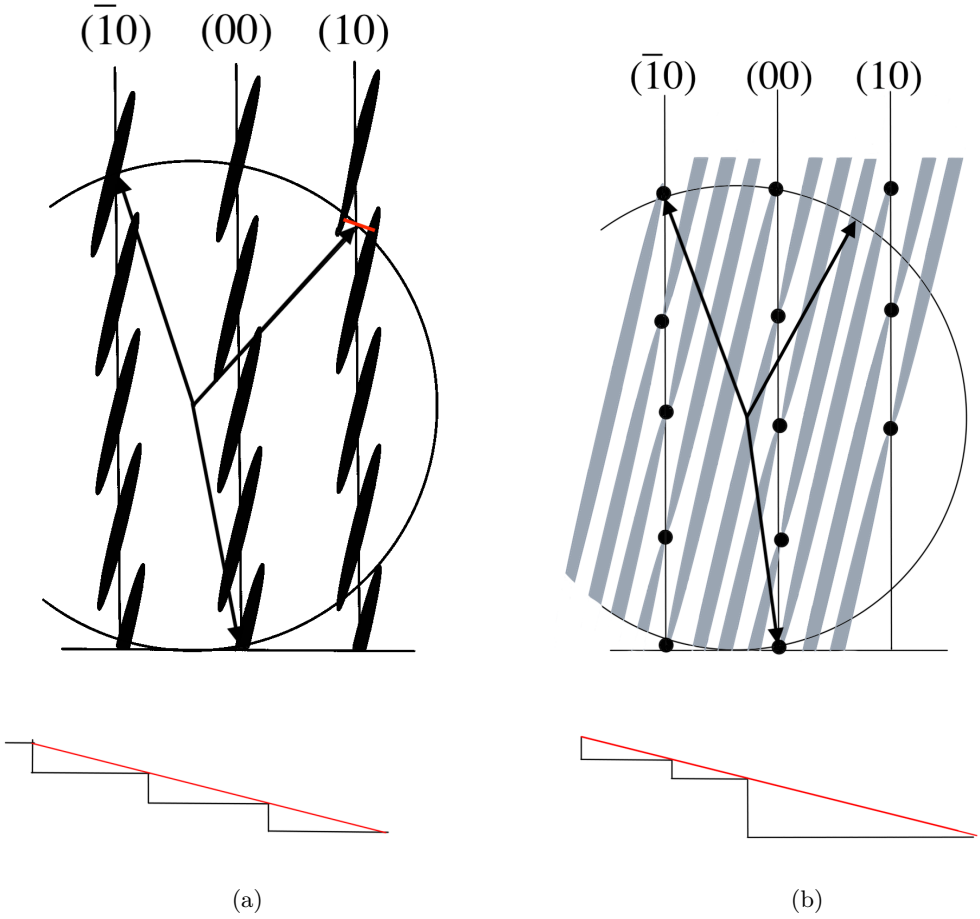
$$A(|\vec{K}_{\mathrm{T},\parallel}|) = \frac{\sin^2\left(\frac{N}{2}|\vec{K}_{\mathrm{T},\parallel}|a_0\right)}{\sin^2\left(\frac{1}{2}|\vec{K}_{\mathrm{T},\parallel}|a_0\right)} \tag{2.32}$$

beschrieben werden. N ist eine ganze Zahl und a_0 ist die Gitterkonstante und damit $T = Na_0$. Für das Übergitter ergibt sich aus der Fouriertransformation der Abstand zwischen den Stangen senkrecht zur gestuften Oberfläche

$$\Delta|\vec{Q}_{\mathrm{vic},\parallel}| = \frac{2\pi}{L}. \tag{2.33}$$

Dieser Ausdruck beschreibt demnach die Reflexaufspaltung im Beugungsmuster, siehe Ab-

bildung 2.10(a) in Rot markiert.
Bei einer regelmäßig gestuften Oberfläche ändert sich auch die Darstellung der Ewald-Konstruktion, diese ist in Abbildung 2.10(a) dargestellt. Das zu untersuchende Substrat ist dabei, wie in Abbildung 2.10 im kleinen Bild unten gezeigt, so orientiert, dass der eintreffende Elektronenstrahl senkrecht zur makroskopischen Oberfläche auftrifft. Da die Gitterpunkte im Real-Raum der Terrasse sehr dicht beieinander liegen folgt, dass die Beugungsstangen im reziproken Raum weit auseinander liegen (Abbildung 2.10, schwarze Linien). Bei der makroskopischen Oberfläche liegen die Gitterpunkte der Stufe sehr weit auseinander, in der Ewald-Konstruktion rücken daher die Beugungsstangen dicht zusammen.
Für die in-Phase-Bedingung nimmt Gleichung 2.32 ein Maximum bei $|\vec{K}_{\mathrm{T},\parallel}| = 2\pi/a_0$ an. Daraus resultiert, dass überall dort ein scharfer Beugungsreflex auftritt, wo die Stangen der makroskopischen Oberfläche die Stangen der Terrassen schneiden, dies ist in Abbildung 2.10 für den $(\bar{1}0)$-Reflex der Fall. Der Vektor $\vec{k}_{(10)}$ in Abbildung 2.10(a) trifft genau den Bereich zwischen zwei Stangen der makroskopischen Oberfläche. Für diesen Fall spaltet sich der Reflex in zwei gleich helle Reflexe auf, die den Abstand aus 2.33 besitzen. Im weiteren Verlauf werden zudem auch unregelmäßig gestufte Oberflächen behandelt, die zwar eine einheitliche vicinale Oberflächenorientierung aufweisen, sich dennoch die Struktur in Terrassenlänge und oder Stufenhöhe unterscheidet. Ein Beispiel ist in Abbildung 2.10(b) im kleinen unteren Bild gezeigt. Für eine unregelmäßig gestufte Oberfläche ändert sich erneut die Ewald-Konstruktion: Während die Ellipsen bei der regelmäßig gestuften Oberfläche die Intensität angeben, beschreiben diese bei einer unregelmäßig gestuften Oberfläche die Halbwertsbreite. Eine Darstellung davon ist in Abbildung 2.10(b) zu sehen, die kleinen schwarzen Kreise stellen dabei Punkte mit minimaler Halbwertsbreite dar. Auch in diesem Fall ist der Reflex $(\bar{1}0)$ scharf und der Reflex zwischen (00) und (10) erscheint diffus. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden andere Strukturen auf Oberflächen behandelt, die hier kurz erläutert werden sollen.
Kleine Bereiche mit einheitlicher Struktur auf einer Oberfläche werden *Domänen* genannt. Beim Auftreten mehrerer Domänen, unterscheidet man zwischen verschiedenen Struktureigenschaften. Ein Bruch einer einheitlichen Oberflächenstruktur kann durch sogenannte *Facetten* beschrieben werden. Facetten sind kleine Bereiche, die relativ zur Oberfläche geneigt sind und deren Orientierung von der restlichen Oberfläche abweicht. Die Orientierung der Facetten können mit Hilfe der Millerschen Indizes, wie in Abschnitt 2.3, beschrieben werden. Die Orientierung der Beugungsstangen bei Facetten ist senkrecht zur Facettenrichtung, wobei der Abstand der Beugungsstangen durch das Reziproke des horizontalen Gitterabstandes definiert ist.



(a) (b)

Abbildung 2.10.: Darstellung der Ewald-Konstruktion für a) eine regelmäßig gestufte und b) eine unregelmäßig gestufte Oberfläche. Der (00)-Reflex wird in beiden Fällen in der in-Phase getroffen, der Reflex ist demnach scharf. Der (10)-Relfex wird zwischen den Stangen des Übergitters getroffen und wird somit für die regelmäßig gestufte Oberfläche in zwei gleich scharfe Reflexe aufgeteilt, bei der unregelmäßig gestuften Oberfläche ergibt sich der Reflex zwischen der (00) und (10)-Stange ein diffuser Reflex. Die unteren Abbildungen zeigen die Seitenansicht der gestuften Oberflächen, wobei die makroskopische Oberfläche in Rot eingezeichnet ist. In Abbildung a) ist zudem in Rot die Reflexaufspaltung $\Delta|\vec{Q}_{\mathrm{vic},\parallel}|$ eingezeichent.

2.8. Analyse von Spot Profilen für vicinale Oberflächen

Zur Analyse von Spot Profilen für vicinale Oberflächen wird in der kinematischen Beugungstheorie eine Näherung verwendet, in der alle Säuleneinheitszellen senkrecht zur Oberfläche einen identischen Formfaktor besitzen. Die folgende Herleitung entstand in Kollaboration mit Prof. Dr. J. Wollschläger [13].
Um das Beugungsprofil zu bestimmen wird daher nur der Gitterfaktor betrachtet. In einem 1+1D-Modell (vgl. [13]) wird von einer Oberfläche gleicher Domänenorientierung ausgegangen, die durch Domänengrenzen getrennt sind. T_n gibt die Anzahl von Atomen innerhalb der Domäne an und kennzeichnet somit die Größe der n-ten Domäne. Der Abstand der Atome in einer Domäne wird durch die Gitterkonstante a gegeben. Es ist zu notieren, dass die Domänengrenzen nicht streuen aber beliebig orientiert sein können. Die Verschiebung der Domänengrenzen wird dabei durch den Verschiebungsvektor $\vec{u}$ beschrieben. Dies ist in Abbildung 2.11 für ein spezielles fcc-Gitter gezeigt.

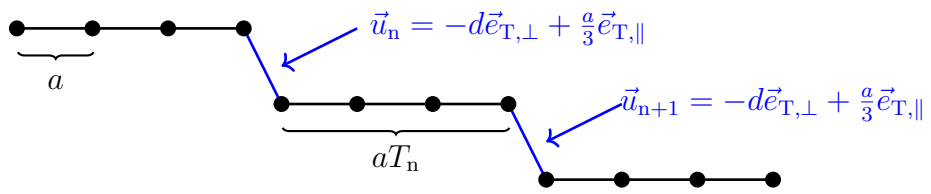


Abbildung 2.11.: Schematische Darstellung einer fcc(553) Struktur als vicinaler Oberfläche zu einer fcc(111) Struktur. Aufgrund der fcc-Struktur ergibt sich eine laterale Verschiebung, diese ist in blau markiert. Der dazugehörige Verschiebungsvektor für diese Struktur ist $\vec{u} = -d\vec{e}_{\mathrm{T},\perp} + \frac{a}{3}\vec{e}_{\mathrm{T},\parallel}$.

Zur Beschreibung des Gitterfaktors werden zudem charakteristische Funktionen verwendet, die sich aus den Fourier-Transformierten der entsprechenden Größenverteilung für Domänengrenzen $P_{DB}(\vec{u})$ und Domänen $P_D(T)$ ergeben:

$$\beta(\vec{K}) = \langle \exp^{\imath\vec{K}\vec{u}} \rangle = \sum P_{DB}(\vec{u}) \exp^{\imath\vec{K}\vec{u}} \tag{2.34}$$

$$\gamma(K_{\mathrm{T},\parallel}) = \langle \exp^{\imath aK_{\mathrm{T},\parallel}T} \rangle = \sum_{T=1} P_D(T) \exp^{\imath aK_{\mathrm{T},\parallel}T}\,. \tag{2.35}$$

$$\tag{2.36}$$

Nach Wollschläger [13] ergibt sich der Gitterfaktor zu:

$$G(\vec{K}) = \frac{1}{2(1-\cos aK_{\mathrm{T},\parallel})}\left[\frac{(1-\beta(\vec{K}))(1-\gamma(K_{\mathrm{T},\parallel}))}{1-\beta\vec{K}\gamma K_{\mathrm{T},\parallel}} + c.c.\right], \tag{2.37}$$

mit dem Streuvektor $\vec{K}$ und seinem parallelen Anteil $K_{\mathrm{T},\parallel}$. Dieser Ansatz wird für vicinale Oberflächen angewendet und liefert die charakteristische Funktion für die Verteilung der

Domänengrößen:

$$\beta(\vec{K}) = \beta(K_{\mathrm{T},\perp}) = \exp^{-\imath d K_{\mathrm{T},\perp} T} \tag{2.38}$$

Es ist zu notieren, dass hierbei vicinale Oberflächen mit Einfachstufen der Stufenhöhe d mit einer Domänengröße aT_{n} betrachtet werden. Außerdem wird angenommen, dass die Oberfläche ausschließlich aus Abwärtsstufen besteht, sodass sich die Verschiebung durch $\vec{u} = -\vec{e}_{\mathrm{T},\perp}$ beschreiben lässt und sich daher für die Verteilungsfunktion eine Delta-Funktion ergibt. Des Weiteren wird angenommen, dass die Terrassenweiten gepeakt sind, das heißt, dass die Standardabweichung σ klein gegenüber der mittleren Terrassenweite $\langle T \rangle$ ist. Weiter wird die Kumulantenentwicklung bestimmt und ferner mithilfe der Taylorreihenentwicklung der Cosinus-Funktion umgeformt.
Zur Bestimmung der Halbwertsbreite und Beschreibung des Beugungsprofils ist es sinnvoll, den Gitterfaktor in eine geeignete Form zu bringen. Dazu wird der Gitterfaktor mithilfe der Lorentzfunktion in die Form

$$G^{-1}(\vec{K}) \propto \kappa^2 + (K_{\mathrm{T},\parallel} - K_0)^2 \tag{2.39}$$

gebracht, wobei κ die halbe Halbwertsbreite und K_0 die Peakposition bezeichnet. Aus der Taylorreihenentwicklung für den zweiten Teil der Gleichung 2.39 ergibt sich:

$$N(K_{\mathrm{T},\parallel}, K_{\mathrm{T},\perp}) = \cosh(\sigma^2[1 - \cos aK_{\mathrm{T},\parallel}]) - \cos(aK_{\mathrm{T},\parallel}T - dK_{\mathrm{T},\perp}). \tag{2.40}$$

Für Gleichung 2.40 gilt, dass die Cosinus-Funktion schnell bezüglich $K_{\mathrm{T},\parallel}$ mit der Periode $2\pi/aT$ variiert und dass die Cosinus-Hyperbolicus-Funktion schwach variiert, wenn σ nicht zu groß ist. Da sich die Peakposition aus dem Maximum der Cosinus-Funktion ergibt, lässt sich daraus die Bragg-Positionen der n-ten Ordnung zu

$$\frac{aK_{\mathrm{T},\parallel}^{(n)}}{2\pi} = \frac{n + (dK_{\mathrm{T},\perp}/2\pi)}{T} \tag{2.41}$$

umformen. Die Stangen im reziproken ($K_{\mathrm{T},\parallel}$,$K_{\mathrm{T},\perp}$)-Raum verlaufen daher schräg und kreuzen die 3D-Bragg-Bedingungen, siehe Abbildung 2.10.
Für den Verlauf der Halbwertsbreite wird weiterhin angenommen, dass σ sehr klein ist und dass für das Argument der Cosinus-Funktion in Gleichung 2.40 die Bragg-Bedingung aus Gleichung 2.41 eingesetzt werden kann. Es ergibt sich dann für die halbe Halbwertsbreite auf der n-ten Bragg Stange:

$$\begin{aligned} \kappa_{\mathrm{n}} &= \frac{\sigma^2}{aT}\left[1 - \cos aK_{\mathrm{T},\parallel}^{(n)}\right] \\ &= \frac{\sigma^2}{aT}\left[1 - \cos\left(\frac{2\pi n + dK_{\mathrm{T},\perp}}{T}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.42}$$

Es wird deutlich, dass die Halbwertsbreite dann minimal wird, wenn das Argument der

Cosinus-Funktion ein Vielfaches von 2π ist:

$$\begin{aligned}\frac{2\pi n + dK_{\mathrm{T},\perp}}{T} &= 2\pi m \\ \frac{dK_{\mathrm{T},\perp}}{2\pi} &= mT - n \quad n, m \in \mathbb{N}.\end{aligned}$$

Auf die Ewald-Konstruktion bezogen bedeutet das, dass die n-te Bragg-Stange einen 3D-Bragg-Punkt schneidet, siehe Abbildung 2.10(b). Umgekehrt wird die Halbwertsbreite zwischen zwei Bragg-Punkten maximal, dies ist in Abbildung 2.10(b) für den Reflex zwischen der (00) und (10)-Stange der Fall.
Für eine vicinale Oberfläche ist es nützlich, in ein anderes Koordinatensystem überzugehen, dies ist in Abbildung 2.9 rechts in Rot grafisch dargestellt und wird im Folgenden „makroskopische“ Orientierung genannt. Die Richtungen hängen dabei wie in Gleichung 2.31 zusammen. Für den Verlauf der Halbwertsbreite einer vicinalen Oberfläche gilt nun das erläuterte Verhalten der Halbwertsbreite in den Q-Raum zu überführen. Es ergibt sich dann mit Gleichung 2.42:

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{n}} &= \frac{\sigma^2}{aT}\left[1 - \cos\left(aQ^{(n)}_{\mathrm{vic},\parallel}\cos\theta + aQ_{\mathrm{vic},\perp}\sin\theta\right)\right] \\ &= \frac{\sigma^2}{aT}\left[1 - \cos\left(2\pi\frac{a}{L}n + aQ_{\mathrm{vic},\perp}\sin\theta\right)\right]. \qquad (2.43)\end{aligned}$$

Als Bedingung für die in-Phase ergibt sich dann

$$Q^{(m)}_{\mathrm{vic},\perp} = \frac{2\pi}{a\sin\theta}m = \frac{2\pi}{c}m \qquad (2.44)$$

mit dem Lagenabstand $c = a\sin\theta$. Es kann daher eine „makroskopische“ Phase $S_{\mathrm{mak}} = cQ_{\mathrm{vic},\perp}/2\pi$ definiert werden mit der in-Phase Bedingung $S_{\mathrm{mak}} = m$ mit $m \in \mathbb{Z}$. Gleichung 2.43 kann damit in die Form

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{n}} &= \frac{\sigma^2}{aT}\left[1 - \cos\left(2\pi\frac{a}{L}n + cQ_{\mathrm{vic},\perp}\right)\right] \\ &= \frac{\sigma^2}{aT}\left[1 - \cos\left(2\pi\left(\frac{a}{L}n + S_{\mathrm{mak}}\right)\right)\right] \qquad (2.45)\end{aligned}$$

gebracht werden und beschreibt die halbe Halbwertsbreite in Abhängigkeit der „makroskopische“ Phase S_{mak}.

3. Experimentelle Grundlagen

In diesem Kapitel werden die experimentellen Grundlagen für diese Arbeit näher erläutert. Zunächst wird die Funktionsweise eines SPA-LEED-Instruments beschrieben. Weiter wird die Unverzichtbarkeit des Ultra-Hochvakuums für diese Experimente erklärt und die verwendete Ultra-Hochvakuum-Kammer beschrieben. Im Anschluss wird auf die Präparation der Probe eingegangen.

3.1. SPA-LEED und modifizierte Ewald-Konstruktion

In dieser Arbeit wird das sogenannte ***S**pot **P**rofil **A**nalysis*-LEED-Instrument (SPA-LEED-Instrument) verwendet. Dieses Instrument ist eine Weiterentwicklung des herkömmlichen LEED-Instruments und wurde von U. Scheithauer *et al.* entwickelt [10].
In Abbildung 3.1 ist das SPA-LEED-Instrument schematisch dargestellt. Die wesentlichen Bestandteile eines SPA-LEEDs sind die Elektronenkanone, die Oktopolplatten, die Kristalllinse und ein Channeltron, welches zur Detektion des gebeugten Elektronenstrahls dient und die Daten digital erfasst. Die Elektronenkanone besteht aus einem Filament als Kathode, einem Wehneltzylinder und elektrostatischen Linsen zur Fokussierung des Elektronenstrahls. Mit Hilfe der Elektronenkanone können Elektronen mit Energien von 5 eV bis 500 eV auf die Probe beschleunigt werden. Über ein System von Oktopolplatten kann der Elektronenstrahl bei Anlegen einer Spannung abgelenkt werden. Das System besteht dabei aus 3×8 Oktopolplatten, wobei die mittleren Platten geerdet sind. Wie in Abbildung 3.1 zu erkennen ist, ist der Winkel α zwischen dem Channeltron und der Elektronenkanone konstant und ist für diesen Aufbau fest eingestellt. Um den gesamten reziproken Raum der Probe abzutasten, muss der Winkel ϵ, mit dem der Elektronenstrahl auf die Probe trifft, variiert werden. Dies wird dadurch realisiert, dass die Spannung der Oktopolplatten verändert wird. Der an der Probe gebeugte Strahl wird dann im Winkel $\epsilon - \alpha$ zurück zum Channeltron gelenkt. Die Kristalllinsen vor der Probe dienen zur Fokussierung, auch hier kann die Fokussierung über eine Spannung passend eingestellt werden. Der wesentliche Unterschied zwischen dem SPA-LEED und dem herkömmlichen LEED besteht darin, dass bei dem SPA-LEED der (00)-Reflex nicht von der Elektronenkanone verdeckt wird. Zudem wird beim LEED der Winkel ϵ konstant gehalten und die gestreuten Elektronen werden über einen Schirm gleichzeitig aufgenommen. Die Schnittpunkte mit den Stangen, siehe Abbildung 2.5, geben dann die möglichen $\vec{k}$ an, bei denen Reflexe auftreten. Beim SPA-LEED ergibt sich die Ewald-Konstruktion aus der gemeinsamen Ro-

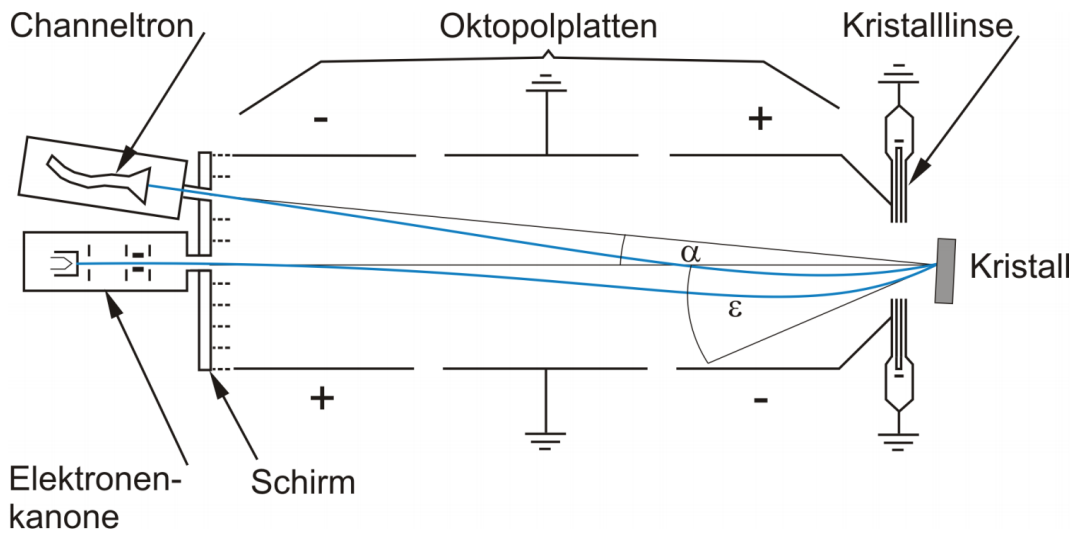


Abbildung 3.1.: Schematischer Aufbau des SPA-LEED-Instruments. Die einzelnen Komponeten sind im Text dazu näher erläutert. Entommen aus [4].

tation der Wellenzahlvektoren $\vec{k}_0$ und $\vec{k}$ unter konstantem Winkel $\Theta = 180° - \alpha$. Dadurch entsteht eine größere Ewald-Konstruktion, die somit auch den abgebildeten Ausschnitt im reziproken Raum vergrößert. Diese wird *modifizierte Ewald-Konstruktion* genannt und ist in Abbildung 3.2 grafisch dargestellt.
Durch den Einsatz der Oktopolplatten wird jedoch eine Verzerrung des Beugungsbildes erzeugt, da das Feld nur in der Mitte homogen ist. Am Rand ergeben sich durch die Inhomogenität Verzerrungen des Beugungsbildes, die bei der Auswertung berücksichtigt werden müssen. Das punktweise Abtasten des reziproken Raumes und die digitale Datenaufnahme ermöglicht außer den zweidimensionalen Aufnahmen auch eindimensionale Scans entlang beliebiger Achsen.
Durch Variation von ϵ mittels Änderung der Spannung an den Oktopolplatten und Channeltron ist eine bessere Auflösung in $\vec{k}_{||}$ möglich, sowie eine bessere quantitative Intensitätsmessung im Vergleich zum herkömmlichen LEED. Für diese Arbeit wird ein kommerzielles SPA-LEED-Instrument der Firma „Omicron“ verwendet. Zur Ansteuerung und Datenaufnahme wird eine in der AG Wollschläger und der Elektronikwerkstatt der Universität Osnabrück entwickelte Software verwendet.

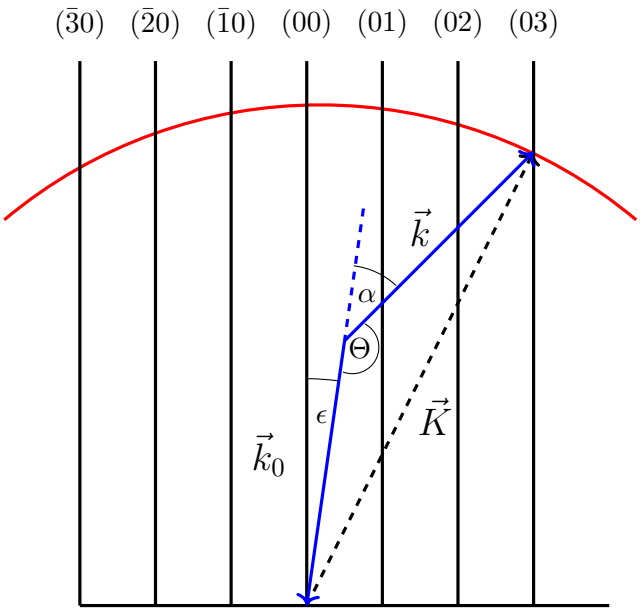


Abbildung 3.2.: Grafische Darstellung des Schnitts durch den reziproken Raum mit modifizierten Ewald-Konstruktion für ein SPA-LEED- Instrument. Der Winkel Θ zwischen den Vektoren $\vec{k}_0$ und $\vec{k}$ bleibt konstant und es gilt $\Theta = 180° - \alpha$. $\vec{K}$ ist der Streuvekor, im Fall einer konstruktiven Interferenz entspricht dieser dem Vektor für die Laue-Bedingung: $\vec{K} = \vec{k}_{\parallel} - \vec{k}_{0,\parallel} = \vec{G}_{\mathrm{hk}}$ aus Gleichung 2.13.

3.2. Ultra-Hochvakuum-Kammer

Für die Messungen mit dem SPA-LEED ist eine Oberfläche frei von Adsorbaten oder anderen Kontaminationen notwendig. Nach der kinetischen Gastheorie sind Gasatome stets in Bewegung und interagieren so mit den Oberflächenatomen der zu untersuchenden Oberfläche. Diese Interaktionen können Rekonstruktionen auslösen oder die periodischen Kristallstrukturen zerstören, was zu unerwünschten Messergebnissen führen kann. Die Monolagenzeit τ_{ML} ist die durchschnittliche Zeitdauer, in der die Oberfläche von Adsorbaten bedeckt wird. Sie wird nach [9] durch

$$\tau = \frac{n_{\mathrm{s}}}{j_{\mathrm{g}}} = \frac{n_{\mathrm{s}}\sqrt{2\pi m k_{\mathrm{B}} T}}{p} \tag{3.1}$$

beschrieben, wobei n_{s} die Dichte der Oberflächenatome, j_{g} die Teilchenstromdichte der Gasatome, m die Masse der Gasatome, k_{B} die Boltzmannkonstante, T die Temperatur und p der Druck ist. Für die Messungen ist somit ein niedriger Druck notwendig, um die Probe möglichst langanhaltend frei von Adsorbaten zu halten. Für diese Arbeit wird ein Druck von $\sim 10^{-9}$mbar benötigt, wodurch eine Durchführung in einer Ultra-Hochvakuum-Kammer (UHV-Kammer) notwendig ist. Der schematische Aufbau des Inneren der UHV-Kammer ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

Für die Erzeugung eines UHVs werden mehrere Pumpen benötigt, da eine einzelne Pumpe nicht den gesamten Druckbereich abdecken kann. Das Pumpsystem ist in Abbildung 3.3 rot gefärbt. In dieser Arbeit wird ein System aus einer Drehschieberpumpe, einer Turbomolekularpumpe, sowie einer Ionengetter- und Titan-Sublimationspumpe verwendet. Die Drehschieberpumpe wird für den Vordruck eingesetzt, um die Kammer vom Atmosphärendruck in ein Vorvakuum von bis zu 10^{-3}mbar zu bringen. Die

Turbomolekularpumpe arbeitet erst ab einem Druck von $< 5\,\mathrm{mbar}$, weshalb sie an der Drehschieberpumpe anschließt. Sie erreicht dabei einen Kammerdruck von bis zu 10^{-9}mbar und ist über ein Ventil mit Schleuse, Hauptkammer und Verdampfer verbunden. Der Arbeitsdruck von rund 10^{-10}mbar wird mit einer Ionengetter- und Titansublimationspumpe in der Hauptkammer erreicht.
Des Weiteren muss während der Messung die Kontrolle über den Druck gegeben sein, um bei einem Leck oder Ausfall der Pumpen den Druckanstieg bemerken zu können. Die Druckbedingungen können über zwei Druckmesser, ein Piranivakuummeter für den Vordruckbereich und ein Extraktor-Ionisationsvakuummeter im UHV-Bereich, kontrolliert werden.
Die Probe wird über eine Schleuse in das System gebracht, welche über ein Ventil vom Rest der Kammer abgetrennt ist, damit beim Einschleusen nicht die gesamte Kammer belüftet werden muss. Bevor die Schleuse zum Einsetzen einer Probe geöffnet wird, muss die Vorkammer belüftet werden, um die Pumpen und Druckmesser nicht zu beschädigen. Innerhalb der Kammer kann die Probe über einen Transferstab bewegt werden. In der Mitte der Kammer wird die Probe auf einen Schuh auf den Manipulator gesetzt. Um eine bestmögliche Position für die Messungen zu ermöglichen, kann die Probe mithilfe des Manipulators in fünf Freiheitsgraden positioniert werden. Es sind drei Translationen in $\mathrm{X}, \mathrm{Y}, \mathrm{Z}$-Richtung möglich, sowie Drehungen um zwei Winkel θ und ϕ, wobei eine Drehung um die Oberflächennormale nicht möglich ist. Zudem wird die Probe über Direktstrom geheizt. Die Temperatur kann dabei mit einem Pyrometer durch ein Fenster kontrolliert werden. An der Unterseite der Kammer befindet sich der Verdampfer, womit das Gold auf die Probe gedampft wird. Das SPA-LEED-Instrument ist an der Seite der Kammer montiert, welches zur Untersuchung der Probe dient.

3.3. Probenpräparation

Der Probenhalter ist in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt. Der Halter besteht aus einer Molybdänbasis, die es ermöglicht, den Probenhalter mit einem Transferstab in der Kammer zu bewegen. Die Probe wird mit zwei Klammern auf der Molybdänbasis mit Schrauben befestigt. Auf der einen Seite des Halters werden unter den Schrauben nicht leitende Keramik-Unterlegscheiben eingebaut, damit das Heizen mit Direktstrom möglich ist. Das zu untersuchende Substrat wird aus einem Wafer für den Probenhalter passend zugeschnitten. Die Größe der Probe beträgt circa (5×15)mm. Die zugeschnittene Probe wird dann auf die Halterung gesetzt und mit zwei Molybdänklammern auf die Basis geschraubt. Es ist darauf zu achten, dass die Klammern nicht zu fest sitzen, um ein Zerbrechen der Probe zu vermeiden, dennoch sollte die Probe fest genug sitzen, damit sie nicht aus dem Halter in die Kammer fällt.
Die Probe wird in die Schleuse auf einen Transferstab gesetzt und die Vorkammer auf

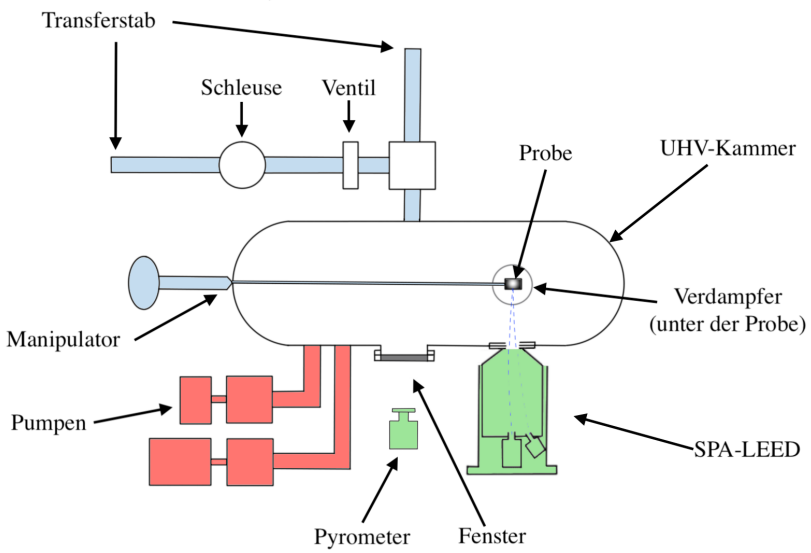


Abbildung 3.3.: Horizontaler Schnitt durch die UHV-Kammer. Die Pumpsysteme sind rot, die Messgeräte grün und der Probenmanipulator und Transferstab sind blau gefärbt. Die einzelnen Komponeten sind im Text dazu näher erläutert.

einen Druck von etwa 10^{-8}mbar gebracht. Anschließend wird das Ventil zur Hauptkammer geöffnet und die Probe über den Transferstab in die Hauptkammer auf den Manipulator gesetzt. Um eine möglichst adsorbatfreie Oberfläche zu gewährleisten wird die Probe über mehrere Stunden ausgeheizt. Dazu wird Direktstrom über die Basis durch die Probe geleitet und heizt sie somit über den Eigenwiderstand auf. Zum Ausheizen wird die Probe für etwa 16 Stunden auf eine Temperatur von 600 °C erhitzt. Die Temperatur kann dabei, wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, mit einem Pyrometer kontrolliert werden.
Nach dem Ausheizen folgt das Flashen der Probe, indem die Probe für wenige Sekunden auf 1150 °C erhitzt wird. Dieser Vorgang wird fünf mal wiederholt. Das Flashen dient dazu, die native SiO_2-Schicht und restliche Adsorbate von der Oberfläche zu entfernen.
Der in dieser Arbeit verwendete Verdampfer ist in Abbildung 3.5 schematisch dargestellt. Im Inneren des Verdampfers befindet sich ein Tiegel, in dem das zu verdampfende Gold gelagert ist. Dicht am Tiegel befindet sich das Filament, welches mit Hilfe des elektrischen Stroms geheizt wird und thermische Elektronen erzeugt. Folglich wird der Tiegel und das darin befindliche Gold erhitzt, bis es verdampft. Um eine Kontrolle über die Menge des Goldes beim Verdampfen zu gewährleisten, kann die Leistung des Filamentstroms passend eingestellt werden. Für diese Arbeit wurde eine Spannung von $U = 1\,\mathrm{kV}$ und ein Filamentstrom von $I_{\mathrm{Fil}} = 2.1\,\mathrm{A}$ eingestellt, daraus resultiert ein Emissionsstrom von $I = 32\,\mathrm{mA}$.
Zudem wird der Verdampfer mittels einer integrierten Wasserkühlung gekühlt. Dadurch wird verhindert, dass der Verdampfer zu heiß wird und dadurch der Druck in der

Kammer ansteigt. Damit die Probe kontrolliert und nicht dauerhaft mit Gold bedampft wird, kann der Goldstrom über einen Shutter unterbrochen werden. Mit Hilfe eines Schwingquarzes wird die Menge von verdampftem Gold bestimmt. Leider ist dieser während eines Vorversuches beschädigt worden und kann somit für die Hauptmessung nicht verwendet werden. Für die Menge des verdampften Goldes wird die Zeit in Sekunden des Aufdampfens als Maß genommen. Wie lange die Probe bedampft wird gibt zwar keine Information über die absolute Menge von verdampftem Gold, dennoch gibt sie eine Aussage über die relativ aufgedampfte Goldmenge. Die Angabe der Zeit kann demnach in dieser Arbeit für eine Reproduktion gleicher Goldbedeckung auf der Probe genutzt werden.

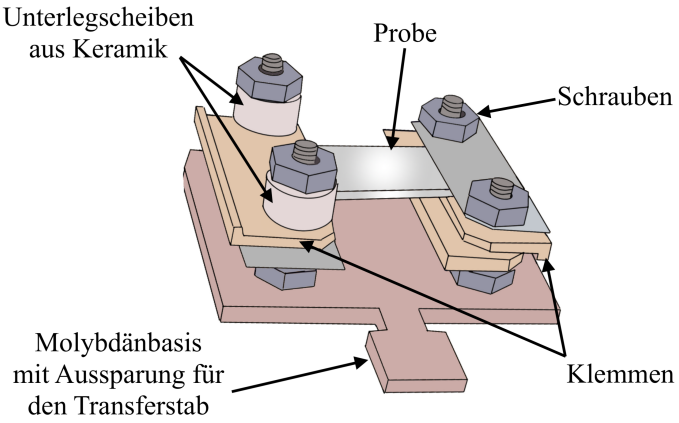


Abbildung 3.4.: Grafische Darstellung des in dieser Arbeit verwendeten Probenhalters. Die einzelnen Komponenten sind im Text dazu erklärt.

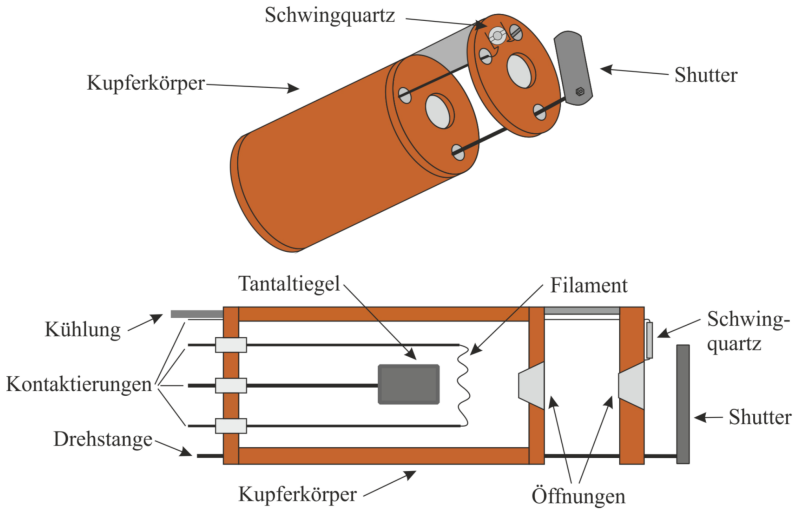


Abbildung 3.5.: Schematische Darstellung des Verdampfers. Oben ist eine Seitenansicht des Verdampfers gezeigt und unten ein vertiakler Schnitt. Die einzelnen Komponenten sind im Text dazu näher erläutert. Entnommen aus [11].

4. Materialsystem

In diesem Kapitel werden die in dieser Arbeit verwendeten Substrate vorgestellt und deren Eigenschaften und Struktur erläutert. Zunächst wird auf reines Silizium eingegangen und später auf eine mit Gold bedeckte Si-Oberfläche.

4.1. Das Substrat: Silizium

Silizium gehört zu den Halbmetallen der vierten Hauptgruppe des Periodensystems und kristallisiert in Diamantstruktur. Hierbei handelt es sich um zwei ineinander gestellte kubisch-flächenzentrierter Gitter, die jeweils um 1/4 der Raumdiagonalen verschoben sind. Die Basis von Silizium besteht daher aus zwei Atomen $\{(0,0,0),(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})\}$ mit einer Gitterkonstanten von $a_{0,\mathrm{Si}} = 5.43\,\text{Å}$ [9]. Abbildung 4.1 a) zeigt die dreidimensionale Einheitszelle von Silizium mit eingezeichneter [111]-Richtung.

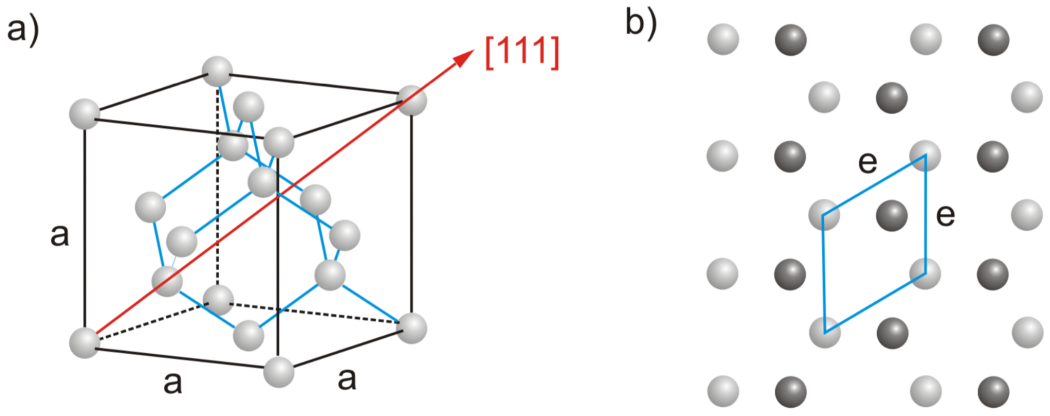


Abbildung 4.1.: a) Grafische Darstellung der dreidimensionalen Einheitszelle von Silizium. In rot ist die [111]-Richtung eingezeichnet. b) In blau: zweidimensionale Einheitszelle der unrekonstruierten Si(111)-Oberfläche. Die hell eingefärbten Kreise entsprechen den Silizium-Oberflächenatomen und die dunkel eingefärbten Kreise entsprechen den Atomen in der darunter liegenden Schicht. Entnommen aus [4].

4.1.1. Si(111)

Si(111) entsteht, wenn der Einkristall entlang der Raumdiagonalen (111) geschnitten wird. Die unrekonstruierte Si(111)-Oberfläche hat eine hexagonalen Einheitszelle mit einer Gitterkonstanten von $e = 3.84\,\text{Å}$ (Abbildung 4.1 b)) [4]. Einige Atome sind nicht

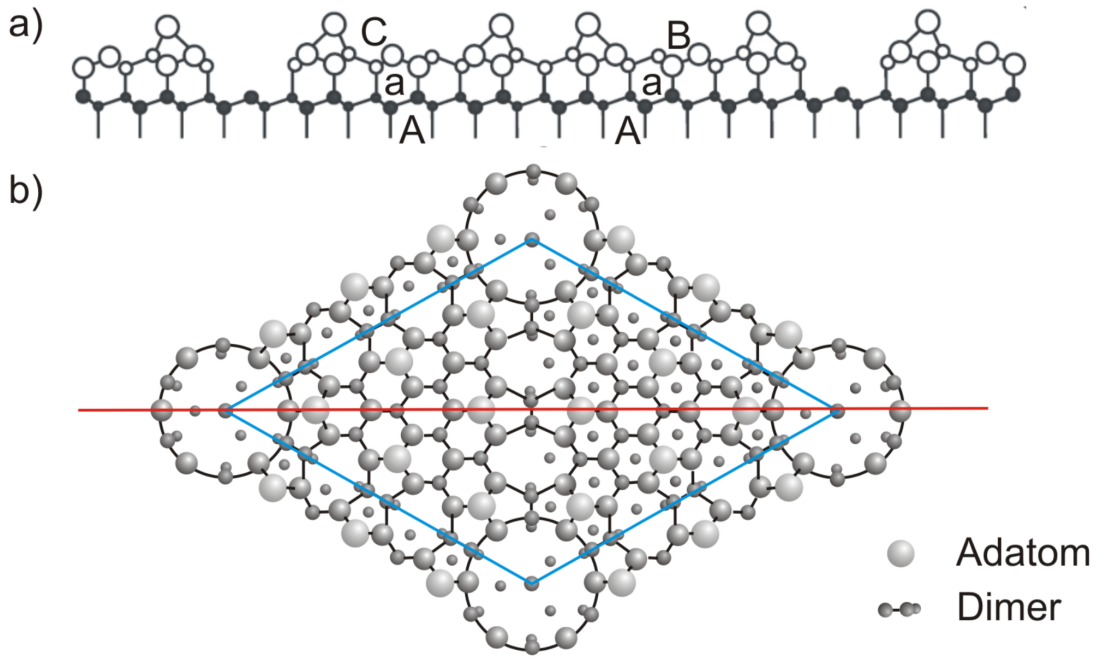


Abbildung 4.2.: Schematische Darstellung des DAS-Modells. a) Seitenansicht der rekonstruierten (7×7)-Überstruktur (rote Linie in b)). b) Draufsicht der (7×7)-Rekonstruktion mit in blau eingezeichneter Einheitszelle. Die hellgrauen großen Kreise deuten Adatome an und die dunklen kleineren Kreise Dimere. Entnommen aus [4].

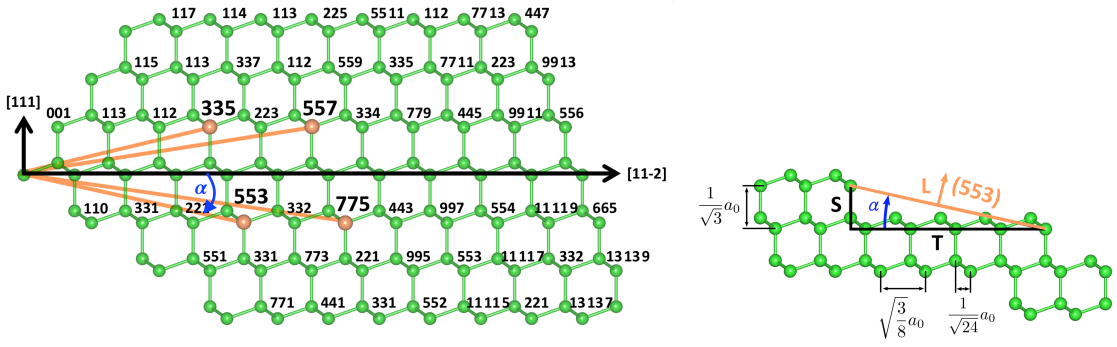
vollständig gebunden, weshalb diese Oberflächenstruktur energetische ungünstig ist. Die Si(111)-Oberfläche weist aus diesem Grund zwei verschiedene Rekonstruktionen auf: Eine (2×1)- und eine (7×7)-Rekonstruktion [9]. Die (2×1)-Rekonstruktion ist metastabil und geht ab einer Temperatur von 400 °C in die (7×7)-Rekonstruktion über. Für die (7×7)-Rekonstruktion wurde 1985 von Takayanagi *et al.* [9] das ***d**imer-**a**datom-**s**tacking fault model* (DAS-Modell) vorgeschlagen. Das DAS-Modell ist in Abbildung 4.2 dargestellt.
Das DAS-Modell ist eine Beschreibung der Einheitszelle der (7×7)-Rekonstruktion der Si(111)-Struktur. Jede Einheitszelle besitzt 12 Adatome und zwei dreieckige Unterzellen, wobei eine der Zellen einen Stapelfehler hat (Abbildung 4.2 a)). Zudem besitzt jede Einheitszelle neun Dimere, diese begrenzen jeweils die dreieckigen Unterzellen. An den Ecken der Einheitszelle befinden sich Ecklöcher. In der nicht rekonstrukierten Si(111)-(7×7)-Einheitszelle sind 49 ungesättigte Bindungen vorhanden, mithilfe des DAS-Modells kann die Anzahl an ungesättigten Bindungen auf 19 reduziert werden [9]. Dieses Modell bietet daher eine Kristallstruktur mit einer geringeren Oberflächenenergie und somit auch eine größere Stabilität der Struktur. Die Einheitszelle der (7×7)-Rekonstruktion ist somit siebenmal größer als die der unrekonstruierten Einheitszelle mit einer Gitterkonstanten von $e_{\text{rekonst.}} = 26.88\,\text{Å}$, sie ist in Abbildung 4.2 blau eingezeichnet. In Abbildung 4.4 ist eine SPA-LEED-Aufnahme von Si(111) dargestellt, die Einheitszelle ist hier in Grün eingezeichnet.

4.1.2. Si(553)

Si(553) gehört zu den vicinalen Oberflächen, also eine Oberfläche mit atomare Stufen. Zur Herstellung dieser Strukturen wird der Si-Einkristall entlang der [11$\bar{2}$]-Richtung unter einem Winkel α geschnitten. In Abbildung 4.3(a) ist eine schematische Seitenansicht eines Si-Kristalls mit unterschiedlichen Schneidwinkeln dargestellt. Für die Herstellung einer Si(553)-Oberfläche wird der Einkristall unter dem Winkel $\alpha = 12.27°$ geschnitten, auf der Terrasse einer Si(553)-Oberfläche befindet sich wieder eine Si(111)-Struktur. Durch Variation des Schneidwinkels α können unterschiedlich gestufte Silizium-Oberflächen erzeugt werden. Der Winkel α gibt daher auch Aussagen über die Indizierung hhk der Oberfläche, sowie die Terrassenweite T und die Periode L. Die Terrassenweite T und die Periode L für eine (hhk)-Struktur lassen sich nach [1] allgemein mit

$$L^2 = S^2 + T^2 = \left(\frac{|h-k|}{2\sqrt{3}} \cdot a_{0,\mathrm{Si}}\right)^2 + \left(\left[\frac{2h}{3} + \frac{k}{3}\right]\sqrt{\frac{3}{8}} \cdot a_{0,\mathrm{Si}}\right) \quad k = h \pm 2n \tag{4.1}$$

bestimmen. S ist hier die Stufenhöhe, n eine ganze Zahl und a_0 die Gitterkonstante von Silizium. Es ergibt sich somit für Si(553) eine Terrassenlänge von $T = 14.4\,\text{Å}$, eine Periode von $L = 14.7\,\text{Å}$ und eine Stufenhöhe von $S = 3.14\,\text{Å}$. Abbildung 4.3(b) zeigt die Seitenansicht einer Si(553)-Oberfläche mit den oben genannten Größen. In Abbildung 4.5 ist eine SPA-LEED Aufnahme von Substrat Si(553) nach dem Flash-Zyklus dargestellt. Die Probe ist so positioniert, dass die Elektronen senkrecht zur makroskopischen Oberfläche auftreffen, siehe Abbildung 4.5 b) im rechten kleinen Bild. In der Aufnahme lassen sich die Reflexgruppen erkennen, die durch die Reflexaufspaltung $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel}$ der gestuften Oberfläche hervorgerufen werden.



(a) (b)

Abbildung 4.3.: a) Schematische Darstellung der Seitenansicht eines Si-Kristalls. Eingezeichnet sind verschiedene Schnittwinkel in orange. Der Schnittwinkel α für Si(553) ist in blau eingezeichnet. b) Schematische Darstellung der Seitenansicht einer Si(553)-Oberfläche. Dabei ist S die Stufenhöhe, T die Terrassenlänge, L die Periode und α der Schneidwinkel. Außerdem sind diverse atomare Abstände in Einheiten der Gitterkonstanten $a_{0,\mathrm{Si}}$ eingezeichnet. Entnommen aus [1] und bearbeitet.

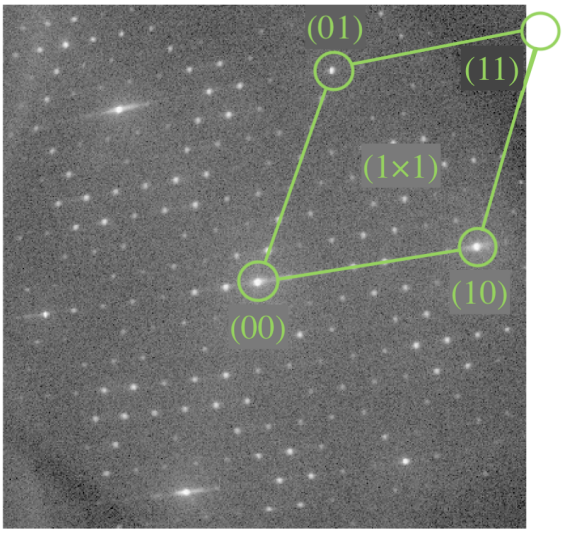


Abbildung 4.4.: SPA-LEED-Aufnahme einer geflashten Si(111)-Oberfläche, aufgenommen bei 160 eV. In grün ist die Einheitszelle eingezeichnet und die Hauptreflexe sind mit großen Kreisen markiert.

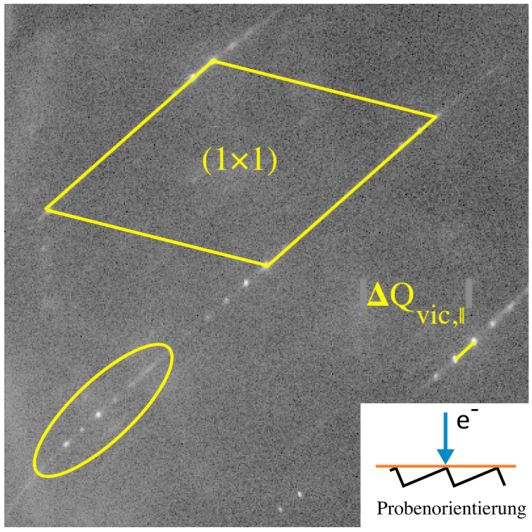


Abbildung 4.5.: SPA-LEED Aufname von Si(553), aufgenommen bei 137 eV. Die gelbe Raute markiert die (1×1) Einheitszelle, sowie die durch die Stufen bedingte Reflexaufpspaltung $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel}$ und Reflexgruppen in Gelb. Im kleinen Bild rechts ist die Probenorientierung gezeigt. Entnommen aus [1] und bearbeitet.

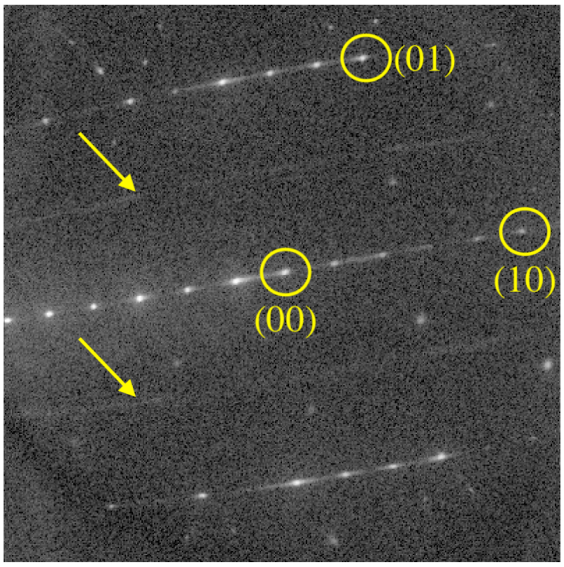


Abbildung 4.6.: SPA-LEED Aufname einer mit Gold bedeckten Si(111)-Oberfläche bei einer Bedeckung von 300 s. Durch die (5×2)-Überstruktur hervorgerufenden Reflexstreifen sind mit gelben Pfeilen markiert.

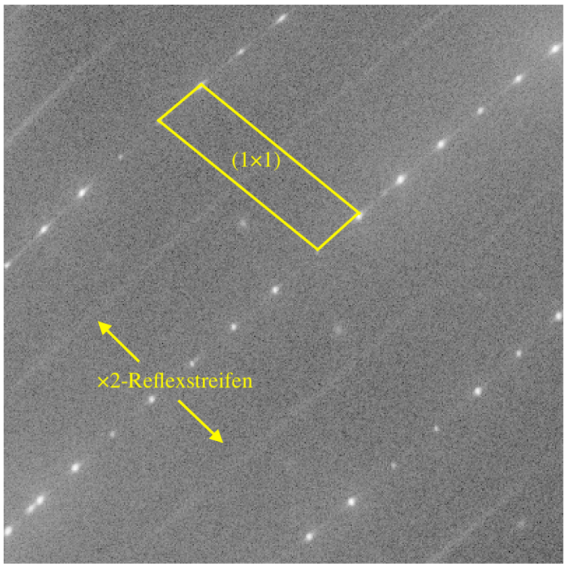


Abbildung 4.7.: SPA-LEED Aufname einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche, aufgenommen bei 203 eV und einer Bedeckung von 200 s. Die (1×1)-Einheitszelle und die durch die $\times2$-Überstruktur hervorgerufenen Reflexstreifen sind in Gelb markiert.

4.2. Gold auf Silizium

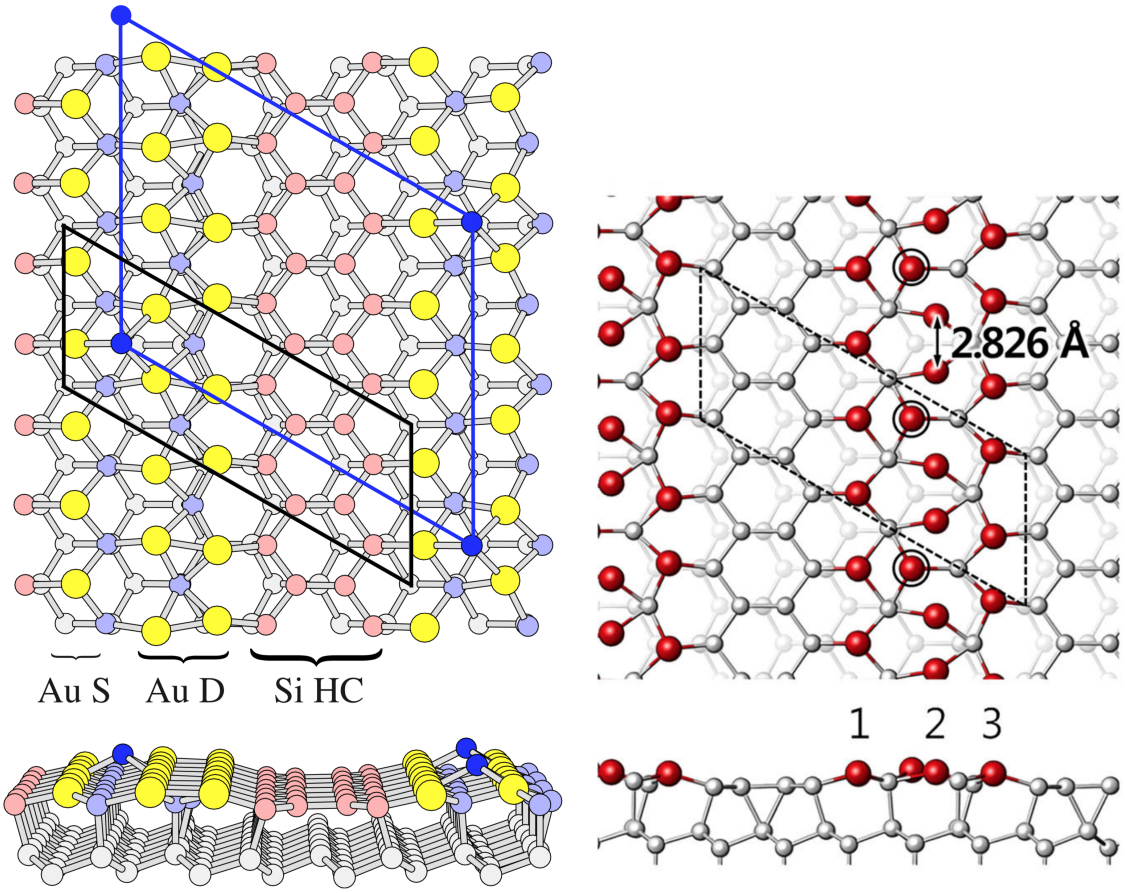
Gold hat das Symbol Au mit der Ordnungszahl 79 und steht in der ersten Nebengruppe im Periodensystem. Die Struktur ist kubisch flächenzentriert mit einer Gitterkonstanten von $a_{0,\mathrm{Au}} = 4.08\,\text{Å}$. Wird eine Si-Oberfläche mit Gold bedampft, bilden sich verschiedene Überstrukturen, die abhängig von der Orientierung (hhk) des Substrats und der aufgedampften Menge an Gold ist. Zur Beschreibung einer Schicht von Atomen auf einer Oberfläche wird der Begriff der *Monolage* (ML) verwendet. Bei einer Bedeckung von 1 ML ist jede (1×1)-Einheitszelle des unrekonstruierten Substrats mit einem Adsorbatatom oder Molekül bedeckt. Der Wert der ML ist somit ein zum Substrat relative Einheit.

4.2.1. Si(111)-Au

Wie in Kapitel 4.1.2 beschrieben, entsprechen die Terrassen der Si(553)-Oberfläche einer Si(111)-Struktur. Für die Untersuchung einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche ist es somit nützlich, zunächst die mit Gold bedeckte Si(111)-Struktur näher zu betrachten. Bei einer mit Gold bedeckten Si(111)-Oberfläche kommt es zu einer Si(111)-(5×2)-Au-Rekonstruktion, für die es zurzeit zwei verschiedene Strukturmodelle gibt. Das erste Modell ist das EBH-Modell nach Erwin, Barke und Himpsel [3], dieses ist in Abbildung 4.8(a) gezeigt. In diesem Modell wird von einer HCC-Struktur (Honeycomb chain) der Si-Atome mit einer Goldbedeckung von 0.6 ML ausgegangen, wobei in allen (5×2)-Elementarzellen sechs Si-Atome durch Au-Atome ersetzt werden. In Abbildung 4.8(a) ist zu sehen, dass die Au-Rekonstruktion aus einer Au-Einzelreihe (Au S), sowie einer Au-Doppelreihe (Au D) und einer Si-HC-Struktur besteht. Zwischen den zwei Goldreihen (Au S) und (Au D) befindet sich ein Si-Adatom mit einer (5×4)-Periodizität, die in Abbildung 4.8(a) in Blau eingezeichnet ist. Aufgrund der Dimerisierung und der leichten Rotation der Dimere der Au-Atome kommt es zu einer (5×2)-Periodizität, die sich im Beugungsbild anhand von Reflexstreifen erkennen lässt [3].
Das zweite Modell zur Beschreibung der Si(111)-(5×2)-Au-Rekonstruktion, ist das Strukturmodell nach Kwon-Kang (KK), dieses ist in Abbildung 4.8(b) dargestellt. Auch in diesem Modell wird von einer HCC-Struktur der Si-Atome ausgegangen. Der Unterschied zu dem EBH-Modell ist aber, dass sich bei dem KK-Modell in jeder (5×2)-Einheitszelle ein weiteres Au-Atom zwischen der Einzel- und Doppelreihe befindet. Die Goldbedeckung entspricht demnach 0.7 ML. Auch in diesem Fall führt die leichte Rotation der Au-Dimere zu einer (5×2)-Überstruktur. Eine SPA-LEED-Aufnahme einer mit Gold bedeckten Si(111)-Oberfläche ist in Abbildung 4.6 zu sehen. Aufgrund des Si-Adatoms im EBH-Modell kommt es zu einer (5×2)-Überstruktur, die sich im Beugungsbild als Streifen zwischen den Hauptreflexen erkennen lässt, diese sind in Abbildung 4.6 mit gelben Pfeilen markiert. Wie in der SPA-LEED-Aufnahme zu sehen, bilden sich keine scharfen Reflexe, sondern Reflexstreifen aus. Dies lässt darauf schließen, dass benachbarte Au-Kettenstrukturen keine feste Phasenbeziehung zueinander haben und gegeneinander verschoben sind.

4.2.2. Si(553)-Au

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Gold Bedeckung einer Si(553)-Oberfläche, die in dieser Arbeit von größter Bedeutung ist. Die Struktur einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche hängt stark von ihrer Bedeckung ab. Das von Krawiec [7] entwickelte Strukturmodell ist in Abbildung 4.9(a) schematisch dargestellt und geht von einer Au-Bedeckung von 0.48 ML aus, was zwei Au-Atomen pro Einheitszelle entspricht. Auf jeder (111)-Terrasse der Si(553)-Oberfläche befinden sich Au-Dimer-Ketten und eine HCC-Struktur der Si-Atome am Rand der Stufenkante. Eine SPA-LEED-Aufnahme einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche ist in Abbildung 4.7 zu sehen, wobei die Stufenkantenrichtung im Real-Raum senkrecht zu den Reflexstreifen im Beugungsbild steht.
Wie im Modell 4.9(a) zu sehen, sind die Au-Dimere leicht gegeneinander verkippt, was eine Periodenverdopplung entlang der Kettenrichtung hervorruft. Folglich bilden sich $\times 2$-Reflexstreifen, die im Beugungsbild parallel und zwischen den Hauptreflexen verlaufen, siehe Abbildung 4.7. Auch in diesem Fall bilden sich keine scharfen Reflexpunkte, sondern Reflexstreifen aus, da ebenso zwischen den Au-Ketten senkrecht zur Stufenrichtung keine feste Phasenbeziehung vorliegt.
Nach den Untersuchungen von Song *et al.* tritt die von Krawiec beobachtete Struktur auch für eine niedrigere Au-Bedeckung von 0.19 ML auf. Dieses Modell wird nach [12] als „Low Coverage Wire“ (LCW) bezeichnet und biete ebenfalls ein Modell zur Beschreibung stabiler Au-induzierter Nanodrähte. Ein weiteres Modell, ebenfalls von Song *et al.* entwickelt, mit einer höheren Bedeckung von 0.48 ML wird als „High Coverage Wire“ (HCW) bezeichnet. Diese Bezeichnungen für niedrige (LCW) und hohe Bedeckungen (HCW) sollen im folgenden Verlauf dieser Arbeit verwendet werden. Eine schematische Darstellung des Modells ist in Abbildung 4.9(b) gezeigt. Auswertungen nach [12] mit dem ***S****canning* ***T****unneling* ***M****icroscope* (STM) haben ergeben, dass bei den LCWs die Stufen der Si(553)-Oberfläche alternierend mit Gold bedeckt sind und sich ebenfalls die Terrassenweite ändert. Die mit Gold bedeckte Stufe hat eine Länge von $4\frac{1}{3}a_{\perp}$ und die unbedeckte Stufe eine Länge von $5\frac{1}{3}a_{\perp}$ mit einem Neigungswinkel von 10° bzw. 12.2°, dies ist ebenfalls in Abbildung 4.9(c) links dargestellt [12]. $a_{\perp}$ bezeichnet hier die Länge einer Einheitszelle in $[11\bar{2}]$-Richtung. Bei den HCWs haben STM-Auswertungen ergeben, dass bei höheren Bedeckungen jede Stufe mit Au bedeckt ist und somit die Terrassenweite für jede Stufe $4\frac{1}{3}a_{\perp}$ beträgt [12], dies ist in Abbildung 4.9(c) im rechten Bild gezeigt. Dadurch, dass bei den LCWs die Stufen alternierend mit Gold bedeckt sind, ist der Abstand zwischen den Au-Ketten größer als dort, wo in den HCWs jede Stufe mit Gold bedeckt ist. Für das Beugungsbild folgt, dass der Abstand der Reflexe auf der Haupt- und Nebenachse bei den LCWs kleiner ist als bei den HCWs.
Bei höheren Bedeckungen als 1 ML wurde die Bildung von Facetten mit einer Orientierung (331) beobachtet [5]. Genauere Modelle dieser Struktur liegen nicht vor.



(a) EBH-Modell (b) KK-Modell

Abbildung 4.8.: a) Schematische Darstellung einer Si(111)-(5 × 2)-Au-Rekonstruktion mit einer Goldbedeckung von 0.6 ML. Große gelbe Kugel stellen Au-Atome dar, kleine hellblaue oder rote Kugeln Si-Oberflächenatome und graue Kugeln Si-Volumenatome. Das Si-Adatom ist in Dunkelblau angedeutet. Außerdem sind die Au-Einzelreihe (S), die Au-Doppelreihe (D) und einer Si-HCC-Struktur dargestellt. Die (5 × 2) Elementarzelle ist in schwarz eingezeichnet und die (5 × 4) in Dunkelblau. Entnommen aus [3] und bearbeitet. b) Schematische Darstellung des KK-Modells für eine (5 × 2)-Überstruktur. Die sieben Au-Atome pro Einheitszelle sind in rot dargestellt und die Si-Atome in grau. Das zum EBH-Modell zusätzliche Au-Atom ist mit einem schwarzen Kreis markiert. Entnommen aus [8].

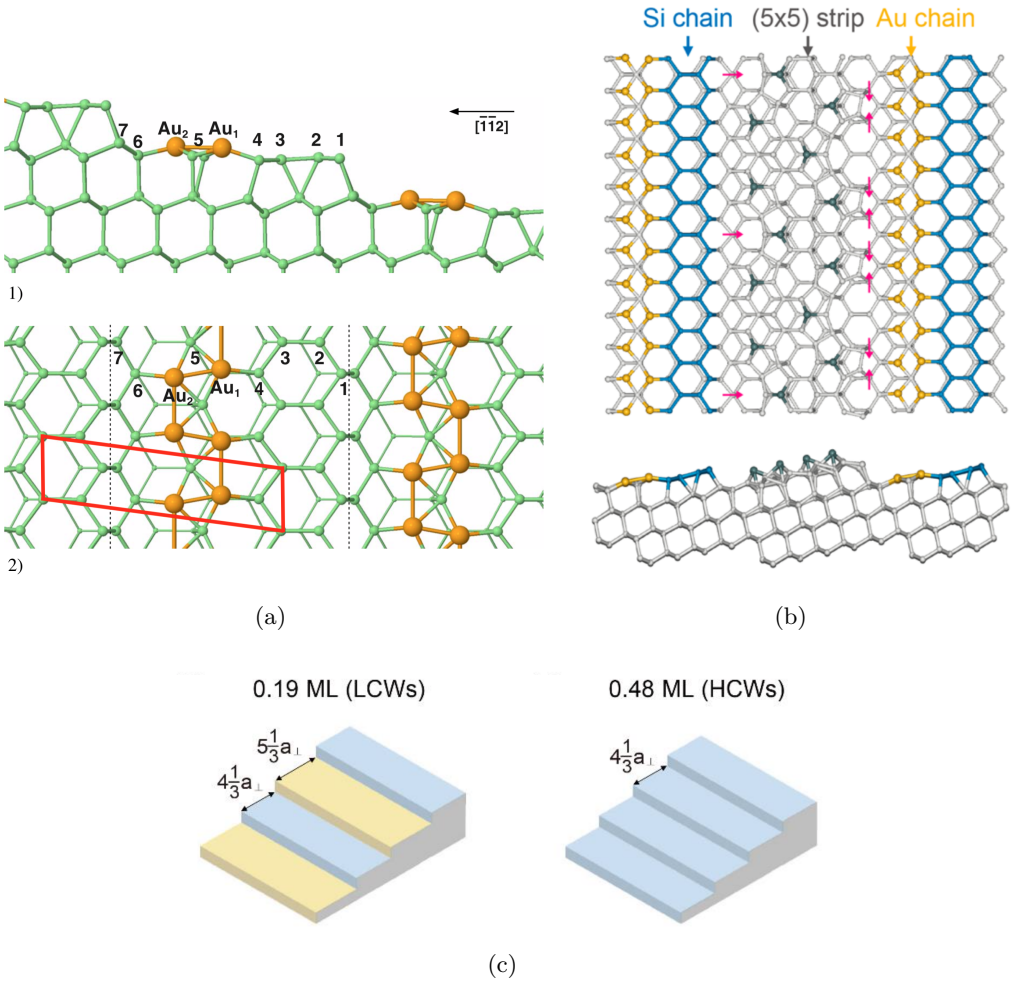


Abbildung 4.9.: a) Schematische Darstellung einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Abbildung 1) zeigt eine Seitenansicht und 2) die Aufsicht. Die Label $1-7$ stehen für die Si-Oberflächen-Atome und Au_1 und Au_2 sind die Gold-Atome. Die (1×1)-Einheitszelle ist in Rot markiert und die Stufenkanten sind mit gestrichelten Linien angedeutet. Entnommen aus [7] und bearbeitet. b) Aufsicht und Seitenansicht einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche für das LCW-Modell nach Song *et al.*. Die grauen und blauen Kugeln korrespondieren zu Si-Atomen und die gelben Kreise deuten Au-Atome an. Entnommen aus [12]. c) Schematische Darstellung Au-induzierter Nanodrähte auf Si(553). Die LCWs sind links und die HCWs rechts gezeigt. Die blauen Stufen deuten dabei mit Au bedeckte Stufen und gelbe Stufen reine Si-Stufen an. Entnommen aus [12].

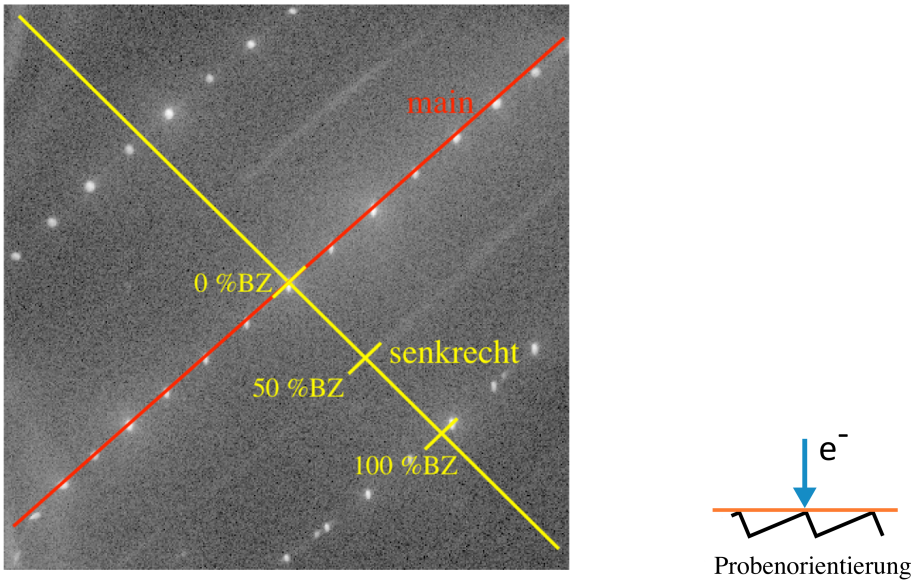
5. Ergebnisse der Messungen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse aus der Messungen vorgestellt und ausgewertet.

5.1. Messprinzip und Auswertungsmethodik

Für die Hauptmessungen muss zunächst die Energie ermittelt werden, mit der die Messungen durchgeführt werden sollen. In dieser Arbeit wird die Energie empirisch bestimmt, indem zunächst Aufnahmen vom reinen Substrat bei verschiedenen Energien im Bereich von 80 eV bis 280 eV erstellt werden. Es wird dann die Energie gewählt, bei der die Intensitäten der Peaks hoch sind und das Rauschen gering ist, sodass ein klar zu erkennendes Beugungsbild aufgenommen wird. In diesem Energiebereich werden intensive Beugungsmuster bei den Energien 137 eV und 203 eV gewonnen, weshalb diese Energien für die Messungen in dieser Arbeit verwendet werden.
Für die Bedeckungsserie wird Gold auf die Si(553)-Oberfläche aufgedampft. Dazu werden Bedeckungszeiten von 120 s bis 420 s gewählt und die Bedeckung nach jedem Flash-Zyklus um 20 s erhöht. Für die Messung bei einer Probentemperatur von 600 °C wird zudem noch eine Bedeckung von 100 s durchgeführt, die aber für die anderen Temperaturen nicht mit eingebunden wird, da bei höheren Temperaturen die gewünschten Beugungsreflexe der $\times 2$-Überstruktur bei 100 s noch nicht sichtbar ist. Das Bedeckungsfenster ist entsprechend gewählt, da hier die $\times 2$-Reflexstreifen auftreten und diese exklusiv durch die gewünschte Struktur hervorgerufen werden. Ziel der Untersuchungen mit dieser Oberfläche ist es, die Parameter wie Bedeckung und Aufdampftemperatur so zu wählen, dass die Goldketten auf den Stufen möglichst lang und ohne Unterbrechungen und auf jeder Stufe vorliegen.
Wie bereits in Kapitel 3.3 erläutert, wird die Probe während des Aufdampfens geheizt. Die Temperatur orientiert sich dabei an der Masterarbeit von Thorben Groven [5], weshalb drei verschiedene Probentemperaturen von 600 °C, 750 °C und 850 °C gewählt werden. Für jede Probentemperatur wird eine Bedeckungsserie erstellt, die sich aus den oben erläuterten Bedeckungen und den Energien 137 eV und 203 eV zusammensetzt. Wie sich in den Versuchen herausstellt, lassen sich bereits zwischen den Temperaturen von 600 °C und 750 °C keine strukturellen Unterschiede im Beugungsbild feststellen, weshalb bei der Probentemperatur von 850 °C nur eine Bedeckung von 180 s für beide Energien durchgeführt wird. Die Messungen selbst finden bei Raumtemperatur statt.
Für jede Bedeckungsszeit, Energie und Temperatur wird eine 2D-Aufnahme mit der SPA-LEED-Apparatur erstellt. In Kapitel 3.1 wurde erläutert, dass mit der SPA-LEED-

Apparatur auch eindimensionale Scans (Linescans) möglich sind. In dieser Arbeit werden zu jeder 2D-Aufnahme zwei Linescans erstellt, die eine bestimmte Orientierung besitzen. Der erste Scan wird entlang der Hauptachse erstellt und bietet Informationen über die Beugungsreflexe auf der Hauptachse. Dieser wird im Folgenden als *main-Messung* bezeichnet. Der zweite Scan wird um 90° zur main-Messung gedreht und ermöglicht es, die für diese Arbeit relevanten Informationen über die Reflexstreifen zu erhalten, die von der $\times$2-Überstruktur rühren. Dieser Scan wird im Folgenden *senkrechte Messung* genannt. In Abbildung 5.1(a) sind diese Scanrichtungen farbig eingezeichnet. In Abbildung 5.1(b) ist zudem die Orientierung der Probe während der Messungen schematisch gezeigt, indem der Elektronenstrahl senkrecht zur makroskopischen Oberfläche auftrifft.
Zur Auswertung der Scans wird ein in der AG-Wollschläger erstelltes Fitting-Tool genutzt. Dieses Tool ermöglicht es, die mit den Linescans erfassten Daten aus den Beugungsmustern auszuwerten. Die ermittelten Daten werden mit mehreren Lorentz-Funktionen gefittet, mit deren Hilfe Auskunft über bestimmte Parameter, wie zum Beispiel Halbwertsbreite (FWHM) oder Intensität (Int.) einzelner Peaks, im Beugungsmuster extrahiert werden kann. Ein Screenshot aus dem Fitting-Tool ist in Abbildung 5.2 gezeigt. Die Y-Achse ist dabei in log [Counts] skaliert und die X-Achse in % Brillouin-Zone (%BZ). Die Einheit %BZ bezieht sich dabei auf die Stange der Si(111)-Terrassen.
Bei allen aufgenommenen Daten handelt es sich nicht um exakte Werte. Jeder gemessene Wert enthält experimentell bedingte Fehler, die in den Messdaten berücksichtigt werden müssen. Zur besseren Übersicht innerhalb der Grafiken wird auf Fehlerbalken oder Ähnliches verzichtet. Wie bereits in Kapitel 3.1 angesprochen, wird durch den experimentellen Aufbau des SPA-LEEDs das Beugungsbild verzerrt, wodurch die abgebildeten Reflexe sich nicht an der tatsächlichen Stelle im reziproken Raum befinden. Diese Verzerrung wird besonders am Rand ab $\pm$100%BZ bemerkbar. Sie kann mithilfe des Fitting-Tools entzerrt werden, sodass bestimmte Beugungsreflexe an ihren eigentlichen Stellen aufzufinden sind.



(a) (b)

Abbildung 5.1.: (a) SPA-LEED-Aufnahme einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche aufgenommen bei 137 eV. In Rot ist die Scanrichtung der main-Messung und in Gelb die der senkrechten Messung eingezeichnet. (b) Schematische Darstellung der Orientierung der Probe in allen Messungen. Entnommen aus [1] und bearbeitet.

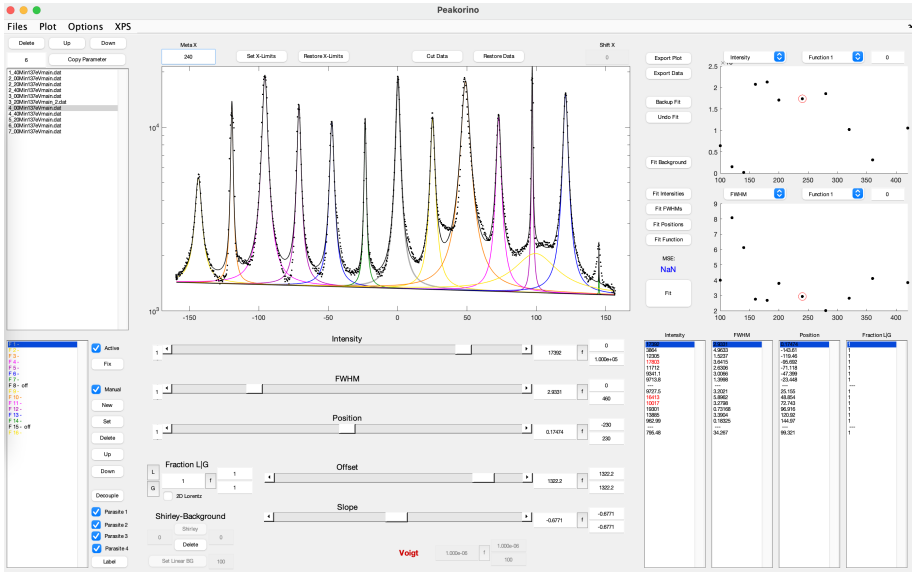


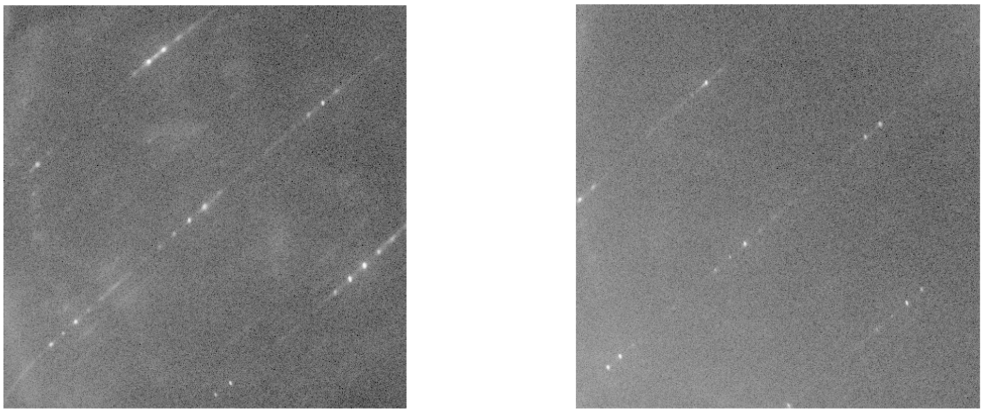
Abbildung 5.2.: Screenshot aus dem Fitting-Tool.

5.2. Bedeckungsserie Si(553)-Au

In diesem Kapitel werden die Bedeckungsserien der Probentemperaturen in einzelnen Kapiteln behandelt. Zunächst wird auf das reine Substrat Si(553) eingegangen.

5.2.1. Das Substrat Si(553)

In Abbildung 5.3 sind zwei 2D-Aufnahmen der geflashten Si(553)-Oberfläche dargestellt. In beiden Bildern sind die in Kapitel 4.1.2 behandelte stufenbedingte Reflexaufspaltung $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel}$ sowie die Reflexgruppen zu erkennen.



(a) (b)

Abbildung 5.3.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen des Substrats Si(553) in a) aufgenommen bei einer Elektronenenergie von 137 eV und in b) von 203 eV.

Auswertung

In Kapitel 2.8 wurde bereits auf die Analyse der Spot Profile eingegangen, die theoretischen Befunde sollen nun verifiziert werden. In diesem Fall bleibt die „makroskopische“ Phase $S_{\mathrm{mak}} = cQ_{\mathrm{vic},\perp}/\pi$, aufgrund der konstanten Elektronenenergien, konstant und die Halbwertsbreite wird in Abhängigkeit der Ordnung n der Bragg-Stange bestimmt. Für die in diesem Experiment verwendeten Energien 137 eV und 203 eV ergibt sich eine „makroskopische“ Phase von $S_{\mathrm{mak,137\,eV}} = 1.35$ und $S_{\mathrm{mak,203\,eV}} = 1.64$, wodurch sich nach Einsetzen in Gleichung 2.45 die Halbwertsbreiten in Abhängigkeit der Beugungsordnung n ergeben. Diese sind in Abbildung 5.5 grafisch ausgewertet. In Abbildung 5.4 ist zudem der reziproke Raum einer idealen Si(553)-Oberfläche mit den eingezeichneten Energien der beiden Messungen dargestellt. Im Vergleich der Verläufe der Halbwertsbreiten mit denen in Abbildung 5.4 wird deutlich, dass immer dort die Halbwertsbreite minimal ist, wo der Scan eine reziproke Stange der (111)-Terrassen schneidet. Diese Beobachtung kann beispielsweise für 137 eV für den (773)-Reflex beobachtet werden, da hier auch die Halbwertsbreite in Grafik 5.5 links für $n = 3$ gleich 0%BZ beträgt.

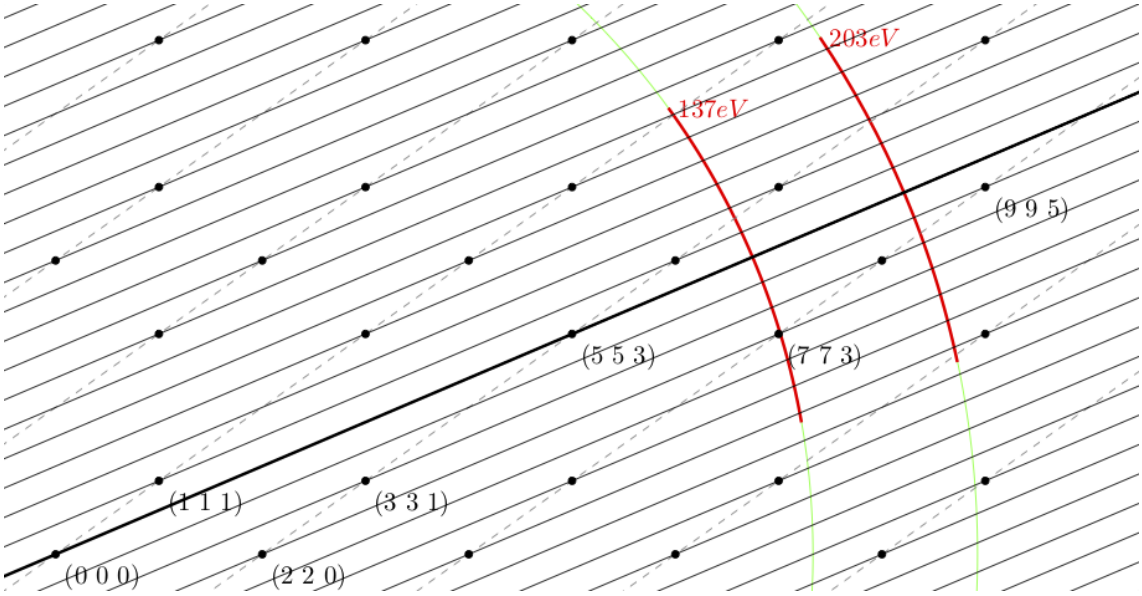


Abbildung 5.4.: Schematische Darstellung des reziproken Raumes des Si(553)-Substrats. Die grünen Streifen repräsentieren den Rand der Ewald-Kugel der einzelnen Energien. In Rot ist der mit dem Linescan erreichbaren Bereich auf der Ewald-Kugel eingezeichnet. Erstellt von Jascha Bahlmann.

In Abbildung 5.6 ist die Halbswertsbreite der Peaks aus den Messungen in %BZ gegen die Position für beide Energien aufgetragen. Allgemein lässt sich erkennen, dass die Verläufe aus der Theorie und der experimentellen Auswertung in manchen Punkten übereinstimmen. Dort, wo bereits in Grafik 5.5 die Halbwertsbreite minimal bestimmt ist, kann diese in Grafik 5.6 teilweise bestätigt werden. Es zeigt sich, dass die Halbwertsbreite im Mittel für den theoretischen Verlauf einen Wert bis maximal 2%BZ annimmt. In Abbildung 5.6 wird deutlich, dass die Halbwertsbreite im Mittel deutlich höher als 2%BZ ist und teilweise einen Wert von bis zu 6%BZ annimmt. Dennoch lassen sich anhand dieser Auswertungen die in Abbildung 5.3 abgebildeten Reflexgruppen gut ablesen. In jeder 2D-Aufnahme und den dazugehörigen Auswertungen lassen sich drei Bereiche mit Reflexgruppen und niedriger Halbwertsbreite erkennen, hier schneidet der Scan eine Si(111)-Stange. Für 137 eV ist die Halbwertsbreite um 0%BZ sehr gering und für 203 eV um -40% BZ, siehe Abbildung 5.6. In Kapitel 4 sind bereits die Parameter einer Si(553)-Oberfläche dargelegt worden. Der Abstand der Reflexe auf der reinen Si(553)-Oberfläche müsste, aufgrund des Verhältnisses $a_\perp/L = 0.225$ mit $a_\perp = a_{0,\mathrm{Si}}\sqrt{3/8} = 3.32\,\text{Å}$, $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel} = 22.5\%\mathrm{BZ}$ betragen. Bei einem Terrassenabstand von $4\frac{1}{3}a_\perp$ ergibt sich ein Reflexabstand von $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel} = 23.1\%\mathrm{BZ}$, der somit in diese Größenordnung passt. Aus Abbildung 5.6 wird ersichtlich, dass der experimentell bestimmte Wert nur ca. 12.1%BZ beträgt und somit nicht mit dem theoretischen Wert übereinstimmt. Eine Begründung dafür könnte sein, dass auf der Oberfläche nicht wie zuvor angenommen Einfachstufen, sondern Doppelstufen vorliegen und somit die Periode größer ist als angenommen. Auf-

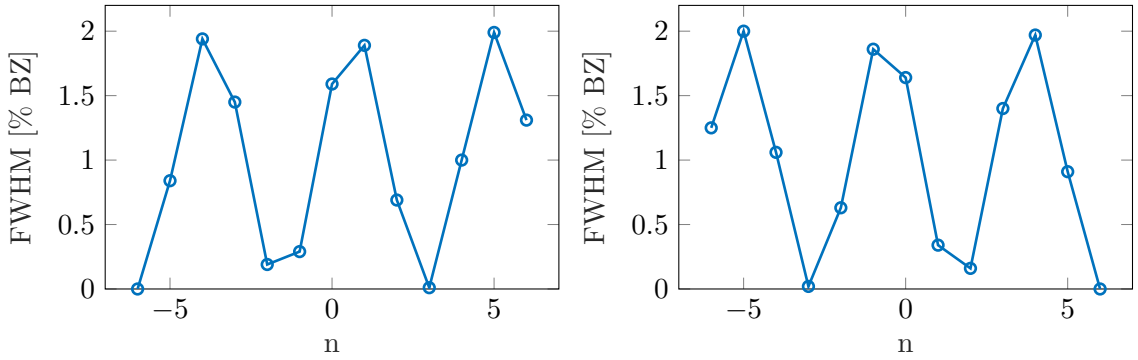


Abbildung 5.5.: Grafische Darstellung der Funktion $[1 - \cos(2\pi(\frac{a}{L}n + S_{\text{mak}}))]$ in Abhängigkeit der Beugungsordnung n der Bragg-Stange und der „makroskopischen“ Phase S_{mak} als Maß für die Halbwertsbreite der verschiedenen Beugungsreflexe eines 1D-Scans. Links: 137 eV, Rechts: 203 eV

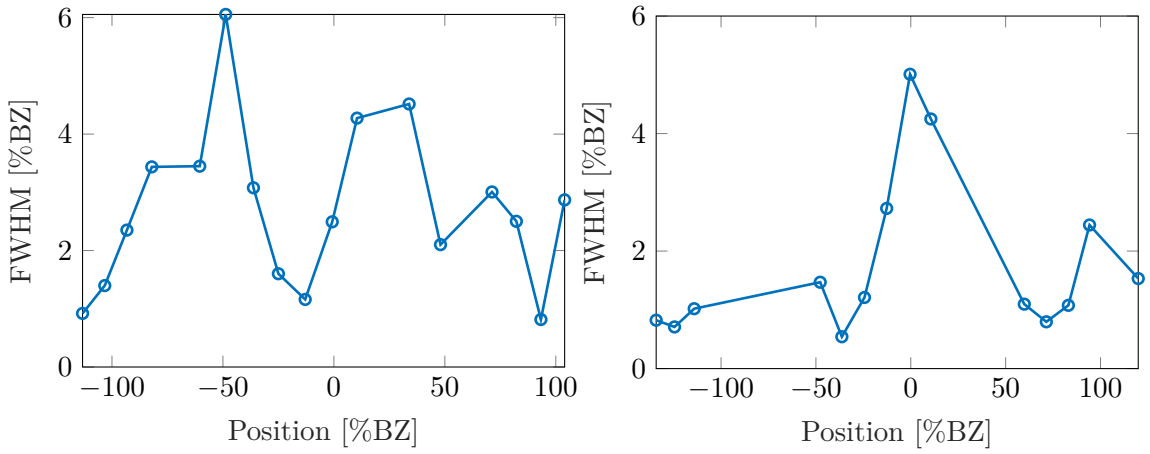


Abbildung 5.6.: Grafische Auswertung der geflashten Si(553) Probe für die main-Messung. Aufgetragen ist die Halbwertsbreite der Peaks gegen die Position bei einer Energie links von 137 eV und rechts von 203 eV.

grund des Reflexabstandes in Abbildung 5.6 entspricht hier ein Reflex bei 100%BZ dem Reflex Nummer ±7 in Abbildung 5.5.

5.2.2. Probentemperatur 600 °C

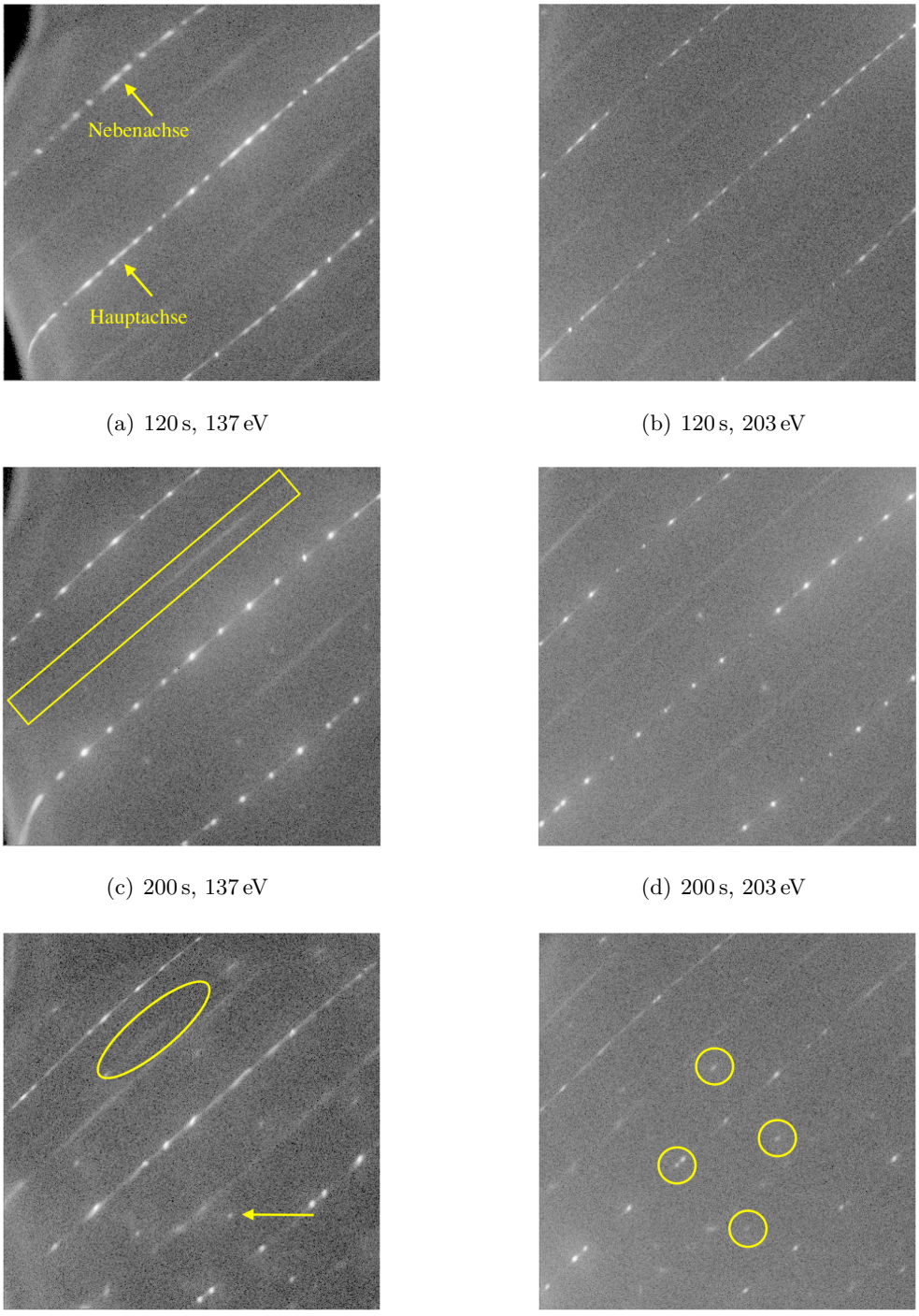
In Abbildung 5.7 sind sechs 2D-SPA-LEED-Aufnahmen bei drei unterschiedlichen Bedeckungen und den zwei Energien 137 eV und 203 eV dargestellt. In allen Bildern lassen sich die Reflexe auf der Haupt- und Nebenachse sowie die Entwicklung der Reflexstreifen zwischen den Hauptreflexgruppen, die von der ×2-Überstruktur herrühren, erkennen. Die ×2-Reflexstreifen sind in Abbildung 5.7(c) in Gelb markiert. Des Weiteren ist zu beobachten, dass sich der Abstand zwischen den Reflexen auf der Haupt- und Nebenachse mit zunehmender Bedeckung vergrößert, diese Beobachtung wird im Auswertungsteil näher analysiert. Ab einer Bedeckung von 200 s lassen sich bei beiden Energien zusätzliche Reflexstreifen parallel zu den ×2-Reflexstreifen erkennen, die von anderen Überstrukturen hervorgerufen werden, einer dieser Reflexe ist in Abbildung 5.7(e) mit einem gelben Oval markiert. Ein Reflex, der von einer anderen Überstruktur herrührt, ist in Abbildung 5.7(e) mit einem gelben Pfeil markiert. Zu den Überstrukturen wird im Auswertungsteil Stellung genommen. Die in Abbildung 5.7(e) markierten Reflexpunkte sind auch für die Energie 203 eV zu beobachten. Es fällt aber auf, dass diese Punkte entlang der Hauptreflexachse bei 203 eV im Bezug auf 137 eV verschoben sind.

Auswertung

In Abbildung 5.8 sind die Linescans der main-Messung zu den 2D-Aufnahmen aus Abbildung 5.7 dargestellt. Für beide Energien lassen sich ähnliche Verläufe in den Linescans feststellen, die bereits in den 2D-Bildern beobachtet werden können. Während für beide Energien bei einer Bedeckung von 200 s die Reflexe auf der Hauptachse deutlich und klar voneinander getrennt sind, werden besonders bei 120 s 137 eV weitere Beugungsreflexe sichtbar, wodurch die Reflexe schwerer zu erkennen sind. Außerdem lässt sich beobachten, dass sich der Abstand zwischen den Reflexen bei der Bedeckung von 120 s zu 200 s für beide Energien vergrößert hat. Die Beobachtung aus den 2D-Aufnahmen in Abbildung 5.7 kann somit verifiziert werden. Für höhere Bedeckungen lassen sich die Reflexe auf der Hauptachse schlechter erkennen, da besonders bei 420 s bei beiden Energien zusätzliche Effekte auftreten, die das Beugungsmuster der Hauptachse beeinflussen.

In Abbildung 5.9 sind die Linescans der senkrechten Messung zu den 2D-Aufnahmen aus Abbildung 5.7 dargestellt. In den Linescans lassen sich sowohl die scharfen Peaks der Reflexe auf der Hauptachse bei 0%BZ und 100%BZ als auch die Peaks von den ×2-Reflexstreifen bei ±50%BZ erkennen. Es ist hier aber anzumerken, dass die in Abschnitt 5.1 erläuterten Verzerrungen des Beugungsbildes mit eingebunden werden müssen. Der Abstand zwischen der Hauptachse und der Nebenachse wurde dabei auf 100%BZ festgelegt und die Linescans mithilfe des Fitting-Tools entsprechend entzerrt.

In der 2D-Aufnahme aus Abbildung 5.7(e) sind neben den Reflexstreifen bei ±50%BZ auch Peaks bei ca. ±33%BZ zu erkennen, die ab einer Bedeckung von 420 s auftreten. Nach der Masterarbeit von Throben Groven [5] handelt es sich hier vermutlich um Reflexe, die von



(a) 120 s, 137 eV

(b) 120 s, 203 eV

(c) 200 s, 137 eV

(d) 200 s, 203 eV

(e) 420 s, 137 eV

(f) 420 s, 203 eV

Abbildung 5.7.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 600 °C. In a) sind in Gelb die Haupt- und Nebenachse der Reflexe markiert und in c) einer der $\times 2$-Reflexstreifen. In Abbildung e) sind in Gelb weitere Reflexe markiert, die vermutlich von einer Si(331)-Facette stammen. In f) ist die (1×1)-Einheitszelle des in e) markierten Reflexes eingezeichnet.

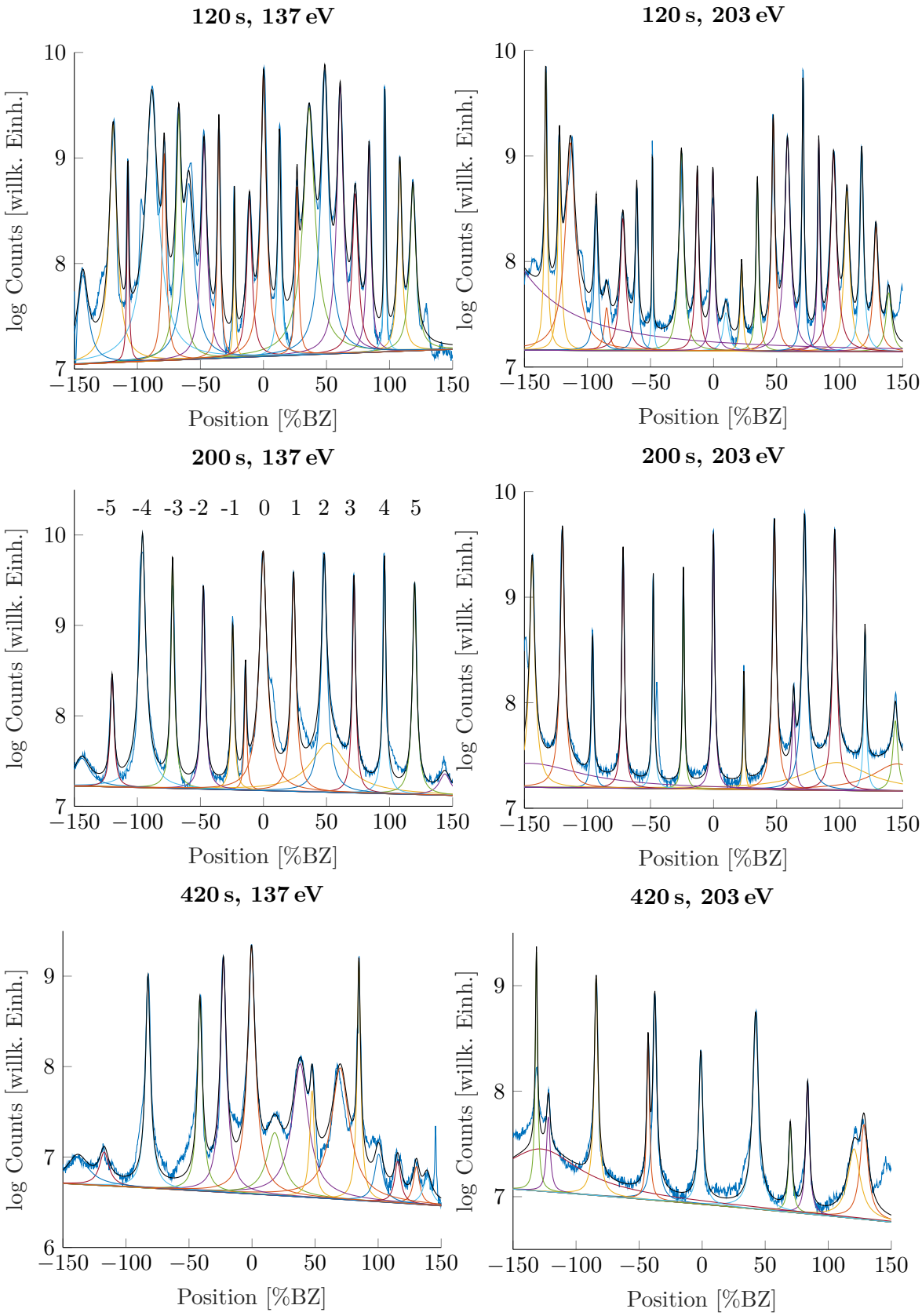


Abbildung 5.8.: 1D-Scans der main-Messung der aus Abbildung 5.7 gezeigten 2D-Aufnahmen. Die Bedeckungen und Energien entsprechen denen aus Abbildung 5.7. Für 200 s 137 eV sind die Reflexe nach der Peaknummer nummeriert.

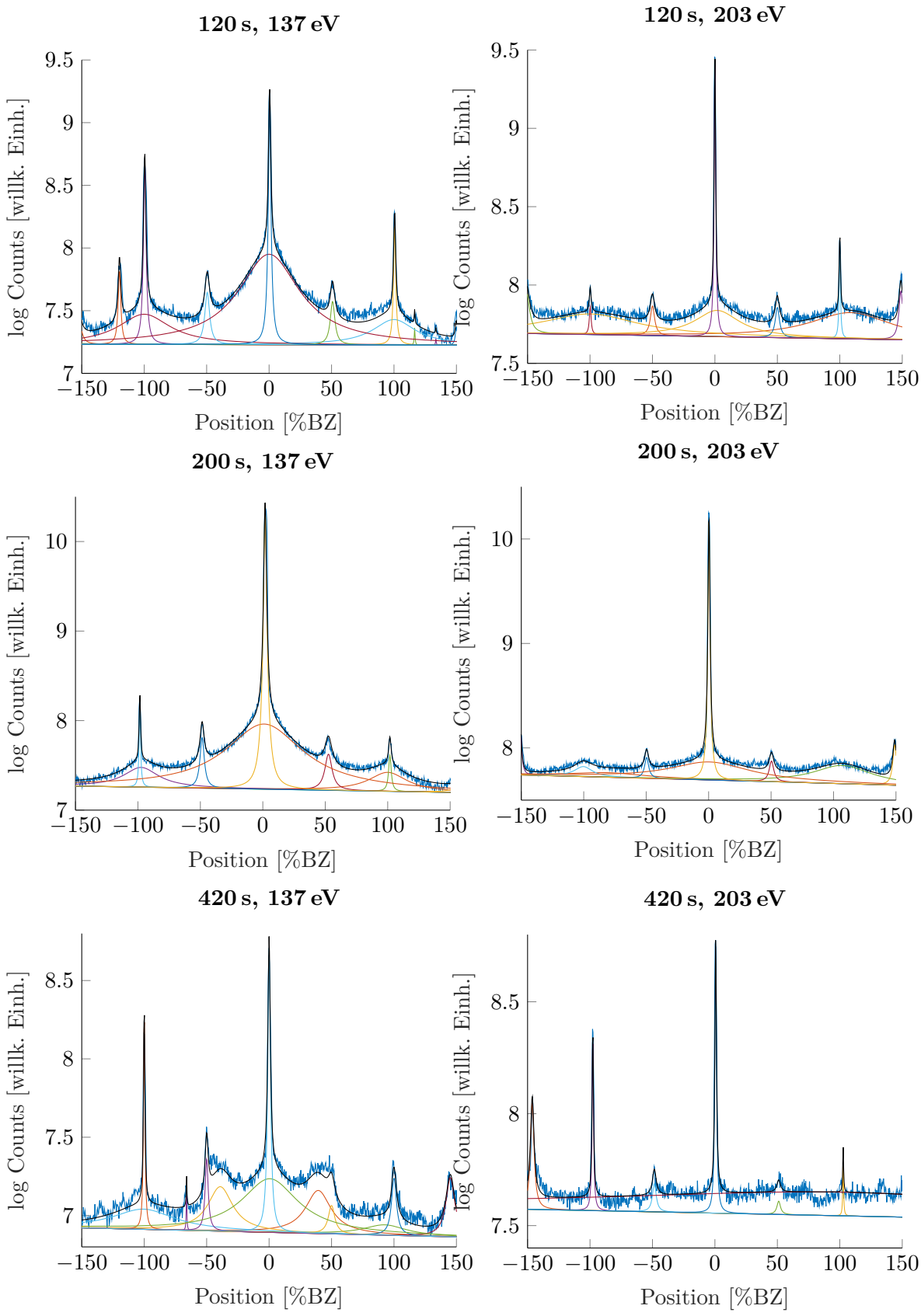


Abbildung 5.9.: 1D-Scans der senkrechten Messung der aus Abbildung 5.7 gezeigten 2D-Aufnahmen. Die Bedeckungen und Energien entsprechen denen aus Abbildung 5.7.

einer Si(331)-Facette herrühren. Die (1×1)-Einheitszelle ist in Abbildung 5.7(f) markiert. Im Linescan ist das Untergrundrauschen zu groß, weshalb diese Struktur im Scan schlecht sichtbar wird. Außerdem wird vermutet, dass der Reflex beim Linescan nicht korrekt getroffen wird und daher diese Struktur schlecht sichtbar wird.
In der 2D-Aufnahme aus Abbildung 5.7(e) sind Reflexpunkte markiert, die auch für die Energie 203 eV zu beobachten sind. Es fällt aber auf, dass diese Reflexe entlang der Hauptreflexachse bei 203 eV im Bezug auf 137 eV verschoben sind. Dies rührt daher, dass wie in Abbildung 5.4 zu sehen bei den zwei Energien auch bei zwei verschiedenen Pfaden im reziproken Raum gemessen wird und daher diese Reflexe verschoben sind.
Aus Kapitel 3.1 ist bekannt, dass durch den experimentellen Aufbau eine Verzerrung des Beugungsbildes hervorgerufen wird, die in den Scans berücksichtigt werden muss. Dies lässt sich auch anhand der Ewald-Kugel und in Abbildung 5.4 erkennen. Der Scan läuft auf dem Rand der Ewald-Kugel, wodurch der Abstand der Reflexe zum Rand des Scans abnimmt. Zur Auswertung dieser Verzerrung wird die Position der Peaks aus der main-Messung gegen die Peaknummer grafisch aufgetragen. Die Peaknummer nummeriert dabei die Peaks im Beugungsmuster von links nach rechts, dies ist als Beispiel in Abbildung 5.8 für 200 s 137 eV eingezeichnet. Durch die Datenpunkte wird eine lineare Regression gelegt, wobei nur die inneren fünf Werte von Peaknummer -2 bis +2 berücksichtigt werden. Mit Hilfe dieser Grafik kann dann die Abweichung der äußeren Peaks ab ±50%BZ zur tatsächlichen Position bestimmt werden. In Abbildung 5.10 ist diese Regression beispielhaft bei einer Bedeckung von 200 s 203 eV gezeigt, wobei diese Auswertung für jede Bedeckung erstellt wurde. Es zeigt sich eine Abweichung der äußersten Peaks bei ±150%BZ von rund 6%BZ. Aufgrund der geringen Abweichung ist der Einfluss der Verzerrung auf die Halbwertsbreiten zu vernachlässigen. Die Daten der main-Messung werden daher für den weiteren Verlauf der Auswertung nicht entzerrt.
Um eine Auskunft über den Verlauf der Halbwertsbreite der Peaks aus der main-Messung zu erhalten, wird die Halbwertsbreite gegen die Peaknummer von allen Bedeckungen aufgetragen. Abbildung 5.11 zeigt diese Auswertung für die Messung von 137 eV und 203 eV. In diesem Fall sind nicht alle Bedeckungen dargestellt, da bei höheren Bedeckungen weitere Beugungserscheinungen auftreten und somit die exakte Identifizierung der Peaks in ihrer Peaknummer erschwert wird, wie bereits in Abbildung 5.8 zu sehen ist. Es zeigt sich, dass der Verlauf der Halbwertsbreite für alle Bedeckungen sehr ähnlich ist, jedoch unterscheiden sich die absoluten Werte der Halbwertsbreite von den Bedeckungen. Für die Bedeckungen 100 s, 120 s und 140 s kommen Reflexe jeweils an der Stelle einer halben Peak-Nummer hinzu, die ebenfalls in Abbildung 5.11 für beide Energien jeweils links zu sehen sind. Diese zusätzlichen Reflexe sind wahrscheinlich das Resultat der LCWs, da diese nach Song *et al.* Stufen beschreiben, die alternierend mit Gold bedeckt sind. Wie bereits in Kapitel 4.2.2 erwähnt rücken die Reflexe im reziproken Raum dichter zusammen, wenn der Abstand der Au-Ketten durch die alternierende Anordnung größer wird. Es ist daher naheliegend, dass es sich bei den Bedeckungen von 100 s, 120 s und 140 s um die LCW-Phase handelt. Ab

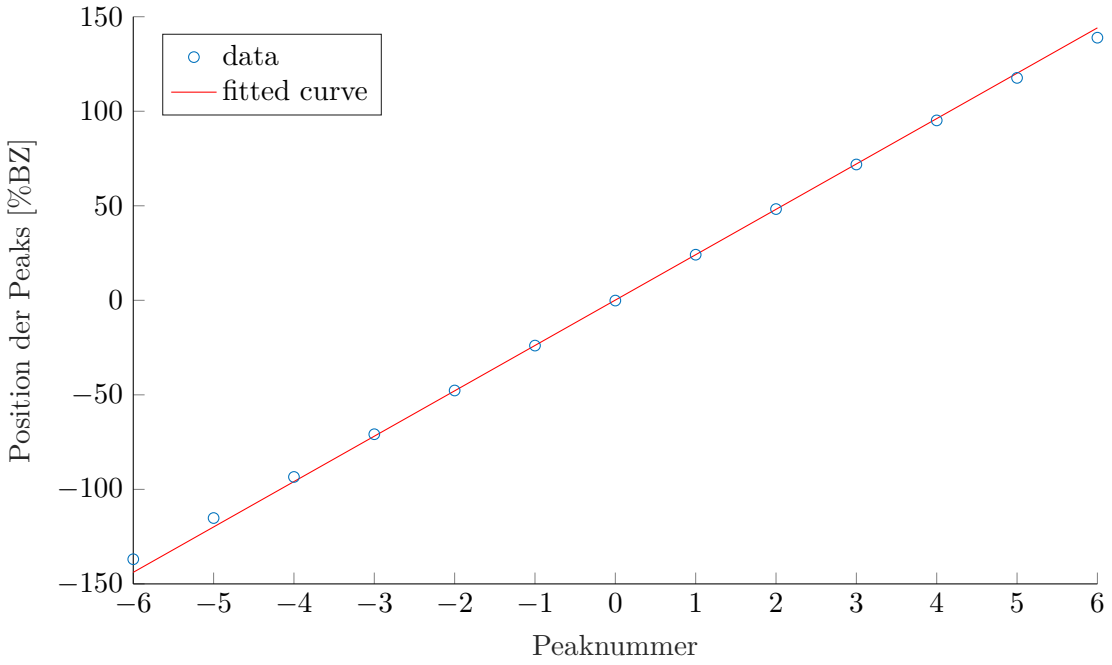


Abbildung 5.10.: Aufgetragen ist die Position der Peaks in %BZ gegen die Peaknummer. Die Regression berücksichtigt nur die Peaks Nummer −2 bis +2. Die Aufdampftemperatur beträgt 600 °C bei einer Energie von 203 eV und einer Bedeckung von 200 s.

einer Bedeckungen von 160 s bis 280 s für beide Energien wird von HCWs ausgegangen, da für diese Bedeckungen die Reflexe nur bei ganzzahligen Peaknummern auftreten. Das von Song *et al.* beschriebene Modell der HCWs, wo jede Stufe mit Gold bedeckt ist, passt daher in dieses Beugungsmuster. Es wird vermutet, dass es aufgrund der alternierend bedeckten Stufen bei der LCW-Phase zu einer Verdopplung der Reflexe im Vergleich zur HCW-Phase kommt. Demnach müsste der Abstand der Reflexe in der LCW-Phase 1/2 des Abstandes der Reflexe in der HCW-Phase entsprechen.
Um diese Vermutung zu verifizieren, sind in Tabelle 5.1 die durchschnittlichen Abstände der Peaks für die LCWs für die main-Messung tabellarisch aufgelistet und in Tabelle 5.2 die der HCWs. Den Tabellen 5.1 und 5.2 ist aber zu entnehmen, dass der Abstand nicht korrekt der Hälfte entspricht, sondern 1.78 für 137 eV und 1.77 für 203 eV. Ein Grund für diese Abweichung kann sein, dass die Bedeckungen eine Phase genau zwischen der LCW und HCW-Phase treffen und sich daher die Reflexe aus der HCW und LCW-Phase zusammensetzen. Weiterhin ist eine geringe Abweichung zu erwarten, da in dem Modell nach Song *et al.* die Neigungen der Oberfläche unterschiedlich sind. Außerdem sollte nach der Theorie der Abstand der Reflexe $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel} = 22.5\%\mathrm{BZ}$ betragen. Dieser Wert kann anhand der Messdaten aus Tabelle 5.2 bestätigt werden. Bei höheren Bedeckungen ab 320 s können die HCWs nicht bestätigt werden, da hier die Reflexe in den Linescans nicht eindeutig identifiziert werden können. Ab einer Bedeckungen von 320 s handelt es sich wahrscheinlich um eine Bedeckung größer als 0.48 ML. Es ist zu beobachten, dass die Halbwertsbreite der

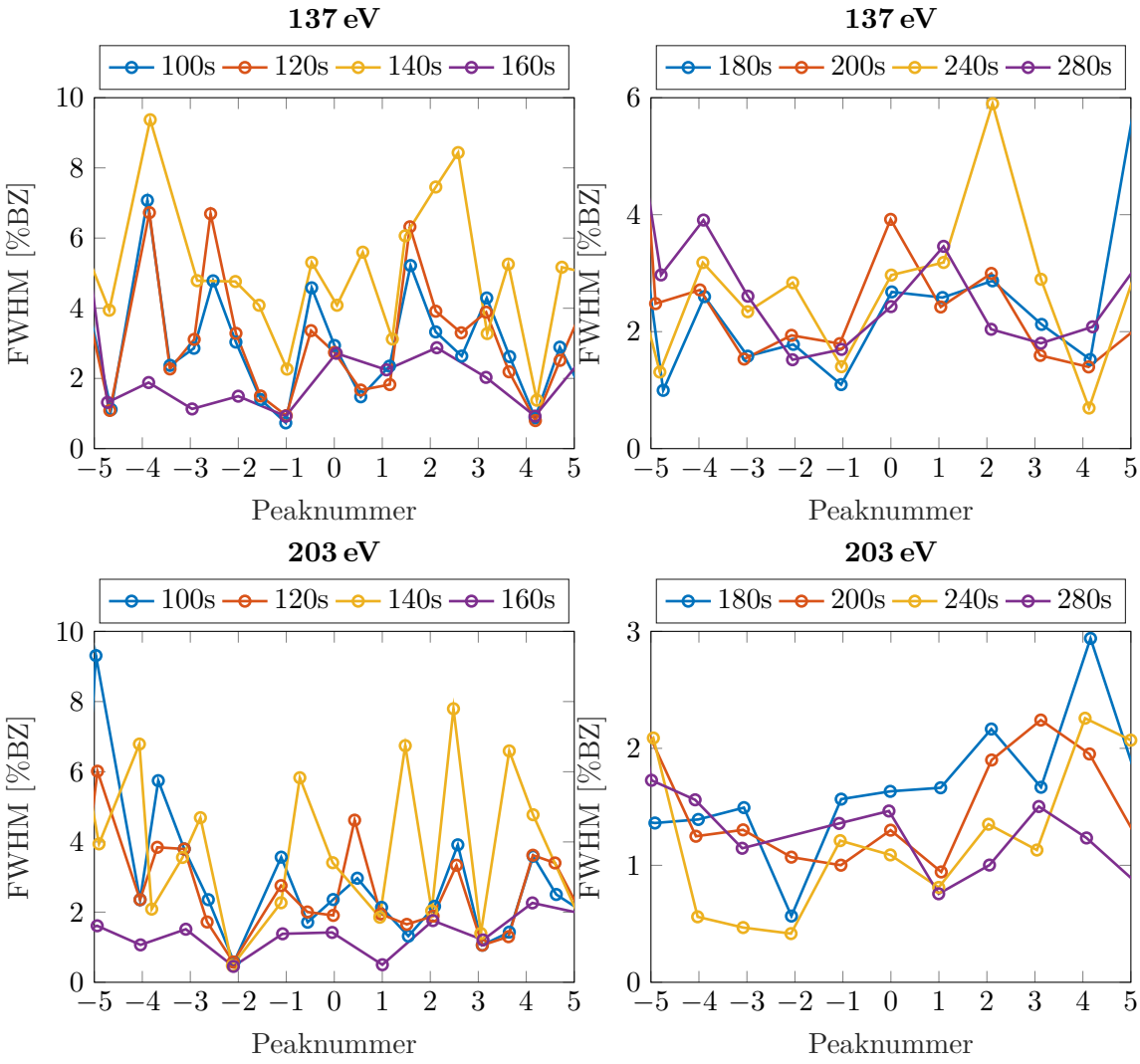


Abbildung 5.11.: Auftragung der Halbwertsbreite gegen die Peaknummer bei einer Aufdampftemperatur von 600 °C und einer Energie von oben 137 eV und unten 203 eV für die main-Messung. Für die Bedeckungen 100 s, 120 s und 140 s sind jeweils die zusätzlichen Reflexe von den LCWs gezeigt.

Peaks bei halben Nummern größer ist, als bei benachbarten ganzzahligen Peaknummern. Dies ist zum Beispiel in Abbildung 5.11 für 140 s auffällig.

Wie bereits in Kapitel 4.2.2 erläutert, sind für dieser Arbeit besonders die Reflexstreifen, die durch die ×2-Überstruktur hervorgerufen werden, interessant. Um eine Aussage über die Länge der Goldketten auf den Stufen zu erhalten, wird in Abbildung 5.12 die Halbwertsbreite der Peaks bei ±50% BZ gegen die Bedeckung für beide Energien aufgetragen. Es zeigt sich, dass die Halbwertsbreite der Peaks bis zu einer Bedeckung von ca. 320 s sinkt und dort ein Minimum annimmt. Ab ca. 360 s steigt die Halbwertsbreite bei allen Energien, es ist aber zu notieren, dass bereits die Linescans der senkrechten Messungen (siehe Abbildung 5.9) weitere Beugungserscheinungen aufweisen, die sich auf die Halbwertsbreite

600°C 137 eV	100 s	11.73%BZ
	120 s	12.46%BZ
	140 s	13.46%BZ
		12.55 %BZ

600°C 203 eV	100 s	12.48%BZ
	120 s	12.37%BZ
	140 s	13.67%BZ
		12.84%BZ

Tabelle 5.1.: Tabellarische Auflistung der durchschnittlichen Abstände in %BZ der Peaks für die LCWs für die main-Messung. Die untere dick gedruckte Zelle zeigt den über alle Bedeckungen gemittelten Abstand.

600°C 137 eV	160 s	22.23%BZ
	180 s	22.25%BZ
	200 s	22.64%BZ
	240 s	22.34%BZ
	280 s	22.27%BZ
		22.34%BZ

600°C 203 eV	160 s	22.76%BZ
	180 s	22.67%BZ
	200 s	22.99%BZ
	240 s	22.48%BZ
		22.73%BZ

Tabelle 5.2.: Tabellarische Auflistung der durchschnittlichen Abstände in %BZ der Peaks für die HCWs für die main-Messung. Die untere dick gedruckte Zelle zeigt den über alle Bedeckungen gemittelten Abstand.

der Reflexstreifen auswirken können. Für die Goldketten auf der Oberfläche bedeutet das, dass aufgrund der niedrigen Halbwertsbreite bei einer Bedeckung von 320 s die Goldketten besonders lang auf den Stufen der Si(553)-Oberfläche zu erwarten sind.
In Abschnitt 2.6.2 wird erläutert, dass die Peaks der Beugungsmuster sich aus einer Schulterfunktion und δ-Funktion zusammensetzen können. Um dieses Verhältnis des Peaks und der Schulterfunktion zu untersuchen, wird in Abbildung 5.13 das Verhältnis der Intensitäten der Schulterfunktion und Peakfunktion gegen die Bedeckung für beiden Energien grafisch aufgetragen. Des Weiteren lässt sich mit Hilfe dieser Auswertung eine Analyse über die Rauheit der Oberfläche erstellen. Es ist zu beobachten, dass bei beiden Energien die Verläufe sehr konstant verlaufen und sich ein Verhältnis von ca. 0.5 ergibt. Lediglich bei einer Energie von 137 eV bis zu einer Bedeckung von 200 s ist das Verhältnis von über 0.3 bis ca. 0.6. Dies lässt sich auch im Linescan (Abbildung 5.9) gut beobachten, da hier die Intensität der Schulterfunktion deutlich größer ist. Ein konstantes Verhältnis zwischen Schulter- und Peakfunktion lässt darauf schließen, dass die Rauheit unabhängig von der Bedeckung ist.
In Abbildung 5.14 ist die Halbwertsbreite der (00)er-Peaks grafisch ausgewertet, aufgetragen ist die Halbswertsbreite gegen die Bedeckung. Für die senkrechte Messung wird die Halbwertsbreite bei 0%BZ und bei der main-Messung die der Peak-Nummer 0 gewählt. Für die Messung bei 137 eV ist bei der main-Messung der Peak Nummer +2 gewählt, da für diese Energie auch der Scan der senkrechten Messung entlang der Hauptachse verschoben ist. Dies hat den Hintergrund, dass an dieser Stelle die $\times$2-Reflexstreifen besser zu detektieren sind. Der Vergleich der Halbwertsbreiten von der main- und senkrechten Messung gibt Auskunft über die Domänen. Bei einer einzelnen bedeckten Stufe mit einer langen Au-Kette ergibt sich bei der senkrechten Messung eine kleine Halbwertsbreite und für die

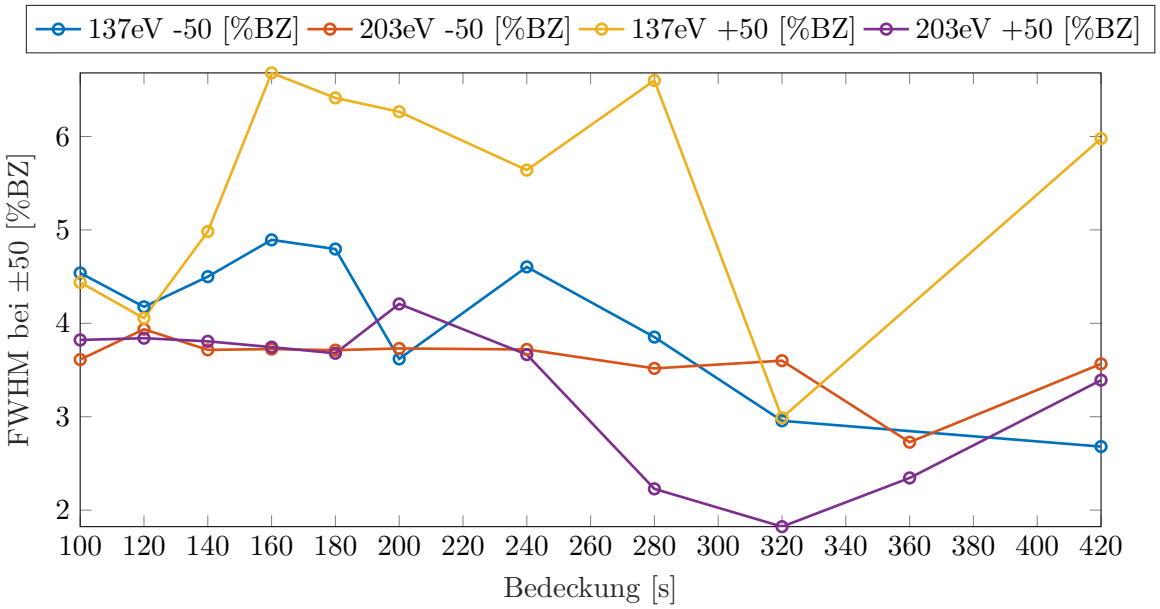


Abbildung 5.12.: Grafische Auswertung der senkrechten Messung. Aufgetragen ist die Halbwertsbreite des Peaks bei ±50%BZ gegen die Bedeckung bei einer Aufdampftemperatur von 600 °C und einer Energie von 137 eV und 203 eV.

main-Messung eine hohe Halbwertsbreite. Sind auf mehreren Stufen kürzere Au-Ketten, ergibt sich eine große Halbwertsbreite für die senkrechte Messung und eine kleine Halbwertsbreite für die main-Messung. Es wird deutlich, dass besonders bei den senkrechten Messungen und die main-Messung bei 203 eV die Halbwertsbreite nahezu konstant bleibt. Lediglich bei der main-Messung bei 137 eV werden bei den Bedeckungen von 140 s und 240 s sehr hohe Halbwertsbreiten aufgenommen. Mit Rücksicht auf die Linescans, siehe Anhang Abbildung A.4 und A.5, lassen sich bereits in diesen deutliche Unebenheiten erkennen, die sich wiederum auf die Halbwertsbreite auswirken können. Aufgrund der konstanten Halbwertsbreite für die senkrechte als auch die main-Messung lässt sich sagen, dass auf der Oberfläche auf vielen Stufen lange Au-Ketten zu vermuten sind.

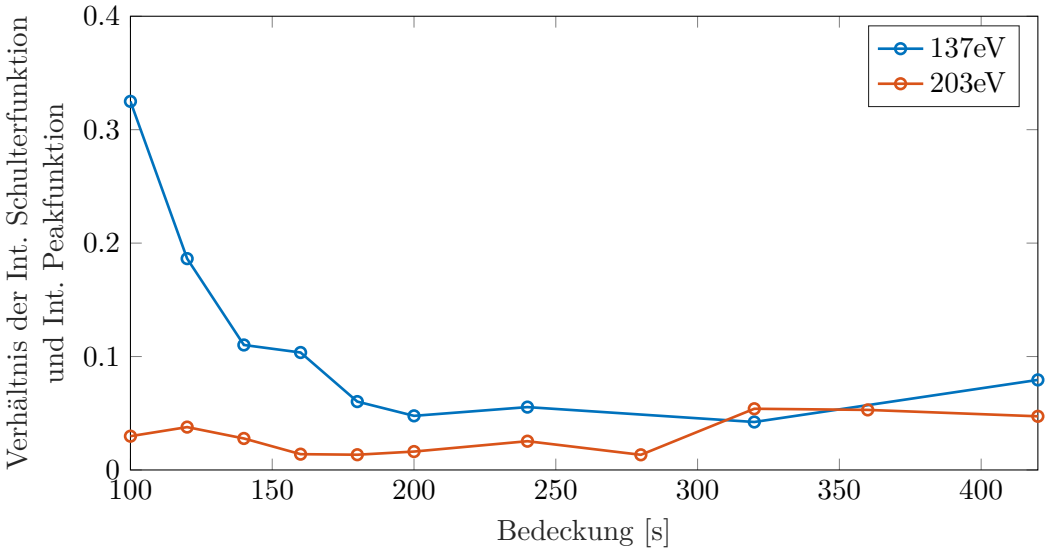


Abbildung 5.13.: Grafische Auswertung der senkrechten Messung. Aufgetragen ist das Verhältnis der Intensitäten der Schulterfunktion und Peakfunktion gegen die Bedeckung bei einer Energie von 137 eV und 203 eV.

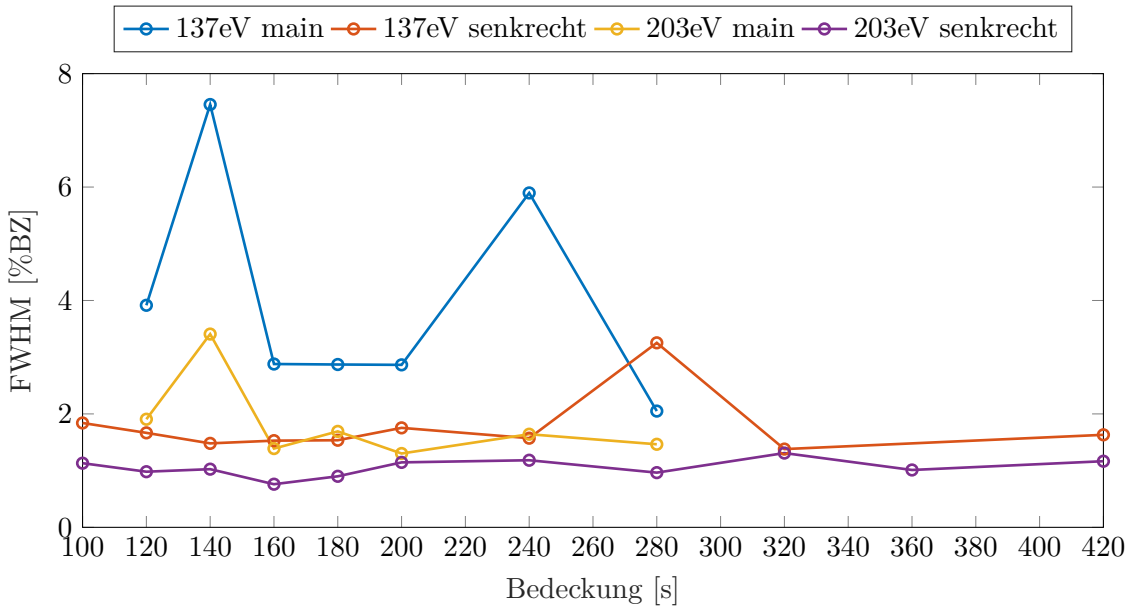


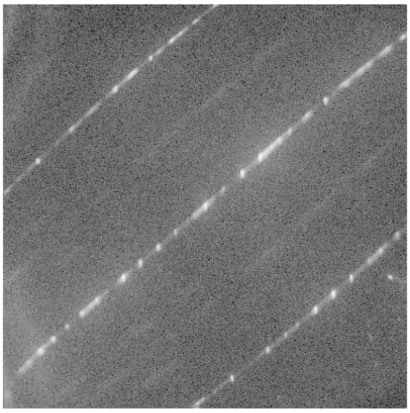
Abbildung 5.14.: Aufgetragen ist die Halbwertsbreite gegen die Bedeckung bei einer Energie von 137 eV und 203 eV. Bei der senkrechten Messung wird die Halbwertsbreite des Peaks bei 0%BZ bei der main-Messung bei 0%BZ gewält. Für die Messung bei 137 eV ist bei er main-Messung der Peak Nummer +2 gewählt.

5.2.3. Probentemperatur 750 °C

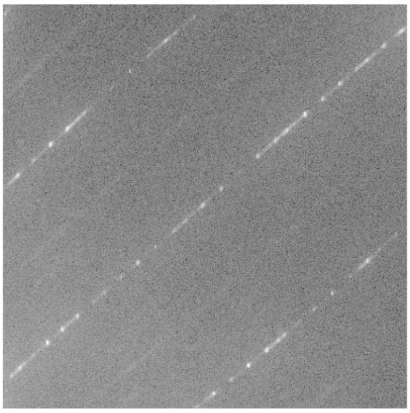
In Abbildung 5.15 sind sechs zweidimensionale SPA-LEED-Aufnahmen bei drei verschiedenen Bedeckungen und den zwei Energien dargestellt. In allen Aufnahmen lassen sich die Reflexe auf der Haupt- und Nebenachse gut erkennen, sowie die Entwicklung der Reflexstreifen von der ×2-Überstruktur. Auch hier ist zu erkennen, dass mit zunehmender Bedeckung der Abstand zwischen den Reflexen auf der Haupt- und Nebenachse größer wird. Ab einer Bedeckung von 200 s werden zudem andere Reflexe sichtbar, die von weiteren Überstrukturen hervorgerufen werden.

Auswertung

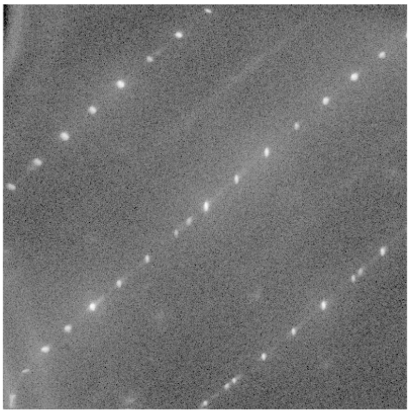
In Abbildung 5.16 sind die gefitteten Linescans aus der main-Messung zu den 2D-Aufnahmen aus Abbildung 5.15 gezeigt. In allen Scans lassen sich die Verläufe erkennen, die bereits in den 2D-Aufnahmen aus Abbildung 5.15 zu beobachten sind. Während bei einer mittleren Bedeckung bei 200 s die Reflexe auf der Hauptachse klar voneinander getrennt sind, überlappen sich die Reflexe bei niedrigen und hohen Bedeckungen, wie zum Beispiel bei 120 s und 420 s. Bei diesen Bedeckungen lassen sich die Reflexe nicht getrennt voneinander identifizieren. In Abbildung 5.15(e) ist zu beobachten, dass die Reflexe auf der Hauptachse sternförmig auseinander laufen, in Abbildung 5.15(f) ist dies nur leicht zu erkennen. Da diese Beobachtung nur bei einer Bedeckung von 420 s und 360 s (siehe Anhang Abbildung B.3) jeweils für die Messung bei 137 eV zu beobachten ist und nicht bekannt ist, woher diese Verläufe stammen, wird darauf im weiteren Verlauf kein Bezug genommen. In Abbildung 5.17 sind die Linescans der senkrechten Messung zu den 2D-Aufnahmen aus Abbildung 5.15 dargestellt. In allen Linescans lässt sich der Peak bei 0%BZ gut erkennen. Die Peaks bei 100%BZ und die Peaks von den ×2-Reflexstreifen bei ±50%BZ lassen sich hingegen nicht in allen Scans gut erkennen, da hier die Intensität im Gegensatz zum Untergrundrauschen sehr gering ist. Besonders bei 420 s 203 eV lassen sich die Reflexe bei ±50%BZ und 100%BZ kaum erkennen. Bei einer Bedeckung von 200 s für beide Energien und bei 420 s für 137 eV werden zudem weitere Überstrukturen bei ca ±33%BZ sichtbar, die auch in Abbildung 5.15 beobachtet werden können. Diese rühren nach [5] vermutlich von einer Si(331)-Facette.



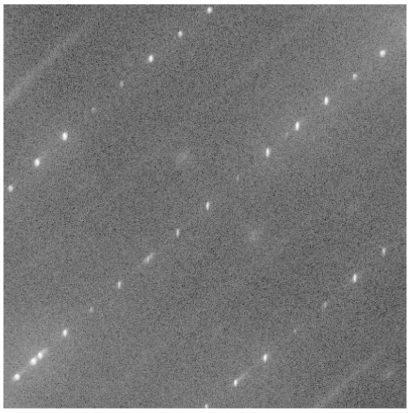
(a) 120 s, 137 eV



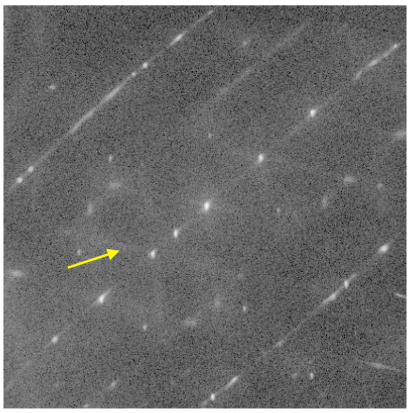
(b) 120 s, 203 eV



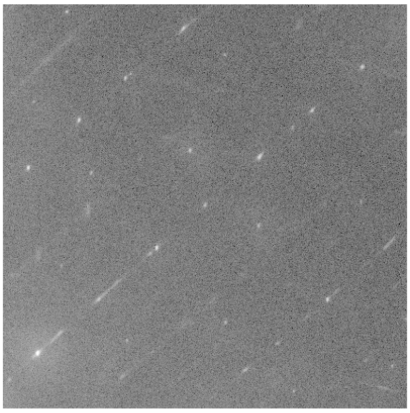
(c) 200 s, 137 eV



(d) 200 s, 203 eV



(e) 420 s, 137 eV



(f) 420 s, 203 eV

Abbildung 5.15.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 750 °C. In e) ist ein sternförmiger Reflex mit einem gelben Pfeil markiert.

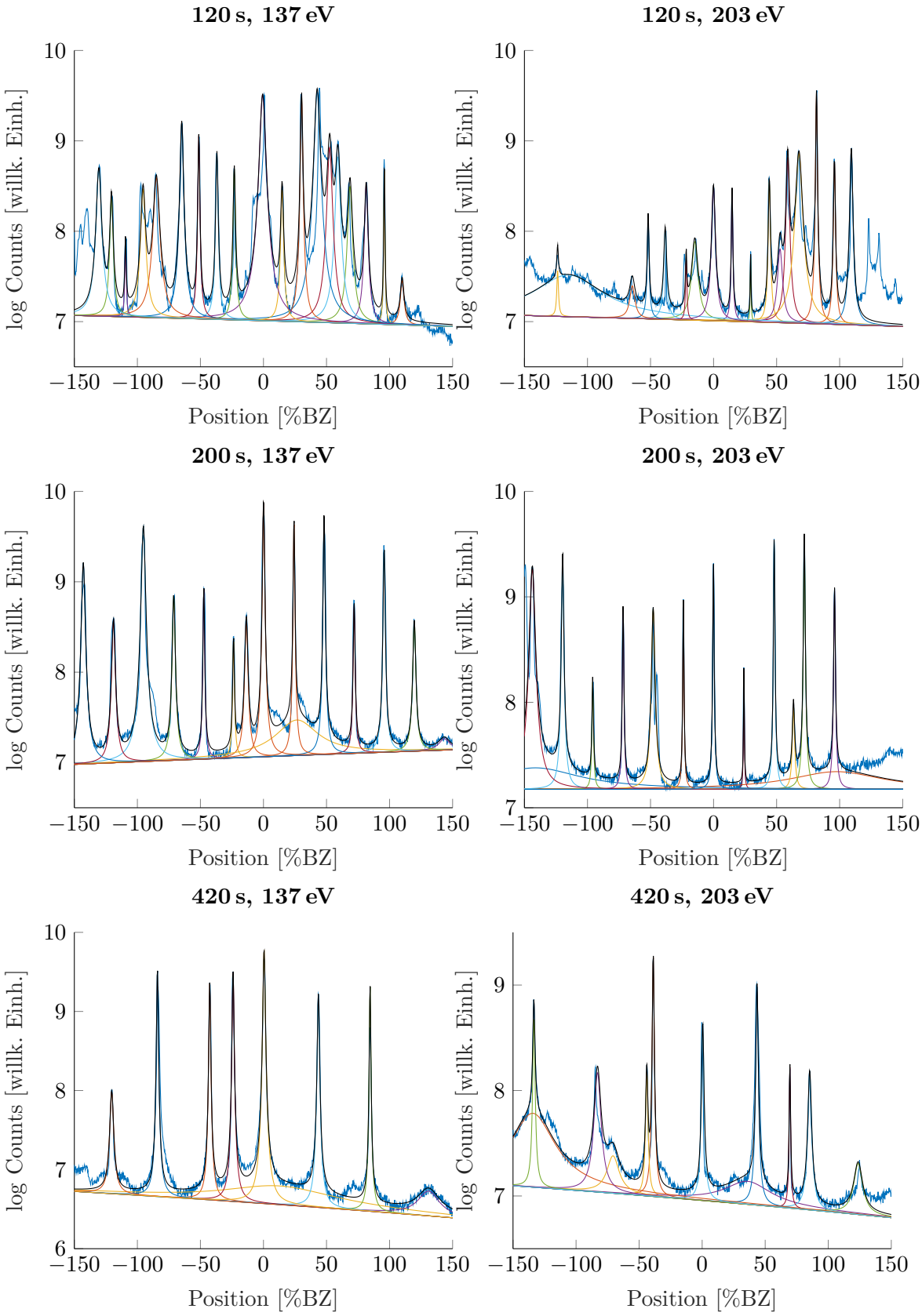


Abbildung 5.16.: 1D-Scans der main-Messung der aus Abbildung 5.15 gezeigten 2D-Aufnahmen. Die Bedeckungen und Energien entsprechen denen aus Abbildung 5.15. In c) sind die Peaks nach der Peaknummer nummeriert.

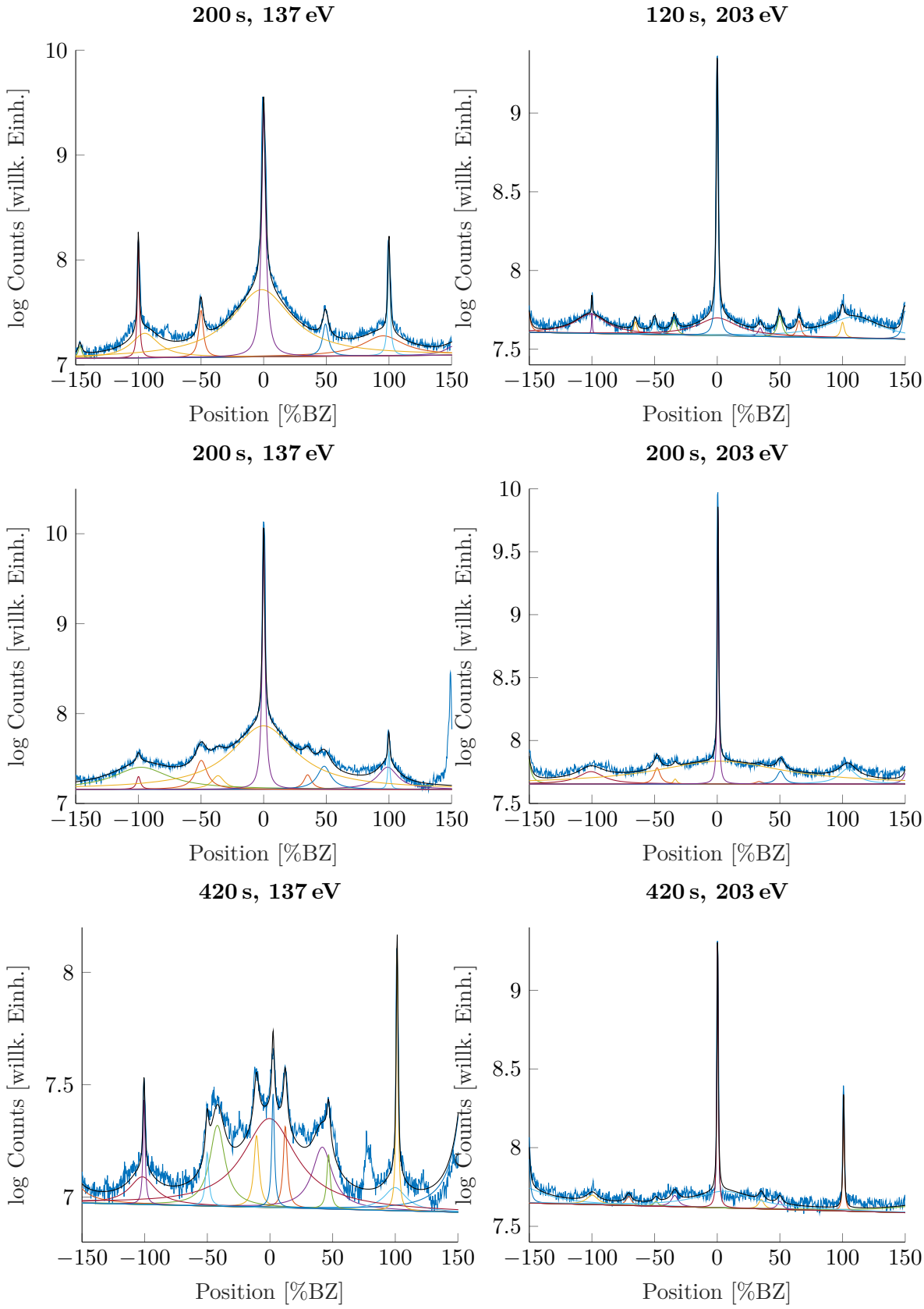


Abbildung 5.17.: 1D-Scans der main-Messung der aus Abbildung 5.15 gezeigten 2D-Aufnahmen. Die Bedeckungen und Energien entsprechen denen aus Abbildung 5.15.

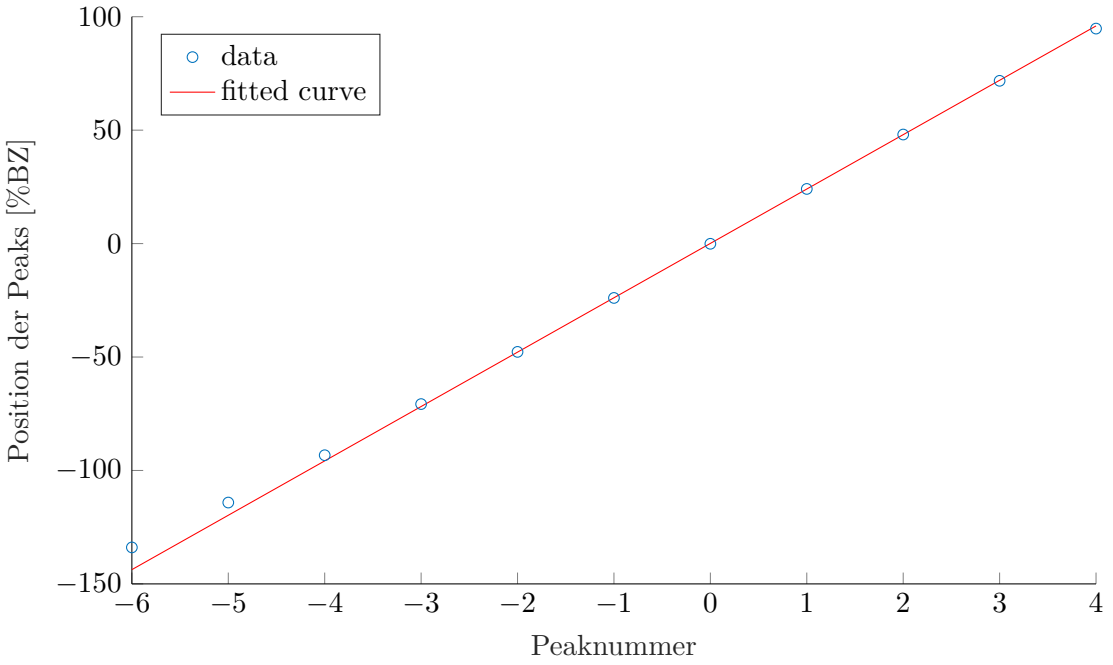


Abbildung 5.18.: Aufgetragen ist die Position der Peaks in %BZ gegen die Peaknummer. Die Regression berücksichtigt nur die Peaks Nummer −2 bis +2. Die Aufdampftemperatur beträgt 750 °C bei einer Energie von 203 eV und einer Bedeckung von 200 s.

Es ist anzumerken, dass die in Abschnitt 5.1 erwähnten Verzerrungen des Beugungsbildes mithilfe des Fitting-Tools behoben worden sind. Wie bereits für die Probentemperatur von 600 °C wird auch für die 750 °C die experimentell bedingte Verzerrung der Reflexe grafisch ausgewertet, indem die Position der Peaks gegen die Peak-Nummer aufgetragen und durch die Messpunkte eine lineare Regression gelegt wird. Diese Grafik ist in Abbildung 5.18 beispielhaft für einer Bedeckung von 200 s gezeigt, wobei diese Auswertung für jede Bedeckung erstellt wurde. Es zeigt sich, dass hier ebenfalls die Abweichung der äußersten Peaks bei ±150%BZ gering ist, in diesem Fall rund 10%BZ Abweichung. Daher werden auch in diesem Fall die Daten der main-Messung für den weiteren Verlauf der Auswertung nicht entzerrt. Der Einfluss der Verzerrung auf die Halbwertsbreiten ist zu vernachlässigen. Abbildung 5.19 zeigen die grafischen Auswertungen der Halbwertsbreite aufgetragen gegen die Peaknummer für die main-Messung bei den Energien 137 eV und 203 eV. Es sind nicht alle Bedeckungen dargestellt, da, wie bereits in Abbildung 5.16 zu sehen, bei höheren Bedeckungen weitere Beugungserscheinungen auftreten und somit die exakte Identifizierung in der Peaknummer erschwert wird. Es zeigt sich, dass der Verlauf der Halbwertsbreite für alle Bedeckungen sehr ähnlich ist. Die absoluten Werte der Halbwertsbreite von den Bedeckungen sind jedoch verschieden. Für die Bedeckung bei 120 s kommen Reflexe jeweils an der Stelle einer halben Peak-Nummer hinzu, die in Abbildung 5.19 für 137 eV zu sehen sind. Es ist zu beobachten, dass die Halbwertsbreite der Peaks bei halben Nummern ähnlich gering ist wie die bei benachbarten ganzzahligen Peaknummern. Die halbzahligen Reflexe sind auch hier vermutlich das Resultat der LCW, da diese nach Song *et al.*

Stufen beschreiben, die alternierend mit Gold bedeckt sind. Wie bereits in Kapitel 4.2.2 erläutert, rücken die Reflexe im reziproken Raum dichter zusammen, wenn der Abstand der Au-Ketten durch die alternierende Anordnung größer wird. Der Abstand der Reflexe in der LCW-Phase müsste demnach 1/2 des Abstandes der Reflexe in der HCW-Phase entsprechen. Bei einer Energie von von 137 eV wird ab einer Bedeckungen von 140 s bis 240 s und bei 203 eV für 160 s bis 200 s von HCWs ausgegangen, da für diese Bedeckungen die Reflexe nur bei ganzzahligen Peaknummern auftreten. Das von Song *et al.* beschriebene Modell, bei dem jede Stufe mit Gold bedeckt ist, passt daher genau in dieses Beugungsmuster. Der aus der Theorie bekannte Abstand der Reflexe $\Delta Q_{\mathrm{vic},\parallel} = 22.5\%\mathrm{BZ}$ kann mit Hilfe der Messdaten aus 5.2 bestätigt werden.
Bei höheren Bedeckungen ab 240 s bzw 200 s können die HCWs nicht bestätigt werden, da hier die Reflexe in den Linescans nicht eindeutig identifiziert und somit auch nicht nummeriert werden können. Ab einer Bedeckung von 240 s bzw 200 s handelt es sich wahrscheinlich um eine Bedeckung größer als 0.48 ML. In Tabelle 5.3 sind die durchschnittlichen Abstände der Peaks für die HCWs für die main-Messung tabellarisch aufgelistet. Da die LCWs nur bei einer Bedeckung von 120 s für eine Energie von 137 eV beobachtet werden können, ergibt sich der durchschnittliche Abstand der Peaks zueinander von 13.37 % BZ. Wie zuvor erläutert, sollte der Abstand bei den LCWs der Hälfte der Abstände der HCWs entsprechen. Vergleicht man den Wert von den LCWs von 13.37 %BZ mit dem durchschnittlichen Wert von den HCWs für 137 eV von 22.41 %BZ wird deutlich, dass dieses Verhältnis nicht der Hälfte entspricht, sondern 1.68. Es wird vermutet, dass auch hier die Bedeckungen eine Phase zwischen der LCW und HCW-Phase treffen und daher die Reflexe sich aus der HCW und LCW-Phase zusammensetzen.
In Abbildung 5.20 werden die $\times 2$-Reflexstreifen ausgewertet, indem die Halbwertsbreite der Peaks bei $\pm 50\%$BZ gegen die Bedeckung für beide Energien aufgetragen wird. Diese Auswertung liefert Informationen über die Länge der Au-Drähte. Es wird deutlich, dass die Halbwertsbreite bei beiden Energien bis zu einer Bedeckung von 180 s nahezu konstant bleibt und bei einer Bedeckung von 200 s ein Maximum annimmt. Die Halbwertsbreite ist bei einer Bedeckung von 320 s am kleinsten, was darauf schließen lässt, dass bei dieser Bedeckung viele benachbarte Stufen mit langen Au-Drähten zu erwarten sind. Dass die Halbwertsbreite bei einer Bedeckung von 200 s für beide Energien ein Maximum annimmt, lässt vermuten, dass bei dieser Bedeckung die Drähte auf den Stufen eher kurz sind.
Außerdem wird das Verhältnis der Intensitäten der Schulterfunktion und δ-Funktion gegen die Bedeckung bei beiden Energien grafisch aufgetragen, um das Verhältnis des Peaks und der Schulterfunktion zu untersuchen, dies ist in Abbildung 5.21 gezeigt. Anhand dieser Auswertung lässt sich Auskunft über die Rauheit der Oberfläche geben. Für eine Bedeckung von 280 s für die Messung bei 203 eV ist ein Sprung im Verlauf zu beobachten. Bei der Betrachtung der 2D-Aufnahme (Anhang B.2) wird deutlich, dass durch benachbarte Beugungsrelfexe auch die Intensität des Reflexes auf der Hauptachse beeinflusst wird und dadurch der Sprung in der Auswertung begründet werden kann.

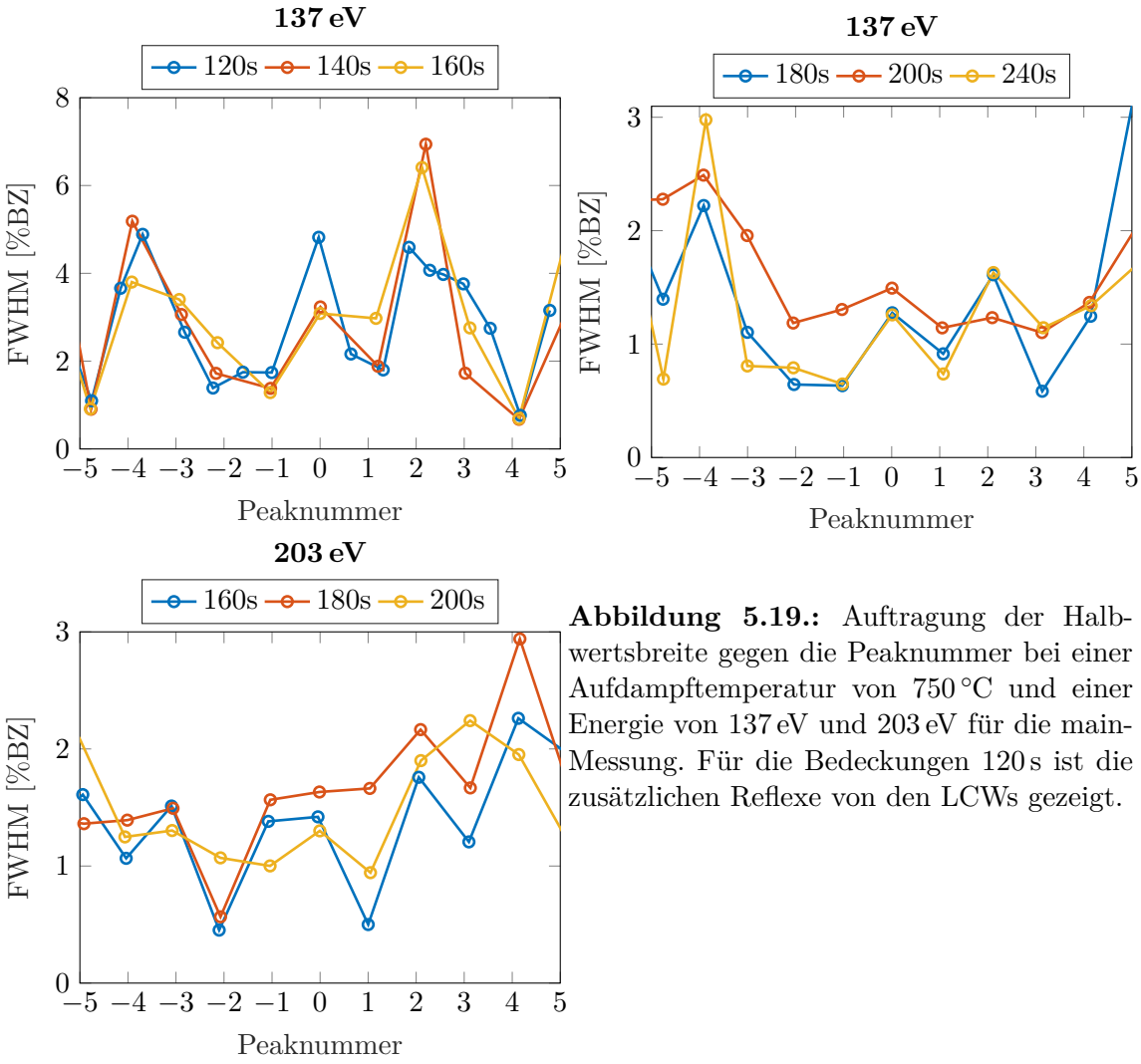


Abbildung 5.19.: Auftragung der Halbwertsbreite gegen die Peaknummer bei einer Aufdampftemperatur von 750 °C und einer Energie von 137 eV und 203 eV für die main-Messung. Für die Bedeckungen 120 s ist die zusätzlichen Reflexe von den LCWs gezeigt.

750°C 137 eV	160 s	22.44%BZ
	180 s	22.67%BZ
	200 s	22.17%BZ
	240 s	22.28%BZ
	280 s	22.49%BZ
		22.41%BZ

750°C 203 eV	160 s	23.12%BZ
	180 s	22.62%BZ
	200 s	22.87%BZ
		22.48%BZ

Tabelle 5.3.: Tabellarische Auflistung der durchschnittlichen Abstände in %BZ der Peaks für die HCWs für die main-Messung. Die untere dick gedruckte Zelle zeigt den über alle Bedeckungen gemittelten Abstand.

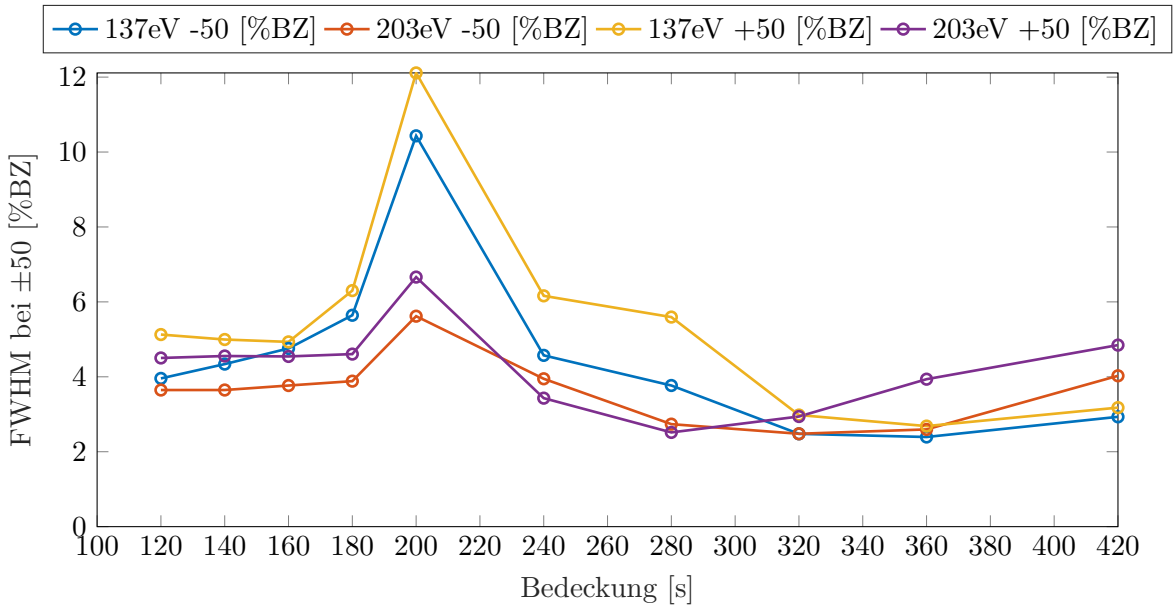


Abbildung 5.20.: Grafische Auswertung der senkrechten Messung. Aufgetragen ist die Halbwertsbreite des Peaks bei ±50%BZ gegen die Bedeckung bei einer Aufdampftemperatur von 750 °C und einer Energie von 137 eV und 203 eV.

Im übrigen Verlauf der Auswertung ist das Verhältnis beider Energien konstant in einem Bereich von 0.05 bis 0.1 für 137 eV und 0.04 bis 0.01 bei 203 eV. Dies lässt darauf schließen, dass die Bedeckung keinen Einfluss auf die Rauheit der Oberfläche hat.
Abbildung 5.22 zeigt die Auswertung der Halbwertsbreite der (00)er-Peaks aufgetragen gegen die Bedeckung. Für die senkrechte Messung wird die Halbwertsbreite bei 0%BZ und bei der main-Messung die der Peak-Nummer 0 gewählt. Für die Messung bei 137 eV ist bei der main-Messung der Peak Nummer +2 gewählt, da für diese Energie auch der Scan der senkrechten Messung entlang der Hauptachse verschoben ist. Es wird deutlich, dass besonders bei der senkrechten Messung bei beiden Energien die Halbwertsbreite im Bereich von 180 s bis 280 s nahezu konstant bleibt. Lediglich für die main-Messungen sind bei den Bedeckungen von 120 s bis 180 s sehr hohe Halbwertsbreiten zu beobachten. Mit Rücksicht auf die Linescans, siehe Anhang Abbildung B.4 und B.5, lassen sich bereits in diesen deutliche Unebenheiten erkennen, die sich wiederum auf die Halbwertsbreite auswirken können. Aufgrund der konstanten Halbwertsbreite für die senkrechte als auch die main-Messung innerhalb der Bedeckungen von 180 s bis 280 s lässt sich darauf schließen, dass auf der Oberfläche viele benachbarte Stufen mit langen Au-Ketten zu vermuten sind. Ab einer Bedeckung von 280 s lassen sich über die Ketten keine konkreten Aussagen treffen, da hier die Daten von der main-Messung für die Auswertung nicht mit einbezogen werden können. Steigt aber die Bedeckung über das Optimum für die HCW-Phase, bleiben die Ketten im Durchschnitt vorerst lang, dennoch verschlechtert sich die Periodizität senkrecht zu den Stufenkanten.

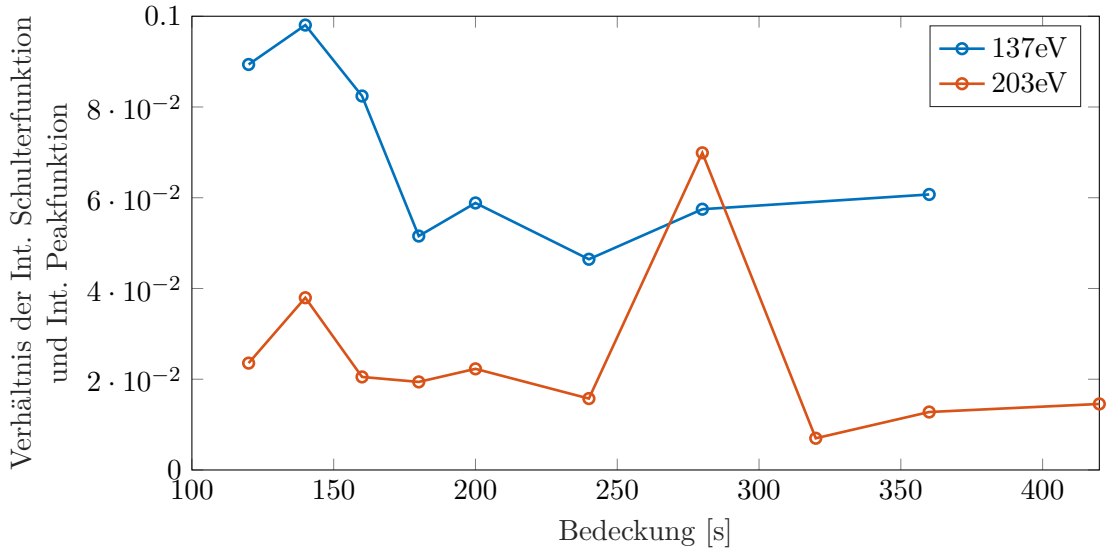


Abbildung 5.21.: Grafische Auswertung der senkrechten Messung. Aufgetragen ist das Verhältnis der Intensitäten der Schulterfunktion und Peakfunktion gegen die Bedeckung bei einer Energie von 137 eV und 203 eV.

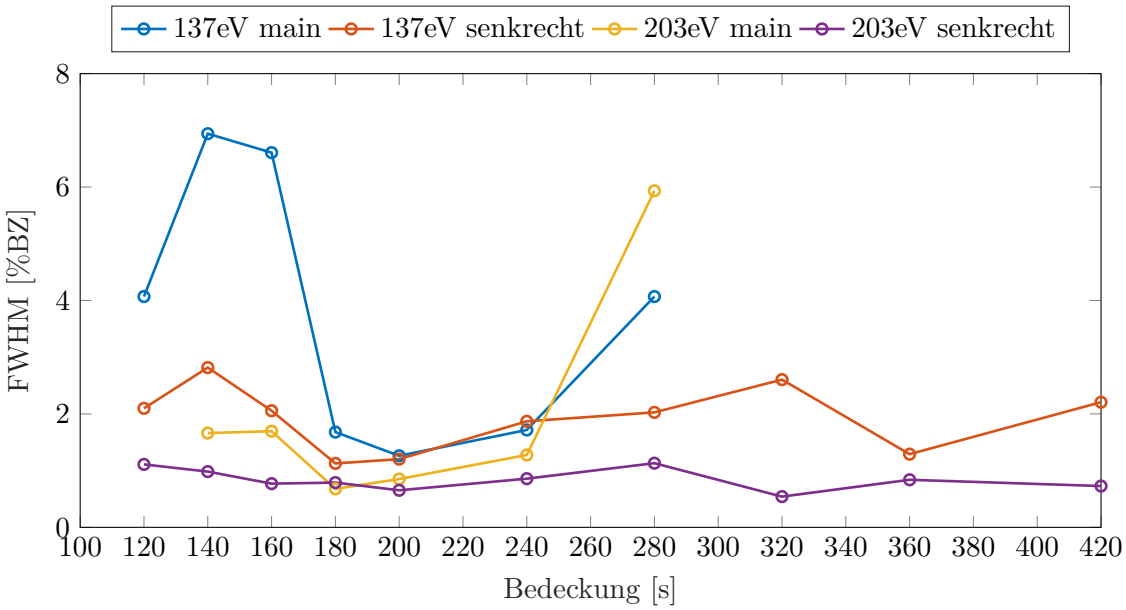
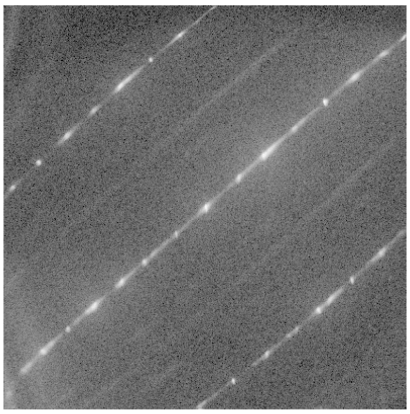
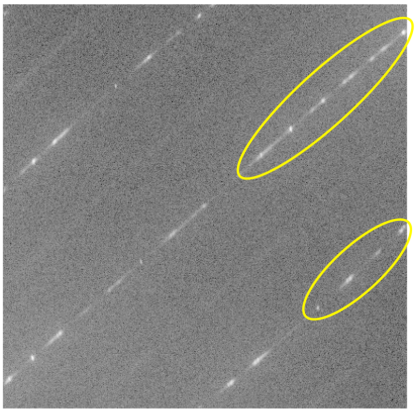


Abbildung 5.22.: Aufgetragen ist die Halbwertsbreite gegen die Bedeckung bei einer Energie von 137 eV und 203 eV. Bei der senkrechten Messung wird die Halbwertsbreite des Peaks bei 0%BZ und bei der main-Messung bei 0%BZ gewält. Für die Messung bei 137 eV ist bei er main-Messung der Peak Nummer +2 gewählt.

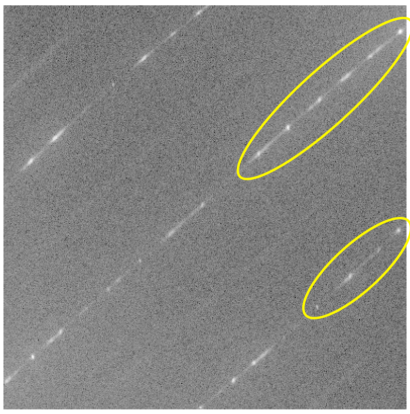
5.2.4. Probentemperatur 850 °C



(a) 850 °C, 180 s, 137 eV



(b) 750 °C, 140 s, 203 eV



(c) 850 °C, 180 s, 203 eV

Abbildung 5.23.: Obere Reihe: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche bei einer Bedeckung von 180 s bei einer Energie in a) von 137 eV und in b) 203 eV. Die Aufdampftemperatur beträgt 850 °C. c) zeigt eine 2D-SPA-LEED-Aufnahme einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche bei einer Probentemperatur von 750 °C und einer Bedeckung 140 s bei einer Energie von 203 eV.

In Abbildung 5.23(a) und 5.23(c) sind die SPA-LEED-Aufnahmen bei der Bedeckung von 180 s für beide Energien für die Probentemperatur 850 °C dargestellt. Abbildung 5.24 zeigt die zu Abbildung 5.23 zugehörigen Scans der main- und senkrechten Messung.
Wie bereits zu Beginn in Kapitel 5.1 erwähnt, wird für die Messung bei 850 °C nur eine Bedeckung von 180 s gewählt, da bereits zwischen den Temperaturen 600 °C und 750 °C keine wesentlichen Unterschiede in der 2D-Aufnahmen zu bemerken waren. Um diese Beobachtung aus qualitativer Sicht zu untersuchen, sind in Abbildung 5.23 drei 2D-Aufnahmen bei den Temperaturen 750 °C und 850 °C gezeigt. Es zeigt sich, dass sich die größte Übereinstimmung der 2D-Aufnahmen bei einer Temperatur von 750 °C und einer Bedeckung von 140 s ergibt. Große Übereinstimmungen in den 2D-Aufnahmen sind in Abbildung 5.23(c) und 5.23(b) in Gelb markiert. Dies lässt vermuten, dass bei einer höheren Temperatur der Haftkoeffizient anders ist und so die Gold-Atome schlechter an der Oberfläche haften bleiben als bei einer geringeren Temperatur. Zudem deutet es darauf hin, dass eine weitere Erhöhung der Temperatur keine wesentliche Änderung der Struktur verursacht. Aus Abbildung 5.24 wird deutlich, dass eine Bestimmung der Peaknumm-

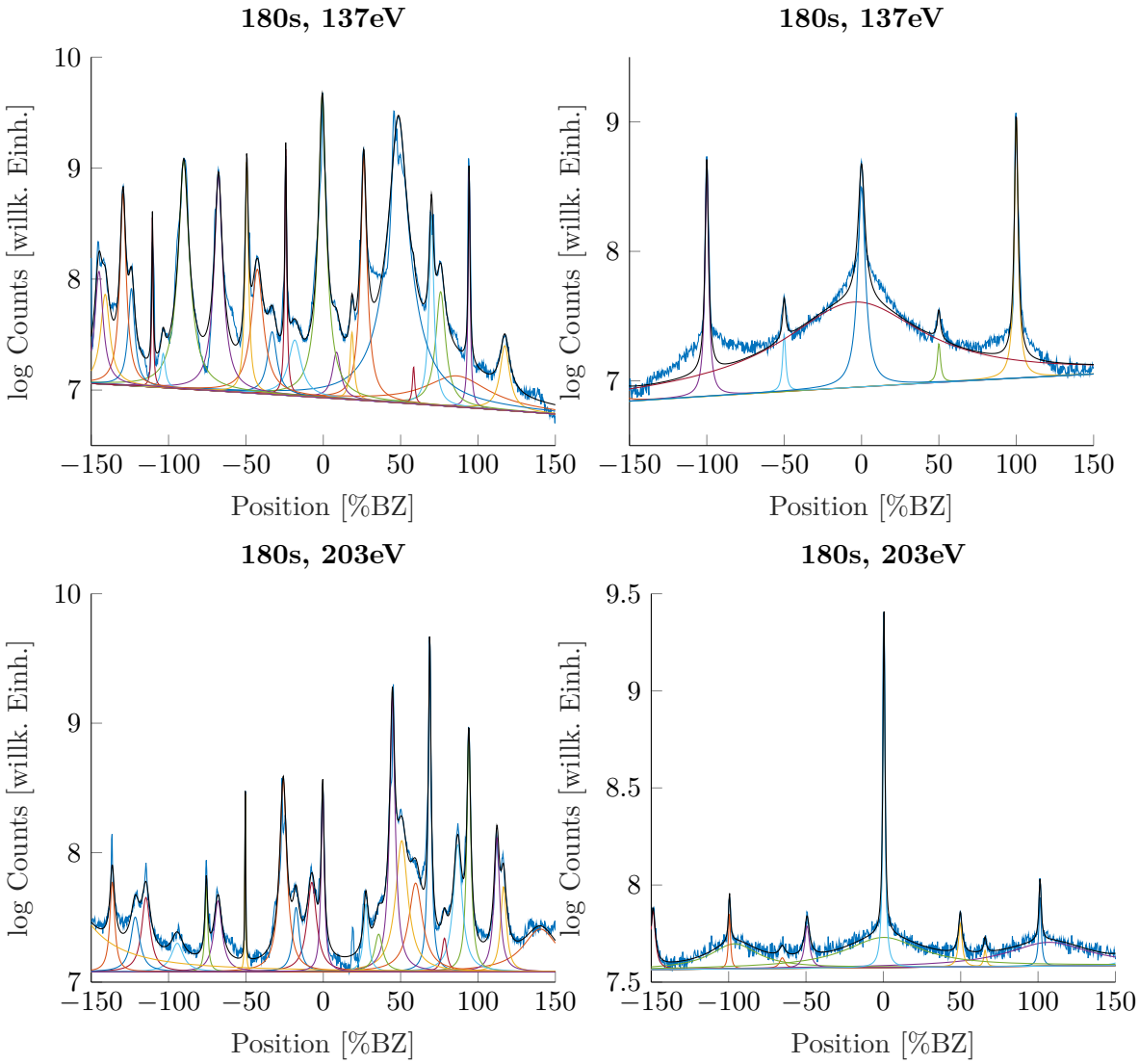


Abbildung 5.24.: 1D-Scans der main-Messung der aus Abbildung 5.23 gezeigten 2D-Aufnahmen. Die Bedeckungen und Energien entsprechen denen aus Abbildung 5.23.

mer nicht möglich ist. Grund dafür kann ein zu großes Untergrundrauschen und andere Überstrukturen sein. Daraus folgt auch, dass weder die HCWs noch LCWs nachgewiesen werden können.

5.3. Vergleich der Temperaturen

Im Vergleich der 2D-Aufnahmen fallen zwischen den Temperaturen keine wesentliche Unterschiede auf. Es zeigt sich aber, wie bereits in Abbildung 5.23, dass für eine höhere Temperatur eine größere Übereinstimmung in den 2D-Aufnahmen bei höherer Bedeckung auftritt. Ein möglicher Grund dafür kann ein anderer Haftkoeffizient bei höheren Temperaturen sein. Außerdem werden bei der Messung von 600 °C Reflexe einer Überstruktur schon bei einer Bedeckungen von 200 s beobachtet. Bei der Probentemperatur von 750 °C werden diese erst bei einer Bedeckung von 240 s deutlich erkennbar. Weitere Reflexstreifen, die in Abbildung 5.7(e) mit einem gelben Oval markiert sind, können bei einer Temperatur von 750 °C schon bei einer Bedeckung von 280 s beobachtet werden, während diese bei einer Temperatur von 600 °C erst bei einer Bedeckung von 320 s sichtbar werden. Im Allgemeinen lässt sich sagen, dass sich die 2D-Aufnahmen für die Temperaturen 600 °C und 750 °C qualitativ wenig unterscheiden.
Im Vergleich der Linescans der beiden Temperaturen lassen sich keine wesentliche Unterschiede feststellen. Für beide Temperaturen sind die Verläufe und die Entwicklung der Bedeckungen ähnlich. Im Bezug auf die Auswertung der Halbwertsbreite der main-Messung können für beide Temperaturen ähnliche Verläufe dargestellt werden. Für 750 °C können die halbzahligen Peaknummern allerdings nur für eine Bedeckung von 120 s notiert werden, da bei höheren Bedeckungen die Peaks nicht eindeutig in ihrer halbzahligen Peaknummer bestimmt werden konnten, dies ist auch in Abbildung B.4 und B.5 zu erkennen.
Um eine Aussage über die Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Temperatur zu bekommen, sind in Tabelle 5.4 alle Halbwertsbreiten der $\times 2$-Reflexstreifen für alle Temperaturen aufgelistet. Da für 850 °C nur bei einer Bedeckung von 180 s gemessen wurde, sind bei den Temperaturen 600 °C und 750 °C die Halbwertsbreiten ebenfalls für eine Bedeckung von 180 s aufgeführt. Im Vergleich der Temperaturen 600 °C und 750 °C sind die Halbwertsbreiten bei +50%BZ 137 eV bei 600 °C größer als bei 750 °C. Im Vergleich der Temperaturen 850 °C und 750 °C sind, auch mit Rücksicht auf die Fehler, alle Halbswertsbreiten geringer als bei 600 °C und 750 °C. Eine kleine Halbwertsbreite der $\times 2$-Reflexstreifen deutet auf große Domänen einheitlicher Struktur mit langen Nanodrähten hin. Eine Verbesserung der höheren Mobilität der Au-Atome ist somit durch hohe Temperaturen bedingt.
Auch für den Verlauf des Verhältnisses der Schulter- und Peakfunktion aus Abbildung 5.13 und 5.21 ergeben sich für beide Temperaturen ähnliche Verläufe. Das Verhältnis bei beiden Temperaturen liegt in der gleichen Größenordnung im Bereich von $5 \cdot 10^{-2}$. Im Bezug auf die Auswertung der Halbwertsbreite für die main- und senkrechte Messung aus Abbildung 5.14 und 5.22 lassen sich keine wesentlichen Unterschiede erkennen. Dies deutet darauf hin, dass die Temperatur keinen großen Einfluss auf die Form der Domänen einnimmt, bzw., dass für beide Temperaturen auf der Oberfläche viele Stufen mit langen Au-Ketten zu vermuten sind. In den Tabellen 5.5 und 5.6 sind jeweils die Intensitäten bei der Messung für 137 eV aufgelistet. Die Tabellen vergleichen die Intensität von Peaknummer 4

mit dem Peak Nummer 3.5. Es wird vermutet, dass die Intensität vom Peaknummer 3.5 mit zunehmender Bedeckung kleiner wird und die Intensität von Peaknummer 4 zunimmt. In Tabelle 5.5 zeigt sich aber, dass sich die Intensität bei einer Bedeckung von 100 s auf 120 s erhöht hat und erst ab 120 s wie zu erwarten sinkt. Die Intensität von Peaknummer 4 steigt hingegen wie zu erwarten mit zunehmender Bedeckung. Da bei der Temperatur von 750 °C der Peak Nummer 3.5 nur bei einer Bedeckung von 120 s beobachtet werden kann, kann hier die Intensität nicht mit anderen Bedeckungen verglichen werden. Für die Messung bei 600 °C geht vermutlich die LCW-Phase in die HCW-Phase über, weshalb hier die Intensität des Peaks Nummer 3.5 mit zunehmender Bedeckung größer wird. Für 750 °C kann diese Vermutung anhand der Daten leider nicht verifiziert werden.
Um einen direkten Vergleich der Halbwertsbreite in der main-Messung für beide Temperaturen zu erhalten, ist in Abbildung 5.25 die Halbwertsbreite gegen die Peaknummer aufgetragen, die Halbwertsbreite ist über alle Bedeckungen gemittelt. Es wird deutlich, dass die Halbwertsbreite im Mittel bei 600 °C höher ist als bei 750 °C. In Verbindung mit den Auswertungen aus Abbildung 5.14 und 5.22 kann geschlossen werden, dass auf vielen benachbarten Stufen Nanodrähte vorhanden sind. Der Verlauf der Halbwertsbreite verhält sich ähnlich wie bei der Messung bei 600 °C, indem bestimmte Peak-Nummern mit einer besonders kleinen oder großen Halbwertsbreite korrelieren. In Abbildung 5.26 sind weitere Reflexe anhand ihrer Halbwertsbreite ausgewertet. Es ist die Halbwertsbreite bestimmter Reflexe gegen die Bedeckung aufgetragen, wobei jeweils ein Reflex mit geringer und großer Halbwertsbreite ausgewertet wird. Es zeigt sich, dass für beide Temperaturen und Energien die Verläufe sehr ähnlich sind.

FWHM	**600°C**	**750°C**	**850°C**
−50% BZ 137 eV	4.80%BZ	5.64%BZ	3.58%BZ
−50% BZ 203 eV	3.71%BZ	3.88%BZ	3.59%BZ
+50% BZ 137 eV	6.41%BZ	6.30%BZ	3.05%BZ
+50% BZ 203 eV	3.68%BZ	4.60%BZ	2.71%BZ

Tabelle 5.4.: Tabellarische Auflistung der Halbwertsbreiten bei ±50%BZ für die ×2-Reflexstreifen für beide Energien und alle Temperaturen. Da für 850 °C nur bei einer Bedeckung von 180 s gemessen wurde, sind bei den Temperaturen 600 °C und 750 °C die Halbwertsbreiten ebenfalls für eine Bedeckung von 180 s aufgelistet.

Intensität [Counts]	**100s**	**120s**	**140s**
Peak Nr. 4	13713	14194	16070
Peak Nr. 3.5	7163	7854	4965

Tabelle 5.5.: Tabellarische Auflistung zum Vergleich der Intensitäten eines Peaks mit niedriger Halbwertsbreite für die Messung bei einer Aufdampftemperatur von 600 °C und einer Energie von 137 eV. Es sind jeweils die Bedeckungen aufgelistet, die im Scan auch einen Peak davor besitzen.

Intensität [Counts]	120s	140s	160s
Peak Nr. 4	5458	9596	11806
Peak Nr. 3.5	3858	-	-

Tabelle 5.6.: Tabellarische Auflistung zum Vergleich der Intensitäten eines Peaks mit niedriger Halbwertsbreite für die Messung bei einer Aufdampftemperatur von 750 °C und einer Energie von 137 eV.

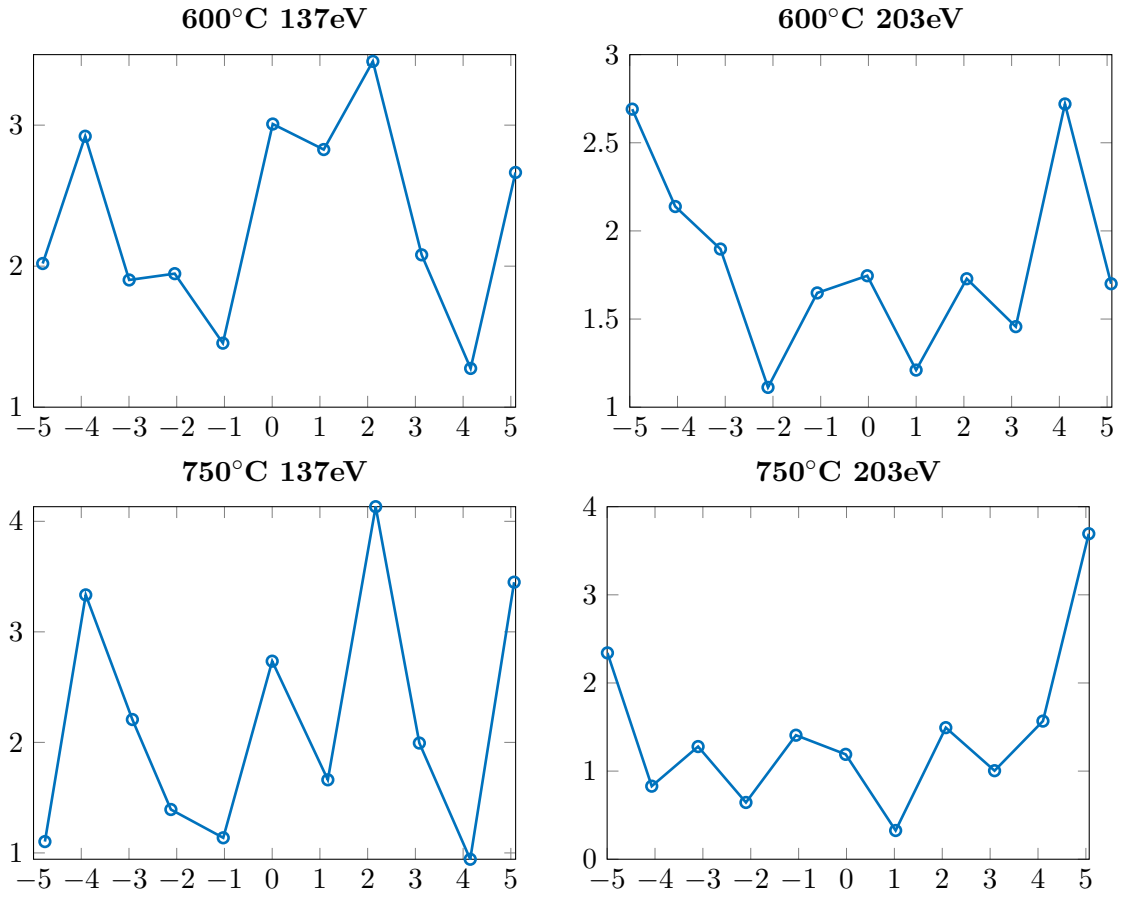


Abbildung 5.25.: Aufgetragen ist die über alle Bedeckungen gemittelte Halbwertsbreite des Peaks bei gegen die gemittelte Halbwertsbreite bei einer Aufdampftemperatur von 600 °C und 750 °C und einer Energie von 137 eV und 203 eV.

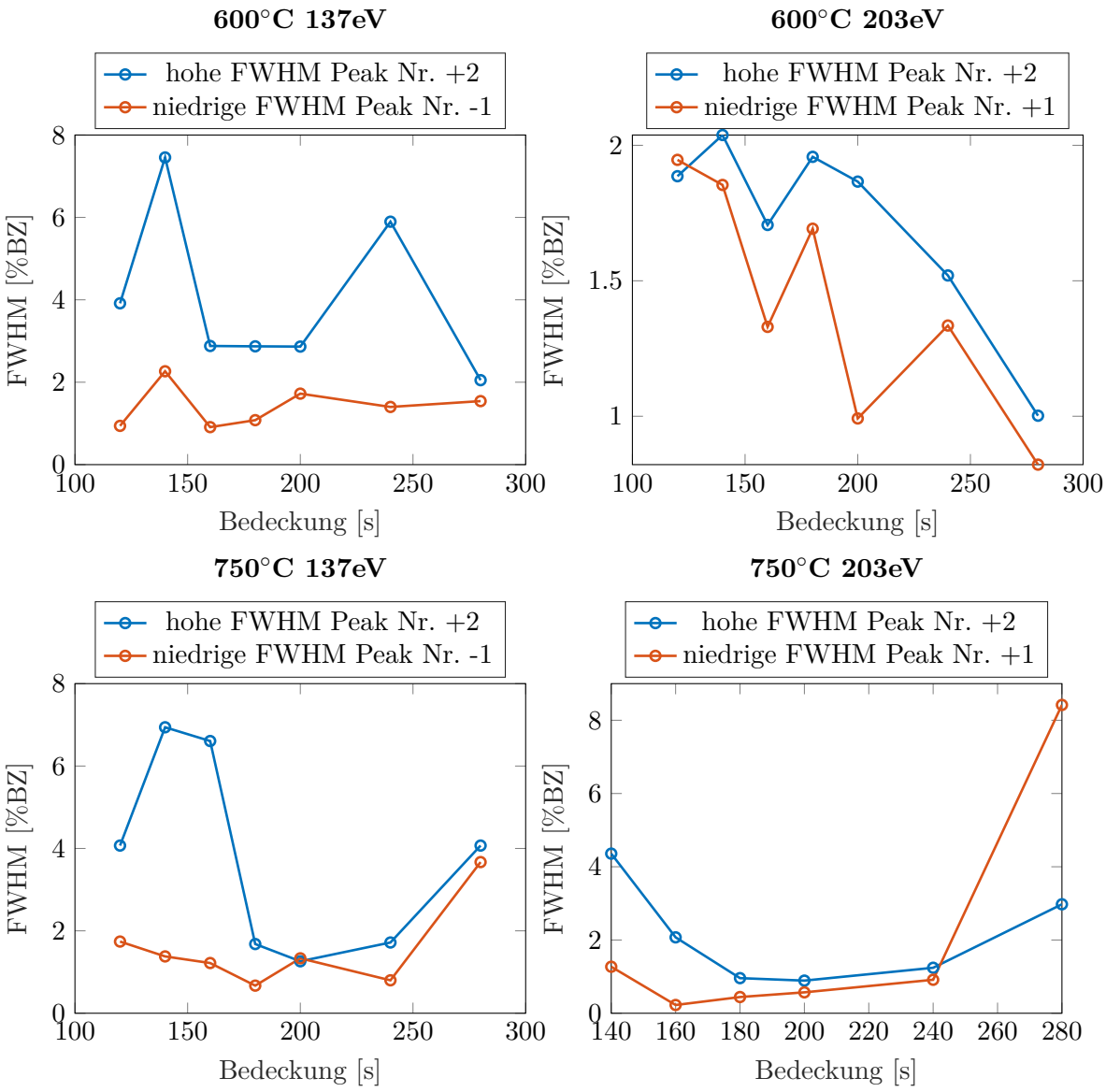


Abbildung 5.26.: Grafische Auswertung der main-Messung. Aufgetragen ist die Halbwertsbreite ausgewählter Peaks gegen die Bedeckung bei einer Aufdampftemperatur von 600 °C und 750 °C und einer Energie von 137 eV und 203 eV.

6. Zusammenfassung

Diese Arbeit hat sich mit der Untersuchung von Oberflächenstrukturen mit Hilfe der SPA-LEED-Messmethode beschäftigt. Ziel dieser Arbeit war die Erzeugung Au-induzierter Nanodrähte auf der vicinalen Oberfläche Si(553). Es galt den Einfluss der Au-Bedeckung und Substrattemperatur auf die Au-Dimer-Ketten anhand verschiedener Parameter zu untersuchen. Die Daten wurden beispielsweise anhand der Halbwertsbreite, Bedeckung oder Position einzelner Reflexe analysiert. Außerdem wurden die aus der Literatur bekannten LCW- oder HCW-Phasen bei unterschiedlichen Bedeckungen erzeugt und konnten mit verschiedenen Auswertungen nachgewiesen werden [12].
Die Auswertungen der 2D-Aufnahmen bei den Temperaturen 600 °C, 750 °C und 850 °C haben ergeben, dass zwischen den Temperaturen qualitativ keine wesentlichen Unterschiede zu erkennen sind. Dennoch ist zu beobachten, dass sich für eine höhere Temperatur eine größere Übereinstimmung bei höheren Bedeckungen im Vergleich zu einer niedrigeren Temperatur ergibt. Andere Reflexe, die von weiteren Überstrukturen herrühren, werden bei höheren Temperaturen erst bei einer höheren Bedeckung sichtbar. Die in dieser Arbeit interessanten $\times 2$-Reflexstreifen bei $\pm 50\%$BZ sind für alle Temperaturen und Bedeckungen in den 2D-Aufnahmen und in den Linescans zu erkennen. Die Auswertungen der Halbwertsbreiten haben ergeben, dass zwischen den Temperatur von 600 °C und 750 °C keine wesentlichen Unterschiede zu erkennen sind. Für 850 °C bei einer Bedeckung von 180 s konnte hingegen eine deutlich kleinere Halbwertsbreite bestätigt werden. Dies lässt darauf schließen, dass bei höheren Temperaturen die Halbwertsbreite kleiner ist und somit die Au-Domänen groß und die Au-Dimer-Ketten besonders lang sind.
Die Auswertungen der Halbwertsbreite des Peaks bei 0%BZ für die senkrechte und main-Messung haben konstante Halbwertsbreiten für beide Messungen ergeben. Es kann somit auf eine Oberfläche geschlossen werden, die aus langen Au-Ketten auf vielen Stufen besteht. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass viele Ergebnisse aus der Literatur reproduziert und verifiziert werden konnten. Neben den LCW- und HCW-Phasen konnten auch Zwischenphasen beobachtet werden, die allerdings nicht vollständig untersucht werden konnten. Des Weiteren hat die Analyse der $\times 2$-Reflexstreifen ergeben, dass besonders lange Ketten bei hohen Temperaturen und höheren Bedeckungen zu vermuten sind.
Für die Zukunft wären die erwähnten Zwischenphasen von Interesse, die mit Hilfe anderer Messmethoden untersucht werden können. Zudem ist die Optimierung der Au-Dimer-Ketten von großer Bedeutung, die ebenfalls auf anderen Wegen näher untersucht werden können. Dies kann neue Einblicke in die Herstellung atomarer Drähte auch für die Halb-

leitertechnik bieten.

Literaturverzeichnis

[1] Julian Aulbach. “Gold-Induced Atomic Wires on Terraced Silicon Surfaces: Formation and Interactions of Silicon Spin Chains”. Diss. Julius-Maximilians-Universität Würzburg, 2017.

[2] Daniel Bruns. “Structure and morphology of ultrathin iron and iron oxide Films on Ag(001)”. Diss. Universität Osnabrück, 2012.

[3] Steven C. Erwin, Ingo Barke und F. J. Himpsel. “Structure and energetics ofSi(111)-(5×2)-Au”. In: *Physical Review B* 80.15 (Okt. 2009), S. 155409. DOI: 10.1103/physrevb.80.155409.

[4] Sebastian Gevers. “SPA-LEED-Untersuchungen von Praseodymoxidschichten auf Si(111)-Substraten”. Magisterarb. Universität Osnabrück, 2007.

[5] Thorben Groven. “SPA-LEED-Untersuchungen zu Au-induzierten Nanodrähten auf Si(553)”. Magisterarb. Universität Osnabrück, 2020.

[6] Konrad Kopitzki. *Einführung in die Festkörperphysik*. StuttgartLeipzigWiesbaden: Teubner, 2004. ISBN: 3519430835.

[7] Mariusz Krawiec. “Structural model of the Au-induced Si(553) surface: Double Au rows”. In: *Physical Review B* 81.11 (März 2010), S. 115436. DOI: 10.1103/physrevb.81.115436.

[8] Se Gab Kwon und Myung Ho Kang. “Identification of the Au Coverage and Structure of the Au/Si(111)-(5×2)Surface”. In: *Physical Review Letters* 113.8 (Aug. 2014), S. 086101. DOI: 10.1103/physrevlett.113.086101.

[9] V. G. Lifshits u. a. *Surface Science*. Springer-Verlag GmbH, Mai 2003. ISBN: 3540005455. URL: https://www.ebook.de/de/product/2318569/v_g_lifshits_alexander_a_saranin_a_v_zotov_m_katayama_k_oura_surface_science.html.

[10] U. Scheithauer, G. Meyer und M. Henzler. “A new LEED instrument for quantitative spot profile analysis”. In: *Surface Science* 178.1-3 (Dez. 1986), S. 441–451. DOI: 10.1016/0039-6028(86)90321-3.

[11] Waldemar Schreiber. “SPA-LEED-Untersuchungen an epitaktischen Terbium-Silizid-Schichten auf Silizium(111)- und Silizium(557)-Oberflächen”. Magisterarb. Universität Osnabrück, 2017.

[12] Inkyung Song u. a. “Realization of a Strained Atomic Wire Superlattice”. In: *ACS Nano* 9.11 (Okt. 2015), S. 10621–10627. DOI: 10.1021/acsnano.5b04377.

[13] J. Wollschläger. “Diffraction from surfaces with randomly distributed structural defects”. In: *Surface Science* 328.3 (Mai 1995), S. 325–336. DOI: 10.1016/0039-6028(95)00059-3.

[14] J. Wollschläger, J. Falta und M. Henzler. “Electron diffraction at stepped homogeneous and inhomogeneous surfaces”. In: *Applied Physics A Solids and Surfaces* 50.1 (Jan. 1990), S. 57–68. DOI: 10.1007/bf00323955.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich bei dieser Arbeit unterstützt haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei Porf. Dr. Wollschläger, der mich in der Arbeitsgruppe *Dünne Schichten und Grenzflächen* aufgenommen und diese Bachelorarbeit erst möglich gemacht hat. Außerdem möchte ich Prof. Dr. Simone Sanna danken, der sich als Position des Zweitprüfers bereiterklärt hat. Einen ganz großen Dank geht an meinen Betreuer Jascha Bahlmann, der mich zu jeder Zeit mit Rat und Tat unterstützt hat, sei es bei technischen Problemen oder zum Korrekturlesen meiner Arbeit. Zu guter Letzt möchte ich besonders meiner Familie und meinem Freund danken, die mich in jeder Lage unterstützt und mentale Unterstützung geleistet haben.

Erklärung zur selbständigen Abfassung der Bachelorarbeit

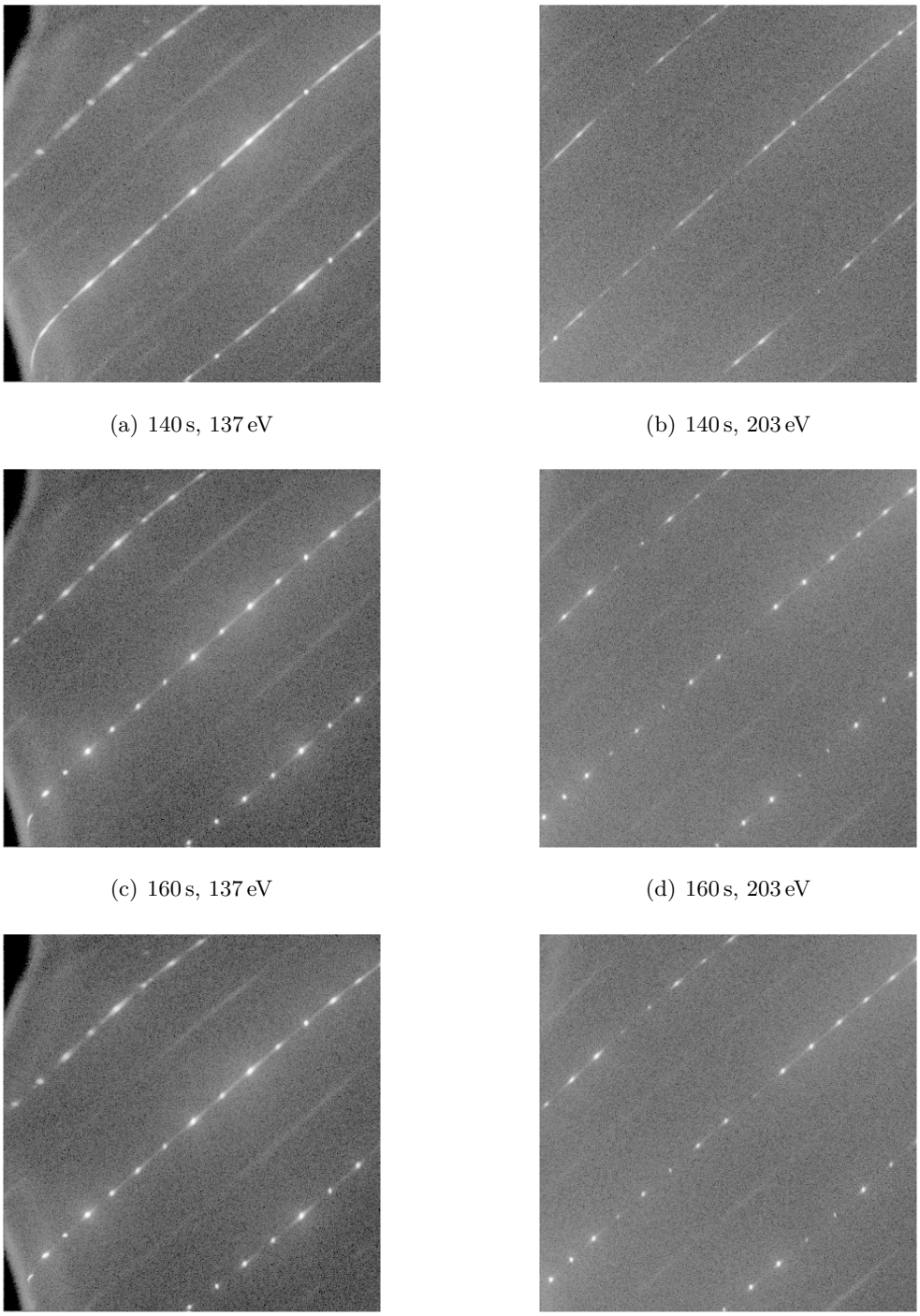
Name: Lena Debbrecht
Geburtsdatum: 25.09.1998
Matrikelnummer: 974412
Titel der Bachelorarbeit: SPA-LEED-Untersuchungen der Ordnung von Au-induzierten Nanodrähten auf Si(553)

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, 28. September 2021

Lena Debbrecht

A. Anhang zu 600°C



(a) 140 s, 137 eV

(b) 140 s, 203 eV

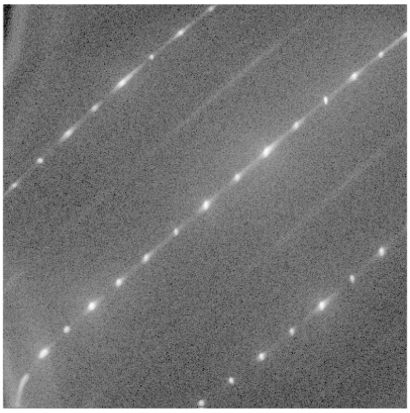
(c) 160 s, 137 eV

(d) 160 s, 203 eV

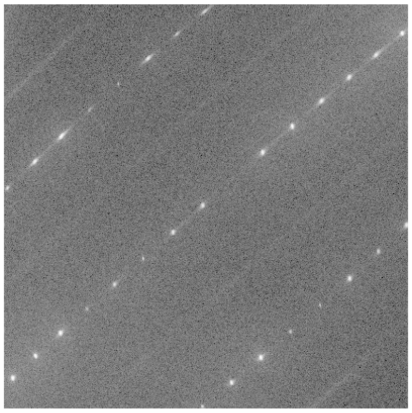
(e) 180 s, 137 eV

(f) 180 s, 203 eV

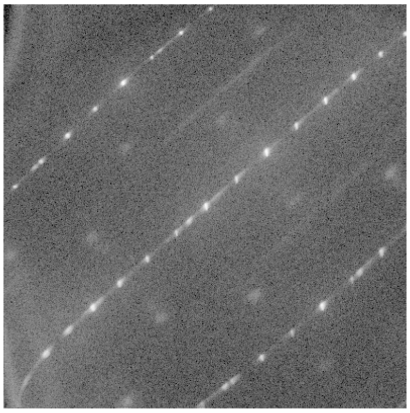
Abbildung A.1.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 600 °C.



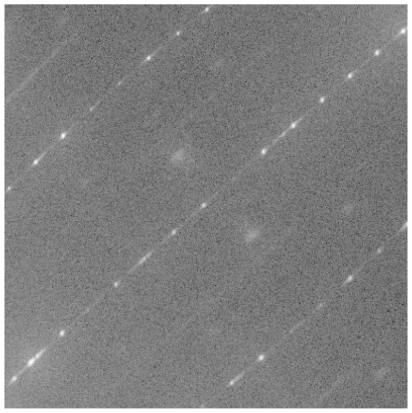
(a) 240 s, 137 eV



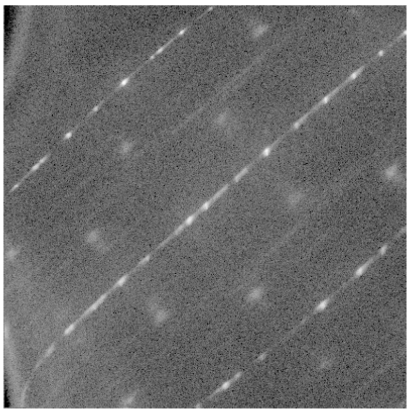
(b) 240 s, 203 eV



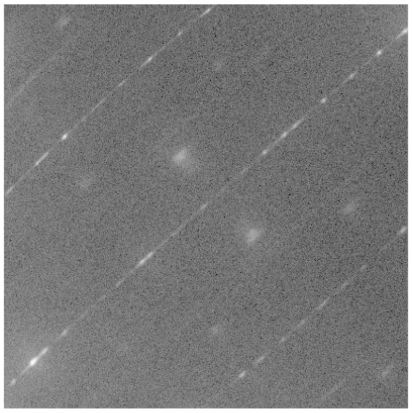
(c) 280 s, 137 eV



(d) 280 s, 203 eV

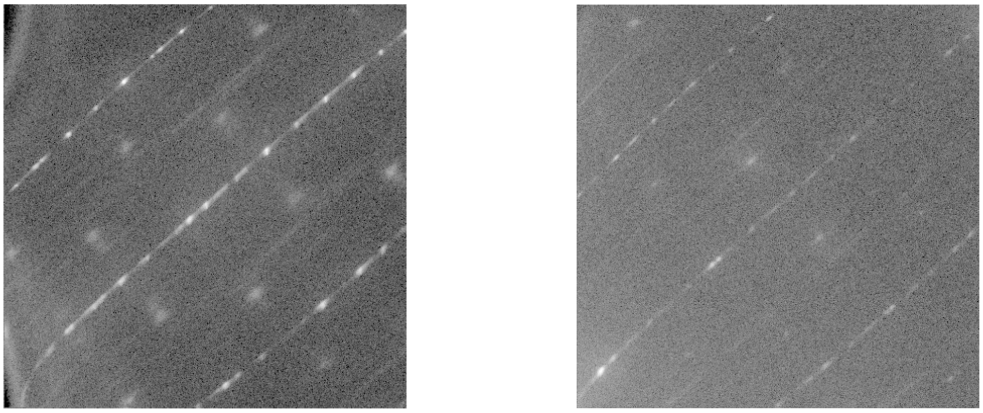


(e) 320 s, 137 eV



(f) 320 s, 203 eV

Abbildung A.2.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 600 °C.



(a) 360 s, 137 eV (b) 360 s, 203 eV

Abbildung A.3.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 600 °C.

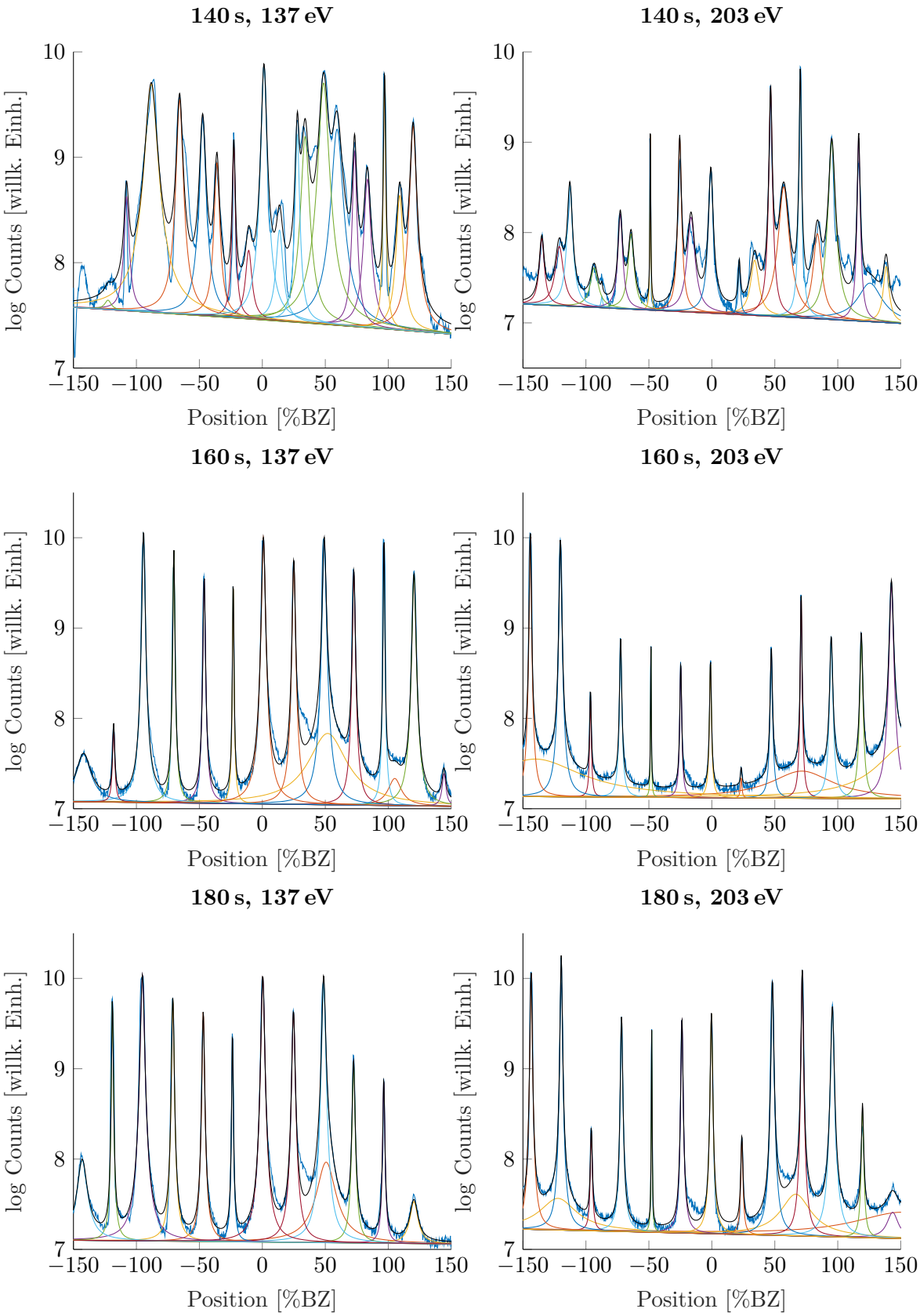


Abbildung A.4.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 600 °C.

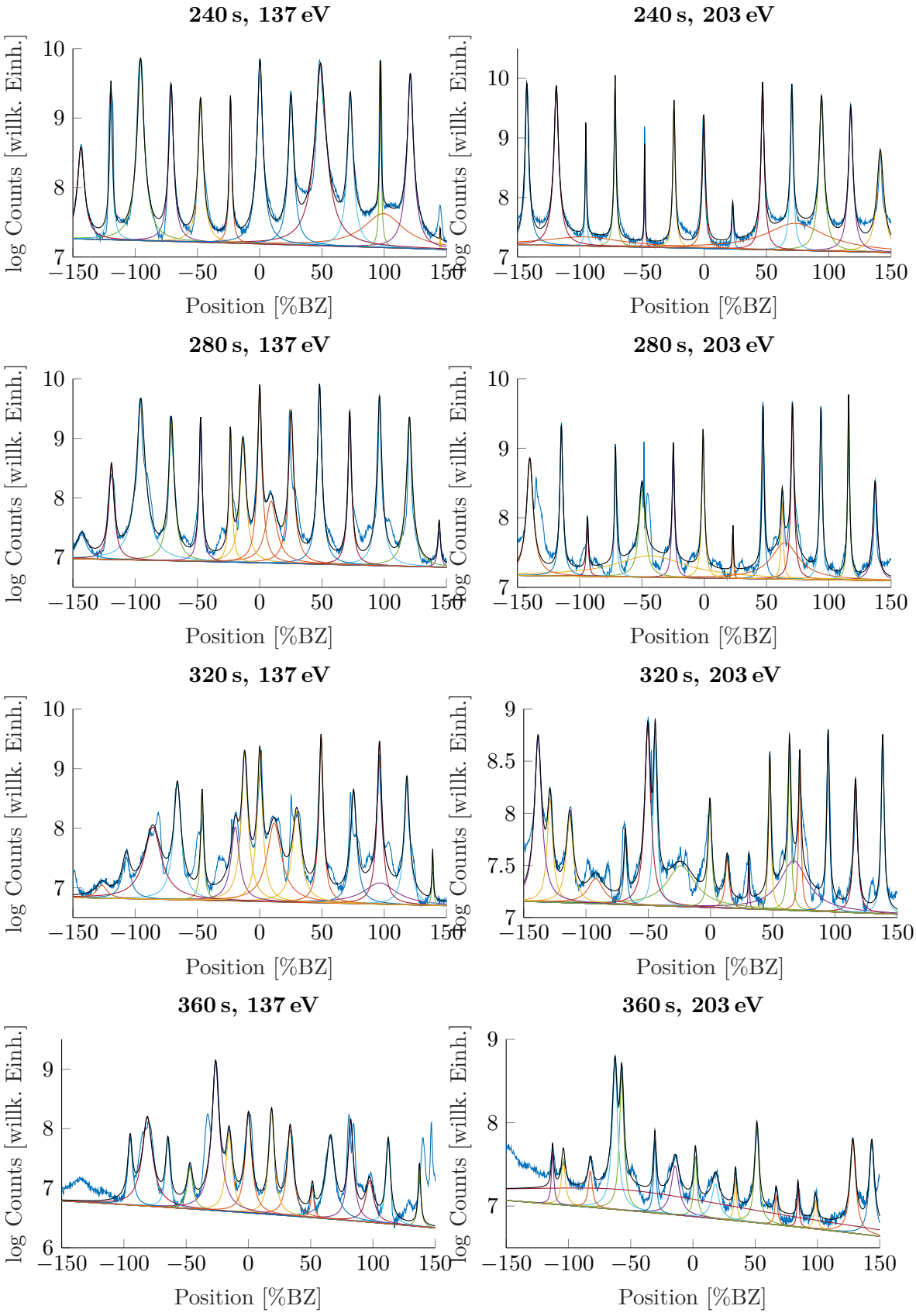


Abbildung A.5.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 600 °C.

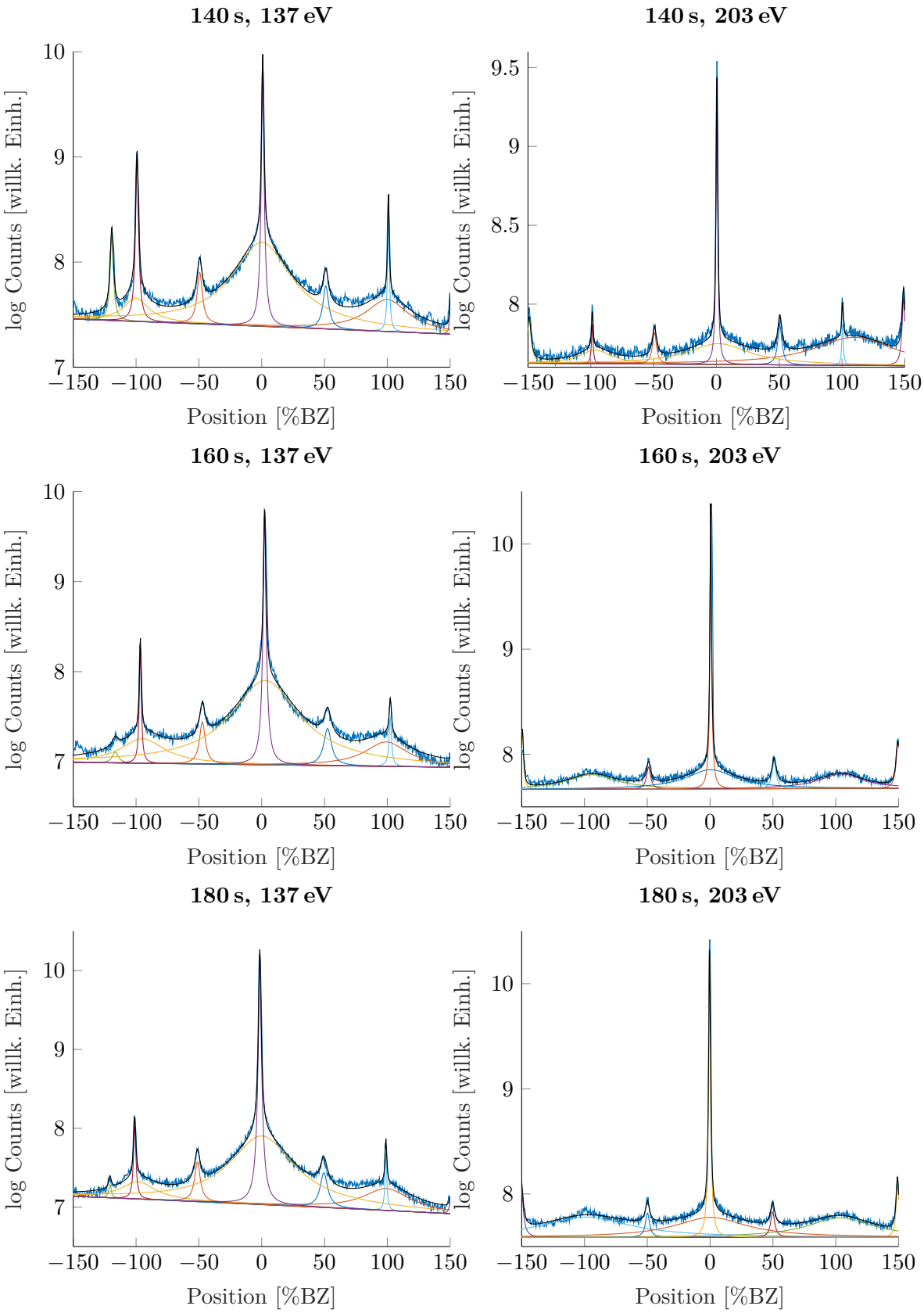


Abbildung A.6.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 600 °C.

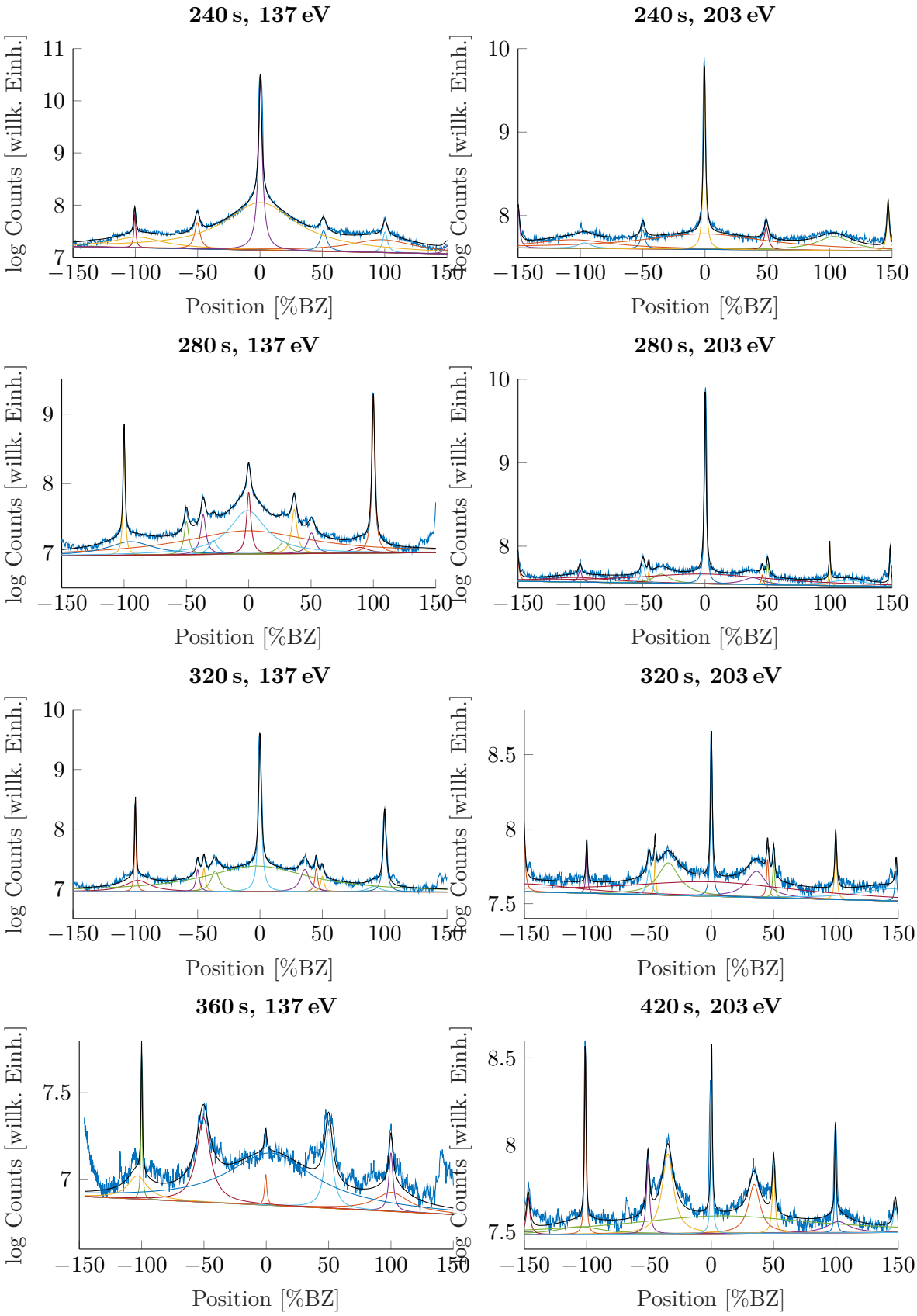
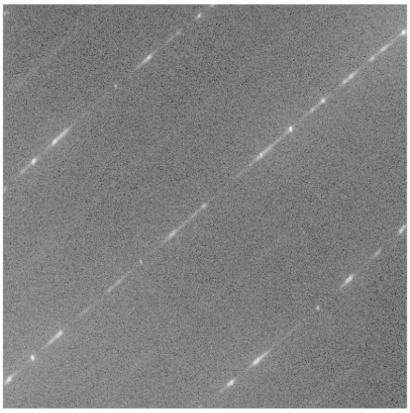
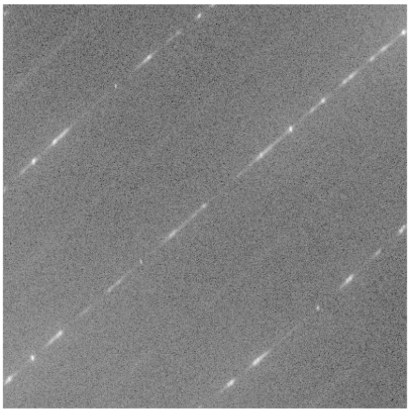


Abbildung A.7.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 600 °C.

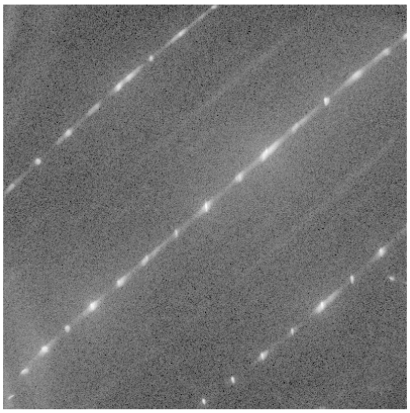
B. Anhang zu 750°C



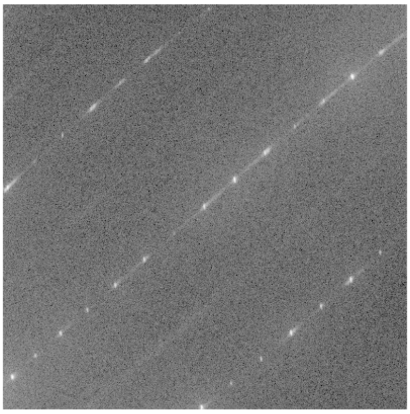
(a) 140 s, 137 eV



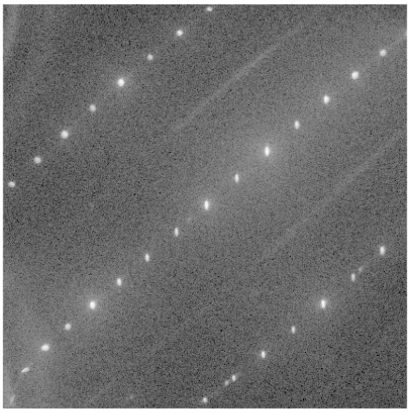
(b) 140 s, 203 eV



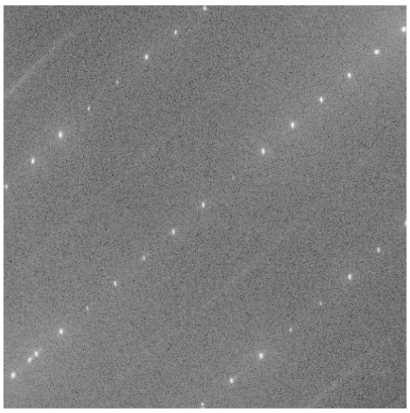
(c) 160 s, 137 eV



(d) 160 s, 203 eV

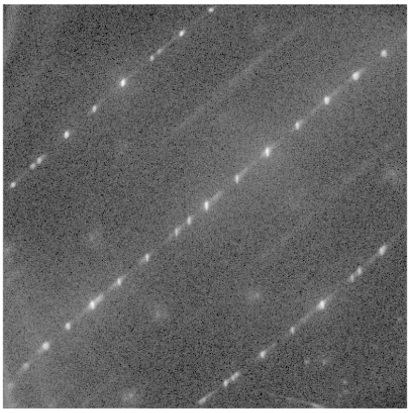


(e) 180 s, 137 eV

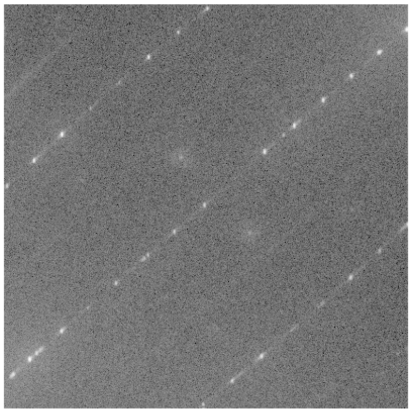


(f) 180 s, 203 eV

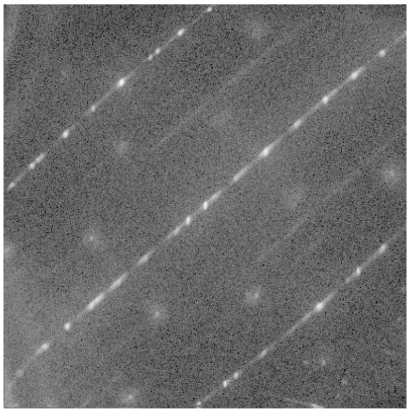
Abbildung B.1.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 750 °C.



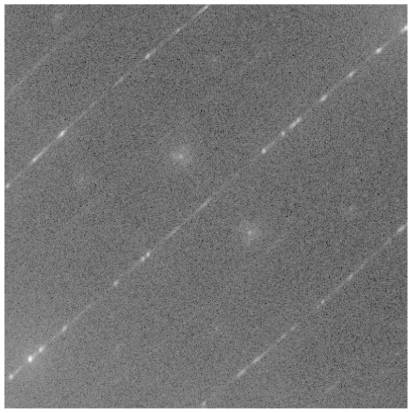
(a) 240 s, 137 eV



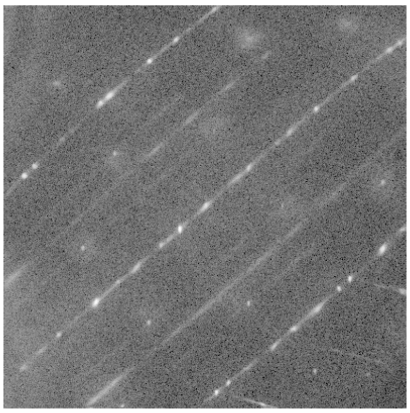
(b) 240 s, 203 eV



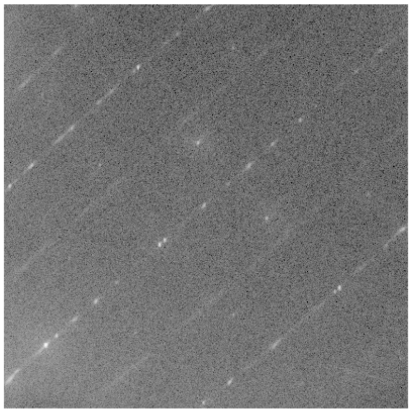
(c) 280 s, 137 eV



(d) 280 s, 203 eV

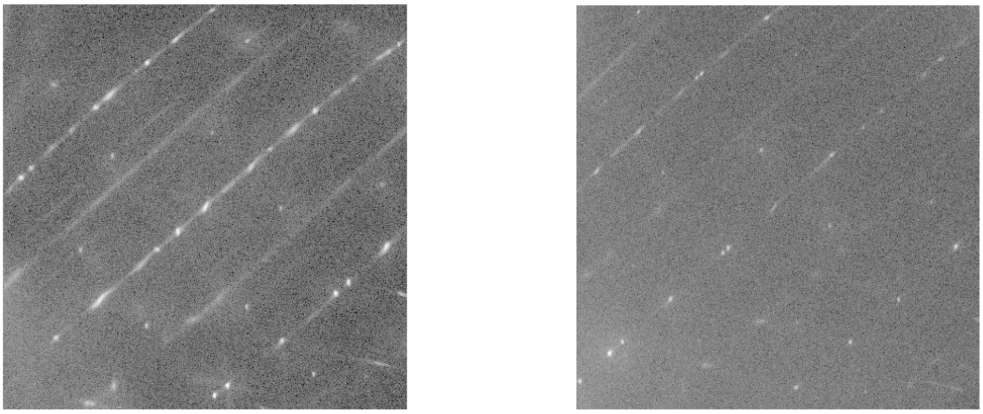


(e) 320 s, 137 eV



(f) 320 s, 203 eV

Abbildung B.2.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 750 °C.



(a) 360 s, 137 eV (b) 360 s, 203 eV

Abbildung B.3.: 2D-SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Gold bedeckten Si(553)-Oberfläche. Die linke Seite zeigt Aufnahmen bei einer Energie von 137 eV und die rechte Seite eine Energie von 203 eV. Die Probentemperatur beim Aufdampfen von allen Aufnahmen beträgt 750 °C.

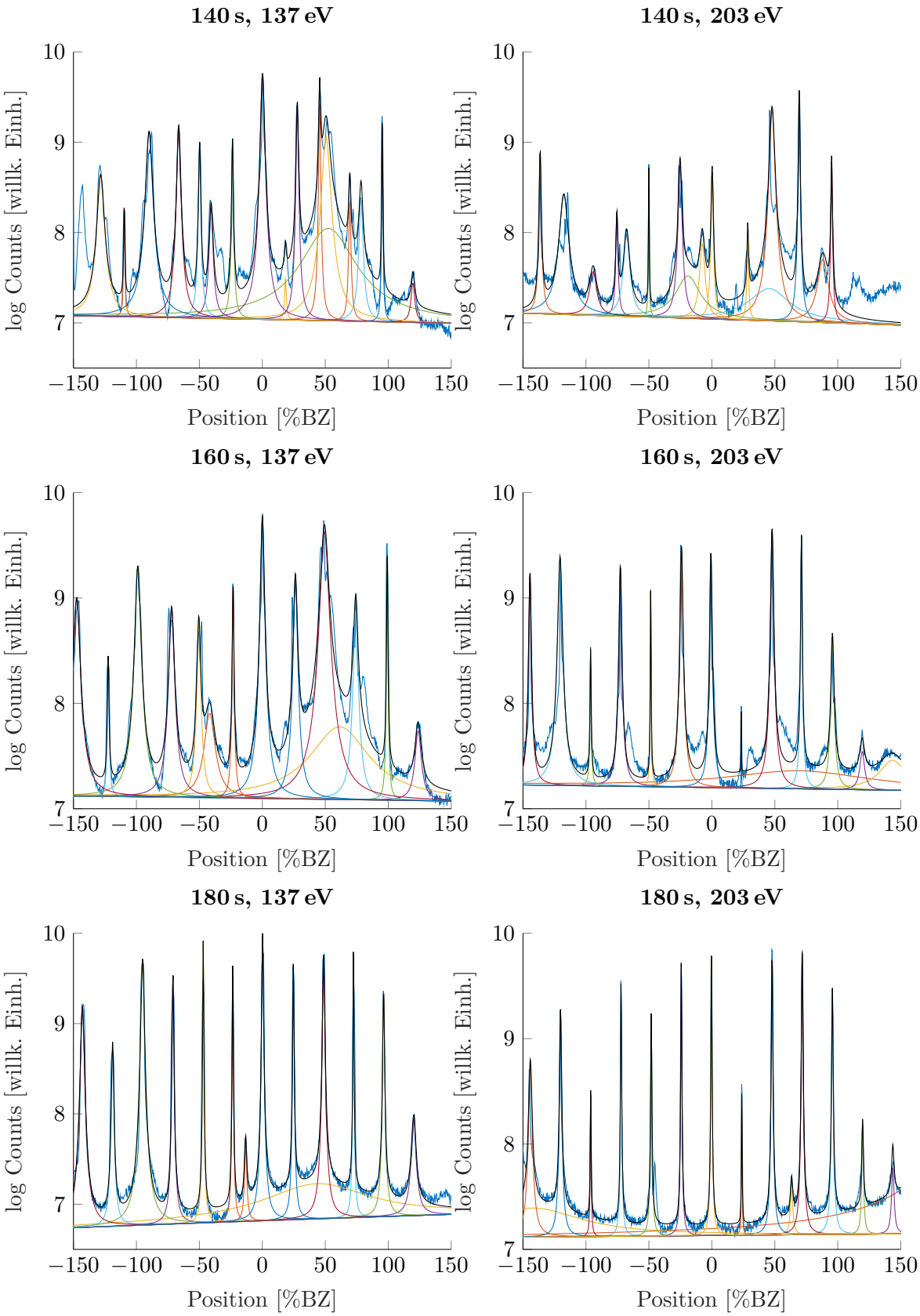


Abbildung B.4.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 750 °C.

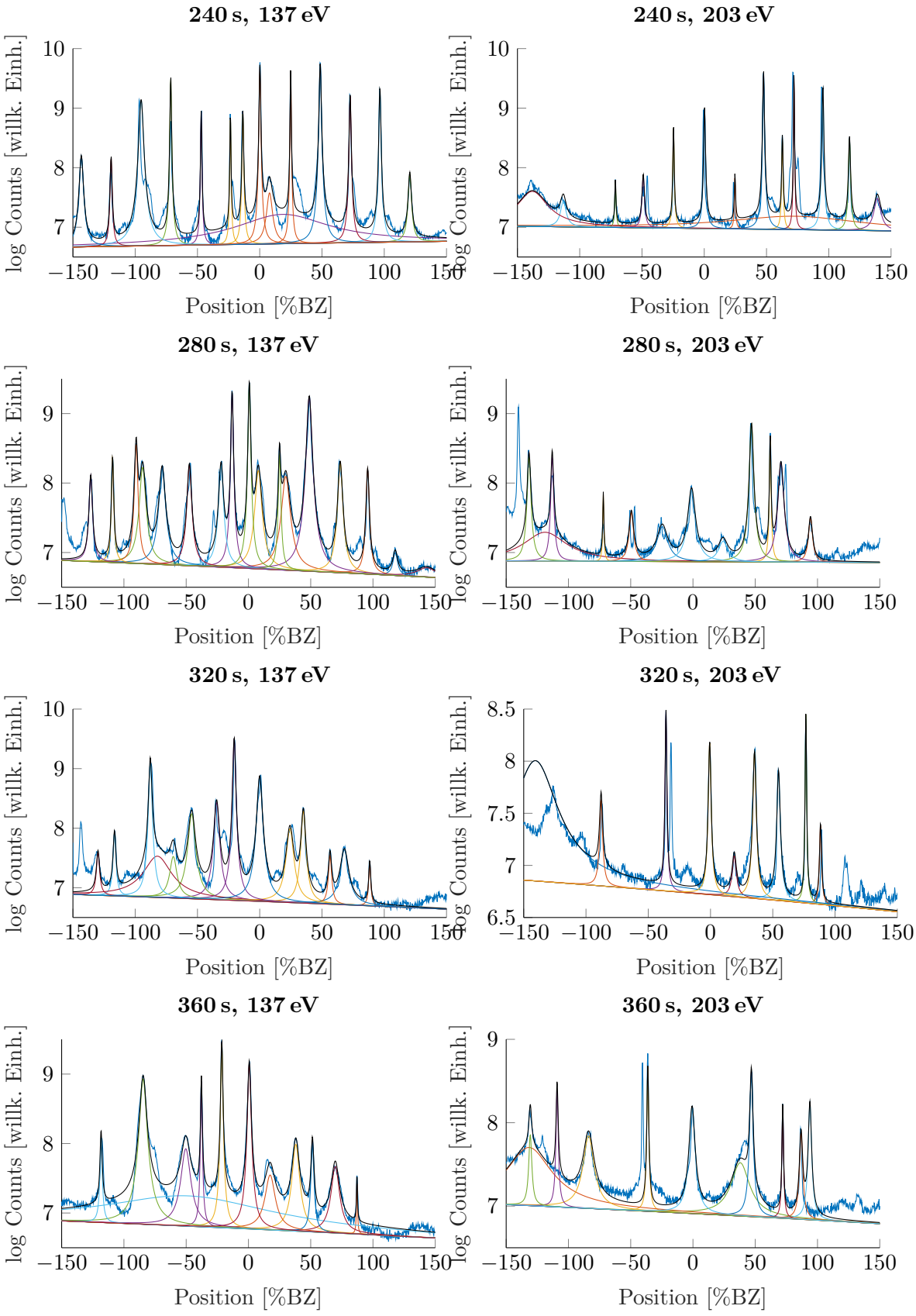


Abbildung B.5.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 750 °C.

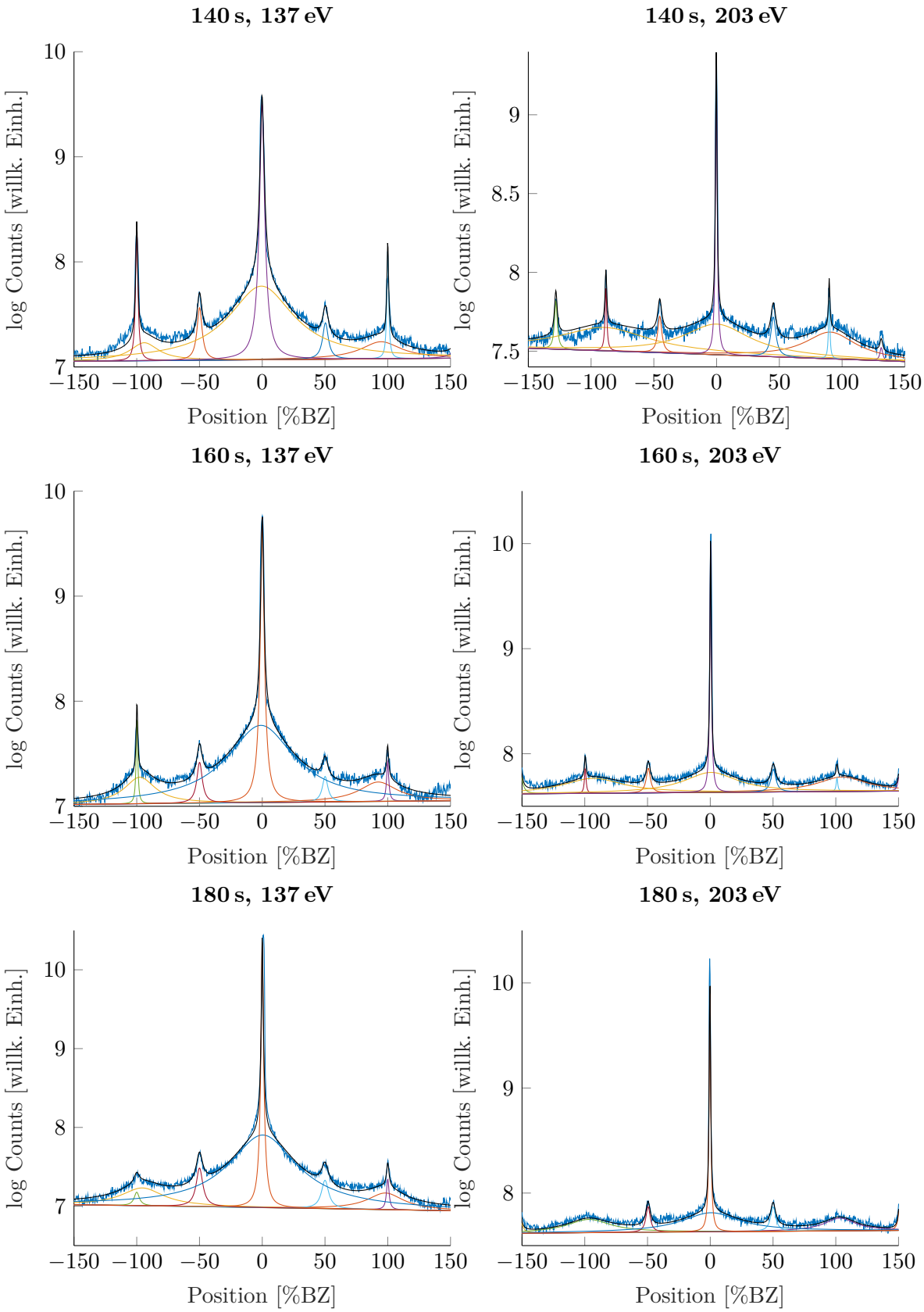


Abbildung B.6.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 750 °C.

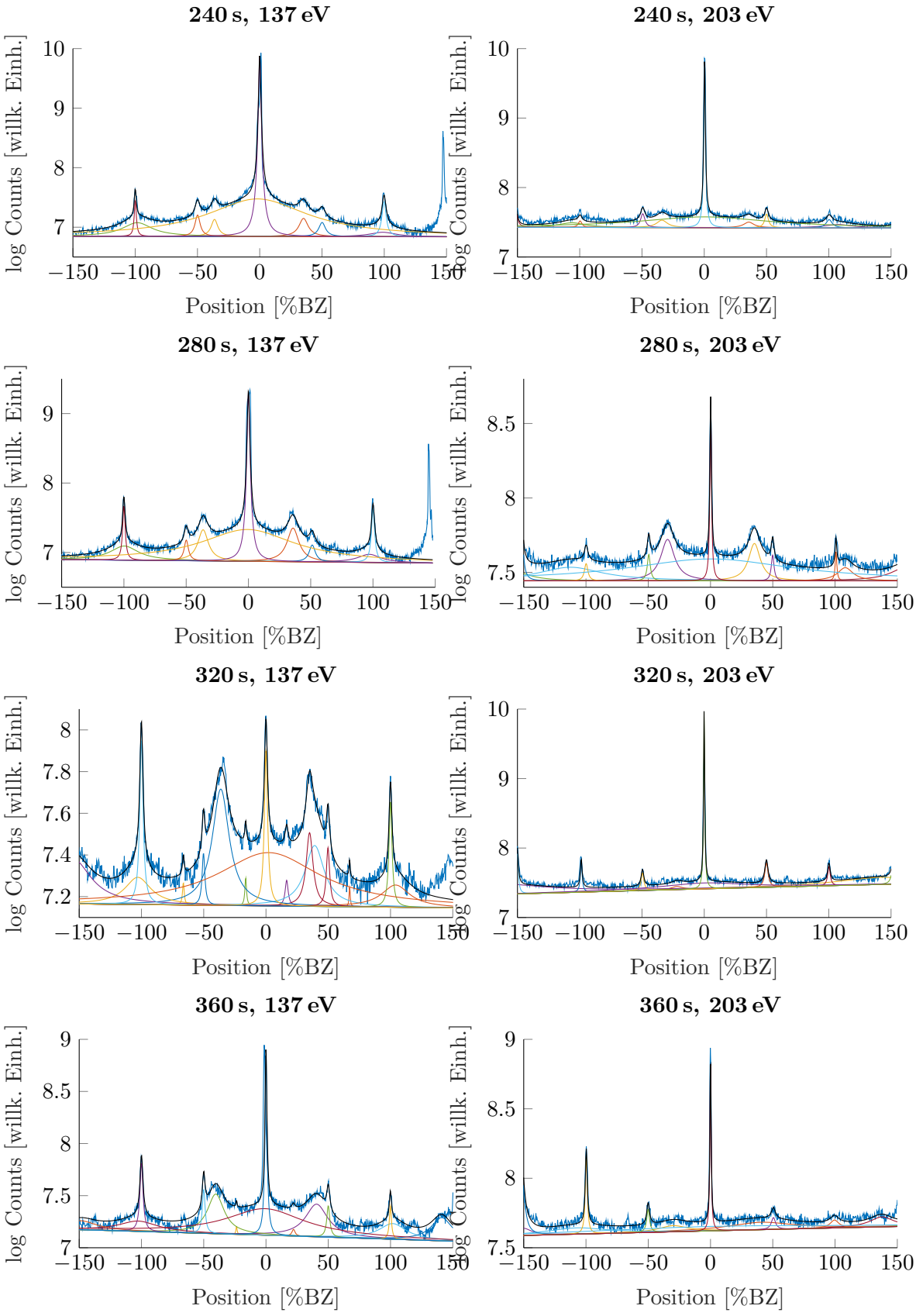


Abbildung B.7.: 1D-Scans der main-Messung für die Messung bei 750 °C.