

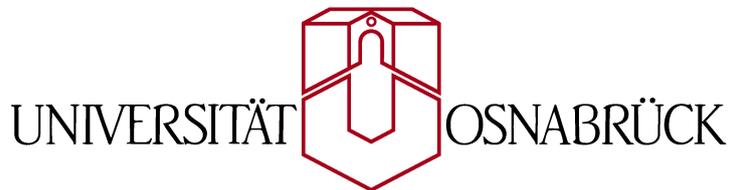
# SPA-LEED-Untersuchungen zu Au-induzierten Nanodrähten auf Si(553)

## Masterarbeit

Thorben Groven

Matrikel-Nummer: 955718

Fachbereich Physik



17. August 2020

Prüfer:

Prof. Dr. Joachim Wollschläger

Prof. Dr. Simone Sanna



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>2</b>
2.1	Kristallstruktur und Oberfläche . . . . .	2
2.2	Reziprokes Gitter . . . . .	5
2.3	Beugung an periodischen Strukturen . . . . .	6
2.4	Elektronenbeugung . . . . .	8
2.4.1	Kinematische Beugungstheorie . . . . .	9
2.4.2	Modifizierte Ewald-Kugel . . . . .	12
2.4.3	Morphologie der Oberfläche . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Experimentelle Grundlagen</b>	<b>15</b>
3.1	SPA-LEED-Instrument . . . . .	15
3.2	Auswertung der RSMs . . . . .	16
3.3	Ultrahochvakuumkammer . . . . .	17
3.4	Probenpräparation . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Materialsystem</b>	<b>21</b>
4.1	Silizium . . . . .	21
4.1.1	Si(111) . . . . .	21
4.1.2	Si(331) . . . . .	24
4.1.3	Si(553) . . . . .	24
4.2	Gold auf Silizium . . . . .	26
4.2.1	Si(111)-Au . . . . .	26
4.2.2	Si(553)-Au . . . . .	28
<b>5</b>	<b>Ergebnisse und Auswertung</b>	<b>32</b>
5.1	Vorversuche . . . . .	32
5.1.1	Kalibrierung an Si(111) . . . . .	32
5.1.2	Messungen am Substrat Si(553) . . . . .	34
5.2	Bedeckungsreihe . . . . .	36
5.3	Auswertung der RSMs und Reflexprofile . . . . .	44
5.3.1	600 Hz/600°C (LCW) . . . . .	45
5.3.2	1600 Hz/600°C (HCW) . . . . .	48
5.3.3	1800 Hz/600°C (HCW) . . . . .	51
5.3.4	600 Hz/800°C (LCW) . . . . .	52
5.3.5	1600 Hz/800°C . . . . .	54

5.3.6	2000 Hz/800°C (HCW und Facetten) . . . . .	56
5.3.7	600 Hz/400°C (LCW) . . . . .	58
5.3.8	1600 Hz/400°C (HCW) . . . . .	60
5.4	Dimerisierung der Au-Doppelkette . . . . .	61
5.5	Untersuchung von Facetten bei hohen Bedeckungen . . . . .	62
5.5.1	3600 Hz . . . . .	63
5.5.2	3200 Hz . . . . .	65
5.5.3	2800 Hz . . . . .	66
5.5.4	2400 Hz . . . . .	68
5.5.5	2000 Hz . . . . .	69
5.5.6	Reflexprofile . . . . .	71
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>73</b>
<b>7</b>	<b>Abstract</b>	<b>74</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>77</b>
<b>A</b>	<b>Anhang zu Abschnitt 5.3</b>	<b>78</b>
<b>B</b>	<b>Anhang zu Abschnitt 5.5</b>	<b>83</b>

# 1 Einleitung

Atomare Drähte, die sich durch selbstorganisiertes Wachstum auf Halbleiteroberflächen bilden, sind in der Forschung seit einigen Jahrzehnten von großem Interesse. Da sie ein quasi-eindimensionales (1D) Elektronensystem darstellen, können an ihnen faszinierende 1D-Quantenphänomene untersucht werden. Darüber hinaus gibt es für diese Systeme viele aussichtsreiche Anwendungsmöglichkeiten wie z.B. integrierte Schaltkreise auf atomarer Skala.

Beispiele für solche Halbleiter-Atomdrahtsysteme sind Siliziumoberflächen, die nach einer Bedeckung mit Metallen unterhalb einer Monolage (ML) stabile quasi-eindimensionale Strukturen ausbilden. Vor mehr als zwei Jahrzehnten wurde entdeckt, dass eine Submonolage Gold auf einer gestuften Siliziumoberfläche zu solch einer eindimensionalen Ordnung führt [1]. Neuere Untersuchungen haben ergeben, dass sich auf der Si(553)-Oberfläche mit einer Bedeckung von etwa 0,5 ML Gold ein stabiles Atomdrahtsystem ausbildet. Dabei bilden die Goldatome auf jeder Terrasse des Substrats neben einer Si-Honigwabenstruktur eine Kette aus Gold-Dimeren [2, 3]. Noch aktuellere Forschungsergebnisse legen nahe, dass auf der gleichen Siliziumoberfläche auch bei geringerer Goldbedeckung von ca. 0,19 ML ein weiteres stabiles Atomdrahtsystem entsteht [4]. Hier befindet sich nur noch auf jeder zweiten Terrasse ein Draht aus Gold-Dimeren, auf den jeweiligen Nachbarterrassen bildet sich eine Si-(5 × 5)-Überstruktur.

Diese beiden stabilen Atomdrahtsysteme sollen in dieser Arbeit genauer untersucht werden. Dabei werden Einflüsse wie Bedeckung und Substrattemperatur beim Aufdampfen des Goldes auf die Bildung der atomaren Drähte analysiert. Darüber hinaus wird die Bildung von Facetten auf der Oberfläche bei Bedeckungen größer als 0,5 ML betrachtet. Dabei steht in allen Fällen vor allem die Morphologie der Systeme im Vordergrund.

Die Methode zur Untersuchung der Atomdrahtsysteme ist hier niederenergetische Elektronenbeugung LEED (*Low Energy Electron Diffraction*). Speziell wird das *Spot Profile Analysis*-LEED verwendet (SPA-LEED), eine weiterentwickelte Form des LEED. Neben einer besseren Auflösung bietet das SPA-LEED den Vorteil, dass Aufnahmen entlang bestimmter Richtungen im reziproken Raum gemacht werden können. Dadurch können Reflexprofile untersucht und zusätzliche Aussagen über Morphologie und Qualität präparierter Oberflächen gemacht werden.

Zuerst werden in den Kapiteln 2 und 3 die theoretischen und die experimentellen Grundlagen für diese Arbeit besprochen. In Kapitel 4 wird dann das Materialsystem und einige Ergebnisse zu diesem System aus der Literatur vorgestellt. Im nächsten Kapitel sollen dann die Messergebnisse dieser Arbeit präsentiert und ausgewertet werden. Die letzten beiden Kapitel bestehen dann aus einer Zusammenfassung und einem Abstract. Zudem gibt es einen Anhang, in dem sich in der Auswertung nicht gezeigte Messergebnisse befinden.

# 2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen für diese Arbeit besprochen. Zuerst wird dabei auf allgemeine Aspekte wie die Volumen- und die Oberflächenstruktur von kristallinen Festkörpern und anschließend auf das reziproke Gitter und die Beugung an solchen periodischen Strukturen eingegangen. Abschließend soll speziell die Beugung von Elektronen an Oberflächen von Festkörpern behandelt werden.

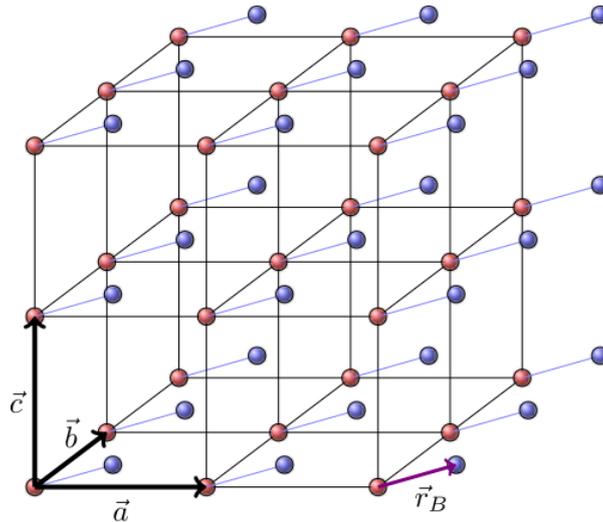
## 2.1 Kristallstruktur und Oberfläche

Ein Kristall ist ein Festkörper, der in jede Raumrichtung periodisch aufgebaut ist. Er kann somit als eine Aneinanderreihung von identischen Einheitszellen betrachtet werden. Die Anordnung der Einheitszellen wird durch das Raumgitter beschrieben, welches durch drei linear unabhängige primitive Translationsvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  aufgespannt wird. Mit diesen Vektoren wird der Translationsvektor

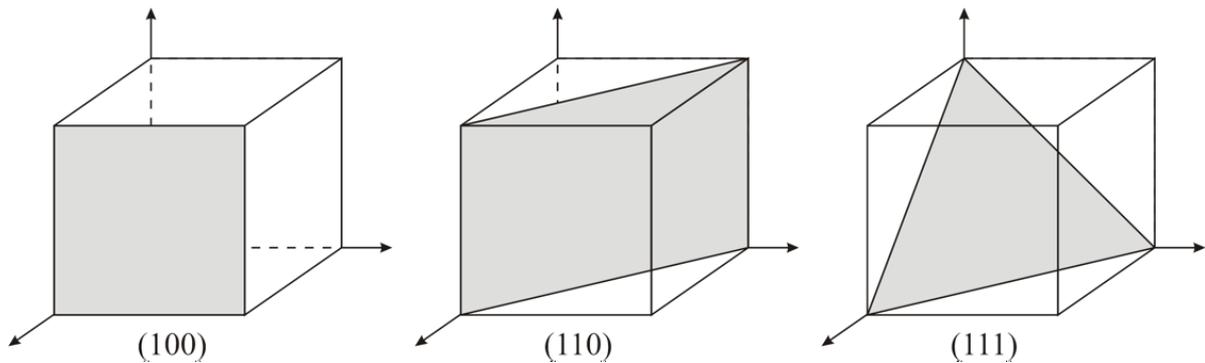
$$\vec{r}_{\text{FK}} = m_1\vec{a} + m_2\vec{b} + m_3\vec{c} \quad \text{mit } m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z} \quad (2.1)$$

definiert, durch den von einem beliebigen Punkt im Raumgitter jeder andere Punkt auf diesem erreicht werden kann. Das Raumgitter ist dabei eines von 14 möglichen *Bravais*-Gittern im dreidimensionalen Raum. Eine Einheitszelle selbst besteht aus einer Basis, die gegebenenfalls auch mehratomig sein kann. Ist dies der Fall, so werden die relativen Positionen  $\vec{r}_{\text{B}}$  der Atome in Bezug zum Ursprung der Basis angegeben. Ein Beispiel für ein kubisches Raumgitter mit zweiatomiger Basis ist in Abb. 2.1 gezeigt.

Um bestimmte Ebenen im Kristall zu bezeichnen, werden die *Millerschen Indizes*  $hkl$  verwendet. Hierbei werden zuerst die Schnittpunkte einer Ebene mit den Kristallachsen als Vielfache der Gitterkonstanten  $a$ ,  $b$ , und  $c$  bestimmt. Von diesen Werten wird dann jeweils der Kehrwert gebildet. Multipliziert man die so erhaltenen Zahlen mit ihrem kleinsten gemeinsamen Nenner, erhält man einen Vektor mit ganzen Zahlen als Einträge. Diese Einträge sind dann die *Millerschen Indizes*  $hkl$ . Bei einer Ebene, die keinen Schnittpunkt mit einer bestimmten Kristallachse hat, wird der Schnittpunkt als im Unendlichen liegend angenommen. Der Kehrwert und damit der entsprechende Index ist dann 0. Liegt ein Schnittpunkt im Negativen, so wird dies mit einem Strich über dem Index gekennzeichnet. Hat eine Ebene beispielsweise die Schnittpunkte  $\{1, 1, \infty\}$ , so ergeben sich daraus die Kehrwerte  $\{1, 1, 0\}$  und die entsprechenden *Millerschen Indizes*  $(1, 1, 0)$ , wie in Abb. 2.2 in der Mitte neben zwei weiteren Beispielen dargestellt ist. Formal ist zwischen Kristallrichtungen und Kristallebenen zu unterscheiden, indem erstere durch eckige und letztere durch runde Klammern gekennzeichnet werden. Die



**Abbildung 2.1** – Beispiel eines kubischen Raumgitters mit zweiatomiger Basis. Die Einheitszelle wird durch die Gittervektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  und die Basis durch  $\vec{r}_B$  beschrieben. Abbildung entnommen aus [5].



**Abbildung 2.2** – Drei Beispiele für Millersche Indizes niedrig indizierter Ebenen im kubischen Kristallgitter. Abbildung entnommen aus [6].

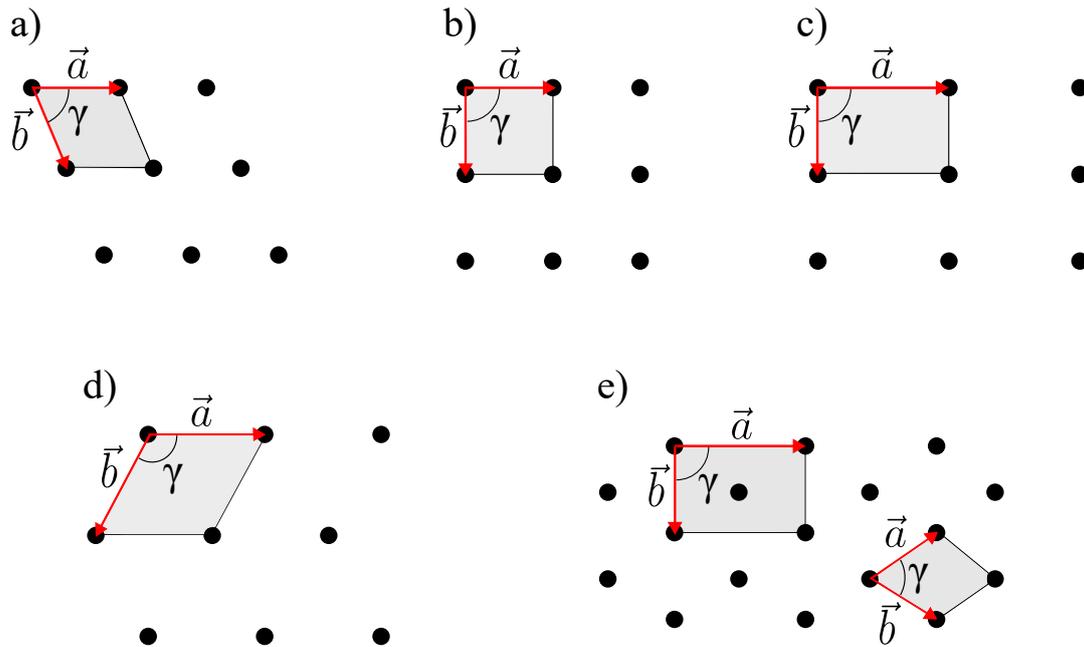
Kristallrichtung ist dabei so definiert, dass sie bei gleichen Indizes senkrecht auf der entsprechenden Ebene steht.

Ausgehend von der Beschreibung der Volumenstruktur von Kristallen kann auch die Oberfläche auf ähnliche Weise beschrieben werden. Die Oberfläche kann analog zum dreidimensionalen Fall durch eines von fünf möglichen zweidimensionalen *Bravais*-Gittern beschrieben werden. Die möglichen *Bravais*-Gitter sind in Abb. 2.3 dargestellt. Analog zum Translationsvektor  $\vec{r}_{\text{FK}}$  des dreidimensionalen Festkörpers kann das Gitter der Oberfläche durch den Translationsvektor

$$\vec{r}_{\text{OF}} = m'_1 \vec{a}' + m'_2 \vec{b}' \quad \text{mit } m'_1, m'_2 \in \mathbb{Z} \quad (2.2)$$

beschrieben werden

An der Oberfläche eines Kristalls gibt es im Gegensatz zu seinem Volumen ungesättigte Bindungen. Um die dadurch bedingte zusätzliche Energie zu minimieren, kann es zu ei-



**Abbildung 2.3** – Die fünf Oberflächen-*Bravais*-Gitter. a) schiefwinklig ( $\gamma \neq 90^\circ, \gamma \notin \{60^\circ, 120^\circ\}$ ,  $|\vec{a}| = |\vec{b}|$ ), b) quadratisch ( $\gamma = 90^\circ, |\vec{a}| = |\vec{b}|$ ), c) rechtwinklig ( $\gamma = 90^\circ, |\vec{a}| \neq |\vec{b}|$ ), d) hexagonal ( $\gamma = 60^\circ$  oder  $\gamma = 120^\circ, |\vec{a}| = |\vec{b}|$ ) e) rechtwinklig zentriert ( $\gamma = 90^\circ, |\vec{a}| \neq |\vec{b}|$  + zentriertem Basiatom. e) ist kein primitives Gitter, es wird aber aufgrund einer einfacheren Beschreibung öfter verwendet als das entsprechende primitive Gitter, das ebenfalls in e) zu sehen ist.)

ner Rekonstruktion der Oberflächenatome kommen. Dadurch liegt an der Oberfläche des Kristalls eine andere Struktur vor als in seinem Volumen. Diese Struktur wird Überstruktur genannt. Um den Zusammenhang zwischen der Überstruktur auf der Oberfläche mit der Volumenstruktur herzustellen, wird in der Regel eine von zwei gängigen Notationen verwendet. Eine ist die Matrix-Notation, in der die Beziehung zwischen Über- und Volumenstruktur durch eine Matrix

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

bestimmt ist. Konkret ergeben sich dann als Zusammenhänge zwischen den Translationsvektoren von Über- und Volumenstruktur

$$\vec{a}' = G_{11}\vec{a} + G_{12}\vec{b} \quad \text{und} \quad \vec{b}' = G_{21}\vec{a} + G_{22}\vec{b}. \quad (2.4)$$

Eine weitere Notation ist die *Wood*-Notation, bei der die Längenverhältnisse der Translationsvektoren betrachtet werden:

$$\frac{|\vec{a}'|}{|\vec{a}|} = m, \quad \frac{|\vec{b}'|}{|\vec{b}|} = n. \quad (2.5)$$

Die Überstruktur wird dann als  $X(hkl)q(m \times n) - R\varphi - Ad$  angegeben. Dabei sind  $hkl$  die *Millerschen Indizes*, welche die Lage der Oberfläche in Bezug auf die Volumenstruktur  $X$  angeben. An Stelle des  $q$  kann ein  $c$  oder ein  $p$  stehen, im ersten Fall liegt eine Zentrierung vor, im zweiten Fall nicht. Ist die Überstruktur gegenüber der Volumenstruktur um einen Winkel  $\varphi$  verkippt, kann dies ebenfalls angegeben werden. Wird die Überstruktur durch Adsorbataatome induziert, wird dies an Stelle des  $Ad$  zusammen mit der Zahl der Adatome pro Einheitszelle angegeben.

## 2.2 Reziprokes Gitter

Bei der Interpretation von Beugungsuntersuchungen an periodischen Strukturen ist das reziproke Gitter ein wesentliches Konzept. Dabei kann jedem Gitter im Realraum ein reziprokes Äquivalent zugeordnet werden. Dieses kann durch einen reziproken Gittervektor

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad \text{mit } h, k, l \in \mathbb{Z} \quad (2.6)$$

beschrieben werden. Dabei sind  $\vec{a}^*$ ,  $\vec{b}^*$  und  $\vec{c}^*$  reziproke Translationsvektoren, die über die Zusammenhänge

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

mit den Translationsvektoren im Realraum verknüpft sind. Die Dimension des Gittervektors im Realraum ist [Länge], wohingegen der reziproken Gittervektor die Dimension [1/Länge] hat. Wie im Realraum besteht das reziproke Gitter aus Punkten, wie in Abb. 2.4 a) dargestellt ist.

Für eine Oberfläche und damit in zwei Dimensionen vereinfacht sich der reziproke Gittervektor zu

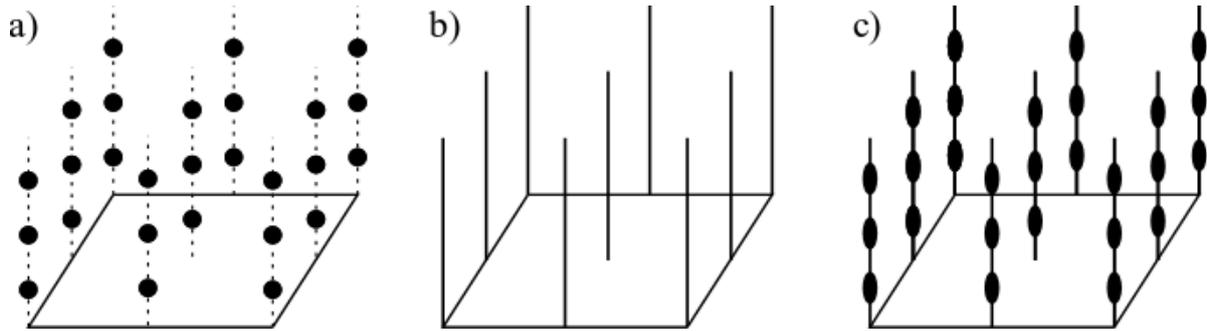
$$\vec{G}_{hk} = h\vec{a}_{\text{OF}}^* + k\vec{b}_{\text{OF}}^* \quad \text{mit } h, k \in \mathbb{Z}. \quad (2.8)$$

Die Vektoren  $\vec{a}_{\text{OF}}^*$  und  $\vec{b}_{\text{OF}}^*$  sind dabei über die Zusammenhänge

$$\vec{a}_{\text{OF}}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{n}}{|\vec{a} \times \vec{b}|} \quad \text{und} \quad \vec{b}_{\text{OF}}^* = 2\pi \frac{\vec{n} \times \vec{a}}{|\vec{a} \times \vec{b}|} \quad (2.9)$$

gegeben, wobei  $\vec{n}$  der Normalenvektor senkrecht zur Oberfläche des Kristalls ist. Zudem steht  $\vec{a}^*$  senkrecht auf  $\vec{b}$  und  $\vec{b}^*$  ist senkrecht zu  $\vec{a}$ .

Anders als im dreidimensionalen Fall besteht das zweidimensionale reziproke Gitter im 3D-Raum nicht mehr aus Punkten. Da hier nur eine Ebene betrachtet wird, kann im Realraum der Abstand zwischen zwei Punkten senkrecht zur Ebene als unendlich lang angenommen werden. Im reziproken Raum bedeutet dies, dass die entsprechenden Punkte unendlich nah zusammenrücken und somit Stangen bilden, wie in Abb. 2.4 b) dargestellt ist. Im Experiment wird die Oberfläche eines ausgedehnten Festkörpers



**Abbildung 2.4** – a) Scharfe Beugungspunkte eines dreidimensionalen Kristallgitters, b) ideale Beugungsstangen des zweidimensionalen Kristallgitters einer Oberfläche und c) ein Mischfall aus a) und b), der dem Realfall für eine Oberfläche am nächsten kommt. Die Darstellungen sind jeweils im reziproken Raum.

untersucht. Die Periodizität vertikal zur Oberfläche ist wegen Rekonstruktionen und Relaxationen nicht perfekt. Werden bei der Untersuchung Elektronen verwendet, beträgt deren Eindringtiefe in den Kristall einige wenige Atomlagen, daher treffen beide oben genannten Extremfälle in einer solchen Situation nicht zu. Da eine begrenzte Anzahl oberflächennaher Lagen untersucht wird, kommt es zu einem Mischfall aus diesen beiden genannten Fällen, der in Abb. 2.4 c) schematisch dargestellt ist. Die Intensität eines gebeugten Strahls hängt dann davon ab, an welchem Punkt die Beugungsstange betrachtet wird und ist somit eine Funktion der Energie.

## 2.3 Beugung an periodischen Strukturen

Zur Untersuchung von Oberflächen ist die Beugung an der Oberflächenstruktur eine geeignete Methode. Dabei werden meist Röntgenstrahlen oder Elektronen verwendet. Da für Elektronen der Welle-Teilchen-Dualismus gilt, kann ihnen eine *De-Broglie*-Wellenlänge

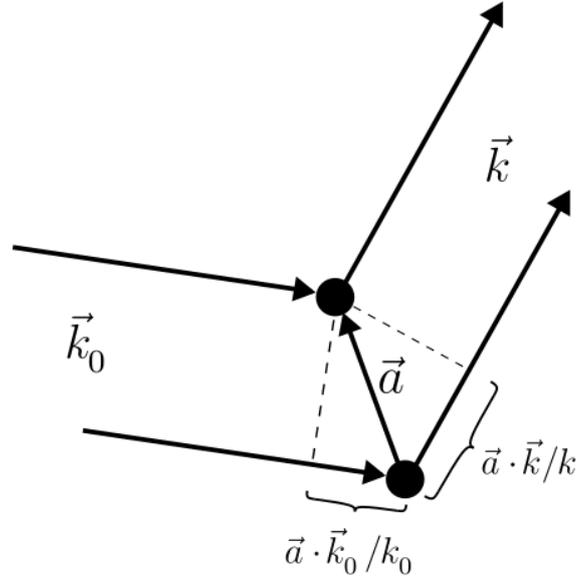
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \quad (2.10)$$

zugeordnet werden.

Die Bedingung für konstruktive Interferenz durch zwei benachbarte Streuzentren lässt sich mit Hilfe von Abb. 2.5 herleiten. Die eintreffenden Strahlen mit dem Wellenvektor  $\vec{k}_0$  treffen auf zwei benachbarte Streuzentren, deren relative Lage zueinander durch den Vektor  $\vec{a}$  beschrieben wird und werden elastisch gestreut. Durch den Gangunterschied der beiden Strahlen kommt es zu Interferenz. Für konstruktive Interferenz muss der Gangunterschied einem Vielfachen der Wellenlänge entsprechen, d.h. es muss

$$\vec{a} \cdot \left( \frac{\vec{k}_0}{|\vec{k}_0|} - \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \right) = h \cdot \lambda \quad \text{mit } h \in \mathbb{Z} \quad (2.11)$$

gelten, wobei  $\vec{k}$  der Wellenvektor des gebeugten Strahls ist.



**Abbildung 2.5** – Skizze zur Herleitung der Beugungsbedingung für zwei benachbarter Streuzentren.  $\vec{a}$  beschreibt die Lage der Streuzentren relativ zueinander,  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}$  sind die Wellenvektoren des einfallenden bzw. des gebeugten Strahls.

Im dreidimensionalen Fall mit den zusätzlichen Translationsvektoren  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  kommen die Gleichungen

$$\vec{b} \cdot \left( \frac{\vec{k}_0}{|\vec{k}_0|} - \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \right) = k \cdot \lambda \quad \text{mit } k \in \mathbb{Z} \quad (2.12)$$

und

$$\vec{c} \cdot \left( \frac{\vec{k}_0}{|\vec{k}_0|} - \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \right) = l \cdot \lambda \quad \text{mit } l \in \mathbb{Z} \quad (2.13)$$

hinzu. Mit dem reziproken Gittervektor  $\vec{G}_{hkl}$  aus Gl. 2.6 lassen sich die Gleichungen 2.11 bis 2.13 zusammenfassen zu:

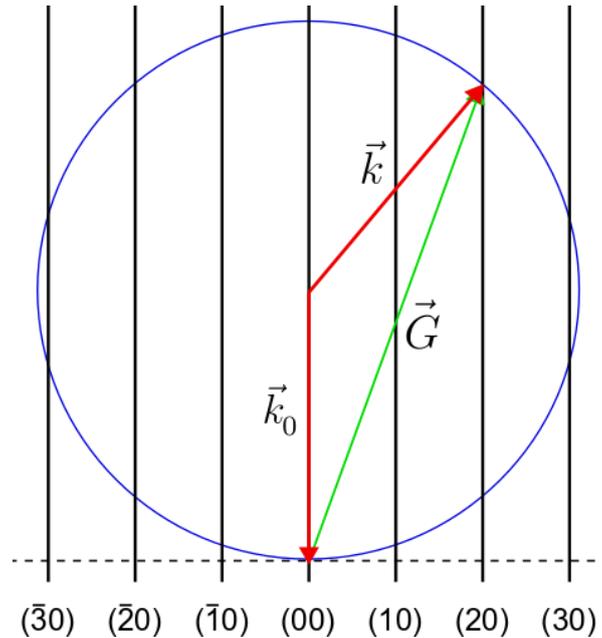
$$\left( \frac{\vec{k}_0}{|\vec{k}_0|} - \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \right) = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \vec{G}_{hkl}. \quad (2.14)$$

Dieser Zusammenhang lässt sich durch skalare Multiplikation beider Seiten mit jeweils  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  oder  $\vec{c}$  beweisen. Da es sich um elastische Streuung handelt, gilt für die Beträge der Wellenvektoren  $|\vec{k}| = |\vec{k}_0| = 2\pi/\lambda$ . Damit lässt sich Gl. 2.14 vereinfachen zur *Laue-Bedingung*

$$\vec{k}_0 - \vec{k} = \vec{G}_{hkl}. \quad (2.15)$$

Im zweidimensionalen Fall bei der Beugung an einer Oberfläche wird  $\vec{G}_{hkl}$  in der *Laue-Bedingung* durch  $\vec{G}_{hk}$  aus Gl. 2.8 ersetzt und von den Wellenvektoren gehen lediglich die Anteile parallel zur Oberfläche ein, somit gilt dann

$$\vec{k}_{0,\parallel} - \vec{k}_{\parallel} = \vec{G}_{hk}. \quad (2.16)$$

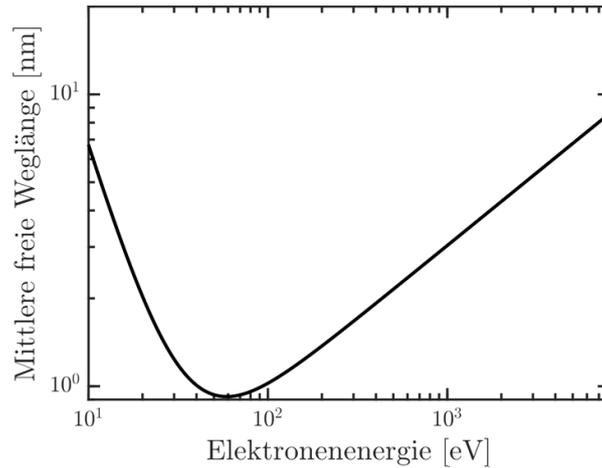


**Abbildung 2.6** – *Ewald Konstruktion* für Beugung an einer Oberfläche. Gezeigt ist die Ewald-Konstruktion für den Reflex (20) bei senkrechtem Einfall des inzidenten Strahls.  $\vec{k}_0$  ist der Wellenvektor des einfallenden Strahls,  $\vec{k}$  der des gebeugten Strahls und  $\vec{G}$  ist ein Gittervektor des reziproken Gitters.

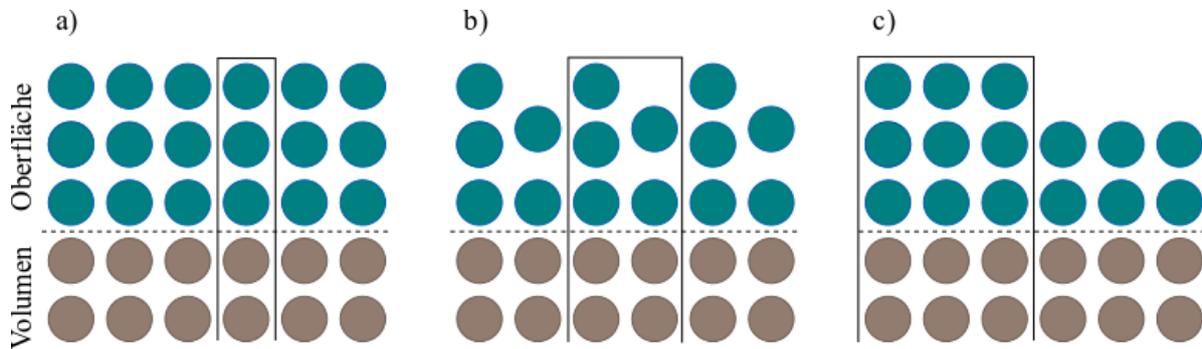
Zur graphischen Veranschaulichung der *Laue-Bedingung* wird oft die *Ewald Konstruktion* verwendet. Bei der Konstruktion wird wie folgt vorgegangen: Zuerst wird das reziproke Gitter gezeichnet, bei einer Oberfläche sind dies die Beugungsstangen. Dann wird der Wellenvektor  $\vec{k}_0$  des einfallenden Strahls eingezeichnet.  $\vec{k}_0$  wird so eingezeichnet, dass er auf einem Beugungspunkt oder einer Beugungsstange endet. Im Anschluss wird um den Ursprung von  $\vec{k}_0$  eine Kugel mit dem Radius  $|\vec{k}_0|$  gezogen. Vom Ursprung der Kugel ausgehend kann zu jedem Schnittpunkt mit einer Beugungsstange ein Vektor  $\vec{k}$  eines gebeugten Strahls eingezeichnet werden, der Gl. 2.15 oder Gl. 2.16 für den jeweiligen Fall erfüllt. Damit ist  $\vec{k}$  ein Wellenvektor für einen im Beugungsexperiment zu erwartenden Reflex. Stellt man einen Schnitt durch den reziproken Raum dar, wird anstelle einer Kugel ein Kreis um den Ursprung gezogen. Im Beispiel in Abb. 2.6 ist die *Ewald Konstruktion* im zweidimensionalen Fall für den (20)-Beugungsreflex gezeigt.

## 2.4 Elektronenbeugung

In dieser Arbeit wird Elektronenbeugung zur Untersuchung von Oberflächen verwendet. Speziell wird die Low Energy Electron Diffraction (LEED) verwendet. Hierbei werden niederenergetische Elektronen mit Energien im Bereich von 20 – 1000 eV verwendet, was einer *De-Broglie*-Wellenlänge von etwa 0,4 – 2,7 Å entspricht. Diese liegt im Bereich der Größenordnung atomarer Abstände in Kristallen und eignet sich daher gut zur Untersuchung der Kristallstruktur. Ein weiterer Vorteil niederenergetischer Elektronen ist ihre



**Abbildung 2.7** – Mittlere freie Weglänge von Elektronen in einem Festkörper in Abhängigkeit ihrer kinetischen Energie. Bei der für LEED typischen Energien (20 – 1000 eV) ist sie im Bereich von 0.3 – 1.1 nm. Erstellt nach Fits der experimentellen Daten von [7] für anorganische Verbindungen.



**Abbildung 2.8** – Beispiele für die in der kinematischen Beugungstheorie angenommenen Säuleneinheitenzellen mit a) einer idealen Oberfläche, b) einer Oberfläche mit Überstruktur und c) einer gestuften Oberfläche.

mittlere freie Weglänge, die bei geringen Energien in der Größenordnung weniger atomarer Schichten ist (siehe Abb. 2.7). Somit findet Beugung hauptsächlich in den oberen Atomschichten statt, wodurch eine hohe Oberflächensensitivität gewährleistet ist.

### 2.4.1 Kinematische Beugungstheorie

Bei der Beugung von Elektronen an einer Oberfläche muss aufgrund einer Wechselwirkung zwischen den Elektronen und den Atomen Mehrfachstreuung berücksichtigt werden. Daher ist für eine vollständige Beschreibung der Elektronenbeugung die dynamische Beugungstheorie nötig. Diese ist jedoch mit einem hohen Rechenaufwand verbunden und für Oberflächen mit statistisch verteilten Defekten sogar kaum berechenbar. Daher wird zur Vereinfachung gerne die kinematische Beugungstheorie verwendet.

In dieser Theorie wird die Oberfläche vorerst in periodische Säuleneinheitenzellen einge-

teilt, die in den Festkörper hinein reichen, wie in Abb. 2.8 dargestellt ist. Dabei werden nur Vorwärts- und Rückwärtsstreuung innerhalb einer Einheitszelle berücksichtigt. Streuprozesse, bei denen benachbarte Säuleneinheitszellen beteiligt sind, werden in dieser Näherung ausgeschlossen [8]. Da im Experiment die Abstände zwischen Elektronenquelle und Probe sowie zwischen Probe und Detektor groß sind, können die Elektronenwellen am Ort  $\vec{r}$  nach der *Fraunhofer*-Näherung als ebene Wellen angenommen werden:

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

Dabei ist  $\vec{k}_0$  der Wellenvektor der einfallenden und  $\vec{k}$  der Wellenvektor der gebeugten Elektronen. Es wird die Beugung eines Elektrons innerhalb der  $n$ -ten Säuleneinheitszelle am Ort  $\vec{r}_n$  betrachtet, wobei  $f_n$  der atomare Formfaktor der entsprechenden Einheitszelle ist. Der Formfaktor kommt durch die Verteilung der Atome innerhalb einer Einheitszelle zustande und bezieht Rückstreuung einzelner Atome sowie Mehrfachstreuung in Form von Vorwärts- und Rückwärtsstreuung innerhalb einer Einheitszelle mit ein. Außerdem wird eine Phasenverschiebung  $\Delta\phi = \vec{K} \cdot \vec{r}_n$  gegenüber einem an der 0-ten Säuleneinheitszelle gestreutem Elektron berücksichtigt, dabei ist  $\vec{K} = \vec{k}_0 - \vec{k}$  der Streuvektor.

Da im Experiment die Wellenfunktion  $\Psi$  nicht messbar ist, sondern die Intensität des gebeugten Elektronenstrahls, wird das Absolutquadrat der Superposition der einzelnen Teilwellen gebildet:

$$I(\vec{k}_0, \vec{k}, \vec{r}_n) \propto \frac{I_0}{N} \cdot \left| e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right|^2 \cdot \left| \sum_{n=0}^N f_n(\vec{k}_0, \vec{k}) \cdot e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} \right|^2. \quad (2.18)$$

$N$  ist hierbei die Gesamtanzahl der Säuleneinheitszellen und der Faktor  $\left| e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right|^2$  wird zu eins und verschwindet daher. Nun kann die Annahme gemacht werden, dass der Formfaktor für alle Einheitszellen gleich ist und somit  $f_n = f_0$  gilt. Diese Annahme gilt streng genommen nur für eine ideale glatte Oberfläche. Bei einer gestuften Oberfläche zum Beispiel gilt sie nur für Atome im mittleren Bereich einer Terrasse. Bei Atomen an den Stufenkanten weichen die Formfaktoren von den durchschnittlichen Werten der Atome auf einer Terrasse ab. Wegen der geringen mittleren freien Weglänge der Elektronen ist diese Abweichung allerdings nur in unmittelbarer Nähe der Stufenkanten relevant. Somit ist diese Näherung besser geeignet, je weiter die Stufenkanten voneinander entfernt sind, bzw. je größer die Terrassen sind und je geringer die allgemeine Defektdichte ist. Mit dieser Annahme lässt sich Gl. 2.18 nun vereinfachen zu

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

$$\Rightarrow I(\vec{k}_0, \vec{k}) \propto \left| F(\vec{k}_0, \vec{k}) \right|^2 \cdot \left| G(\vec{K}) \right|^2. \quad (2.20)$$

$F$  ist der dynamische Strukturfaktor. Er berücksichtigt Streuprozesse innerhalb einer Einheitszelle wie Mehrfachstreuung und bestimmt die Intensität der Reflexe. Mit der obigen Annahme ( $f_n = f_0$ ) ist er in der kinematischen Näherung für alle Einheitszellen gleich und damit in dieser Theorie nicht exakt beschrieben. Im Realfall können Defekte zu unterschiedlichen atomaren Formfaktoren für verschiedene Einheitszellen führen. Dennoch führt die kinematische Näherung für viele Oberflächen zu richtigen Ergebnissen und beschreibt sie damit gut. Der Gitterfaktor  $G$  ist von der Morphologie der Oberfläche abhängig und bestimmt das Profil der Beugungsreflexe, sodass man aus einer Analyse der Reflexprofile Informationen über die Beschaffenheit der Oberfläche gewinnen kann. Der Gitterfaktor soll im Folgenden genauer behandelt werden.

Ausgehend von Gl. 2.19 kann der Gitterfaktor geschrieben werden als

$$|G(\vec{K})|^2 = G(\vec{K})G(\vec{K})^* = \sum_n \sum_m e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_m} = \sum_{n,m} e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}_n - \vec{r}_m)}, \quad (2.21)$$

wobei sich die Doppelsumme und der zusätzliche Laufindex  $m$  aus der Quadrierung ergeben,  $m$  und  $n$  indizieren die Einheitszellen. Die Streuzentren befinden sich dabei an den Positionen

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

dabei sind  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  Translationsvektoren der Oberfläche und  $\vec{d}$  ein Vektor, der senkrecht zur Oberfläche steht und die Länge eines Lagenabstandes hat.  $h(n_1, n_2)$  ist die Höhenfunktion der Einheitszelle am Ort  $\vec{n} = (n_1, n_2)$  mit  $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$ . Separiert man den Streuvektor in  $\vec{K} = \vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\perp}$ , so wird Gl. 2.21 nach [9] zu

$$|G(\vec{K})|^2 = \sum_{\vec{n}} \langle e^{i\vec{k}_{\perp}\cdot(h(\vec{n}+\vec{m})-h(\vec{m}))} \rangle_{\vec{m}} \cdot e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot(n_1\vec{a}+n_2\vec{b})}. \quad (2.23)$$

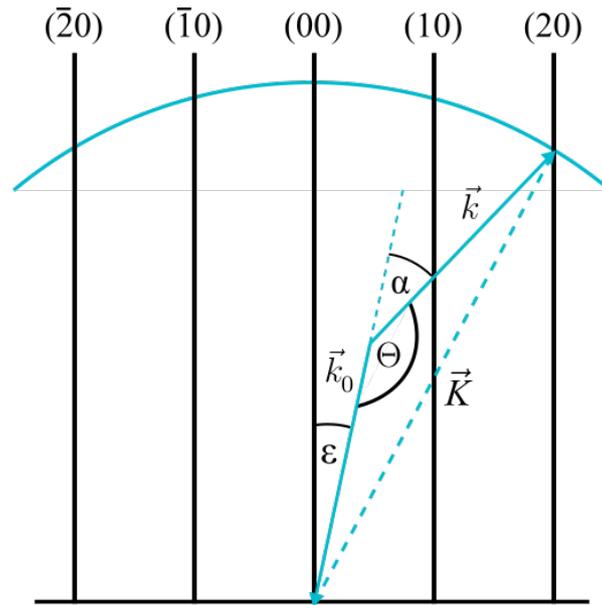
Die eckigen Klammern  $\langle \rangle_{\vec{m}}$  geben dabei den Mittelwert bezüglich  $\vec{m} = (m_1, m_2)$  an. Bei einer idealen glatten Oberfläche gibt es keinen Höhenunterschied zwischen benachbarten Einheitszellen, daher verschwindet der Term in den eckigen Klammern und der Gitterfaktor vereinfacht sich in diesem Fall zu

$$|G(\vec{K})|_{ideal}^2 = \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot(n_1\vec{a}+n_2\vec{b})}. \quad (2.24)$$

Die zweidimensionalen *Laue*-Gleichungen besagen, dass sich das Skalarprodukt aus den primitiven Einheitsvektoren des Realraums und des reziproken Raums zu  $\vec{a} \cdot \vec{k}_{\parallel} = 2\pi h$  bzw.  $\vec{b} \cdot \vec{k}_{\parallel} = 2\pi k$  ergibt, wobei  $h$  und  $k$  ganze Zahlen sind. So lässt sich Gl. 2.24 weiter modifizieren zu

$$|G(\vec{K})|_{ideal}^2 = \sum_{\vec{n}} e^{i2\pi(n_1 h + n_2 k)}. \quad (2.25)$$

Damit steht im Exponenten stets ein ganzzahliges Vielfaches von  $\pi$ , sodass die Exponentialfunktion für alle Werte von  $\vec{n}$  und so an allen Gitterplätzen 1 ergibt. Bei Gl. 2.25 handelt es sich also um eine  $\delta$ -Verteilung der gebeugten Intensität. Daher ist für eine ideale Oberfläche eine Reihe von unendlich scharfen Reflexen in zwei Dimensionen zu



**Abbildung 2.9** – Modifizierte *Ewald-Konstruktion* für ein SPA-LEED-Instrument. Der Winkel  $\Theta$  zwischen  $\vec{k}$  und  $\vec{k}_0$  bleibt konstant, es gilt  $\Theta = 180^\circ - \alpha$ .

erwarten, die sich an den Stellen des reziproken Gittervektors  $\vec{G}_\parallel$  befinden. Für eine reale Oberfläche haben diese Reflexe dann eine gewisse Intensitätsverteilung, wobei die Halbwertsbreite dieser Verteilung in der Regel als ein Maß für die Ordnung der Oberfläche gesehen werden kann.

### 2.4.2 Modifizierte Ewald-Kugel

Die *Ewald Konstruktion* im Allgemeinen ist in Abschnitt 2.3 bereits behandelt worden. Bei einem Beugungsexperiment mit Elektronen trifft der Elektronenstrahl in der Regel senkrecht auf die Probe, weshalb der Wellenvektor  $\vec{k}_0$  wie in Abb. 2.6 parallel zu den Beugungsstangen eingezeichnet wird.

Im Fall eines SPA-LEED-Experiments (siehe Abschnitt 3.1) muss die Ewald-Kugel weiter modifiziert werden. Während eines Experiments werden Einfallswinkel und Ausfallswinkel des Elektronenstrahls variiert, weshalb der Winkel  $\alpha$  zwischen einfallendem und gebeugtem Elektronenstrahl konstant bleibt. Dadurch ist der Absolutwert des Streuvektors  $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$  ebenfalls konstant, lediglich seine Orientierung zur Oberfläche ändert sich während des Experiments. So ergibt sich eine vergrößerte *Ewald-Kugel* mit dem Radius  $|\vec{K}|$ , wie in Abb. 2.9 gezeigt ist. So wird der abgebildete Bereich des reziproken Raumes vergrößert.

### 2.4.3 Morphologie der Oberfläche

Eine Möglichkeit, periodisch gestufte Oberflächen zu beschreiben, besteht über das Fal-tungstheorem [9]. Dabei ist das Beugungsmuster gegeben durch eine Multiplikation der Fouriertransformierten der Einheitszelle und der des kinematischen Strukturfaktors,



beschrieben werden. Dieser Ausdruck hat Maxima bei  $K = 2\pi/a_0$ , weshalb die Beugungsreflexe einer gestuften Oberfläche nur dort intensiv sind, wo Beugungsreflexe einer den Terrassenoberflächen entsprechenden glatten makroskopischen Oberfläche zu erwarten sind.

Neben gestuften Oberflächen können auch Facetten auf sehr ähnliche Art behandelt werden. Eine Facette kann zuerst einmal als eine geordnete Folge sehr schmaler Terrassen betrachtet werden [9]. Die Orientierung der Facette wird dabei durch *Millersche Indizes* ( $hkl$ ) beschrieben. Die Beugungsstange einer Facette steht immer senkrecht zu der Facettenrichtung und der horizontale Abstand zwischen den Stangen ist durch das Reziproke des horizontalen Gitterabstandes gegeben [10]. Gibt es mehrere Facettentypen, so überlagern sich deren Beugungsmuster, wie in Abb. 2.10 auf der rechten Seite beispielhaft gezeigt ist. Aus solchen Beugungsmustern lassen sich mit Hilfe der 3D-Braggbedingung die Orientierung der Facetten bestimmen. Mit dem Wissen über Gitterstruktur und Gitterkonstanten des zugrundeliegenden Materials lassen sich die Positionen der Bragg-Reflexe im reziproken Raum berechnen. Findet man nun zwei Schnittpunkte der Bragg-Reflexe mit einer Beugungsstange einer Facette, so lässt sich deren Orientierung aus der Differenz der *Millerschen Indizes* der beiden Schnittpunkte bestimmen.

Eine weitere mögliche morphologische Eigenschaft sind Domänen auf einer Oberfläche. Eine Domäne ist dabei ein Bereich mit einheitlicher Struktur. Bei benachbarten Domänen unterscheiden sich dann bestimmte Struktureigenschaften wie z.B. die Orientierung von Stufen oder die Länge von Terrassen. Die durchschnittliche Größe von Domänen kann über die Halbwertsbreite (FWHM) der Reflexe eines Beugungsbildes abgeschätzt werden. Ausgehend von [11] und für die Situation in dieser Arbeit angepasst kann dies über den Zusammenhang

$$\Delta\text{FWHM} = \frac{2}{\langle D \rangle} \quad (2.28)$$

passieren. Dabei ist  $\Delta\text{FWHM}$  die zusätzliche Halbwertsbreite der Reflexe gegenüber denen einer entsprechenden unbedeckten Oberfläche und  $\langle D \rangle$  die mittlere Domänengröße auf der untersuchten Oberfläche. Dabei ist zu beachten, dass  $\Delta\text{FWHM}$  die Dimension einer reziproken Länge hat.

Bilder wie in Abb. 2.10 können mit einem SPA-LEED-Instrument (siehe Abschnitt 3.1) als eine *Reciprocal Space Map* (RSM) aufgenommen werden. Dabei werden Messungen entlang einer bestimmten Richtung im reziproken Raum (Linescans) gemacht und der Streuvektor  $K_{\perp}$  durch die Energie des auf die Probe treffenden Elektronenstrahls variiert. Die einzelnen Linescans werden dann zu einem Bild zusammengesetzt. Aus einem solchen Bild können dann unter anderem Informationen über die Stufenlänge, wie in Abb. 2.10 dargestellt, oder die Neigung der Stufen auf einer Oberfläche gewonnen werden. Letztere entspricht dabei dem Winkel zwischen der  $\vec{K}_{\perp}$ -Richtung und den Beugungsstangen.

Mit Hilfe einer RSM können auch andere Oberflächenstrukturen wie z.B. Adsorbatsinseln, Vicinalitäten oder amorphe Strukturen nachgewiesen werden. Da in dieser Arbeit im Wesentlichen gestufte Oberflächen untersucht werden, soll darauf aber nicht weiter eingegangen werden.

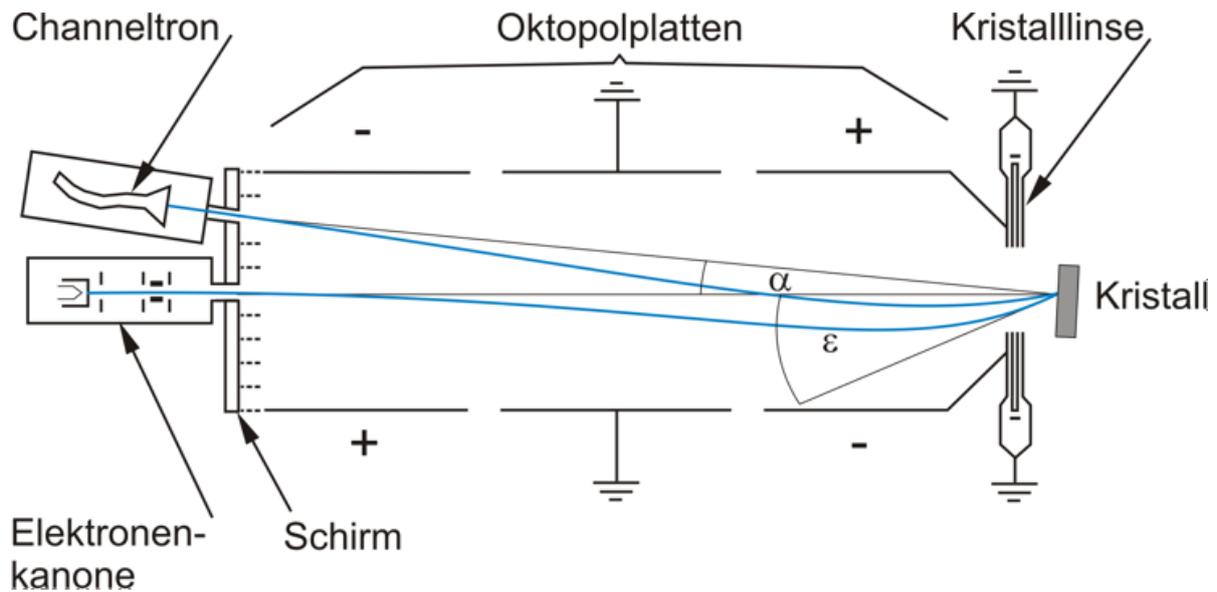
# 3 Experimentelle Grundlagen

In diesem Abschnitt werden die experimentellen Grundlagen für diese Arbeit besprochen. Zuerst wird die Funktionsweise eines SPA-LEED-Instruments beschrieben und das verwendete Instrument vorgestellt. Dann wird auf die Notwendigkeit von Ultrahochvakuum bei Untersuchungen von Oberflächen sowie auf die hier benutzte Ultrahochvakuumkammer eingegangen. Zuletzt wird noch die in dieser Arbeit durchgeführte Probenpräparation behandelt.

## 3.1 SPA-LEED-Instrument

In dieser Arbeit wird ein *Spot-Profile-Analysis-LEED*-Instrument (SPA-LEED-Instrument) verwendet, welches eine von Henzler *et al.* [13] entwickelte Erweiterung des konventionellen LEED ist.

Eine schematische Darstellung des Aufbaus eines SPA-LEED-Instruments befindet sich in Abb. 3.1. Das System besteht aus einer Elektronenkanone, elektrostatischen Ablenkplatten (Oktupolplatten), einem Kristalllinsensystem und einem Elektronenvervielfacher (Channeltron), welches als Detektor dient. Die Elektronenkanone besteht aus einem Filament als Kathode, einem Wehneltzylinder und elektrostatischen Linsen zur Bündelung und Fokussierung des Elektronenstrahls. Mit der Elektronenkanone können Elektronen mit Energien von 5 eV bis 500 eV auf die Probe beschleunigt werden. Mittels eines System von  $3 \times 8$  Oktupolplatten, wobei die mittleren Platten auf Masse liegt, kann der Elektronenstrahl durch das Anlegen einer Spannung abgelenkt werden. Durch verschiedene Spannungen wird der Winkel  $\epsilon$ , in dem der Strahl auf die Probe trifft, variiert und so die modifizierte Ewaldkugel Punkt für Punkt abgetastet. Der gebeugte Strahl wird durch die Oktupolplatten auf das Channeltron gelenkt, nachdem er durch die Kristalllinsen auf dieses fokussiert worden ist. Der Winkel  $\alpha$  zwischen dem einfallenden und dem gebeugten Strahl wird systembedingt konstant gehalten und beträgt in dieser Arbeit  $8^\circ$ . Der auffälligste Unterschied zwischen einem SPA-LEED und einem konventionellen LEED ist, dass beim SPA-LEED der (00)-Reflex nicht durch die Elektronenkanone verdeckt ist. Damit einher geht allerdings eine leichte Verzerrung des Beugungsbildes. Durch das punktweise Abtasten des reziproken Raums und die digitale Datenerfassung sind neben zweidimensionalen Aufnahmen auch eindimensionale Scans entlang bestimmter Richtungen möglich. Dadurch wird die Aufnahme von *Reciprocal Space Maps* (siehe Abschnitt 2.4.3) möglich, wodurch Informationen über die Oberflächenmorphologie der Probe gewonnen werden können. Außerdem kann durch die Erhöhung der Sensitivität der Ablenkspannungen eine bessere Auflösung erzielt werden, was einen noch besseren Zugang zu den Reflexprofilen ermöglicht.

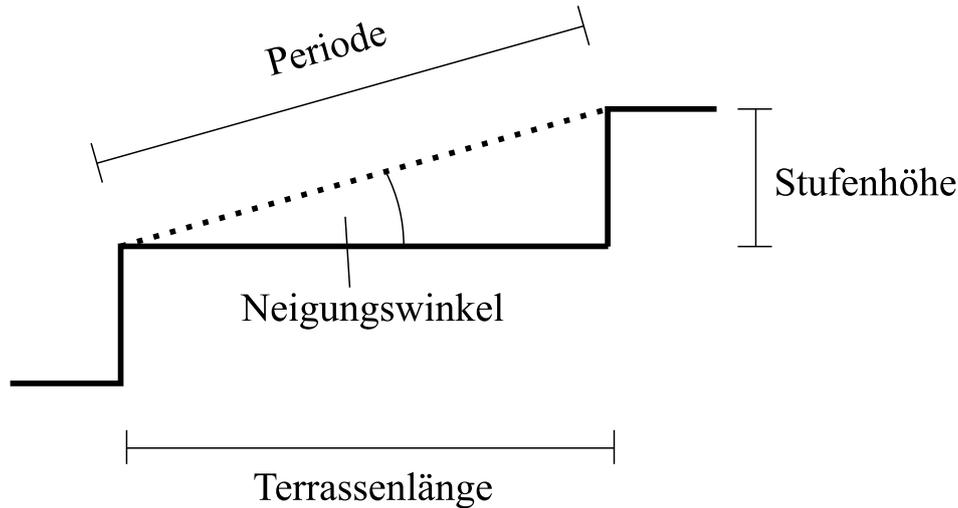


**Abbildung 3.1** – Schematische Darstellung eines SPA-LEED-Systems. Der Winkel  $\alpha$  zwischen der Elektronenkanone und dem Channeltron ist durch den Aufbau festgelegt. Der Winkel  $\epsilon$  des einfallenden Elektronenstrahls wird während der Messung variiert. Ein möglicher Strahlengang ist in blau eingezeichnet. Entnommen aus [12].

In dieser 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 [14].

## 3.2 Auswertung der RSMs

In diesem Abschnitt soll kurz darauf eingegangen werden, wie anhand der RSMs morphologische Größen wie die Terrassenlänge bestimmt werden. Aufgrund experimenteller Begebenheiten kann dabei nicht strikt wie in Abschnitt 2.4.3 beschrieben vorgegangen werde. Nach einer ersten Auswertung verschiedener RSMs bei gleicher Bedeckung hat sich herausgestellt, dass der Winkel zwischen den Beugungsreflexen und der  $K_{\perp}$ -Achse, der fortan die Orientierung der Reflexe in der RSM genannt werden soll, nicht konstant ist. Außerdem entspricht die Orientierung zumeist nicht dem Neigungswinkel der Stufen (siehe Abb. 3.2), was im Fall einer exakten senkrechten Ausrichtung der Si(111)-Terrassen vor dem SPA-LEED so sein sollte. Dies lässt darauf schließen, dass der Winkel der Probe vor dem SPA-LEED nicht exakt eingestellt und reproduziert werden kann und somit die Si(111)-Terrassen auch nicht genau senkrecht zu dem Strahl stehen. Vielmehr ist die RSM stets um einen leichten Fehlwinkel verkippt. Daher entspricht auch der in den aufgenommenen RSMs bestimmte Abstand zwischen den Beugungsreflexen parallel zu  $K_{\parallel}$  auch nicht dem in Abb. 2.10 gezeigten Abstand. Um dennoch verlässliche morphologische Größen aus den RSMs zu bestimmen, ist der Abstand der Beugungsstangen senkrecht zu deren Verlauf bestimmt worden. Dieser ist unabhängig von dem Winkel



**Abbildung 3.2** – Schematische Darstellung einer vicinalen Oberfläche in der Seitenansicht. Angegeben sind die morphologischen Größen einer solchen Oberfläche.

zwischen den Reflexen und der  $K_{\perp}$ -Achse gleich und somit nicht durch den Fehlwinkel beeinflusst. Nimmt man diesen Abstand als  $\Delta K$  an, so lässt sich daraus analog zu Gl. 2.26 die morphologische Größe der Periode zu  $2\pi/\Delta K$  bestimmen. Eine schematische Darstellung der Stufen einer vicinalen Oberfläche in der Seitenansicht ist in Abb. 3.2 gezeigt, die Periode ist dort ebenfalls markiert. Durch geometrische Überlegungen lassen sich dann die anderen Größen bestimmen, allerdings unter dem Kompromiss, dass eine weitere Größe als fest angenommen werden muss. Im Rahmen dieser Arbeit ist die Stufenhöhe als fest angenommen worden. Welcher Wert explizit angenommen wird ist, wird in der Auswertung an geeigneter Stelle genauer behandelt.

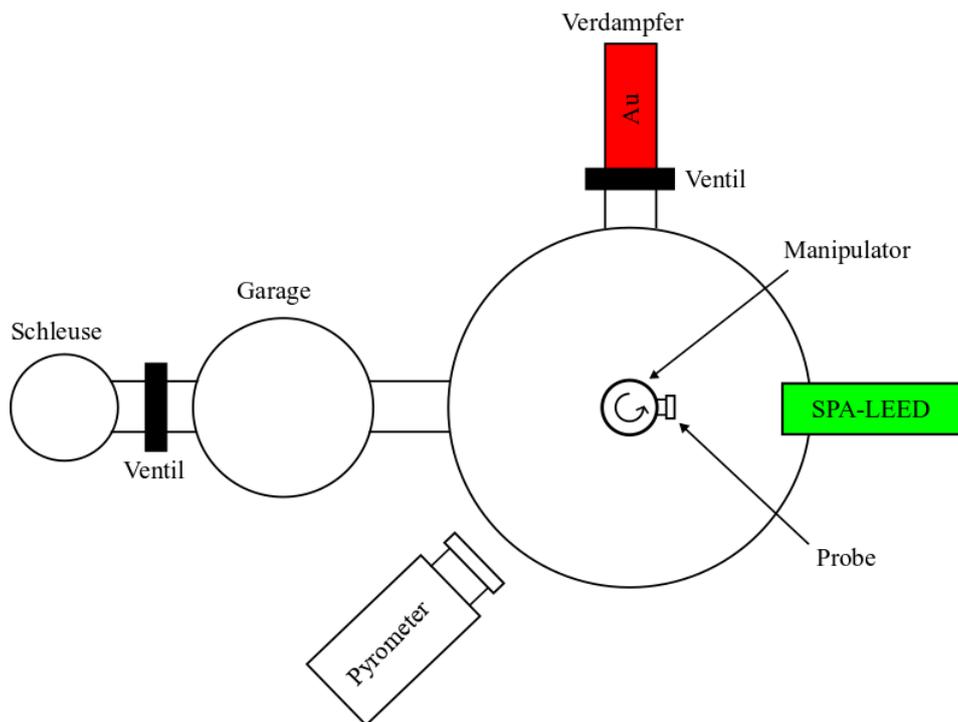
### 3.3 Ultrahochvakuumkammer

SPA-LEED ist eine sehr oberflächensensitive Messmethode, daher ist es wünschenswert, dass die Oberfläche einer Probe möglichst lange frei von Adsorbaten und anderen Kontaminationen bleibt. Zudem können Adsorbate Rekonstruktion auf der Oberfläche auslösen oder ganz einfach die periodische Kristallstruktur zerstören, was die Messergebnisse unter Umständen verfälschen kann.

Nach der kinetischen Gastheorie [15] ist die Monolagenzeit  $\tau$ , nach der im Mittel jedes Oberflächenatom von einem Gasatom getroffen worden ist

$$\tau = \frac{n_0}{j} = \frac{n_0 \sqrt{2\pi m k_B T}}{p}. \quad (3.1)$$

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

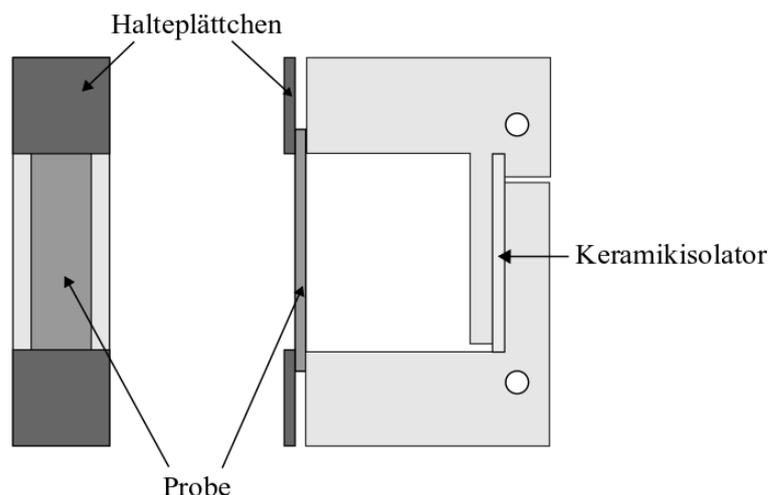


**Abbildung 3.3** – Schematische Darstellung der Ultrahochvakuumkammer. Eine Beschreibung der Komponenten und der Funktionsweise befindet sich im Text.

Um eine möglichst langanhaltend adsorbatfreie Oberfläche zu erreichen, ist somit ein niedriger Druck nötig. In den in dieser Arbeit durchgeführten Experimenten ist dies ein Druck von  $\sim 10^{-10}$  mbar, damit ist die Durchführung in einer Ultrahochvakuumkammer (UHV-Kammer) unerlässlich.

Eine schematische Darstellung der verwendeten UHV-Kammer befindet sich in Abb. 3.3. Über eine Schleuse kann die Probe in das System gebracht werden. Die Schleuse ist durch ein Ventil vom Rest der Kammer getrennt, um ein Einschleusen ohne das Belüften der gesamten Kammer zu ermöglichen. Die Probe selbst wird mit einem Transferstab durch das System bewegt. Zwischen Schleuse und Hauptkammer befindet sich eine Garage, in der bis zu vier Proben untergebracht werden können. So wird ein schneller Austausch verschiedener Proben ermöglicht. In der Mitte der Hauptkammer befindet sich die Probe auf einem Manipulator, mit dem Position und Orientierung der Probe variiert werden können. Durch ein weiteres Ventil abtrennbar befindet sich der Verdampfer an der Hauptkammer, mit dem Gold auf die Probe aufgedampft werden kann. Das Ventil dient dazu, den Verdampfer bei eventuellen Problemen ausschleusen und untersuchen zu können, ohne die Hauptkammer dabei belüften zu müssen. Direkt an der Hauptkammer befindet sich das SPA-LEED-Instrument, mit dem die Probe untersucht wird. Die Temperatur der Probe, die über Direktstrom geheizt wird, kann durch ein Fenster mit einem Infrarotpyrometer bestimmt werden.

Zur Erzeugung des Ultrahochvakuums wird ein mehrstufiges Pumpsystem verwendet. Als Vorpumpe dient eine Drehschieberpumpe, die bis zu einem Druck von  $10^{-2}$  mbar

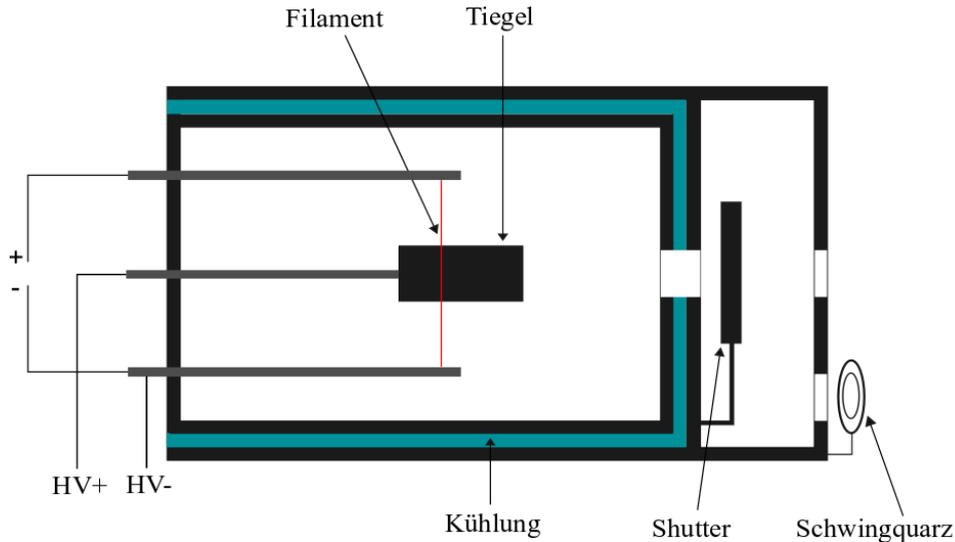


**Abbildung 3.4** – Schematische Darstellung des in dieser Arbeit verwendeten Probenhalters. Links befindet sich eine Frontalansicht, rechts eine Seitenansicht. Die Probe wird mittels Halteplättchen, die mit Schrauben festgezogen werden können, auf dem Halter festgehalten. Dieser besteht aus zwei Metallstücken, in denen jeweils ein Loch gebohrt ist, sodass der Probenhalter auf den Manipulator in der Hauptkammer gesteckt werden kann. Zudem sind sie durch ein isolierendes Keramikplättchen voneinander getrennt, um zu gewährleisten, dass ein Strom nur durch die Probe fließen kann.

pumpt. Dann folgt eine Turbomolekularpumpe, die durch Ventile trennbar mit Schleuse, Hauptkammer und Verdampfer verbunden ist und mit der ein Druck von bis zu  $10^{-8}$  mbar erreicht werden kann. Der gewünschte Basisdruck von  $10^{-10}$  mbar wird mit einer Ionengetter- und einer Titansublimationspumpe in der Hauptkammer erreicht.

### 3.4 Probenpräparation

Die Siliziumprobe mit einer Größe von  $5 \times 15$  mm wird in einen Probenhalter eingespannt. Eine schematische Darstellung des verwendeten Probenhalters befindet sich in Abb. 3.4. Beim Einspannen wird darauf geachtet, dass die Probe auf beiden Seiten gleich weit unter die Kontaktierungsecken des Probenhalters reicht und die Schrauben zum Festhalten der Probe auf beiden Seiten gleichermaßen angezogen werden. Dadurch soll gewährleistet werden, dass die Probe später möglichst gleichmäßig durch Direktstrom geheizt wird. Der Probenhalter wird zuerst in die Schleuse eingeführt und nach dem Abpumpen dieser mit dem Transferstab auf den Manipulator in der Hauptkammer gesetzt. Dort findet nun das Ausheizen statt, um eine möglichst adsorbatfreie Oberfläche zu gewährleisten. Dazu wird die Probe auf eine Temperatur von  $600^\circ\text{C}$  geheizt und für ca. 16 Stunden auf dieser Temperatur belassen. Die Temperatur der Probe kann dabei wie in Abschnitt 3.3 bereits erwähnt mit einem Infrarotpyrometer gemessen werden. Im Anschluss wird die Probe innerhalb einiger Sekunden bis auf  $1150^\circ\text{C}$  erhitzt und nach etwa 5 Sekunden wieder abgekühlt. Dieser Vorgang wird Flashen genannt und dient dazu, die natürliche  $\text{SiO}_2$ -Schicht (natives Oxid) und eventuelle restliche Adsorbate auf der Oberfläche zu



**Abbildung 3.5** – Schematische Darstellung des in dieser Arbeit verwendeten Verdampfers. Eine genauere Beschreibung der Komponenten und der Funktionsweise befindet sich im Text.

beseitigen. Insgesamt werden drei solcher Flashzyklen durchgeführt. Später im Experiment wird auf die gleiche Weise bereits aufgedampftes Gold von der Oberfläche entfernt, um die Probe erneut nutzbar zu machen.

Die nun saubere Oberfläche wird wieder auf eine erhöhte Temperatur geheizt, je nach Experiment zwischen  $840^{\circ}\text{C}$  und  $800^{\circ}\text{C}$ . Dann wird Gold auf die Probe aufgedampft. Der dazu verwendete Verdampfer ist in Abb. 3.5 schematisch dargestellt. Das zu verdampfende Gold befindet sich in einem Tiegel. Um den Tiegel befindet sich ein Filament, aus dem durch den glühelektrischen Effekt Elektronen austreten. Der Tiegel liegt auf einer positiven Hochspannung, wodurch die Elektronen in die Richtung des Tiegels beschleunigt werden. Am Tiegel geben sie ihre kinetische Energie an den Tiegel ab, wodurch dieser erhitzt wird und das in ihm befindliche Gold schmilzt und letztendlich verdampft. Zudem muss der Verdampfer mit einer Wasserkühlung während des Verdampfvorganges gekühlt werden, um eine Kontrolle über die Menge verdampften Goldes zu haben. Mit einem Shutter kann der Strom des Golddampfes auf die Probe unterbrochen werden, sodass diese nicht durchgehend bedampft wird. Die Menge des verdampften Goldes kann mittels eines Schwingquarzes bestimmt werden. Dabei ist die Frequenzänderung  $\Delta f$  des Quarzes eine Funktion der Masse  $\Delta m$  des auf den Quarz aufgedampften Goldes:

$$|\Delta f| \propto \Delta m \quad . \quad (3.2)$$

$\Delta f$  gibt letztendlich keine Information über die absolute auf die Probe aufgedampfte Goldmenge, es kann aber Aussagen über relative aufgedampfte Mengen machen und zur Reproduktion gleicher Bedeckungen der Probe genutzt werden.

# 4 Materialsystem

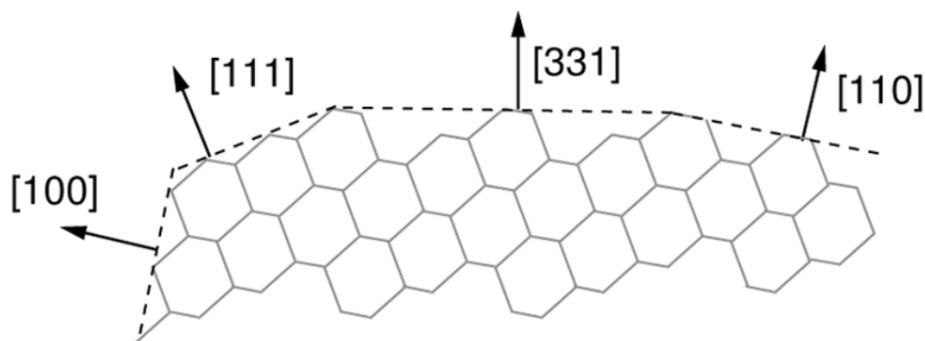
In diesem Abschnitt werden die in dieser Arbeit verwendeten Materialien, deren Struktur und Eigenschaften vorgestellt. Zuerst einmal ist dies reines Silizium und im Anschluss mit Gold dekorierte Si-Oberflächen.

## 4.1 Silizium

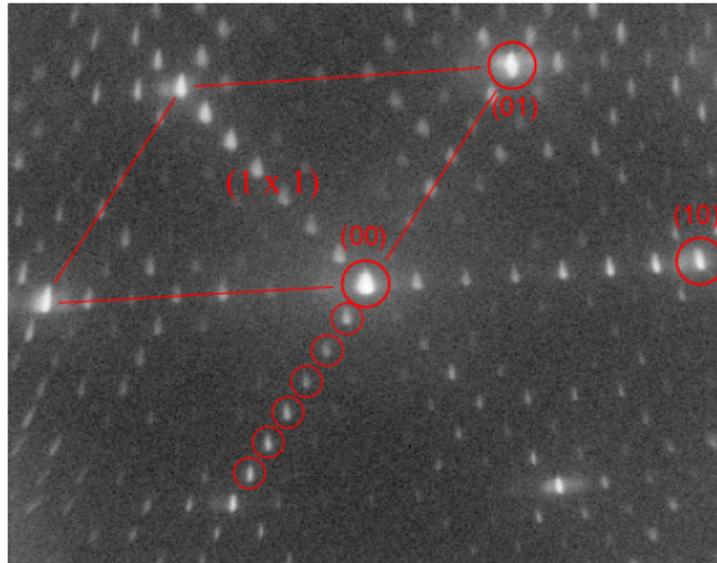
Silizium ist ein Element der vierten Hauptgruppe des Periodensystems mit dem Elementsymbol Si und hat die Ordnungszahl 14. Im kristallinen Zustand besitzt es eine Diamantstruktur mit einer Gitterkonstanten von  $a_0 = 5,43 \text{ \AA}$ .

### 4.1.1 Si(111)

Die Si(111)-Oberfläche entsteht, wenn ein Siliziumkristall entlang der (111)-Ebene geschnitten wird. Die unrekonstruierte Si(111)-Oberfläche hat ein hexagonales Oberflächen-*Bravais*-Gitter mit einer Gitterkonstanten von  $3,84 \text{ \AA}$ . In Abb. 4.1 ist eine schematische Seitenansicht eines Si-Kristallgitters gezeigt, es sind verschiedene Kristallebenen eingezeichnet, u.a. auch die (111)-Fläche. Aufgrund von freien Bindungen kommt es zu einer Rekonstruktion der Oberfläche. Bei einer sauberen Si(111)-Oberfläche und Temperaturen zwischen  $600$  und  $800^\circ\text{C}$  kommt es in der Regel zu einer  $7 \times 7$ -Rekonstruktion [16, 17]. Diese hat den Vorteil, dass sie frei von Verunreinigungen ist. Allerdings muss sie auch in einem aufwändigen Hochtemperaturprozess im UHV präpariert werden und ist auch nur dort stabil [18]. Bei höheren Präparationstemperaturen kann es zu einer  $1 \times 1$ -Struktur kommen [17], bei niedrigeren Temperaturen hingegen zu einer metastabilen



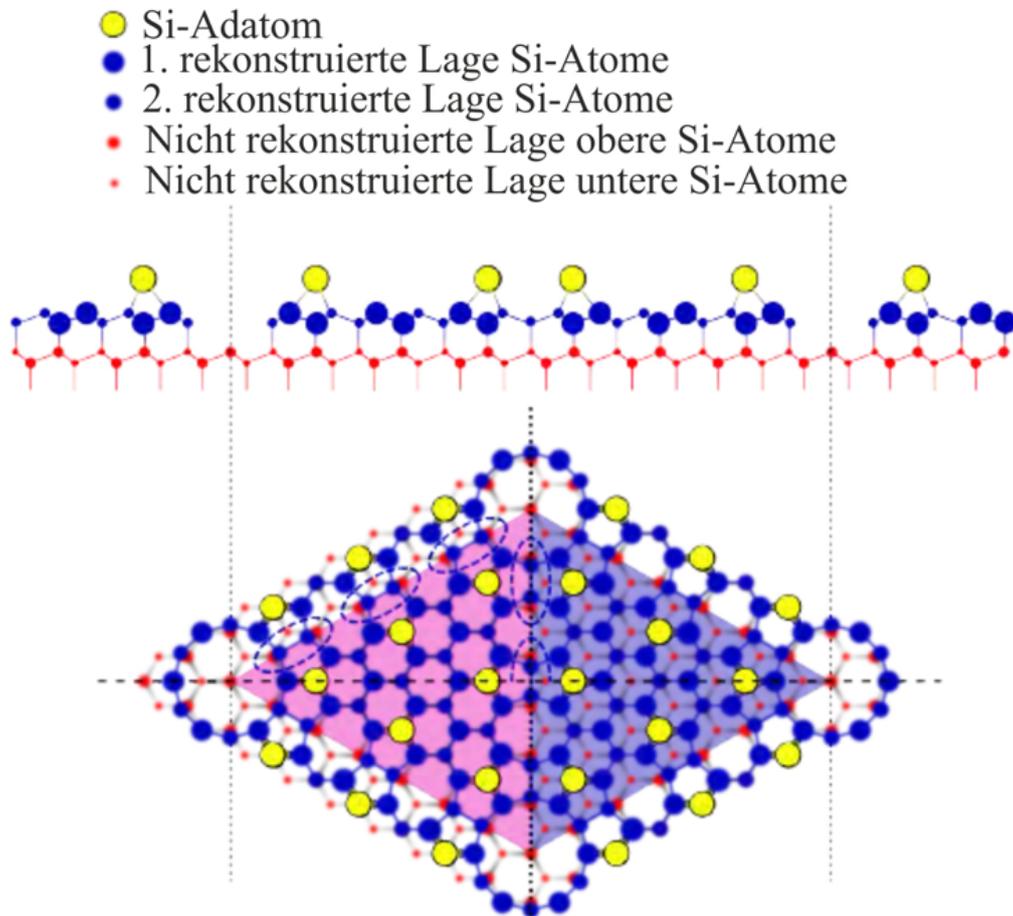
**Abbildung 4.1** – Schematische Seitenansicht eines Si-Kristallgitters mit verschiedenen eingezeichneten Kristallebenen. Entnommen und angepasst aus [20].



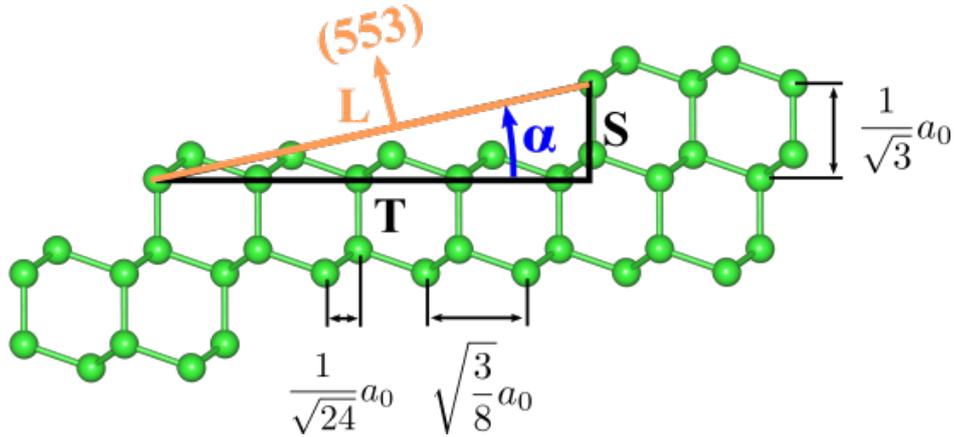
**Abbildung 4.2** – SPA-LEED-Aufnahme einer geflashten Si(111)-Oberfläche. Die Hauptreflexe sind mit großen roten Kreisen markiert, die Reflexe der durch die  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion entstandenen Überstruktur sind entlang einer Richtung mit kleinen roten Kreisen markiert. Eine  $(1 \times 1)$ -Einheitszelle ist mit einer roten Raute markiert.

$5 \times 5$ -Struktur [19]. Eine SPA-LEED-Aufnahme einer Si(111)-Oberfläche mit  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion ist in Abb. 4.2 zu sehen. Drei Hauptreflexe  $((00), (01), (10))$  sind dort mit großen roten Kreisen markiert. Die durch die Rekonstruktion bedingten Reflexe der Überstruktur sind größtenteils auch gut zu sehen, in eine Richtung sind sie mit kleinen roten Kreisen markiert.

Das akzeptierte Modell für die  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion der Si(111)-Oberfläche ist das 1985 von Takanayagi *et al.* vorgeschlagene DAS-Modell („dimer-atomstacking fault“) [21]. Dieses Modell ist in Abb. 4.3 dargestellt. Das obere Bild ist eine Seitenansicht, das untere eine Draufsicht. Die Einheitszelle der  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion besteht aus einer gefalteten Halbzelle („faulted half“), bei der die Si-Adatome auf gegenüber den regulären Gitterplätzen versetzten Plätzen sitzen und einer nicht gefalteten Halbzelle („unfaulted half“), bei der sich die Si-Adatome auf regulären Gitterplätzen der Volumen-Kristallstruktur befinden. Die Kantenlänge einer Halbzelle ist dabei  $7 \cdot 3,84 \text{ \AA} = 26,88 \text{ \AA}$  [18]. Die  $3,84 \text{ \AA}$  entsprechen hier dem Abstand zwischen zwei Si-Atomen entlang einer Außenkante der  $(7 \times 7)$ -rekonstruierten Oberflächeneinheitszelle. Insgesamt liegen auf der so rekonstruierten Si(111)-Oberfläche 19 freie Bindungen vor, im Gegensatz zu 49 freien Bindungen auf der gleichen Fläche einer unrekonstruierten  $(1 \times 1)$ -Oberfläche [22], was zu einer erheblichen Verringerung der Oberflächenenergie und damit zu einer Stabilisierung führt.



**Abbildung 4.3** – Die  $(7 \times 7)$ -rekonstruierte Oberflächeneinheit zelle der Si(111)-Oberfläche nach dem DAS-Modell von Takayanagi *et al.* [21]. Oben ist die Seitenansicht und unten die Draufsicht gezeigt. Bei der letzteren entspricht die blau unterlegte Hälfte der „unfaulted half“, bei der die Si-Adatome auf regulären Gitterplätzen sitzen und die rot unterlegte Hälfte der „faulted half“, bei der die Adatome auf zu den regulären Gitterplätzen versetzten Plätzen sind. Zwischen den beiden Hälften verläuft die Spiegelebene, die durch eine vertikale gestrichelte Linie gekennzeichnet ist. Entnommen und angepasst aus [23].



**Abbildung 4.4** – Modell der Stufen bei Si(553) in der Seitenansicht. Eingezeichnet sind diverse atomare Abstände in Einheiten der Gitterkonstante  $a_0$  sowie die Stufenhöhe  $S$ , die Terrassenlänge  $T$  und der Periode  $L$ . Entnommen und angepasst aus [26].

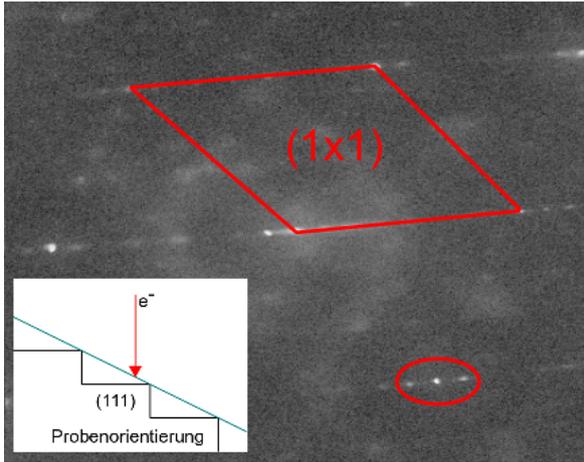
### 4.1.2 Si(331)

Da im Verlauf dieser Arbeit auch Si(331)-Facetten untersucht werden, soll diese Oberfläche hier kurz vorgestellt werden. In Abb. 4.1 ist diese Ebene in der Seitenansicht eines Si-Kristallgitters neben anderen Ebenen gekennzeichnet. Si(331) ist bis heute die einzige bestätigte stabile Fläche zwischen der (111)- und der (110)-Richtung [20]. Wie sich durch einfache Rechnung zeigen lässt, ist der Winkel zwischen der Si(331)-Fläche und der (111)-Richtung  $22^\circ$ . Die Einheitszelle der Si(331)-Fläche hat eine Größe von  $7,8 \text{ \AA}$  [24]. Zudem ist bekannt, dass es auf dieser Oberfläche zu einer  $(12 \times 1)$ -Rekonstruktion kommt [25].

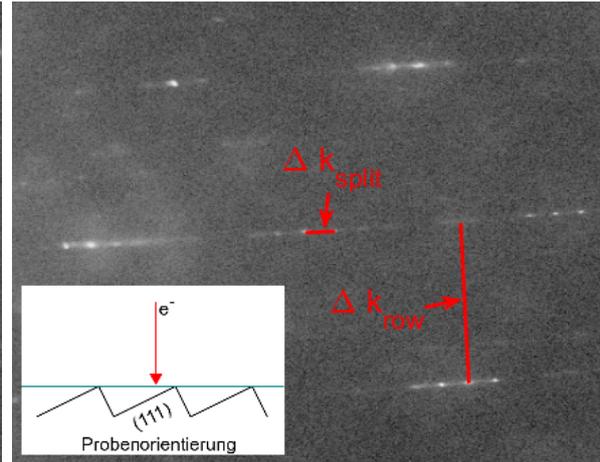
### 4.1.3 Si(553)

Bei der Si(553) handelt es sich um eine Oberfläche mit atomaren Stufen. Auf den Terrassen befindet sich dabei jeweils eine Si(111)-Oberfläche. Es gibt allerdings auch Vorschläge, die Si(553)-Oberfläche setze sich aus Si(111)- und Si(331)-Facetten zusammen [27, 24]. Da hierbei die (331)-Facetten deutlich schmaler als die (111)-Facetten sind, unterscheidet sich dieses Modell nur an den Stufenkanten, die dann aus den (331)-Facetten bestehen, geringfügig von dem reinen Stufenmodell. Daher soll weiterhin das Stufenmodell als das zentrale angenommen werden. Generell können gestufte Silizium-Oberflächen erzeugt werden, indem ein Si-Einkristall entlang der  $[11\bar{2}]$ -Richtung der Ebene, die der Si(111)-Oberfläche entspricht, unter einem bestimmten Winkel  $\alpha$  geschnitten wird. Dieser Winkel bestimmt dabei die Indizierung  $hkk$  der Oberfläche und damit auch die Terrassenlänge  $T$ . Für Si(553) ist der Neigungswinkel der Terrassen  $\alpha = 12,3^\circ$ . Nach [28] lassen sich Terrassenlänge und Periode  $L$  für ein Si( $hkk$ )-Substrat allgemein zu

$$L^2 = S^2 + T^2 = \left( \frac{|h - k|}{2\sqrt{3}} \right)^2 + \left( \left[ \frac{2h}{3} + \frac{k}{3} \right] \sqrt{\frac{3}{8}} \cdot a_0 \right)^2 \quad \text{mit } h = k \pm 2n \quad (4.1)$$



**Abbildung 4.5** – SPA-LEED-Bild einer Si(553)-Oberfläche nach mehreren Flash-Zyklen. Die Orientierung des Elektronenstrahls relativ zur Oberfläche ist senkrecht zu den Terrassen und ist im kleineren Bild angedeutet. Markiert sind eine  $(1 \times 1)$ -Einheitszelle einer Terrasse sowie eine durch die periodischen Stufen in mehrere Reflexe aufgespaltenen Beugungsstange.



**Abbildung 4.6** – SPA-LEED-Bild einer Si(553)-Oberfläche nach mehreren Flash-Zyklen. Die Orientierung des Elektronenstrahls relativ zur Oberfläche ist senkrecht zur makroskopischen Oberfläche und ist im kleineren Bild angedeutet. Markiert sind die durch die Stufen bedingte Reflexaufspaltung  $\Delta k_{\text{split}}$  und die Reihenaufspaltung  $\Delta k_{\text{row}}$ .

berechnen, wobei  $S$  die Stufenhöhe,  $n$  eine ganze Zahl und  $a_0$  die Gitterkonstante von Silizium ist ( $a_0 = 5,43 \text{ \AA}$ ). Für Si(553) ergibt sich so eine Stufenhöhe  $S_{\text{Si}(553)} = 3,14 \text{ \AA}$ , eine Terrassenlänge  $T_{\text{Si}(553)} = 14,4 \text{ \AA}$  und ein Periode  $L_{\text{Si}(553)} = 14,7 \text{ \AA}$ . Eine Seitenansicht eines Modells von Si(553) ist in Abb. 4.4 zu sehen, dort sind zudem die oben genannten Größen eingezeichnet.

Ein SPA-LEED-Bild einer Si(553)-Oberfläche ist in Abb. 4.5 zu sehen. Die Makroskopische Oberfläche der Probe steht dabei nicht senkrecht zum Elektronenstrahl, sondern ist um den Winkel  $\alpha = 12,3^\circ$  verkippt. So ist gewährleistet, dass der Elektronenstrahl senkrecht zu den Si(111)-Terrassen auf die Probenoberfläche trifft. In dem Bild ist die  $(1 \times 1)$ -Einheitszelle markiert. Bei einer gestuften Oberfläche werden die Beugungsstangen wie in Abschnitt 2.4.3 besprochen in mehrere Reflexe aufgespalten. Dies ist in der Abbildung mit einem Oval markiert.

In Abb. 4.6 ist ein weiteres SPA-LEED-Bild einer Si(553)-Oberfläche zu sehen, diesmal jedoch mit dem Elektronenstrahl senkrecht zur makroskopischen Oberfläche. Markiert sind die durch die Stufen bedingte Reflexaufspaltung  $\Delta K_{\text{split}}$  und die Periodizität senkrecht zur Verkipprichtung  $\Delta K_{[\bar{1}10]}$ . Aus diesen beiden lässt sich nach [26] die Periode

$$L_{hhk} = \frac{\Delta K_{[\bar{1}10]}}{\Delta K_{\text{split}}} \cdot a_{[\bar{1}10]} \quad (4.2)$$

berechnen, wobei  $a_{[\bar{1}10]}$  die Distanz zwischen periodisch angeordneten Atomen in  $[\bar{1}10]$ -

Richtung ist, welche für Silizium  $3.84 \text{ \AA}$  ist. Nach Gl. 4.2 und den aus Abb. 4.6 bestimmten Aufspaltungen, ergibt sich eine Periode von  $28.87 \pm (3.74) \text{ \AA}$ . Der Fehler resultiert dabei aus den maximalen und minimalen gemessenen Werten für die jeweiligen Aufspaltungen. Dass er so groß ist, liegt an der Verzerrung der Reflexe, gerade in Richtung von  $\Delta k_{\text{split}}$ . Ein Vergleich der so bestimmten Periode mit dem nach Gl. 4.1 bestimmten Wert legt nahe, dass sich auf der Si(553)-Oberfläche zweiatomige Stufen befinden oder es aufgrund unterschiedlicher atomarer Strukturen benachbarter Terrassen zu einer Periodenverdopplung kommt. Dies stimmt auch mit Ergebnissen in der Literatur überein [26, 29].

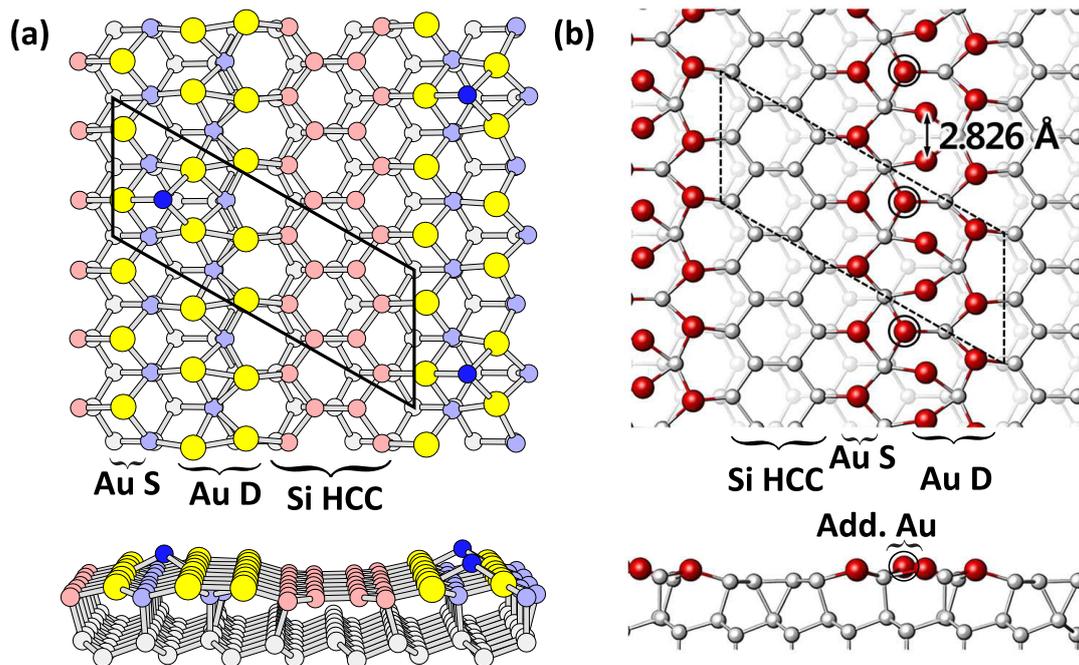
## 4.2 Gold auf Silizium

Gold ist ein Element der 1. Nebengruppe des Periodensystems und ist damit ein Übergangsmetall. Es hat die Ordnungszahl 79 und das Elementsymbol Au. Die Kristallstruktur von Gold ist kubisch flächenzentriert mit einer Gitterkonstante von  $a_0 = 4,08 \text{ \AA}$ . Wird Gold auf eine Si-Oberfläche aufgedampft, können sich verschiedene Überstrukturen bilden, abhängig unter anderem von der Orientierung ( $h h k$ ) der Si-Oberfläche und der Menge des aufgedampften Goldes.

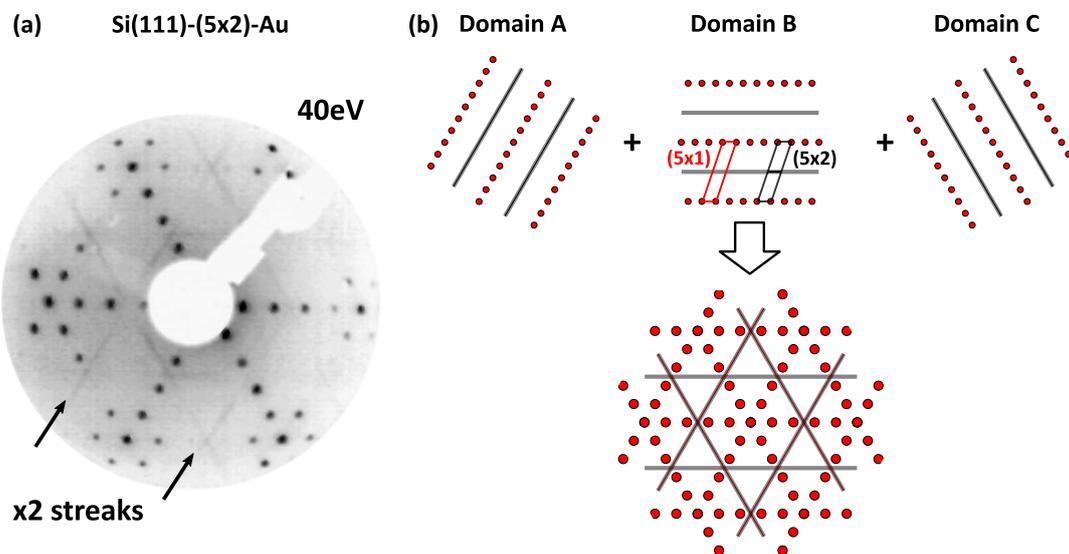
### 4.2.1 Si(111)-Au

Vor der Behandlung von Si(553)-Au sollte Si(111)-Au betrachtet werden, da dort schon einige strukturelle Kernelemente für höher induzierte Si( $h h k$ )-Au-Systeme zu finden sind. Konkret kommt es zu einer Si(111)-( $5 \times 2$ )-Au-Rekonstruktion, für die verschiedene Strukturmodelle vorgeschlagen worden sind. Hier sollen davon zwei dieser Modelle genauer behandelt werden.

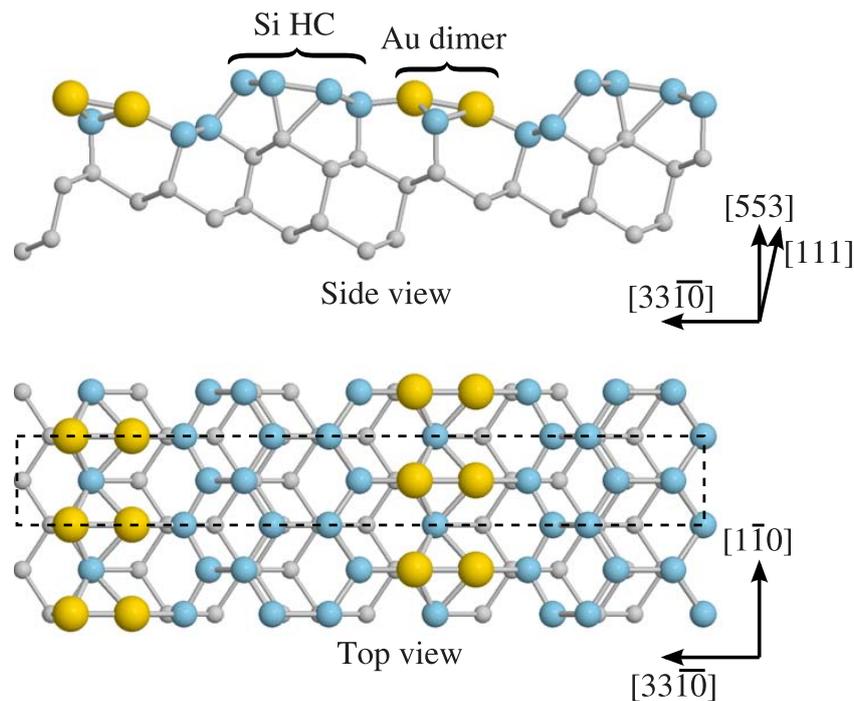
Das erste ist das EBH-Modell [30], das nach seinen Erfindern Erwin, Barke und Himpel benannt worden ist. Es ist in Abb. 4.7 a) dargestellt. Bei diesem Modell wird von einer HCC-Struktur („Honeycombe-Chain“) der Si-Atome ausgegangen. In jeder der ( $5 \times 2$ )-Einheitszellen werden dabei sechs Si-Atome durch Au-Atome ersetzt. Geht man davon aus, dass eine Bedeckung von 1 ML einem Au-Atom pro Si-Atom der Si(111)-Oberfläche auf den Terrassen entspricht, geht es bei diesem Modell um eine Bedeckung von 0,6 ML. Die Au-Rekonstruktion besteht aus einer Einzelreihe (Au S) und einer Doppelreihe (Au D) aus Goldatomen. Zwischen diesen beiden Reihen befindet sich ein Si-Adatom mit einer Periodizität von  $4 a_0$  in Kettenrichtung. Dadurch kommt es zu einer Verdopplung der Periodizität der Au-Reihen und somit zu einer  $\times 2$ -Überstruktur. Außerdem führt es zu einer Dimerisierung der Au-Atome in der Doppelreihe. Eine LEED-Aufnahme der Si(111)-( $5 \times 2$ )-Au Oberfläche ist in Abb. 4.8 a) zu sehen. Im Teil b) der selben Abbildung wird das Zustandekommen dieses Beugungsbildes verdeutlicht. Die roten ( $5 \times 1$ )-Reflexe (rote Raute in b), Domain B) entsprechen den in Abb. 4.7 markierten Oberflächeneinheitszellen. Die Streifen in der Mitte dieser Ketten suggerieren eine  $\times 2$ -Überstruktur, welche im EBH-Modell durch die Si-Adatome in jeder Einheitszelle realisiert wird. Da Streifen und keine einzelnen Reflexe vorliegen, kann davon ausge-



**Abbildung 4.7** – a) EBH-Modell der Si(111)-(5 × 2)-Au Oberfläche. Es besteht aus einer HCC-Struktur aus Si-Atomen (hellrot), 6 Goldatomen (gelb) in einer Einzel- und einer Doppelreihe und einem Si-Adatom (dunkelblau) pro Einheitszelle. Die restlichen Atome (hellblau und grau) sind Si-Atome. b) KK-Modell der Si(111)-(5 × 2)-Au Oberfläche. Es enthält 7 Au-Atome (rot) pro Einheitszelle. Das gegenüber dem EBH-Modell zusätzliche Au-Atom ist mit einem schwarzen Kringel markiert. Abbildung entnommen aus [26].



**Abbildung 4.8** – a) LEED-Bild der Si(111)-(5 × 2)-Au Oberfläche bei einer Elektronenenergie von 40 eV. ×2-Streifen sind mit schwarzen Pfeilen markiert. b) schematische Darstellung des Zustandekommens des Beugungsbildes in a) durch Superposition der Domänen A, B und C. In Domäne B sind die (5 × 1) und die (5 × 2) Einheitszellen mit einem roten bzw. schwarzen Rhomboeder markiert. Abbildung entnommen aus [26].



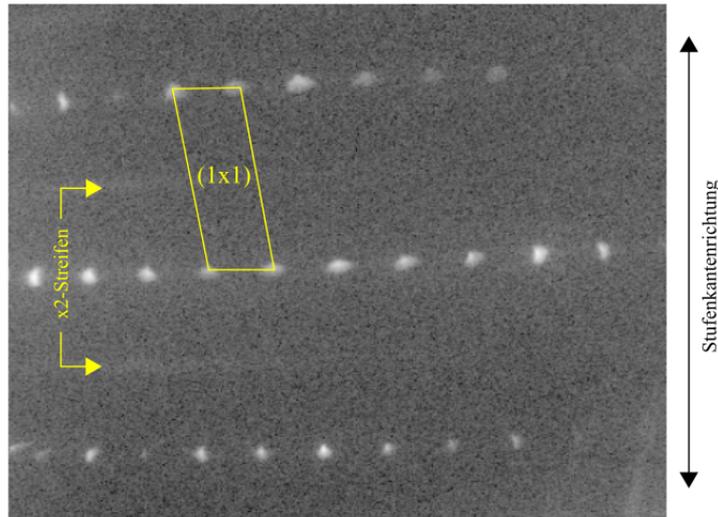
**Abbildung 4.9** – Seitenansicht (oben) und Frontansicht (unten) des Modells für Si(553)-Au mit einer Au-Bedeckung von 0.48 ML nach Voegeli *et al.* [3]. Die gelben Kugeln sind Au-Atome, die blauen Kugeln Si-Oberflächenatome und die grauen Kugeln Si-Volumenatome. Abbildung entnommen und angepasst aus [3].

gangen werden, dass benachbarte Kettenstrukturen keine feste Phasenkorrelation zueinander haben. Dass das Beugungsmuster in drei verschiedenen Rotationen jeweils  $120^\circ$  zueinander verdreht vorliegt, legt die Existenz verschiedener Rotationsdomänen auf der Oberfläche nahe. Das experimentelle Beugungsmuster entsteht dann durch Superposition der Beugung der jeweils um  $120^\circ$  zueinander verdrehten Domänen.

Ein weiteres Modell ist das Kwon-Kang (KK) Modell [31], welches in Abb. 4.7 b) dargestellt ist. Dieses geht wie das EBH-Modell von einem HCC-Gitter der Si-Atome aus. Es unterscheidet sich von dem obigen Modell aber in sofern, dass in jeder  $(5 \times 2)$ -Einheitszelle ein weiteres Au-Atom untergebracht wird, d.h. dass die Goldbedeckung 0,7 ML statt wie zuvor 0,6 ML entspricht. Durch dieses zusätzliche Au-Atom, das sich zwischen der Einzel- und der Doppelreihe befindet, lässt sich die  $(5 \times 2)$ -Überstruktur begründen, weshalb in diesem Modell kein Si-Adatom wie im EBH-Modell mehr benötigt wird.

## 4.2.2 Si(553)-Au

Das System Si(553)-Au ist aus der Si( $hkk$ )-Au-Familie jenes, welches in der Literatur am intensivsten untersucht worden und auch in dieser Arbeit von größter Bedeutung ist. Die Struktur der Oberfläche des Systems hängt dabei stark von der Au-Bedeckung ab. In der Literatur am häufigsten untersucht ist die Oberfläche mit einer Goldbede-



**Abbildung 4.10** – LEED-Bild der Si(553)-Au Oberfläche bei einer Bedeckung von 0.48 ML Au ( $\equiv$  1600 Hz), aufgenommen bei 130 eV. Die  $(1 \times 1)$ -Einheitszelle ist mit einem gelben Rhomboeder markiert.

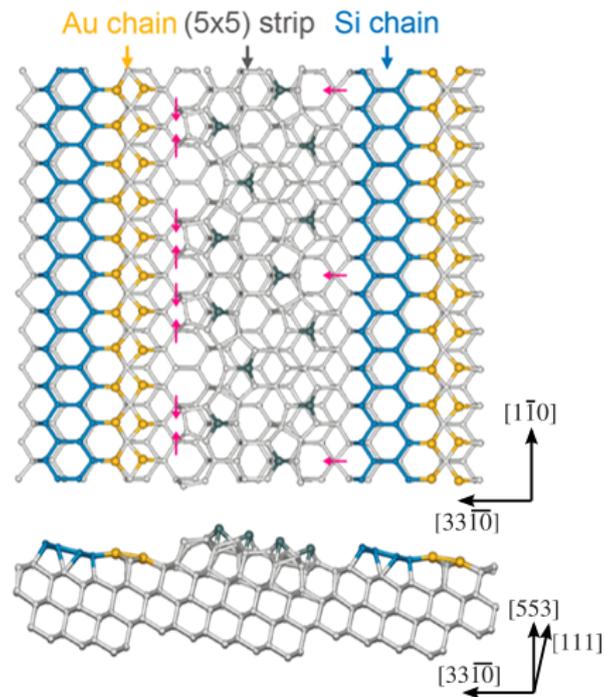
ckung von 0,48 ML, was zwei Au-Atomen pro Flächeneinheit entspricht. Ein in der Theorie von Krawiec entwickeltes Modell [2] konnte weitgehend im Experiment bestätigt werden [3]. Das nach dem Experiment leicht modifizierte Modell ist in Abb. 4.9 dargestellt. Hier formen die Au-Atome auf jeder Si(111)-Terrasse eine Doppelreihe und bilden dabei Dimere. An der Stufenkante befindet sich eine Si-Kette in Honigwabenstruktur (HCC, s.o.). Es ist anzumerken, dass diese Honigwabenstruktur derjenigen auf der Oberfläche von Si(111)- $(5 \times 2)$ -Au im EBH- und KK-Modell erstaunlich ähnlich ist (siehe Abb. 4.7).

Ein SPA-LEED-Bild der Si(553)-Au Oberfläche mit einer Au-Bedeckung von 0,48 ML aufgenommen bei Raumtemperatur ist in Abb. 4.10 zu sehen. Die  $(1 \times 1)$ -Einheitszelle dieses Gitters ist mit einer gelben Raute markiert. Die Stufenkantenrichtung im Realraum ist senkrecht zu den Reflexketten und mit einem Doppelpfeil markiert. In der Mitte zwischen den Reflexketten sind Streifen parallel zu den Ketten zu sehen. Diese  $\times 2$ -Streifen sprechen dafür, dass es eine  $\times 2$ -Periodizität entlang der Kettenrichtung gibt. Diese rührt daher, dass jeweils benachbarte Au-Dimere leicht gegeneinander verkippt sind und es so zu einer Periodenverdopplung kommt [26, 32]. Da es sich dabei um Streifen und nicht um scharfe Reflexe handelt, gibt es zwischen den verschiedenen Au-Ketten in Stufenrichtung offenbar keine Phasenkorrelation.

Bei höheren Au-Bedeckungen kommt es zudem zu einer Bildung von Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Au-Facetten [33]. Ein SPA-LEED-Bild einer solchen Oberfläche ist in Abb. 5.6 d) gezeigt. Zusätzlich zu den Reflexen und Streifen der Oberfläche mit einer Au-Bedeckung von 0,48 ML sind dort  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe zu sehen. Sie sind mit gelben Kreisen markiert,

die  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle mit einer gelben Raute. Nach [33] entstehen entsprechende Facetten bei einer Bedeckung von 1 ML. Somit ist ein Beugungsbild wie in Abb. 5.6 d) ein Zeichen dafür, dass zu viel Gold auf der Oberfläche ist, um eine reine wie oben beschriebene Struktur zu erhalten und zusätzlich Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Au-Facetten entstehen. Dies kann entweder durch zu viel aus dem Verdampfer zur Verfügung gestelltes Gold oder durch eine zu niedrige Temperatur der Probe und einen dadurch höheren Haftkoeffizienten der Au-Adsorbataatome geschehen.

Ein weiteres Si(553)-Au-System mit stabiler Überstruktur ist von Song *et al.* entdeckt worden [4]. Dieses entsteht bei einer Au-Bedeckung von 0,19 ML. Da es eine niedrigere Bedeckung als das obige System hat, wird es bei Song *et al.* LCW („Low Coverage Wire“) genannt, das Modell mit höherer Bedeckung entsprechend HCW („High Coverage Wire“). Diese Bezeichnungen sollen im Folgenden auch in dieser Arbeit verwendet werden. Ein Modell des LCW ist in Abb. 4.11 gezeigt. Es können dabei drei verschiedene Ketten auf zwei Terrassen identifiziert werden. Die ersten beiden befinden sich auf einer Terrasse und sind eine Kette aus Au-Doppelreihen und eine Si-HCC-Kette. Die entsprechende Terrasse hat dabei eine Weite von  $(4\frac{1}{3} \cdot a_{\perp}) = 14,39 \text{ \AA}$  und einen Neigungswinkel von  $12,2^{\circ}$ .  $a_{\perp} = 3,32 \text{ \AA}$  ist hier die Länge einer Einheitszelle in  $[11\bar{2}]$ -Richtung, derjenigen in Stufenrichtung [4] und senkrecht zur Stufenkantenrichtung. Die beiden Ketten entsprechen ziemlich genau denen aus dem HCW. Sowohl die Periode als auch atomare Positionen, gewonnen aus STM-Messungen, stimmen in beiden Systemen gut miteinander überein [4]. Die Si-HCC-Kette ist allerdings gegenüber der bei höherer Au-Bedeckung leicht verzerrt. Da die Terrasse mit den beiden Ketten gut einem HCW entspricht, können für ein HCW die gleiche Terrassenlänge und der gleiche Neigungswinkel angenommen werden. In dem neuen Modell kommt allerdings eine weitere Kette auf einer weiteren Terrasse hinzu. Die räumliche Anordnung und STS-Spektren dieser Kette stimmen gut mit denen der Si-Adatome einer Si(111)- $(5 \times 5)$ -Oberfläche überein. Die Größe der zusätzlichen Terrasse passt ebenfalls gut zu der einer  $(5 \times 5)$ -Einheitszelle, weshalb angenommen werden kann, dass diese Terrasse aus einer Si-basierten Kette aus  $(5 \times 5)$ -Einheitszellen besteht. Die Terrasse hat dabei eine Weite von  $(5\frac{1}{3} \cdot a_{\perp}) = 17,71 \text{ \AA}$  und einen Neigungswinkel von  $10^{\circ}$ . Es ist zudem anzumerken, dass bei einer Au-Bedeckung von 0,05 ML die Oberfläche überwiegend aus solchen Ketten besteht. Mit zunehmender Au-Bedeckung nimmt die Dichte dieser Terrassen allerdings ab [4]. Die leichte Verzerrung der Si-HCC-Kette kann auf den Kontakt mit der zusätzlichen Terrasse zurückgeführt werden. Ebenso sind Si-Atome der  $(5 \times 5)$ -Kette an den Schnittstellen zu benachbarten Ketten verzerrt. Die Verzerrungen sind in Abb. 4.11 mit roten Pfeilen angedeutet. Betrachtet man die beiden Terrassen als Einheit, so ergibt sich eine Terrassenlänge von  $(9\frac{2}{3} \cdot a_{\perp}) = 32,1 \text{ \AA}$  und ein Neigungswinkel von  $11^{\circ}$ .



**Abbildung 4.11** – Frontansicht (oben) und Seitenansicht (unten) des Modells für Si(553)-Au mit einer Au-Bedeckung von 0.19 ML nach Song *et al.* [4]. Die gelben Kreise sind Au-Atome, die blauen Si-Atome der Si-Honigwabenstruktur, die dunkelgrauen Si-Adatome der (5 × 5)-Kette und die hellgrauen die restlichen Si-Atome. Mit roten Pfeilen angedeutet sind die Verzerrungen an den Schnittstellen der verschiedenen Ketten. Abbildung entnommen und angepasst aus [4].

# 5 Ergebnisse und Auswertung

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse dieser Arbeit vorgestellt und ausgewertet werden. Zuerst werden dabei mit der Kalibrierung der SPA-LEED-Messungen mithilfe einer reinen Si(111)-Probe und Messungen am reinen Si(553)-Substrat einige Vorversuche durchgeführt. Dann folgt eine Bedeckungsserie, gefolgt von einer detaillierteren Analyse aufgenommener RSMs und Reflexprofile für verschiedene Konfigurationen von Bedeckungen und Substrattemperaturen beim Aufdampfen. Nach einer Betrachtung der Dimerisierung der Au-Doppelkette wird abschließend die Bildung von Facetten bei höheren Bedeckungen als für die HCW-Phase untersucht.

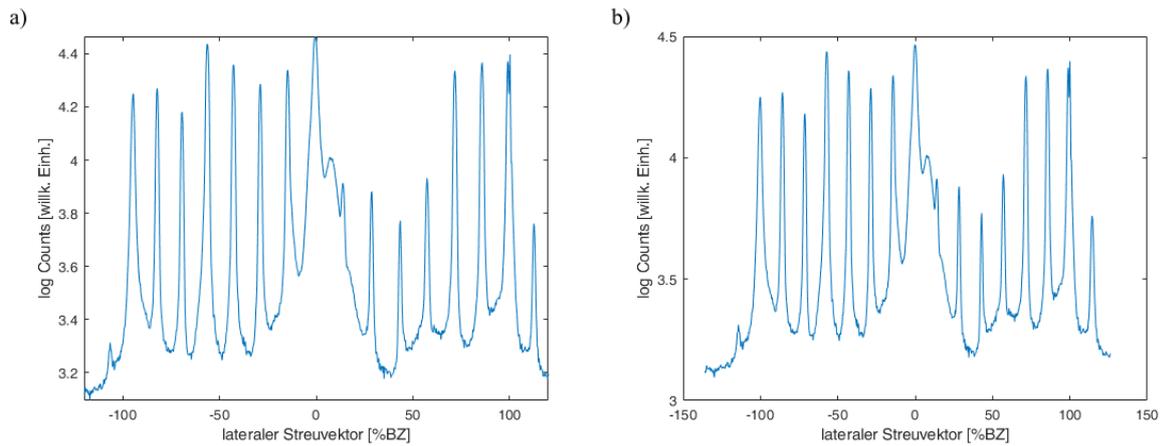
## 5.1 Vorversuche

Hier werden mit der Kalibrierung bzw. „Entzerrung“ der SPA-LEED-Aufnahmen und Messungen am reinen Si(553)-Substrat Vorversuche im Rahmen dieser Arbeit vorgestellt.

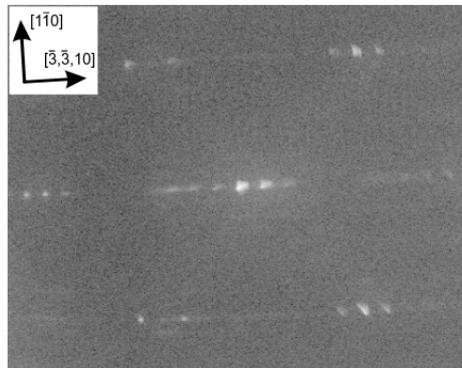
### 5.1.1 Kalibrierung an Si(111)

Bei SPA-LEED-Messungen kommt es wie in Abschnitt 3.1 erwähnt aufgrund des Aufbaus des Instruments zu einer Verzerrung des Beugungsbildes, die insbesondere zum Rand des Messbereiches zunimmt. Im Endeffekt wird am Channeltron die Intensität des reflektierten Elektronenstrahls in Abhängigkeit der am Oktopol angelegten Spannung gemessen. Aufgrund von Inhomogenitäten ist der Zusammenhang zwischen Spannung und Position im reziproken Raum nicht linear, was eine Verzerrung mit sich zieht. Diese führt unweigerlich zu einer Verfälschung der Messergebnisse, weswegen es wünschenswert ist, die aufgenommenen Scans nachträglich zu „entzerren“ und so möglichst realistische Messergebnisse zu erhalten. Das Vorgehen bei dieser Kalibrierung soll im Folgenden erläutert werden.

Zur Kalibrierung wird eine Si(111)-Probe verwendet. Wie in Abschnitt 4.1.1 behandelt, ist die Oberfläche von Si(111) mit seiner  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion sehr gut untersucht und daher gut für die Kalibrierung geeignet. An einer sauberen Si(111)-Oberfläche werden Linescans vorgenommen. Dabei wird bei jeder Energie, bei der auch Si(553)-Au vermessen wird, ein Scan durchgeführt. Ein solcher Linescan für eine Elektronenenergie von 120 eV ist in Abb. 5.1 a) gezeigt. Nach den Messungen, die zu diesem Punkt noch verzerrt sind, folgt nun für jede Energie das gleiche Vorgehen. Zuerst werden die verzerrten Positionen bestimmt. Für Si(111) ist wohlbekannt, dass die Hauptreflexe bei 0%BZ und 100%BZ bzw.  $-100\%$ BZ liegen. Dazwischen sind die Reflexe bedingt durch

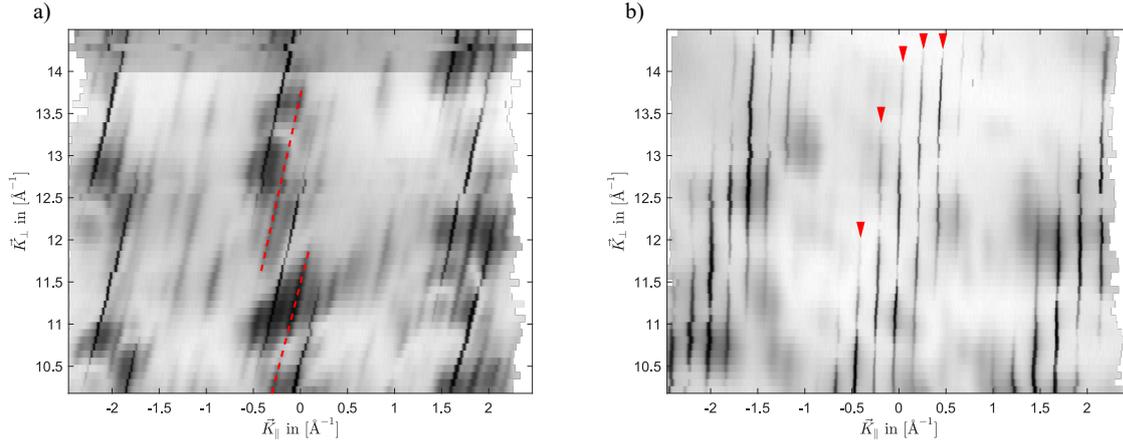


**Abbildung 5.1** – a): Linescan entlang der Hauptachse bei Si(111) und einer Elektronenenergie von 120 eV vor der Kalibrierung. b): Der gleiche Scan nach der Kalibrierung.



**Abbildung 5.2** – 2D-Aufnahme einer Si(553)-Oberfläche ohne Bedeckung.

die  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion mit jeweils einem Abstand von  $1/7 \cdot 100 \%BZ$ . Den noch verzerrten Peaks werden dann die entsprechenden zu erwartenden Positionen zugewiesen und ein Polynom berechnet, dass die Peaks auf die korrekten Positionen projiziert und die restliche Messung entsprechend entzerrt. Nach Anwendung dieses Polynoms liegt ein entzerrtes Bild vor. Ein so entzerrtes Bild des schon oben erwähnten Linescans bei 120 eV ist in Abb. 5.1 b) gezeigt. Das für jede Energie berechnete Polynom kann dann auch auf andere Messungen bei entsprechenden Energien angewandt werden und diese so ebenfalls entzerren. Entzerrt wird allerdings nur bei Linescans, da diese zur quantitativen Auswertung verwendet werden. Die in dieser Arbeit gezeigten 2D-Bilder sind somit immer noch verzerrt.



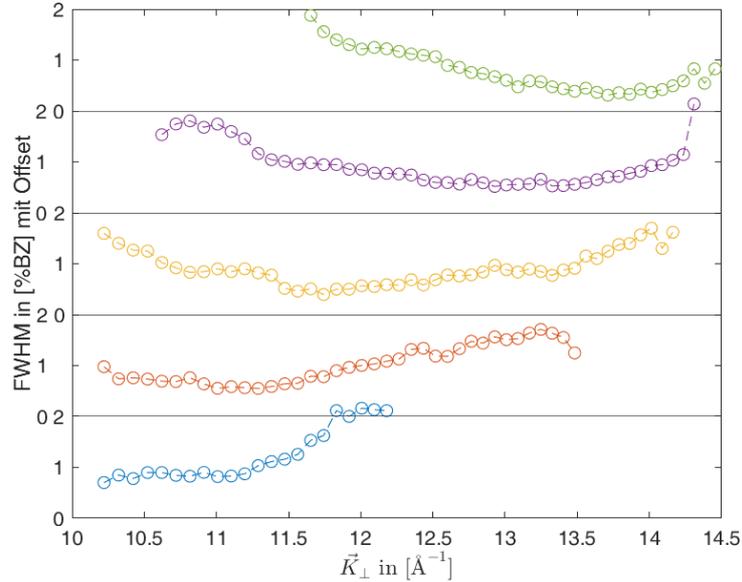
**Abbildung 5.3** – RSMs der Si(553)-Oberfläche ohne Goldbedeckung mit a) den Si(111)-Terrassen senkrecht zum Elektronenstrahl und b) der makroskopischen Oberfläche senkrecht zum Elektronenstrahl. Für die mit roten Pfeilen markierten Reflexe ist in Abb. 5.4 der energieabhängige Verlauf der Halbwertsbreite gezeigt.

### 5.1.2 Messungen am Substrat Si(553)

Bevor die Ergebnisse zu den Messungen am Atomdrahtsystem Si(553)-Au vorgestellt werden, soll kurz auf das reine Substrat eingegangen werden.

Eine 2D-Aufnahme dieser Oberfläche ist in Abb. 5.2 dargestellt. Es ist gut zu erkennen, wie die Reflexe im Bereich der Beugungsstangen durch die Periodizität der Stufen aufspalten. In Abb. 5.3 sind zwei RSMs der unbedeckten Oberfläche gezeigt, wobei in a) die Si(111)-Terrassen senkrecht zum Elektronenstrahl des SPA-LEED stehen und in b) die makroskopische Oberfläche. Es sind jeweils drei Gruppen von Beugungsstangen zu erkennen. Wie zu erwarten, sind die Beugungsstangen nur dort intensiv, wo Stangen der reinen Si(111)-Oberfläche zu erwarten wären, wodurch es erst zu der Bildung von Gruppen kommt. In a) verlaufen die Gruppen parallel zu  $K_{\perp}$ -Achse, da dort die Si(111)-Terrassen nahezu senkrecht zum Elektronenstrahl stehen. In b) hingegen verlaufen die Gruppen leicht verkippt, da hier auch die Probe und damit die (111)-Terrassen verkippt vor dem Elektronenstrahl stehen. In a) fällt neben relativ schwachen Stangen zwischen diesen Gruppen auf, dass zwischen intensiveren Beugungsstangen in halbem Abstand noch etwas schwächere Stangen liegen, welche in Abb. 5.3 a) in der mitte exemplarisch mit gestrichelten gelben Linien markiert sind. Anhand der RSMs können nun morphologische Größen bestimmt werden, hier soll dies insbesondere die Terrassenlänge sein.

Für den Fall a) muss dabei bedacht werden, dass die Si(111)-Terrassen nicht exakt senkrecht zum Elektronenstrahl stehen. Aus diesem Grund ist wird die Terrassenlänge für diesen Fall wie in Abschnitt 3.2 beschrieben bestimmt. Berücksichtigt man nur die intensiveren Stangen, so ergibt sich eine Periode von  $(14.03 \pm 0.91) \text{ \AA}$ , wobei zuerst für jede Gruppe die Periode gemittelt und anschließend der Mittelwert über alle Gruppen bestimmt wird. Der Fehler ist dabei die Standardabweichung  $\sigma$  dieser Verteilung. Für die aus der Periode bestimmten Werte wird dann dieser Fehler als relativer Fehler an-



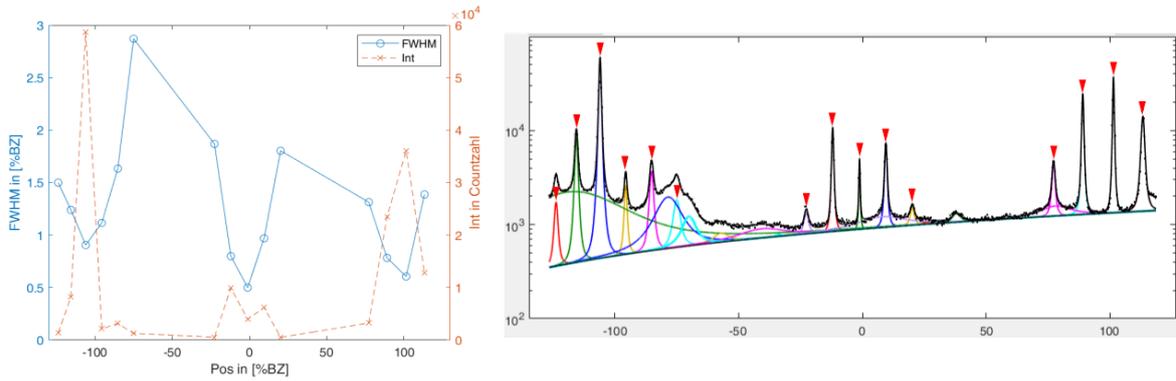
**Abbildung 5.4** – FWHM in Abhängigkeit der Elektronenenergie der in Abb. 5.3 b) markierten Reflexe mit Offset. Die gezeigten Verläufe entsprechen dabei von unten nach oben den markierten Reflexen von links nach rechts. Die durchgezogenen Linien stellen dabei jeweils die 0 für den darüber liegenden Verlauf dar.

genommen. Mit der oben angegebenen Orientierung als Neigungswinkel ergibt sich eine Terrassenlänge von  $(13,67 \pm 0,89) \text{ \AA}$ , was im Rahmen des Fehlers zu dem nach Gl. 4.1 bestimmten Wert passt. Berücksichtigt man hingegen die schwächeren Zwischenreflexe, so ergibt sich eine Periode von  $(27,56 \pm 1,93) \text{ \AA}$  und als Terrassenlänge  $(26,86 \pm 1,88) \text{ \AA}$ . Dieser Wert passt zu dem nach Gl. 4.2 bestimmten Wert, was die These unterstützt, dass auf der Si(553)-Oberfläche Doppelstufen vorliegen oder es aus einem anderen Grund zu einer Periodenverdopplung kommt.

Im Fall von b) ist die Orientierung der Reflexe  $(1,18 \pm 0,45)^\circ$  und damit sehr nah an den für diesen Fall idealen  $0^\circ$ . Somit kann einfach analog zu Abb. 2.10 durch den Abstand der Beugungsstangen die Terrassenlänge nach Gl. 2.26 bestimmt werden. Der Abstand ist dabei wie in Fall a) bestimmt worden, der durch die leichte Fehlneigung resultierende Fehler liegt dabei unter  $0,1\%$  und ist als vernachlässigbar angenommen worden. Die bestimmte Terrassenlänge  $29,92 \pm 1,42 \text{ \AA}$  unterstützt wieder die Doppelstufenthese, bzw. eine andersartige Periodenverdopplung. Dass hier alle Reflexe anders als in Fall a) annähernd gleich intensiv sind, bestärkt diese Annahme noch weiter.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass in keiner der beiden gezeigten RSMs Anzeichen für (111)- und (331)-Facetten, wie sie teilweise in der Literatur für die Si(553)-Oberfläche vorgeschlagen werden [27, 24], zu sehen sind. Dies legt den Schluss nahe, dass hier schlicht keine Facetten existieren und sie somit auch nicht sichtbar gemacht werden können.

In Abb. 5.4 ist die Halbwertsbreite der in Abb. 5.3 mit roten Pfeilen markierten Re-



**Abbildung 5.5** – Links: Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\cong K_{\parallel}$ ) in %BZ für eine saubere Si(553)-Oberfläche und einer Elektronenenergie von 130 eV. Die ausgewerteten Peaks sind rechts mit roten Pfeilen markiert. Rechts: Ausschnitt aus dem ReflexFit-Programm mit den an den Linescan angepassten Funktionen.

flexe gezeigt. Dies dient vor allem dazu, später die Qualität der mit Gold bedeckten Oberflächen mit der einer sauberen Oberfläche zu vergleichen. Die FWHM liegt bei den hier ausgewerteten Reflexen überwiegend zwischen etwas über 0 und 2 %BZ, wobei der Mittelwert in allen Fällen nah bei 1 %BZ liegt. Es fällt auf, dass alle Reflexe einen recht ähnlichen Verlauf mit einem breiten Minimum haben. Zudem verschieben sich diese Minima in positiver  $K_{\parallel}$ -Richtung zu höheren Energien. Dies steht in Korrelation zum Verlauf der (111)-Stangen, welcher bei dieser Probenorientierung ebenfalls schräg in der RSM stehen.

In Abb. 5.5 ist auf der linken Seite die Halbwertsbreite von Peaks der sauberen Si(553)-Oberfläche in Abhängigkeit ihrer Position bzw. von  $K_{\parallel}$ . Rechts in der Abbildung ist ein Linescan mit angepassten Funktionen zu sehen, dort sind die links gezeigten Peaks mit roten Pfeilen markiert. Hier ergibt sich für die vermessenen Peaks eine mittlere Halbwertsbreite von  $(1,29 \pm 0,61)$  %BZ. Dieser Wert stimmt auch gut mit den Halbwertsbreiten in Abb. 5.4 überein.

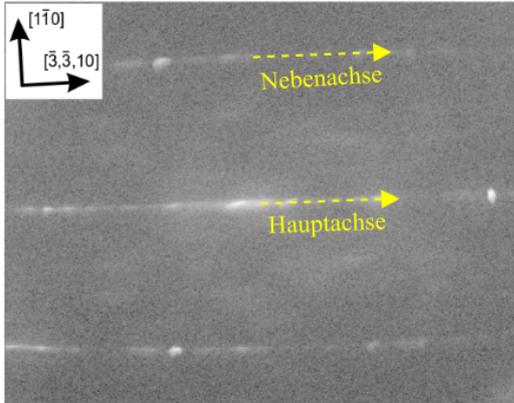
## 5.2 Bedeckungsreihe

Nach den Vorversuchen an Si(111) und dem Substrat Si(553) soll nun das System Si(553)-Au untersucht werden. Dazu wird zu Beginn eine Bedeckungsreihe aufgenommen. So soll vor allem herausgefunden werden, bei welchen aufgedampften Mengen Gold eine LCW- bzw. eine HCW-Phase auf der Oberfläche vorliegen. Zuerst wird wie in Abschnitt 3.4 beschrieben eine saubere Si(553)-Oberfläche erzeugt. Dann wird bei einer Proben-temperatur von 600°C unterschiedliche Mengen Gold auf die Oberfläche aufgedampft. Die Menge aufgedampften Goldes wird dabei mit Hilfe eines Schwingquarzes gemessen. Zu Beginn wird eine Menge entsprechend 100 Hz aufgedampft. Von dem so präparierten System wird dann ein SPA-LEED-Bild sowie ein Linescan entlang der Hauptachse aufgenommen. Alle Aufnahmen, hier und auch im Folgenden, werden dabei bei Raumtem-

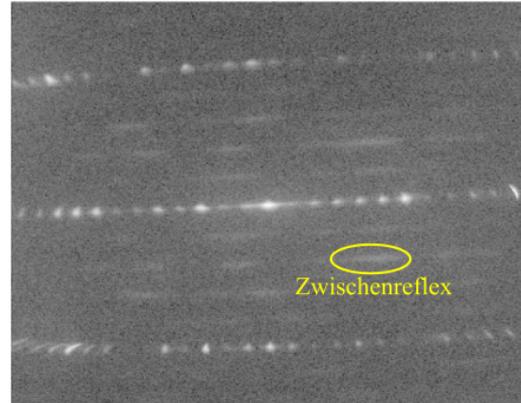
peratur durchgeführt. Die Richtung der Hauptachse ist im SPA-LEED-Bild in Abb. 5.6 a) mit einem gestrichelten Pfeil angezeigt. Sie ist für alle folgenden gezeigten 2D-Bilder gleich definiert. Die beiden ähnlich aussehenden Achsen parallel zu der Hauptachse sollen im Weiteren als Nebenachsen bezeichnet werden, in Abb. 5.6 a) ist eine solche ebenfalls markiert. Reflexe zwischen diesen Achsen werden als Zwischenreflexe bezeichnet (vgl. die Markierung in Abb. 5.6 b)). Nachdem die Messungen für eine Bedeckung abgeschlossen ist, wird die Probe durch drei Flashzyklen (siehe Abschnitt 3.4) von Gold gereinigt und so erneut eine saubere Oberfläche erzeugt. Nachdem an einer Probe insgesamt etwa zehn mal diese drei Flashzyklen vorgenommen worden sind, wird eine neue Probe verwendet, da die Probenoberfläche mit zunehmender Anzahl an durchgeführten Flashzyklen merklich degradiert. Im folgenden Schritt der Bedeckungsserie wird dann die nächsthöhere Bedeckung auf die saubere Probe aufgedampft. Bis zu einer Bedeckung von 1600 Hz wird sie in Schritten von 100 Hz sukzessive erhöht. Wegen dann nur noch kleinen Änderungen im SPA-LEED-2D-Bild bei dieser Schrittweite wird diese bis zu der maximalen vermessen Bedeckung von 2400 Hz auf 200 Hz gesetzt.

In Abb. 5.7 ist ein Plot mit Linescans der Bedeckungsserie bis zu einer Bedeckung von 2000 Hz in den oben angegebenen Schrittweiten dargestellt. Es werden dabei jeweils entzerrte (bzw. kalibrierte) Linescans entlang der Hauptachse bei einer Elektronenenergie von 130 eV gezeigt. Bei den Bedeckungen 100 Hz bis 300 Hz reicht der Scan dabei nicht ganz bis  $-130\%BZ$ , wie es bei den anderen Scans der Fall ist. Dies liegt daran, dass bei diesen Bedeckungen insgesamt noch ein kleinerer Bereich gescannt worden ist und der gesamte Scan nachträglich wegen einem nicht genau mit späteren Winkeln übereinstimmendem Winkel der Probe vor dem SPA-LEED-Instrument verschoben werden musste.

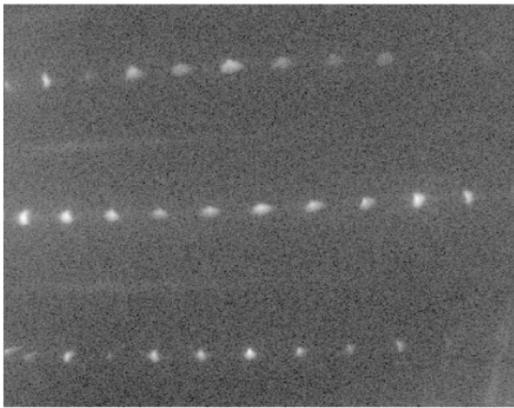
Mit steigender Bedeckung zeigen sich deutlich voneinander unterschiedliche Linienprofile. Zuerst fällt auf, dass sich bereits bei einer Bedeckung von 100 Hz das Profil von der unbedeckten Si(553)-Oberfläche unterscheidet. Dies lässt darauf schließen, dass es bereits bei geringen Bedeckungen zu einer merklichen Umstrukturierung der Oberflächenmorphologie kommt. Dass die Peaks weniger, schwächer und breiter werden deutet darauf hin, dass zuerst einmal weniger Ordnung auf der Oberfläche herrscht. Bis zu einer Bedeckung von 600 Hz bildet sich dann nach und nach die Struktur der LCW-Phase mit einer regelmäßigen Periodizität und relativ intensiven und schmalen Reflexen aus. Der Linescan bei dieser Bedeckung wird später genauer ausgewertet. Mit steigender Bedeckung werden die Peaks der LCW-Phase stetig schwächer und breiter und es bilden sich bis zu einer Bedeckung von 1400 Hz allmählich die Peaks der HCW-Phase aus. Insbesondere bei 1600 Hz und 1800 Hz sind diese Peaks deutlich und mit relativ geringer Halbwertsbreite ausgeprägt. Der Linescan für 1600 Hz wird später in diesem Abschnitt weiter ausgewertet. Bei der mit 2000 Hz höchsten Bedeckung in diesem Plot werden die Peaks bereits wieder deutlich schwächer und breiter, was dafür spricht, dass die HCW-Phase bei dieser Bedeckung bereits weniger stark ausgeprägt ist bzw. durch eine andere Struktur verdrängt wird. Dabei handelt es sich dabei um Facetten. Was daher bei dieser Bedeckung auffällt ist, dass kein Peak der Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur zu sehen ist (siehe Abb. 5.6 d) auf der Hauptachse), was bei späteren Messungen hingegen der Fall war. Dem soll an dieser Stelle aber keine allzu große Bedeutung beikommen, im



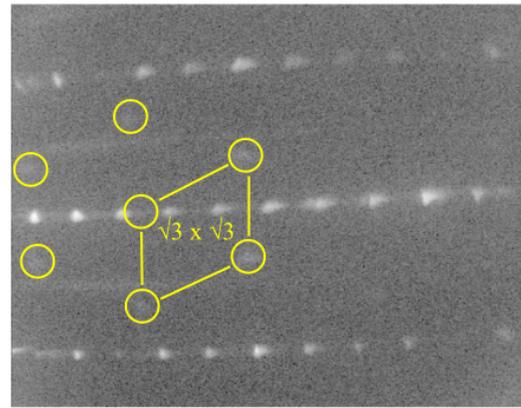
a) 300 Hz, 600 C



b) 600 Hz, 600 C

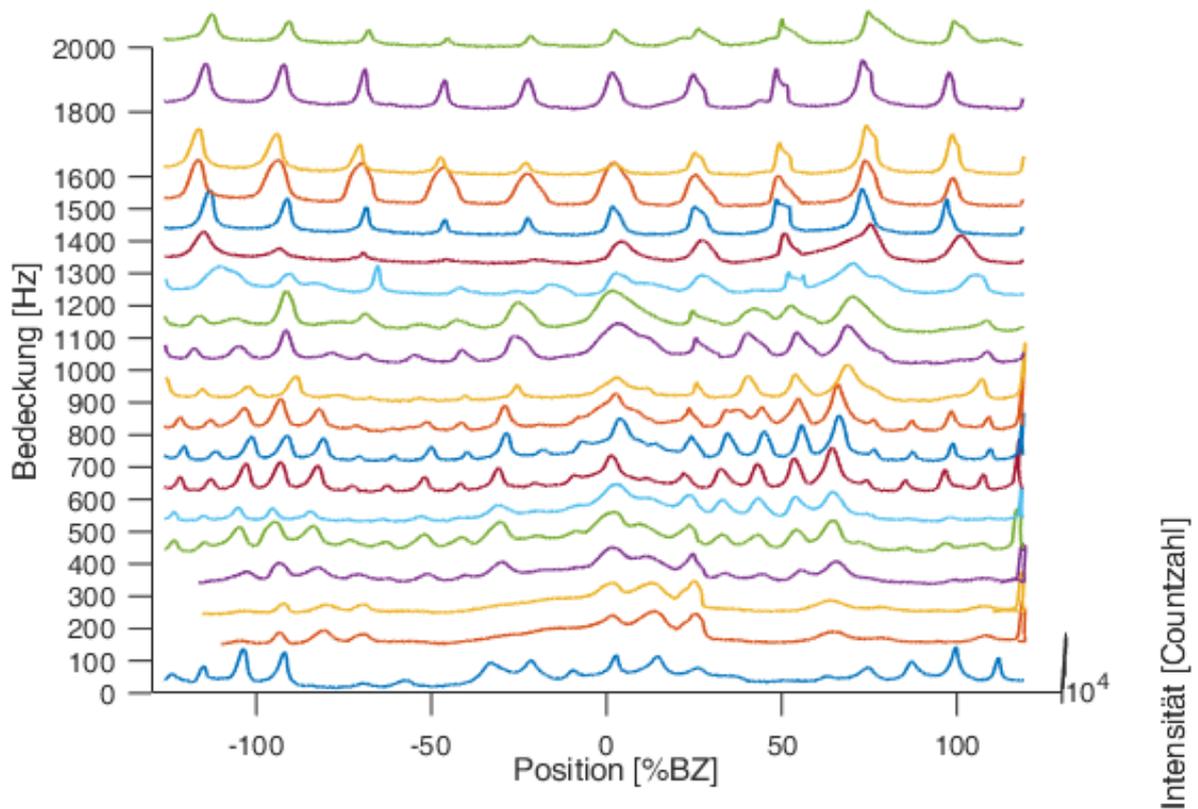


c) 1600 Hz, 600 C

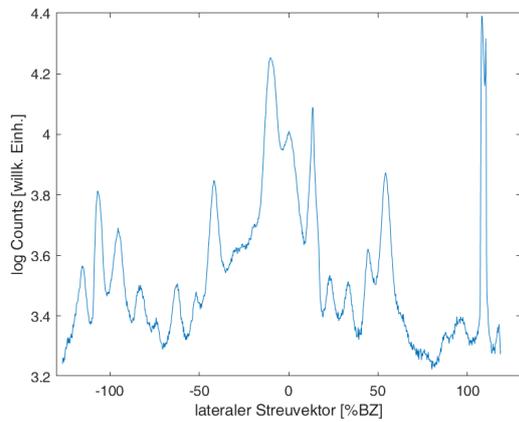


d) 2200 Hz, 600 C

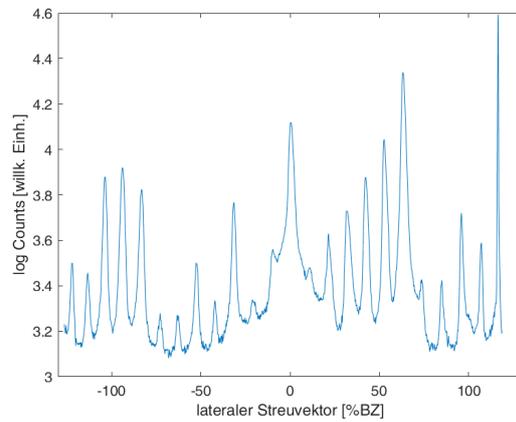
**Abbildung 5.6** – SPA-LEED-Bilder aus der Bedeckungsreihe. Es ist jeweils Gold bei 600°C auf Si(553) aufgedampft worden. Die entsprechenden Bedeckungen und Elektronenenergien sind angegeben. In a) sind Haupt- und Nebenachse jeweils mit einem gestrichelten Pfeil markiert. In b) ist einer der im Text genauer beschriebenen Zwischenreflexe mit einem gelben Kreis markiert. In d) sind die Reflexe der Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )-Au-Facetten mit en Kreisen markiert sowie die entsprechenden Einheitszelle mit einer gelben Raute. Die in a) angegebenen kristallografischen Achsen sind für alle hier gezeigten Bilder gleich.



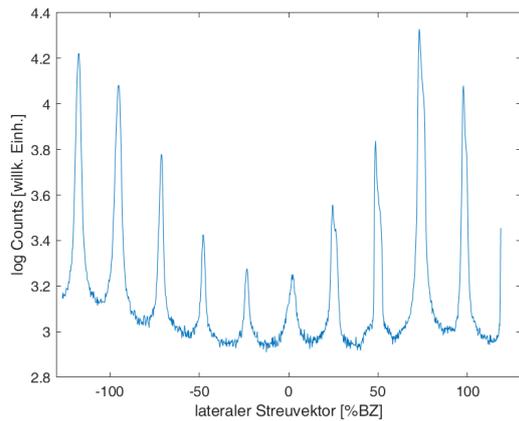
**Abbildung 5.7** – Linescans der Bedeckungsserie von Si(553)-Au in Abhängigkeit der Bedeckung. Es handelt sich dabei jeweils um Linescans entlang der Hauptachse (siehe Abb. 5.6 a)) bei einer Elektronenenergie von 130 eV. Die Bedeckung reicht dabei von 0 Hz bis 2000 Hz in den im Text angegebenen Schrittweiten.



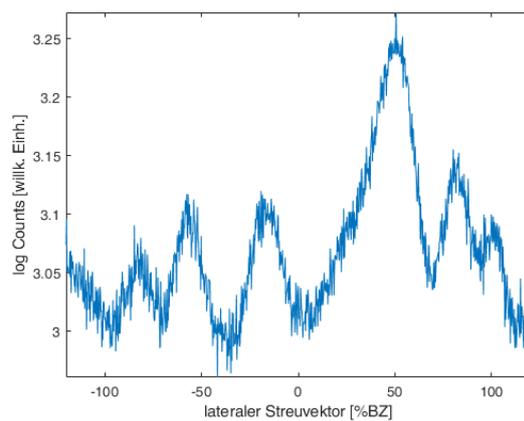
a) 300Hz, 130eV



b) 600Hz, 130eV - Hauptachse



c) 1600Hz, 130eV



d) 600Hz, 130eV - Zwischenreflexe

**Abbildung 5.8** – Linescans bei verschiedenen Bedeckungen. Alle Messungen sind bei einer Elektronenenergie von 130 eV aufgenommen worden. Die Scans in a), b) und c) entsprechen dabei den Bedeckungen a), b) und c) in Abb. 5.6. d) zeigt einen Linescan entlang der Achse des in Abb. 5.6 b) markierten Zwischenreflexes.

2D-Bild der nächsthöheren Bedeckung sind diese Reflexe bereits zu sehen (vgl. Abb. 5.6 d)). Die Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur soll in Abschnitt 5.5 im Rahmen der Untersuchung von Facetten tiefergehend behandelt werden.

Um nun bestimmte Bedeckungen den verschiedenen Phasen (LCW und HCW) zuordnen zu können, werden einige Bedeckungen nach den Erkenntnissen aus dem Plot in Abb. 5.7 genauer analysiert. In Abb. 5.6 sind SPA-LEED-Bilder für die verschiedenen ausgewählten Bedeckungen dargestellt. Die den Bedeckungen aus Abb. 5.6 a) bis c) entsprechenden entzerrten Linescans sowie ein Linescan entlang der Achse des in Abb. 5.6 b) markierten Zwischenreflexes befinden sich in Abb. 5.8. Die Auswertungen, die in diesem Abschnitt durchgeführt werden, sollen erst einmal der Zuordnung der Bedeckungen zu entsprechenden Phasen und einer ersten Einschätzung der Ordnung dienen. Viele der Auswertungen sind in folgenden Abschnitten so ähnlich und in größerem Umfang erneut durchgeführt worden, dann vor allem an Messungen im Rahmen der Aufnahme von RSMs.

**300 Hz** - In Abb. 5.6 a) ist das 2D-SPA-LEED-Bild für eine Bedeckung von 300 Hz und eine Elektronenenergie von 130 eV zu sehen. Diese Bedeckung soll untersucht werden, um zu überprüfen, ob hier eine ähnliche Struktur wie bei der von Song *et al.* bei einer niedrigen Bedeckung von 0,05 ML [4] vorliegt. Ein erster Vergleich mit einer Aufnahme einer sauberen Si(553)-Oberfläche (Abb. 5.2) zeigt, dass bei dieser Bedeckung das Beugungsmuster dem einer sauberen Oberfläche ähnelt. Es sind jedoch auf der Hauptachse einige weitere Reflexe aufgetaucht. Dies widerspricht gewissermaßen den Beobachtungen aus dem Plot in Abb. 5.7. Dennoch liegt auch hier liegt der Schluss nahe, dass bereits bei dieser Bedeckung durch das Gold eine Umstrukturierung auf der Oberfläche induziert wird. Das aufgenommene 2D-Bild entspricht allerdings nicht dem von Song *et al.* bei einer Bedeckung von 0,05 ML. Auch bei niedrigeren Bedeckungen konnte dieses Beugungsbild nicht reproduziert werden. Dies könnte daran liegen, dass in dieser Arbeit der Basisdruck in der UHV-Kammer höher ist und die Bildung einer Phase wie bei Song *et al.* durch Adsorbate auf der Oberfläche gestört wird. Gerade bei geringen Bedeckungen würden Adsorbate einen nicht unerheblichen Einfluss auf die Bildung geordneter Strukturen haben. Ein anderer Grund könnte sein, dass mit dem hier verwendeten Verdampfer nicht mit ausreichender Präzision solch kleine Mengen Au homogen auf die Si(553)-Oberfläche gebracht werden können. So würde auf der Oberfläche eine Mischungen aus Bedeckungen zwischen 0 ML und etwa 0,1 ML vorliegen und keine reine Bedeckung mit 0,05 ML.

Ein Linescan zu dieser Bedeckung ist in Abb. 5.8 a) zu sehen. Dort ist eine Periodizität zu erkennen, wenn auch mit stark unterschiedlichen Intensitäten und teils nur schwach ausgeprägten Peaks. Anhand des Linescans kann die Periode entlang der Hauptachse bestimmt werden. Sie ist zusammen mit der mittleren Halbwertsbreite der Reflexe in Tabelle 5.1 angegeben. Mit der Periode und der Länge einer Einheitszelle in Stufenrichtung  $a_{\perp} = 3,32 \text{ \AA}$  kann nun eine Terrassenlänge berechnet werden. Sie ergibt sich zu  $(100\%BZ/11, 71\%BZ) \cdot a_{\perp}$  und befindet sich ebenfalls in Tabelle 5.1. Diese Terrassenlänge entspricht wie auch das Beugungsbild nicht der bei Song *et al.* bei 0,05 ML Bedeckung. Vielmehr stimmt sie innerhalb der Fehlergrenzen gut mit der Terrassenlänge bei einer

Bedeckung von 600 Hz (s.u.) überein. Sie könnte allerdings auch noch auf die Struktur einer unbedeckten Si(553)-Oberfläche mit Doppelstufen zurückzuführen sein, bei der eine sehr ähnliche Periode vorliegt. Der Fehler, der als relativer Fehler der Periode angenommen worden ist, ist auffallend groß. Die Halbwertsbreite ist ebenfalls deutlich größer als bei höheren Bedeckungen, was auf eine schwach ausgeprägt Ordnung schließen lässt. Da eine Phase geringer Bedeckung wie bei Song *et al.* nicht reproduziert werden konnte, die Oberfläche bei dieser Bedeckung sowohl Ähnlichkeiten mit der LCW als auch einer sauberen Oberfläche hat und generell eine Ordnung noch recht schwach ausgeprägt ist, soll die Bedeckung von 300 Hz im Rest dieser Arbeit nicht weiter untersucht werden.

**Tabelle 5.1** – Periode und mittlere Halbwertsbreite der Peaks aus den Linescans in Abb. 5.8. Mit HA ist hier die Hauptachse bei 600 Hz bezeichnet, mit ZR die Zwischenreflexe bei der gleichen Bedeckung. Die Fehler für Periode und mittlere Halbwertsbreite entsprechen jeweils der Standardabweichung der Messwerte. Für die Terrassenlänge ist der relative Fehler der Periode angenommen worden. Für 600 Hz (ZR) ist der Begriff Terrassenlänge strenggenommen nicht passend, dies ist im Text weiter erläutert.

Bedeckung	Periode [%BZ]	FWHM [%BZ]	Terrassenlänge [Å]
0 Hz	10,72 ± 0,09	1,14 ± 0,56	30,97 ± 0,26
300 Hz	11,71 ± 2,15	5,86 ± 2,88	28,35 ± 5,21
600 Hz (HA)	10,89 ± 0,76	3,08 ± 1,63	30,47 ± 2,13
600 Hz (ZR)	33,26 ± 6,17	12,93 ± 2,88	9,98 ± 1,86
1600 Hz	24,22 ± 0,89	2,78 ± 0,84	13,71 ± 0,51

**600 Hz** - Das SPA-LEED-Bild für die Bedeckung 600 Hz befindet sich in Abb. 5.6 b). Hier ist wie in Abb. 5.7 bereits ein deutlicher Unterschied zur sauberen Oberfläche zu erkennen. Auf der Hauptachse befinden sich nun durchgehend Reflexe in periodischen Abständen und mit unterschiedlichen Intensitäten. In Abb. 5.8 b) ist ein Linescan entlang der Hauptachse für diese Bedeckung zu sehen. Dort ist die Periodizität ebenfalls gut zu erkennen. Mit dem Linescan wird wieder die Periode entlang der Hauptachse (HA) bestimmt. Sie und die mittlere Halbwertsbreite der Reflexe sind in Tabelle 5.1 angegeben. Wie oben kann aus der Periode die Terrassenlänge bestimmt werden, sie ist ebenfalls in Tabelle 5.1 angegeben. Die so bestimmte Terrassenlänge stimmt innerhalb der Fehlergrenzen mit dem von Song *et al.* angegebenen Wert überein. Die Halbwertsbreite ist gegenüber 300 Hz auf nahezu die Hälfte gesunken, was für eine deutlich bessere Ordnung auf der Oberfläche spricht. Auffällig an dem Beugungsbild ist, dass zwischen der Haupt- und den Nebenachsen jeweils vier äquidistante Reihen aus in Richtung der Achsen langgezogenen Reflexen zu sehen sind. Ein solcher Zwischenreflex (ZR) ist in Abb. 5.6 mit einem gelben Kreis markiert. Entlang dieser Reflexe in der Reihe des markierten Reflexes ist ebenfalls ein Linescan aufgenommen worden, der in Abb. 5.8 d) dargestellt ist. Auch hier kann an dem Linescan eine Periode und eine mittlere Halbwertsbreite der Reflexe bestimmt werden. Diese sind ebenfalls in Tabelle 5.1 angegeben. Die Zwischenreflexe sollen nun gedeutet werden. Da es sich um vier äquidistante Reflex-

reihen in Stufenkantenrichtung handelt, kann davon ausgegangen werden, dass in diese Richtung auf der Oberfläche eine Überstruktur mit  $\times 5$ -Periodizität vorliegt. Es sind allerdings Streifen mit sichtlich modulierter Intensität und keine durchgehenden Streifen, wie im Beugungsbild der HCW-Phase (siehe  $\times 2$ -Streak in Abb. 4.10). Daher sollen sie hier als getrennte Reflexe interpretiert werden. So scheint anders als bei der HCW-Phase zwischen diesen periodischen Strukturen auf unterschiedlichen benachbarten Terrassen eine Phasenkorrelation vorzuliegen. Die Reflexe sind mit denen auf der Haupt- und den Nebenachsen verglichen breiter, was vor allem an der merklich größeren Halbwertsbreite deutlich wird. Damit ist die Ordnung dieser Überstruktur weniger streng eingehalten. Die Terrassenlänge, die sich analog zu dem obigen Vorgehen aus der Periode der Zwischenreflexe ergibt, befindet sich ebenfalls in Tabelle 5.1. Hier ist allerdings der Begriff Terrassenlänge nicht ganz passend, vielmehr handelt es sich um eine Periodenlänge, mit der diese Überstruktur auf der Oberfläche im Realraum auftaucht. Zwischenreflexe dieser Art sind nicht nur bei einer Bedeckung von 600 Hz zu sehen, sie sind bei Bedeckungen von 400 Hz bis 900 Hz zu beobachten, mit abnehmender Intensität zu jeweils niedrigeren und höheren Bedeckungen. Insgesamt stimmt das Beugungsmuster bei dieser Bedeckung, die Periode und die daraus bestimmte Terrassenlänge gut mit dem der LCW-Phase [4] überein. Deshalb soll die Bedeckung von 600 Hz im Folgenden der LCW-Phase zugeordnet werden.

**1600 Hz** - Für 1600 Hz befindet sich das SPA-LEED-Bild in Abb. 5.6 c), der entsprechende Linescan entlang der Hauptachse ist in Abb. 5.8 c) zu sehen. Hier bietet sich wie in Abb. 5.7 erneut ein anderes Bild als bei vorherigen Bedeckungen. Es sind entlang der Haupt- und Nebenachsen durchgehende Reflexe zu beobachten, diesmal jedoch mit deutlich größerer Periodizität als zuvor. Die Reflexe zwischen den Achsen sind nicht mehr zu sehen, dafür befindet sich in der Mitte der Achsen ein durchgezogener Reflexstreifen ( $\times 2$ -Streak), der vor allem auf der linken Seite des Bildes gut zu erkennen ist. Dieser Streak ist auf die Periodenverdopplung aufgrund gegenseitiger Verkippung benachbarter Dimere in der Au-Doppelkette zurückzuführen. Im Linescan entlang der Hauptachse ist eine Periode deutlich zu erkennen. Die aus dem Linescan bestimmte Periode, die mittlere Halbwertsbreite der Reflexe und die wie oben aus der Periode berechnete Terrassenlänge befinden sich in Tabelle 5.1. Die Halbwertsbreite ist vergleichbar mit der bei 600 Hz und sogar noch etwas kleiner, somit scheint auch hier eine recht gute Ordnung auf der Oberfläche zu herrschen. Das Beugungsbild stimmt gut mit dem der HCW-Phase bei Song *et al.* überein. Die hier berechnete Terrassenlänge ist hingegen etwas kleiner, unter Berücksichtigung des größten Fehlers um 1,2%. Trotz dieser Abweichung und wegen des gut übereinstimmenden Beugungsbildes kann die Bedeckung von 1600 Hz aber der HCW-Phase zugeordnet werden.

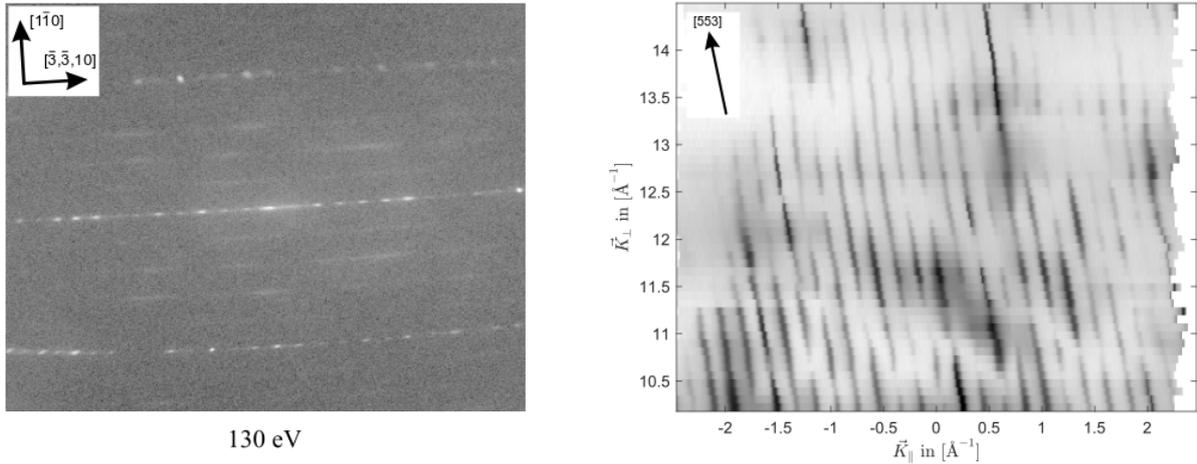
**2200 Hz** - In Abb. 5.6 d) ist ein 2D-SPA-LEED-Bild für die Bedeckung 2200 Hz dargestellt. Es unterscheidet sich in den Grundzügen nicht besonders von dem Bild bei 1600 Hz, es sind jedoch zusätzliche Reflexen zu sehen, die mit gelben Kreisen markiert sind. Diese Reflexe können Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )-Au-Facetten zugeordnet werden, welche

ab einer Bedeckung von 1 ML auftreten sollen (siehe Abschnitt 4.2.2). Auch bei einer Bedeckung 2400 Hz, welche hier nicht dargestellt ist, ist diese Struktur gut zu erkennen. Sie soll aber später in Abschnitt 5.5 im Rahmen der Untersuchung von Facetten bei hohen Bedeckungen intensiver untersucht werden.

### 5.3 Auswertung der RSMs und Reflexprofile

In diesem Abschnitt sollen die erstellten RSMs unter anderem für Bedeckungen, die im vorherigen Abschnitt der LCW- bzw. der HCW-Phase zugeordnet worden sind, in Hinblick auf die Morphologie der Atomdrahtsysteme ausgewertet werden. Dies geschieht wie in Abschnitt 2.4.3 beschrieben. Dabei sind neben Proben, die mit einer Substrattemperatur von  $600^{\circ}\text{C}$  präpariert worden sind auch solche mit Temperaturen von  $800^{\circ}\text{C}$  und  $400^{\circ}\text{C}$  beim Aufdampfen untersucht worden. So soll der Einfluss der Substrattemperatur auf das Wachstum der Gold-Nanodrähte untersucht werden. Zudem werden die Reflexprofile von einzelnen Linescans, die im Rahmen der Erstellung der RSMs aufgenommen worden sind, untersucht, um weitere Aussagen über die Beschaffenheit und Qualität der Oberflächen zu machen.

Grundsätzlich ist das Vorgehen bei jeder Kombination aus Bedeckung und Temperatur gleich. Die Proben werden dabei wie im vorherigen Abschnitt beschrieben hergestellt, lediglich die Temperatur des Substrats ist teilweise eine andere. An der fertigen Probe werden dann mit dem SPA-LEED Linescans bei verschiedenen Elektronenenergien durchgeführt. Angefangen bei 100 eV wird die Elektronenenergie sukzessive um 2 eV bis zu einer Energie von 200 eV erhöht und jeweils ein Scan durchgeführt. Da bei höheren Energien als 200 eV die Oberfläche der Probe durch den Elektronenbeschuss merklich degradiert, werden dafür keine Scans mehr durchgeführt. Bei niedrigeren Energien als 100 eV kommt es hingegen zu einer starken energieabhängigen Verzerrung der Linescans, sodass die Beugungsstangen in den RSMs bei diesen niedrigen Energien stark abknicken und diese Energiebereiche somit für eine sinnvolle Auswertung nicht geeignet sind. Nach jeweils einer Schrittweite von 10 eV wird ein 2D-SPA-LEED-Bild aufgenommen, um zu überprüfen, ob die Scanachse noch der gewünschten Hauptachse des Beugungsbildes entspricht. Ist dies nicht der Fall, so wird die x-Position der Scanachse elektronisch nachjustiert und gegebenenfalls Scans bei niedrigeren Energien nachgeholt. Die y-Position der Scanachse ist während der gesamten Messreihe an einer Probe konstant. Im Anschluss an die Messung werden die einzelnen Scans gemäß Abschnitt 5.1.1 entzerrt und zu einer RSM zusammengesetzt. Aufgrund unterschiedlicher Orientierungen verschiedener Proben sind diese Maps teilweise auch unterschiedlich orientiert. Für eine bessere Übersicht werden entsprechende Maps gespiegelt, sodass alle die gleiche Orientierung aufweisen. Das Spiegeln hat keine Auswirkungen auf die Auswertung der Maps, da alle relevanten Abstände und Winkel gleich bleiben. Im Folgenden sollen die Ergebnisse dieser Messungen präsentiert und ausgewertet werden.

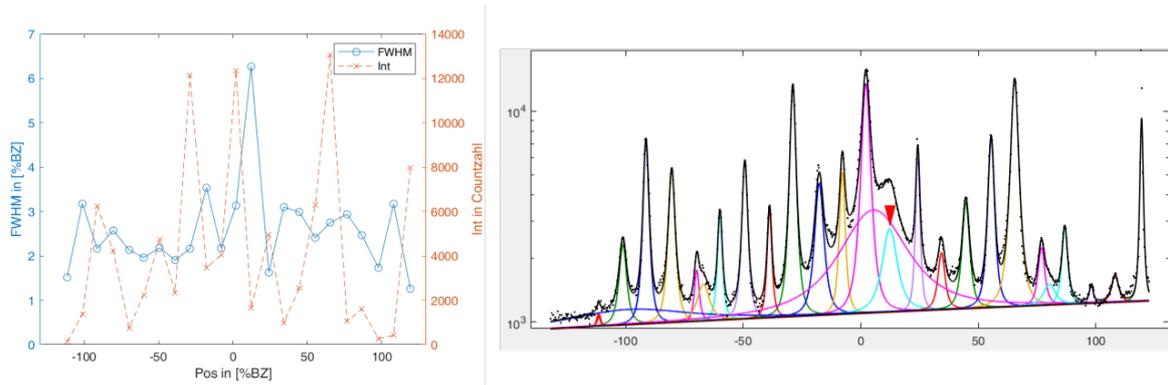


**Abbildung 5.9** – Rechts: RSM für die Bedeckung 600 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

### 5.3.1 600 Hz/600°C (LCW)

In Abb. 5.9 ist die RSM für die Bedeckung 600 Hz bei einer Aufdampf­temperatur von 600°C auf der rechten sowie das 2D-Bild der entsprechenden Präparation bei 130 eV Elektronenenergie auf der linken Seite gezeigt. In der RSM sind die Beugungsstangen in periodischen Abständen gut zu erkennen. Bei höheren Werten von  $K_{\perp}$  und damit bei höheren Elektronenenergien nimmt die Intensität der Reflexe ab, was vor allem daran liegt, dass die Oberfläche unter Beschuss mit höherenergetischen Elektronen zunehmend degradiert. Die RSM kann wie in Abschnitt 3.2 beschrieben ausgewertet werden. Die bestimmte Periode resultiert dabei aus dem mittleren Abstand der Reflexe über die gesamte Map. Der Fehler der Periode folgt aus der Standardabweichung dieses Mittelwerts, für alle daraus berechneten Größen wird dieser Fehler als relativer Fehler angenommen. Da es sich bei dieser Bedeckung um eine LCW-Phase handelt, gibt es zwei atomare Stufen innerhalb einer Periode (vgl. Abb. 4.11), deswegen wird bei der Berechnung der weiteren Größen aus der Periode als Stufenhöhe 6,28 Å angenommen. Die bestimmte Periode sowie die daraus berechneten Größen sind in Tabelle 5.2 zusammengefasst. Sowohl Terrassenlänge als auch Neigungswinkel stimmen im Rahmen des Fehler gut mit den von Song *et al.* [4] ermittelten Werten überein.

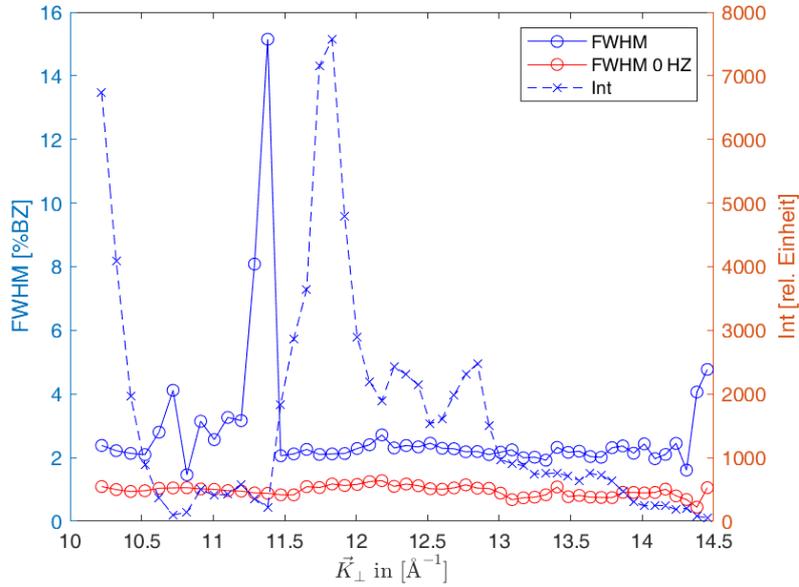
Die Halbwertsbreite der mit der LCW-Phase in Verbindung zu bringenden Peaks ist in Abb. 5.10 gezeigt. Sie sind dabei gegen die Position der jeweiligen Peaks in %BZ, was  $K_{\parallel}$  in der RSM entspricht, aufgetragen. Der Linescan, aus dem die Halbwertsbreiten bestimmt werden, ist im Rahmen der Erstellung der RSM in Abb. 5.9 bei einer Elektronenenergie von 130 eV entstanden. Er ist in Abb. 5.10 auf der rechten Seite zusammen mit den angepassten Funktionen gezeigt. Neben den relativ intensiven und schmalen Peaks, die mit der LCW-Phase assoziiert werden, werden noch mehrere Funktionen für den Untergrund angepasst. Diese können eventuell mit Si(111)-Terrassen assoziiert werden.



**Abbildung 5.10** – Links: Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\cong K_{\parallel}$ ) in %BZ für eine Bedeckung von 600 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen und einer Elektronenenergie von 130 eV. Es sind dabei die Halbwertsbreiten der Peaks dargestellt, die eindeutig mit der LCW-Phase in Verbindung gebracht werden können. Dies sind in der Darstellung rechts die periodisch angeordneten Peaks mit hoher Intensität und geringer Halbwertsbreite. Rechts: Ausschnitt aus dem ReflexFit-Programm mit den an den Linescan angepassten Funktionen.

Sie können auf jeden Fall nicht direkt auf die Struktur der LCW-Phase zurückgeführt werden und werden daher in dieser Auswertung nicht berücksichtigt. Betrachtet man die Halbwertsbreiten, fällt auf, dass ein Peak bei etwa 10%BZ mit einer besonders hohen Halbwertsbreite heraussteicht. Dieser Peak ist in Abb. 5.10 auf der rechten Seite mit einem roten Pfeil markiert. Er wird stark mit dem recht breiten und intensiven Untergrundpeak (magenta) überlagert, weshalb eine präzise Anpassung einer Funktion an diesen Peak schwierig ist. Daher soll der Abweichung der Halbwertsbreite dieses Peaks von denen der anderen keine allzu große Bedeutung beigemessen werden. Insgesamt ergibt sich eine mittlere Halbwertsbreite von  $(2,58 \pm 1,01)$  %BZ. Ein Vergleich mit der mittleren Halbwertsbreite von  $(1,29 \pm 0,61)$  %BZ für das saubere Substrat zeigt, dass die Peaks der LCW-Phase ziemlich genau doppelt so breit sind. Ein klarer positionsabhängiger Verlauf der Halbwertsbreite ist nicht zu erkennen. Dies lässt darauf schließen, dass es keinen bevorzugten Phasenzusammenhang zwischen benachbarten Domänen auf der Oberfläche gibt. Mit der mittleren Halbwertsbreite lässt sich nach Gl. 2.28 die mittlere Domänengröße abschätzen. Es ergibt sich eine Domänengröße von  $(81,92 \pm 32,07)$  Å, sodass man von etwa zwei bis drei Terrassen pro Domäne ausgehen kann.

In Abb. 5.11 ist der energieabhängige Verlauf der Halbwertsbreite eines ausgesuchten Peaks dargestellt. Insgesamt ist dieses Verhalten für mehrere Peaks untersucht worden, die Plots für diese Peaks sowie ein Linescan, in dem die untersuchten Peaks markiert sind, befinden sich in Abb. A.2 bzw. A.1 in Anhang A. Bei dem hier gezeigten Plot handelt es sich um den Peak 1 im Linescan. Zudem ist in dieser Abbildung die Intensität dieses Peaks sowie die mittlere Halbwertsbreite der in Abb. 5.4 gezeigten Peaks der unbedeckten Substratoberfläche gezeigt. Im Großteil des Energieverlaufs liegt die Halbwertsbreite recht konstant zwischen 2 %BZ und 3 %BZ mit Ausnahme eines kleinen und eines großen „Ausreißers“. Da hier keine periodischen Oszillationen der Halbwertsbreite zu sehen sind,

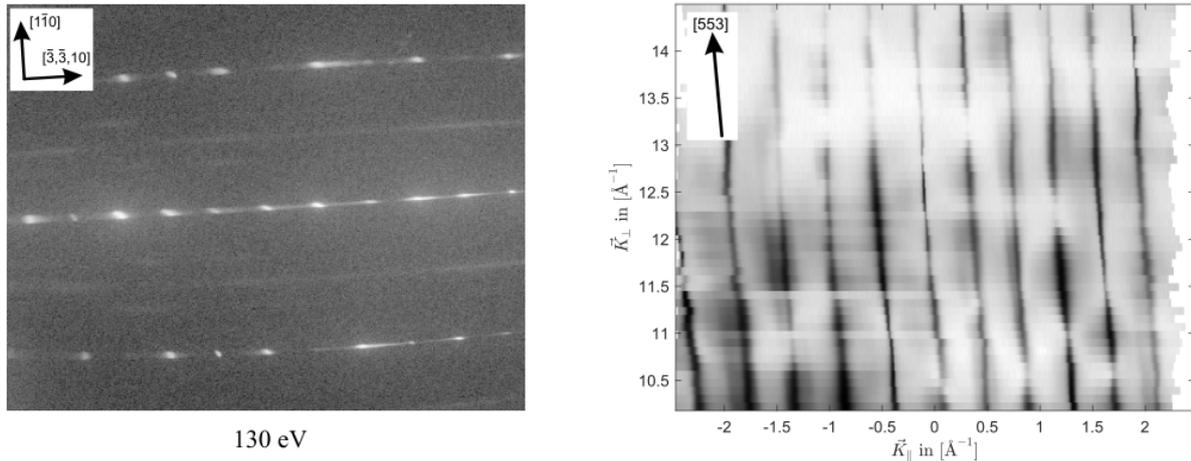


**Abbildung 5.11** – Halbwertsbreite und Intensität für einen Peak in Abhängigkeit der Elektronenenergie für eine Bedeckung 600 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen sowie die mittlere energieabhängige Halbwertsbreite der in Abb. 5.4 dargestellten Reflexe der sauberen Substratoberfläche zum Vergleich.

kann davon ausgegangen werden, dass in Bezug auf eine reine Si(553)-Oberfläche keine atomaren Stufen vorliegen, d.h. dass die Terrassen eine gewisse Längenverteilung haben. Für die große Abweichung bei 122 – 124 eV ist zugleich die Intensität des Peaks sehr gering, ebenso bei den kleineren Abweichungen, weshalb sie hier vernachlässigt werden sollen. Insgesamt weisen auch die im Anhang gezeigten Peaks ein ähnliches Verhalten auf. Die Halbwertsbreiten passen insgesamt gut zu der aus Abb. 5.10 bestimmten mittleren Halbwertsbreite. Vergleicht man hier die Halbwertsbreiten mit denen des sauberen Substrats, so sind sie im Schnitt zwei bis drei mal so groß, was die Ergebnisse aus Abb. 5.10 ebenfalls gut widerspiegelt. Somit lässt sich schließen, dass die LCW-Phase zwar keine ganz so strenge Ordnung wie das Substrat zeigt aber dennoch schon eine relativ gute Ordnung vorhanden ist.

**Tabelle 5.2** – Morphologische Größen bestimmt aus den RSMs (siehe Abbildungen 5.9, 5.12, 5.15, jeweils rechts) für verschiedene Bedeckungen bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen.

Bedeckung	Periode [ $\text{\AA}^{-1}$ ]	Stufenhöhe [ $\text{\AA}$ ]	Terrassenlänge [ $\text{\AA}$ ]	Neigungswinkel [ $^\circ$ ]
600 Hz	$0,195 \pm 0,011$	6,28	$31,60 \pm 1,78$	$11,24 \pm 0,63$
1600 Hz	$0,431 \pm 0,96$	3,14	$14,24 \pm 0,96$	$12,44 \pm 0,84$
1800 Hz	$0,440 \pm 0,012$	3,14	$13,93 \pm 0,38$	$12,70 \pm 0,35$

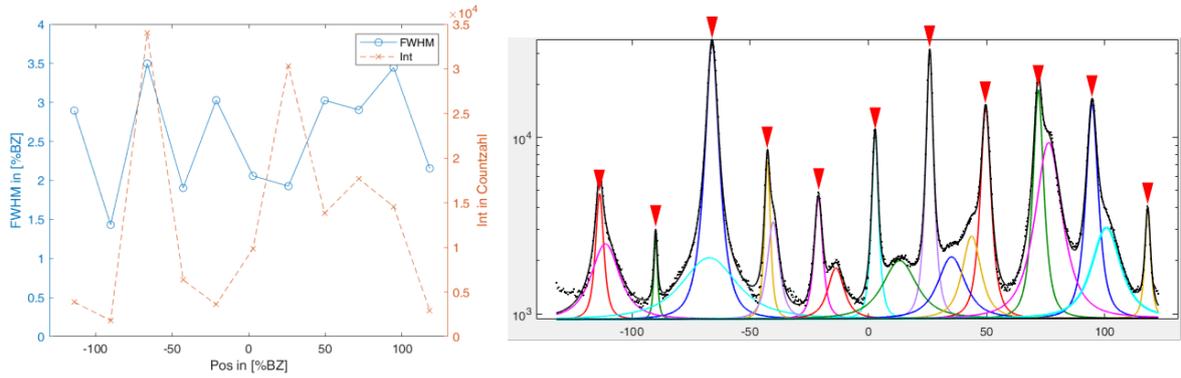


**Abbildung 5.12** – Rechts: RSM für die Bedeckung 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

### 5.3.2 1600 Hz/600°C (HCW)

Die RSM für die Bedeckung 1600 Hz bei einer Aufdampftemperatur von 600°C sowie das entsprechende 2D-Bild bei 130 eV sind in Abb. 5.12 gezeigt. In der Map sind wieder periodische Reflexstreifen zu sehen, diesmal mit einer größeren Periode als noch bei der LCW-Phase. Bei dem 2D-Bild fällt auf, dass neben den  $\times 2$ -Streaks (vgl. Abb. 5.6 c)) zumindest auf der linken Seite noch weitere Streaks zu sehen sind. Dies könnte ein Zeichen dafür sein, dass auf der Oberfläche noch keine ideale HCW-Phase vorliegt. Das steht in gewissen Widerspruch zu den Ergebnissen der Bedeckungsserie, wo bei dieser (zumindest nach der Frequenzänderung des Schwingquarzes) gleichen aufgedampften Menge Gold eine scheinbar gut geordnete HCW-Phase vorliegt. Dass dies hier nicht der Fall ist, könnte an Verunreinigungen auf der Oberfläche liegen oder aber daran, dass die Position der Proben vor dem Verdampfer nicht exakt reproduziert worden ist. Letzteres könnte dazu führen, dass trotz gleicher Frequenzänderung am Schwingquarz eine unterschiedliche Menge Gold an der Probe angelangt. Dennoch liegt auf der Hauptachse eine recht gute Ordnung für eine HCW-Phase vor und die RSM, die sich ja aus Linescans entlang dieser Achse zusammensetzt, soll hier ausgewertet werden. Die Auswertung erfolgt dabei analog zu dem Vorgehen im vorherigen Abschnitt, wobei hier eine einfache Stufenhöhe von 3,14 Å angenommen wird (vgl. Abb. 4.9). Die sich so ergebenden morphologischen Größen befinden sich in Tabelle 5.2. Hier passen die Werte im Rahmen des Fehlers wieder gut zu denen in der Literatur [4].

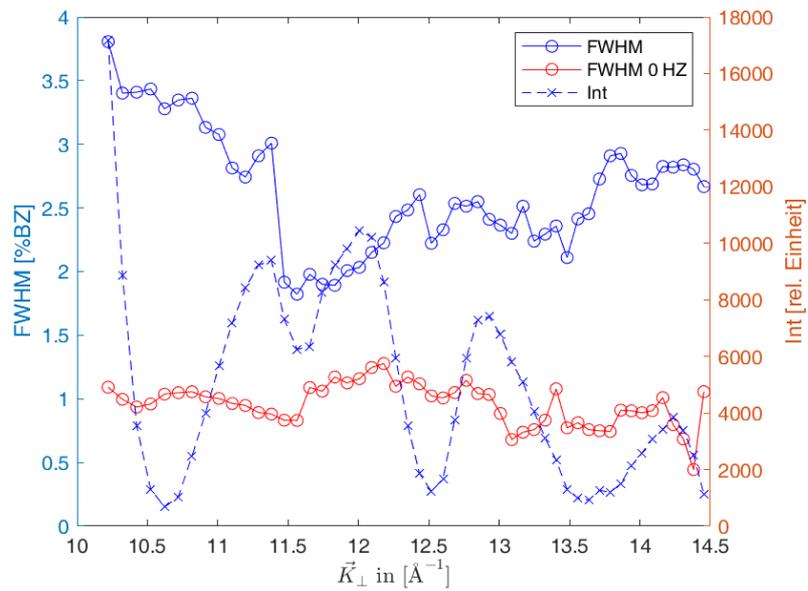
Auch hier wird wie bei der LCW-Phase die Halbwertsbreite der Peaks der HCW-Phase in Abhängigkeit ihrer Position bzw.  $K_{\parallel}$  bei der Elektronenenergie 130 eV bestimmt. Der Plot und der entsprechende Linescan mit angepassten Funktionen ist in Abb. 5.13 zu sehen. Da hier für den Untergrund deutlich mehr Funktionen angepasst werden, sind die HCW-Peaks zur besseren Übersicht durchgehend mit roten Pfeilen markiert.



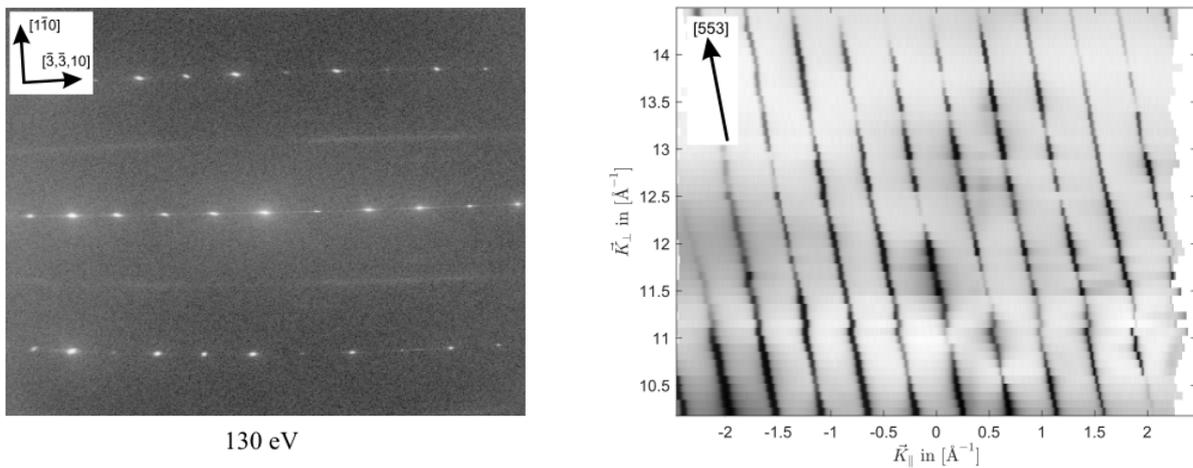
**Abbildung 5.13** – Links: Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\cong K_{\parallel}$ ) in %BZ für eine Bedeckung von 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von  $600^{\circ}\text{C}$  beim Aufdampfen und einer Elektronenenergie von 130 eV. Es sind dabei die Halbwertsbreiten der Peaks dargestellt, die eindeutig mit der HCW-Phase in Verbindung gebracht werden können. Dies sind in der Darstellung rechts die periodisch angeordneten Peaks mit hoher Intensität und geringer Halbwertsbreite. Rechts: Ausschnitt aus dem ReflexFit-Programm mit den an den Linescan angepassten Funktionen.

Dass sich noch so viele Peaks neben diesen im Untergrund befinden, ist ein weiteres Zeichen dafür, dass hier noch keine wohlgeordnete HCW-Phase vorliegt. Betrachtet man allerdings die mittlere Halbwertsbreite, so liegt sie bei  $(2,57 \pm 0,70) \% \text{BZ}$  und ist sehr nah am Wert für die LCW-Phase. Somit scheint zumindest anhand dieses Indizes eine ähnlich gute Ordnung der HCW-Phase vorzuliegen wie zuvor bei der LCW-Phase bei niedrigerer Bedeckung. Die mittlere Domänenlänge ist hier  $(82,56 \pm 22,49) \text{ \AA}$  und damit ebenfalls mit der bei 600 Hz vergleichbar. Bei der kleineren Terrassenlänge der HCW-Phase bedeutet dies allerdings, dass hier im Schnitt etwa sechs Terrassen in einer Domäne sind.

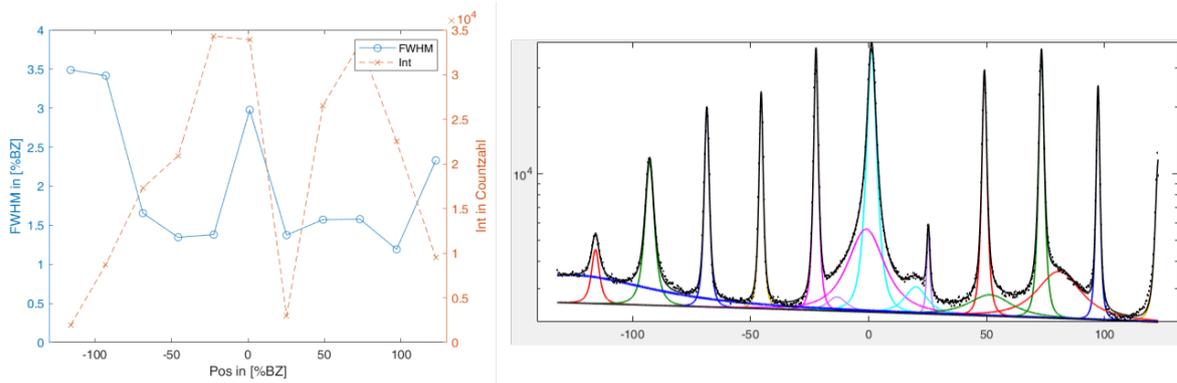
Die Qualität der Oberfläche bestätigt sich auch, wenn man die Halbwertsbreite eines ausgesuchten Peaks energieabhängig betrachtet, wie in Abb. 5.14 dargestellt ist. Es sind ebenfalls wieder mehrere Peaks ausgewertet worden, die restlichen Auswertungen und ein Linescan, in dem diese Peaks markiert sind, befinden sich in Abb. A.4 bzw. A.3 in Anhang A. Der hier gezeigte Peak ist Peak 1 im Linescan. Wie bei der LCW-Phase ist die Halbwertsbreite des Peaks außer bei niedrigen Energien  $< 120 \text{ eV}$  etwa 2 bis 3 mal größer als bei der sauberen Oberfläche. Insgesamt scheint also eine einigermaßen geordnete HCW-Phase vorzuliegen, die passenden morphologischen Größen und die Halbwertsbreiten deuten darauf hin. Nichtsdestotrotz gibt es wegen den zusätzlichen Streaks neben dem  $\times 2$ -Streak und wegen der vielen zusätzlichen Peaks im Untergrund offenbar noch zusätzliche Strukturen, die nicht direkt mit der HCW-Phase in Verbindung gebracht werden können.



**Abbildung 5.14** – Halbwertsbreite und Intensität für einen Peak in Abhängigkeit der Elektronenenergie für eine Bedeckung 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen sowie die mittlere energieabhängige Halbwertsbreite der in Abb. 5.4 dargestellten Reflexe der sauberen Substratoberfläche zum Vergleich.



**Abbildung 5.15** – Rechts: RSM für die Bedeckung 1800 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

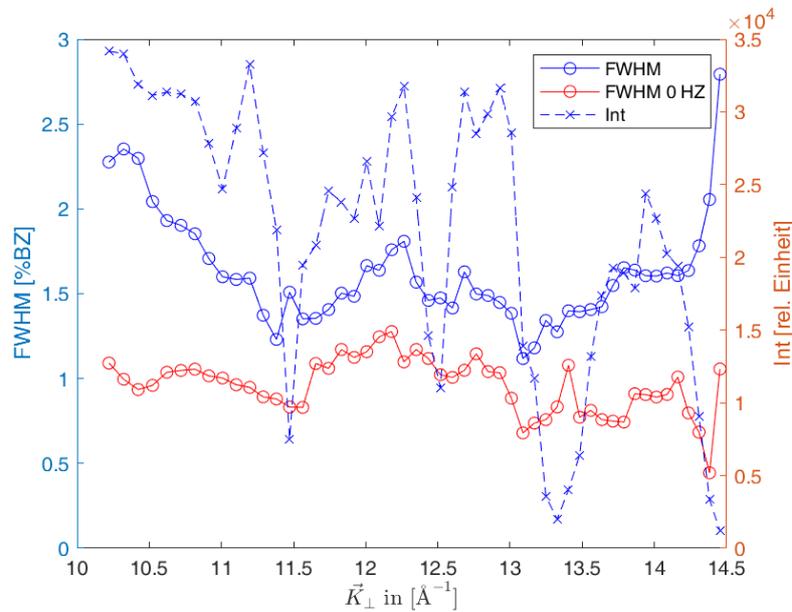


**Abbildung 5.16** – Links: Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\hat{=K}_{\parallel}$ ) in %BZ für eine Bedeckung von 1800 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen und einer Elektronenenergie von 130 eV. Es sind dabei die Halbwertsbreiten der Peaks dargestellt, die eindeutig mit der HCW-Phase in Verbindung gebracht werden können. Dies sind in der Darstellung rechts die periodisch angeordneten Peaks mit hoher Intensität und geringer Halbwertsbreite. Rechts: Ausschnitt aus dem ReflexFit-Programm mit den an den Linescan angepassten Funktionen.

### 5.3.3 1800 Hz/600°C (HCW)

Da bei 1600 Hz noch keine reine HCW-Phase vorzuliegen scheint, wird für die Bedeckung 1800 Hz ebenfalls eine RSM angefertigt. Diese befindet sich zusammen mit dem entsprechenden 2D-Bild, wieder bei 130 eV, in Abb. 5.15. Es ist diese Bedeckung gewählt worden, da bei ihr in der Bedeckungsserie ebenfalls eine gute HCW-Struktur zu sehen ist (vgl. 5.7). Ein Vergleich der RSM mit der im vorherigen Abschnitt zeigt direkt, dass die Reflexe hier deutlich schärfer sind und dass neben diesen Reflexen auch deutlich weniger „passiert“. Auch im 2D-Bild ist eine deutlich bessere HCW-Ordnung zu sehen. Die Reflexe auf der Hauptachse sind schärfer und zwischen ihnen ist deutlich weniger Rauschen zu sehen. Die Streaks neben dem  $\times 2$ -Streak sind ebenfalls nicht mehr zu sehen. Die morphologischen Größen, die sich aus einer Auswertung der RSM analog zu dem Vorgehen bei 1600 Hz ergeben, befinden sich in Tabelle 5.2. Die ermittelte Terrassenlänge passt im Rahmen des Fehlers noch zu dem Literaturwert. Der Neigungswinkel ist allerdings unter Berücksichtigung des größten Fehlers immer noch 1,21 % zu groß. Dies steht erst einmal im Widerspruch zu der augenscheinlich besseren Ordnung der HCW-Phase als bei der kleineren Bedeckung. Die Abweichung ist aber immer noch sehr klein und soll hier vernachlässigt werden.

Die positionsabhängige Halbwertsbreite sowie der Linescan bei 130 eV mit den angepassten Funktionen sind in Abb. 5.16 dargestellt. Im Linescan ist direkt zu sehen, dass neben den Reflexen der HCW-Phase deutlich weniger Reflexe als noch bei 1600 Hz zu sehen sind. Bei den energieabhängigen Halbwertsbreiten stechen besonders drei hohe Werte heraus, zum einen die des zentrale Peaks bei etwa 0 %BZ und die der beiden linken Peaks. Bei diesen ist aber zu berücksichtigen, dass sie sich mit weiteren Untergrundreflexen überlagern, welche wie zuvor mit Si(111) assoziiert werden können. Zudem ist bei



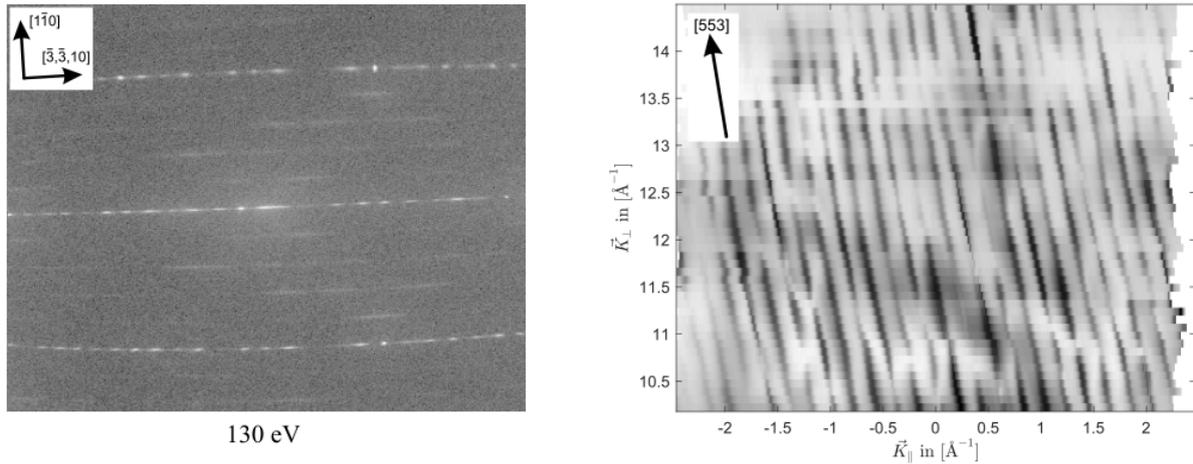
**Abbildung 5.17** – Halbwertsbreite und Intensität für einen Peak in Abhängigkeit der Elektronenenergie für eine Bedeckung 1800 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen sowie die mittlere energieabhängige Halbwertsbreite der in Abb. 5.4 dargestellten Reflexe der sauberen Substratoberfläche zum Vergleich.

den linken Peaks die Intensität relativ gering. Vernachlässigt man aus diesen Gründen diese Peaks, so fällt auf, dass die Halbwertsbreite der übrigen Peaks ein gutes Stück kleiner ist als noch bei 1600 Hz. Ihr Mittelwert liegt bei  $(2,03 \pm 0,87)$  %BZ. Daraus ergibt sich eine mittlere Domänengröße von  $(142,81 \pm 61,20)$  Å, welche deutlich größer als noch bei den beiden geringeren Bedeckungen ist. Es sind so im Mittel zehn Terrassen in einer Domäne.

Auch in der energieabhängigen Messung der Halbwertsbreite eines Peaks spiegelt sich dieses Verhalten wider. Hier ist Peak 2 gezeigt, die restlichen Auswertungen anderer Peaks und ein Linescan, in dem diese markiert sind, befinden sich in Abb. A.6 bzw. A.5 in Anhang A. Die Halbwertsbreite liegt bis auf leichte Abweichungen bei niedrigen und hohen Energien etwa zwischen 1,2 %BZ und 2 %BZ und ist damit ungefähr halb so groß wie bei 1600 Hz und sogar kleiner als bei der LCW-Phase. Zudem ist sie überwiegend weniger als doppelt so groß wie die Halbwertsbreite der sauberen Oberfläche. Es liegt also eine verhältnismäßig sehr gute Ordnung der HCW-Phase vor, gerade im Vergleich mit der zuvor vermessen Bedeckung.

### 5.3.4 600 Hz/800°C (LCW)

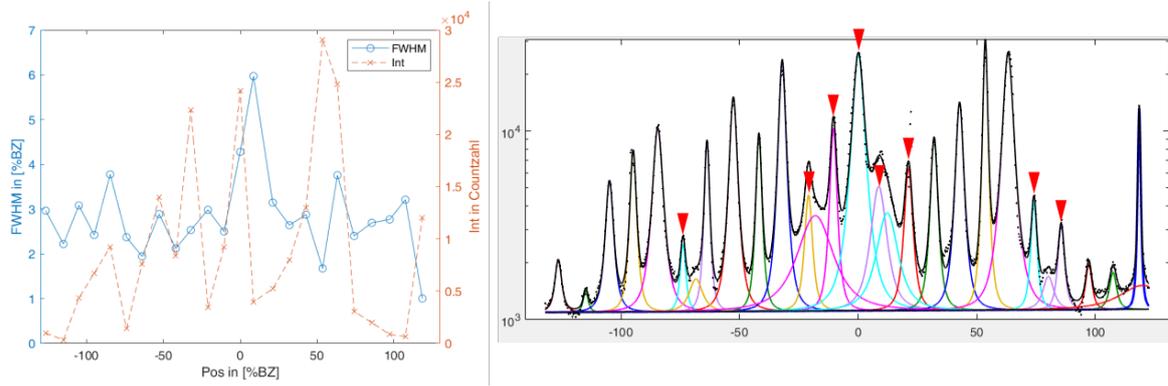
Die RSM für eine Bedeckung von 600 Hz bei einer Aufdampfpreatur von 800°C sowie das entsprechende 2D-Bild sind in Abb. 5.18 dargestellt. Auf den ersten Blick sehen beide denen bei der gleichen Bedeckung aber 600°C Aufdampfpreatur sehr ähnlich. Es fällt jedoch auf, dass das 2D-Bild hier gegenüber dem in Abb. 5.9 etwas nach links



**Abbildung 5.18** – Rechts: RSM für die Bedeckung 600 Hz bei einer Substrattemperatur von 800°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

verschoben ist. Das liegt vermutlich an einer nicht exakten Reproduktion der Position der Probe vor dem SPA-LEED. Dies sollte ebenfalls einen Shift in der RSM verursachen, was aber letztendlich keinen Einfluss auf die Auswertung der RSM hat, weshalb dieser Shift vernachlässigt werden soll. Die RSM wird wie zuvor ausgewertet, da es sich um eine LCW-Phase handelt, wird wieder eine Stufenhöhe von 6,28 Å angenommen. Die sich so ergebende Terrassenlänge ist  $(31,45 \pm 1,93)$  Å und der Neigungswinkel  $(11,30 \pm 0,69)^\circ$ . Beide Werte passen gut zu den Literaturwerten für die LCW-Phase und stimmen im Rahmen des Fehlers auch mit den vorherigen Ergebnissen mit gleicher Bedeckung aber 600°C Aufdampftemperatur überein.

Die Halbwertsbreite der LCW-Peaks bei 130 eV Elektronenenergie in Abhängigkeit ihrer Position ist in Abb. 5.19 gezeigt, dort befindet sich ebenfalls der entsprechende Linescan mit den angepassten Funktionen. Da hier wieder relativ viele Peaks neben denen der LCW-Phase zugehörigen angepasst werden, sind letztere mit roten Pfeilen markiert, wo der Unterschied nicht ganz deutlich ist. Es fallen zwei relativ breite Peaks in der Nähe von 0 %BZ auf. Da sich in diesem Bereich aber auch Untergrundpeaks befinden, was eine Anpassung leicht erschwert, soll dem keine große Bedeutung beigemessen werden. Die mittlere Halbwertsbreite der Peaks liegt bei  $(2,84 \pm 0,96)$  %BZ, womit sie etwas größer als noch bei 600°C Aufdampftemperatur ist und damit eine etwas schlechtere Ordnung der LCW-Phase herrscht. Dafür spricht auch die größere Zahl von Peaks, die nicht direkt mit der LCW-Phase in Verbindung gebracht werden können. Bei höherer Temperatur der Oberfläche beim Aufdampfen ist die Beweglichkeit der adsorbierte Goldatome größer, was eigentlich die Bildung einer Ordnung begünstigen sollte. Es ist allerdings auch die Desorptionsrate größer, was dazu führen kann, dass am Ende weniger Goldatome zur Bildung geordneter Nanodrähte zur Verfügung stehen. Aus der größeren Halbwertsbreite ergibt sich auch mit  $(68,18 \pm 23,05)$  Å eine kleinere mittlere Domänengröße als bei geringerer Temperatur. Es sind so nur noch durchschnittlich zwei Terrassen pro Domäne.



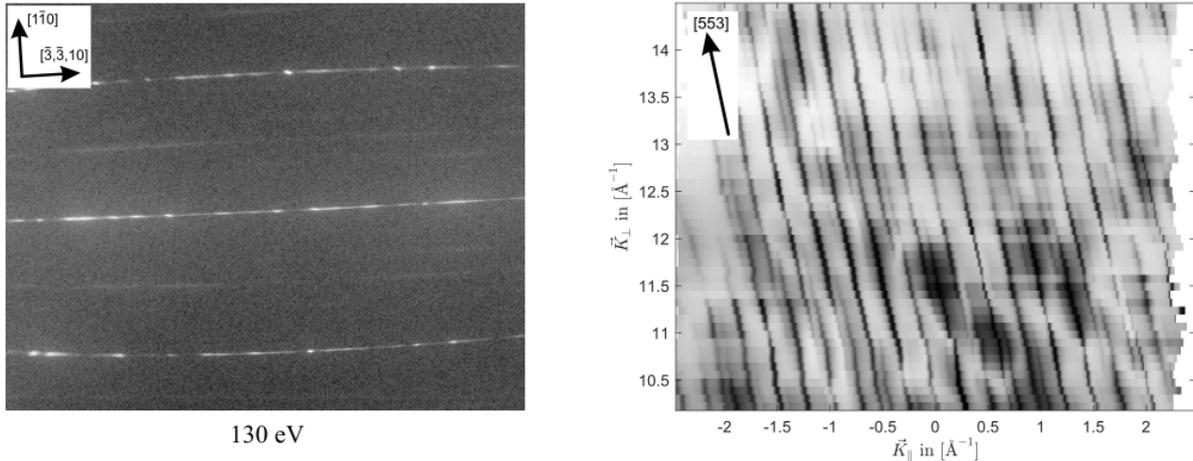
**Abbildung 5.19** – Links: Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\hat{=}K_{\parallel}$ ) in %BZ für eine Bedeckung von 600 Hz bei einer Substrattemperatur von 800°C beim Aufdampfen und einer Elektronenenergie von 130 eV. Es sind dabei die Halbwertsbreiten der Peaks dargestellt, die eindeutig mit der LCW-Phase in Verbindung gebracht werden können. Dies sind in der Darstellung rechts die periodisch angeordneten Peaks mit hoher Intensität und geringer Halbwertsbreite. Rechts: Ausschnitt aus dem ReflexFit-Programm mit den an den Linescan angepassten Funktionen.

Eine energieabhängige Halbwertsbreite wie in den vorherigen Abschnitten ist diesmal nicht bestimmt worden. Dies liegt daran, dass bei anderen Elektronenenergien als für die in Abb. 5.19 gezeigten größtenteils noch deutlich mehr Peaks neben denen der LCW-Phase im Untergrund zu sehen sind, was eine sinnvolle Anpassung von Funktionen erheblich erschwert. Gerade, wenn sich zwei oder mehr Peaks eng überlagern, kann nicht mehr mit Sicherheit bestimmt werden, welcher Peak mit welcher Intensität und Halbwertsbreite zu dem resultierenden Gesamtverlauf beiträgt. Insgesamt liegt aber auch bei dieser Aufdampftemperatur eine einigermaßen geordnete LCW-Phase vor, wenn auch größere Halbwertsbreiten und mehr Untergrundpeaks für eine schlechtere Ordnung als bei 600°C Aufdampftemperatur sprechen.

### 5.3.5 1600 Hz/800°C

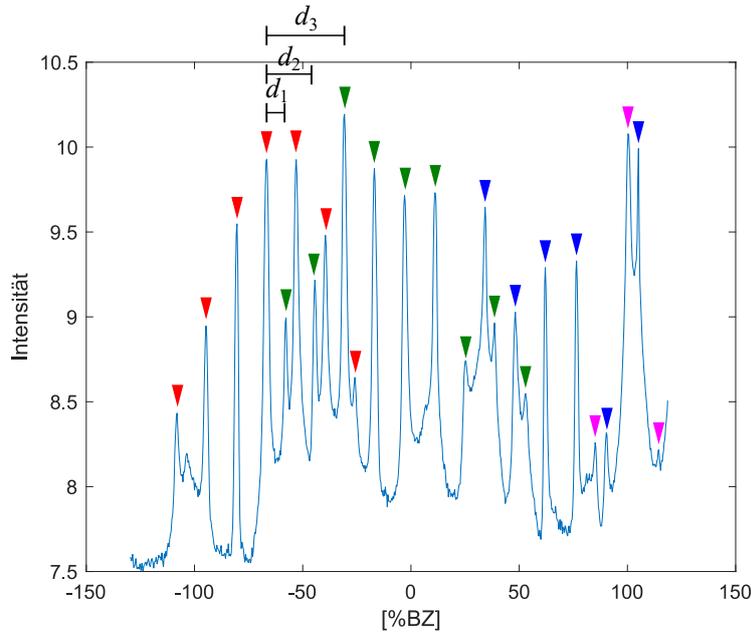
In Abb. 5.20 ist die RSM und das 2D-Bild für die Bedeckung 1600 Hz bei 800°C Aufdampftemperatur gezeigt. Hier zeigt sich ein ganz anderes Bild als noch bei der gleichen Bedeckung und 600°C Aufdampftemperatur. Im 2D-Bild sind die Reflexe deutlich verschmierter, neben dem  $\times 2$ -Streak ist, ähnlich wie bei der geringeren Temperatur, ein weiterer äquidistanter Streak auf jeder Seite zu sehen, hier allerdings nahezu durchgehend. Diese Streaks sollen hier und im Folgenden als  $\times 3$ -Streaks bezeichnet werden. Noch deutlicher wird der Unterschied, wenn man die RSM betrachtet. Eine Periode mit einem Abstand wie in der RSM in Abb. 5.12 ist nicht zu erkennen. Vielmehr scheint es so, dass verschiedene Gruppen von Beugungsstangen mit jeweils periodischen Abständen sich gegenseitig regelmäßig überlagern.

Um diese Annahme zu verdeutlichen und zu unterstützen, wird ein Linescan aus der RSM bei 160 eV genauer analysiert. Es ist diese Energie an Stelle der sonst in dieser



**Abbildung 5.20** – Rechts: RSM für die Bedeckung 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von  $800^\circ\text{C}$  beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

Arbeit gängigen Energie von 130 eV gewählt worden, da hier das Verhalten deutlicher zu sehen ist. Der Linescan ist in Abb. 5.21 dargestellt. Die besagten Gruppen von Reflexen sind dort jeweils mit Pfeilen der gleichen Farbe markiert. Bei der roten und grünen Gruppe ist gut zu erkennen, wie die Intensität der Reflexe in der Mitte der Gruppe am höchsten ist und zum Rand hin abnimmt. Die Perioden innerhalb jeder Gruppe sind in Tabelle 5.3 gezeigt. Es handelt sich dabei um aus dem Linescan bestimmte und in den Realraum umgerechnete Werte. Die Periode der einzelnen Gruppen stimmen innerhalb der Fehlergrenzen gut miteinander überein. Sie passen aber weder zu der LCW- noch zu der HCW-Phase. Um eventuell dennoch zu diesen Phasen passende Werte zu finden, sind die Abstände zwischen dem Reflex einer Gruppe mit seinen jeweils drei nächsten Nachbarn der nächsten Gruppe bestimmt worden. Es werden dabei stets die Abstände zwischen dem Reflex der vorherigen Gruppe, der vor dem ersten der nachfolgenden Gruppe steht, und den ersten drei Reflexe der nachfolgenden Gruppe ausgewertet. Für den entsprechenden Reflex der roten Gruppe sind diese Abstände exemplarische in Abb. 5.21 markiert. Diese Abstände sind für alle Gruppen außer der violetten, die keine nachfolgende Gruppe hat, ebenfalls in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Die Abstände sind dabei mit  $d_1$  bis  $d_3$  bezeichnet. Auch hier fällt auf, dass diese Werte für die verschiedenen Gruppen gut miteinander übereinstimmen. Dies unterstützt die These, dass in der RSM sich Gruppen von Reflexen mit gleichen Perioden regelmäßig überlagern. Die Deutung dieser These gestaltet sich jedoch als schwierig. Zwar passt der Abstand  $d_2$  einigermaßen zu der HCW-Phase, er ist aber nicht dominierend in dieser RSM. Die ausgeprägteste Eigenschaft, die Periode der einzelnen Gruppen, passt wie schon erwähnt weder zur LCW- noch zur HCW-Phase, sodass mit hoher Wahrscheinlichkeit davon ausgegangen werden kann, dass keine dieser Phasen hier vorliegt. Welche Oberflächenstruktur hier konkret vorliegt, insbesondere was die sich überlagernden Gruppen zu bedeuten haben, kann im Rahmen dieser Arbeit nicht geklärt werden.



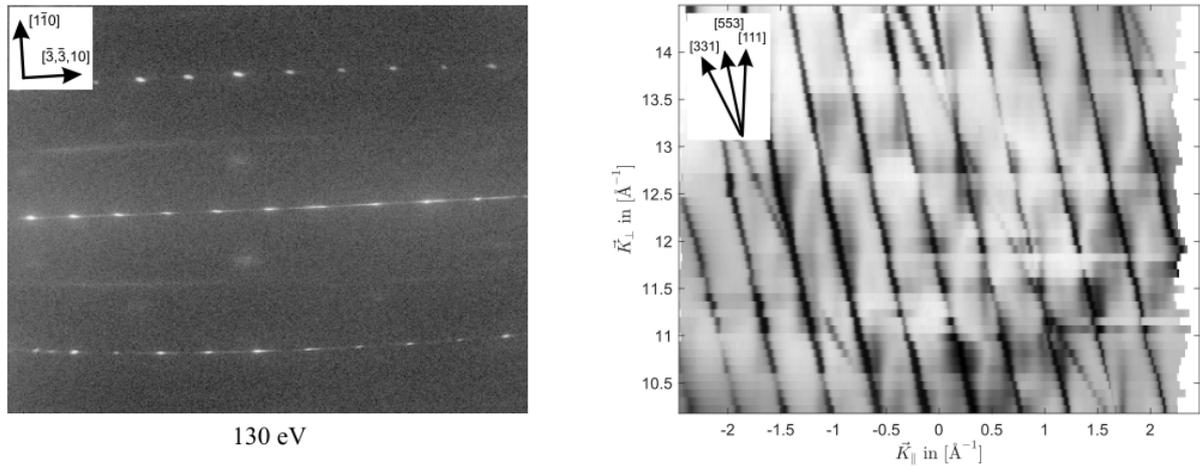
**Abbildung 5.21** – Linescan entlang der Hauptachse für die Bedeckung 1600 Hz bei einer Aufdampftemperatur von 800°C aufgenommen bei 160 eV. Die Markierungen werden im Text genauer erläutert.

**Tabelle 5.3** – Aus Reflexabständen in Abb. 5.21 bestimmte Abstände im Realraum. Das genaue Vorgehen dabei ist im Text erläutert.

Gruppe	Periode [Å]	$d_1$ [Å]	$d_2$ [Å]	$d_3$ [Å]
rot	$24,19 \pm 0,47$	38,29	14,89	9,23
grün	$23,90 \pm 0,86$	40,29	14,47	9,04
blau	$23,37 \pm 1,04$	39,90	13,83	8,76
violett	$23,14 \pm 1,29$	-	-	-

### 5.3.6 2000 Hz/800°C (HCW und Facetten)

Da bei 1600 Hz Bedeckung und 800°C Aufdampftemperatur offenbar keine HCW-Phase vorliegt, ist die Bedeckung weiter sukzessive bei gleicher Temperatur erhöht worden, um zu untersuchen, bei welcher Bedeckung sich eine solche Phase ausbildet. Eine HCW-Phase war zuerst bei einer Bedeckung von 2000 Hz zu erkennen. Die RSM und das dazugehörige 2D-Bild sind in Abb. 5.22 dargestellt. Im 2D-Bild fällt direkt auf, dass neben der HCW-Struktur bereits Reflexe der  $\text{Si}(111)\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ -Facetten zu sehen sind (vgl. Abb. 5.6 d)). Auch in der RSM sind neben den Stangen der HCW-Phase zusätzliche Stangen zu sehen. Zum einen sind dies drei flachere Streifen mit relativ großem Abstand und zum anderen schwache und verschmierte Stangen nahezu parallel zur  $K_{\perp}$ -Achse. Diese können beide auf Facetten zurückgeführt werden. Facetten sind aber Gegenstand von Abschnitt 5.5 und sollen dort noch einmal genauer behandelt werden. Hier wird fortan nur auf die HCW-Struktur eingegangen. Aus der RSM können

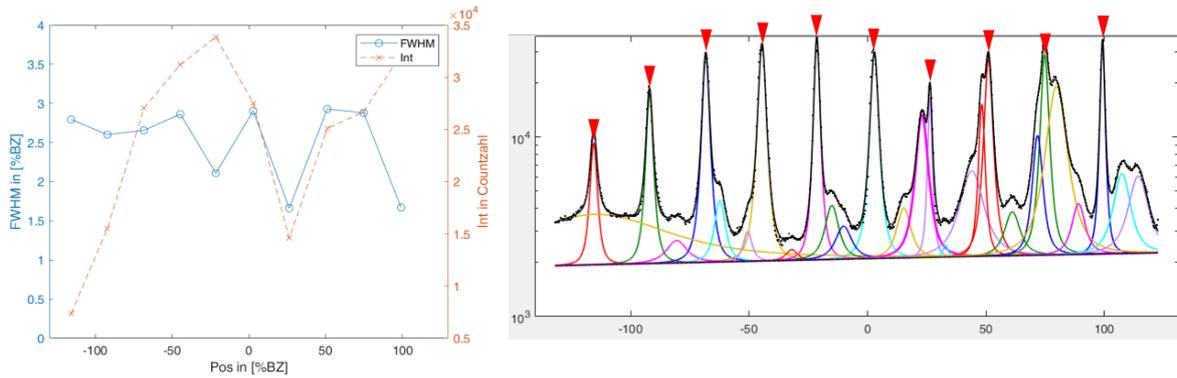


**Abbildung 5.22** – Rechts: RSM für die Bedeckung 2000 Hz bei einer Substrattemperatur von 800°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

die morphologischen Größen wie gewohnt bestimmt werden, hier mit einer angenommenen Stufenhöhe von  $3,14 \text{ \AA}$ . So ergibt sich eine Terrassenlänge von  $(13,96 \pm 0,32) \text{ \AA}$ , welcher unter Berücksichtigung des Fehlers  $0,7\%$  größer als der Literaturwert ist. Der Neigungswinkel ergibt sich zu  $(12,67 \pm 0,29)^\circ$  und ist damit  $1,45\%$  größer als der Literaturwert. Diese Abweichungen sind im Grunde nicht besonders groß, sodass gesagt werden kann, dass immer noch eine recht gute HCW-Ordnung vorliegt. Die Abweichung könnte darauf zurückzuführen sein, dass sich neben der HCW-Phase bereits Facetten auf der Oberfläche entstanden sind, was die Bildung der HCW-Phase beeinträchtigt.

Auch hier wird wieder die Halbwertsbreite als Funktion der Position für einen Linescan bei 130 eV ausgewertet. Die entsprechenden Plots sind in Abb. 5.23 dargestellt. Im Linescan sind neben den HCW-Peaks, die zur besseren Übersicht mit roten Pfeilen markiert sind, viele weitere Peaks zu sehen. Diese können vor allem auf die bereits vorhandenen Facetten auf der Oberfläche zurückgeführt werden. Für die Halbwertsbreite ergeben sich ein Mittelwert von  $(2,51 \pm 0,50) \% \text{BZ}$ . Damit ist trotz der Facetten die Ordnung der HCW-Phase mit denen bei niedrigerer Aufdampftemperatur vergleichbar. Es ergibt sich daraus eine mittlere Domänenlänge von  $(86,62 \pm 17,26) \text{ \AA}$ , welche ebenfalls mit der bei niedrigerer Temperatur vergleichbar ist. Die energieabhängige Halbwertsbreite eines Peaks ist in Abb. 5.24 zu sehen. Hier ist der Peak 2 gezeigt, die restlichen ausgewerteten Peaks und der Linescan, in dem diese markiert sind, befinden sich in Abb. A.8 bzw. A.7 in Anhang A. Es ergibt sich größtenteils eine Halbwertsbreite zwischen  $1,5 \% \text{BZ}$  und  $3,5 \% \text{BZ}$ . Sie stimmt damit gut mit der für 1600 Hz bei 600°C überein, ist aber etwas größer als bei 1800 Hz bei 600°C. Dies ist aufgrund der Facetten jedoch nicht verwunderlich.

Letztendlich liegt bei dieser Bedeckung und Aufdampftemperatur eine recht gut geordnete HCW-Phase vor, obwohl sich bereits parallel Facetten auf der Oberfläche bilden. Bei einer Aufdampftemperatur von 800°C eine reine HCW-Phase ohne Facetten zu

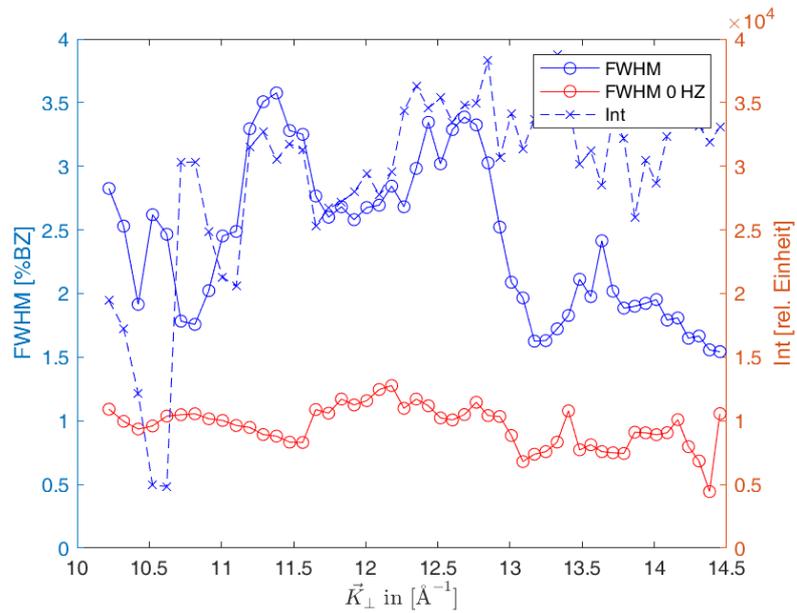


**Abbildung 5.23** – Links: Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\cong K_{\parallel}$ ) in %BZ für eine Bedeckung von 2000 Hz bei einer Substrattemperatur von  $800^{\circ}\text{C}$  beim Aufdampfen und einer Elektronenenergie von 130 eV. Es sind dabei die Halbwertsbreiten der Peaks dargestellt, die eindeutig mit der HCW-Phase in Verbindung gebracht werden können. Dies sind in der Darstellung rechts die periodisch angeordneten Peaks mit hoher Intensität und geringer Halbwertsbreite. Rechts: Ausschnitt aus dem ReflexFit-Programm mit den an den Linescan angepassten Funktionen.

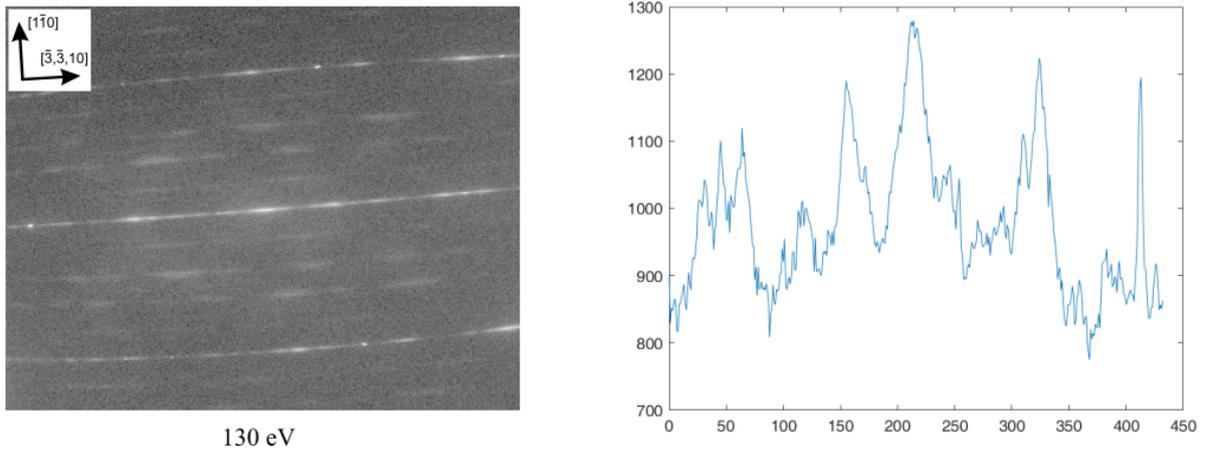
präparieren ist im Rahmen dieser Arbeit nicht gelungen.

### 5.3.7 600 Hz/400°C (LCW)

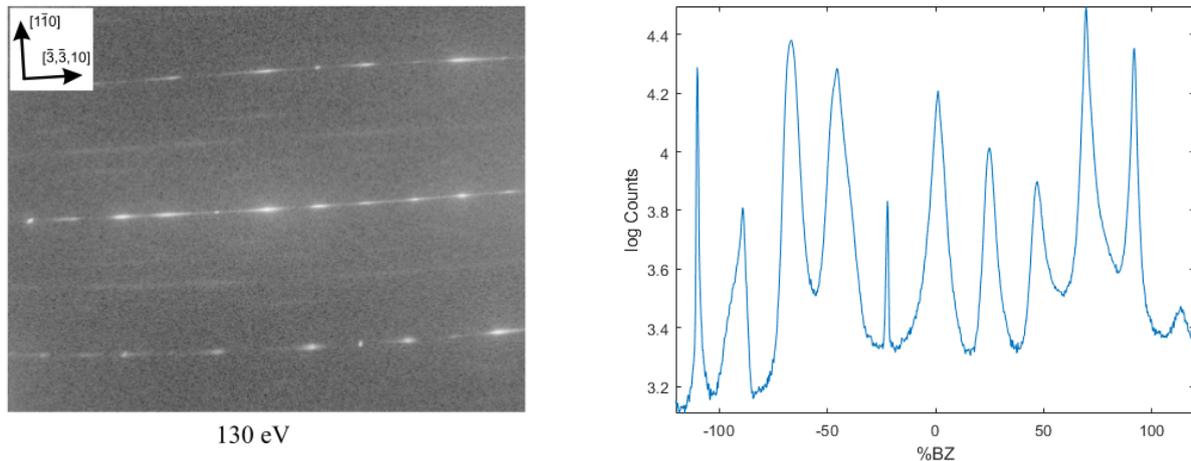
Die LCW- und die HCW-Phasen sind ebenfalls bei einer Substrattemperatur von  $400^{\circ}\text{C}$  beim Aufdampfen untersucht worden. Es sind dafür zwar keine RSMs angefertigt worden, dennoch sollen die Ergebnisse dazu in diesem Abschnitt vorgestellt und ausgewertet werden. In Abb. 5.25 ist für die Bedeckung 600 Hz und damit für die LCW-Phase ein 2D-Bild sowie ein Linescan entlang der Hauptachse, beide bei 130 eV, gezeigt. Im 2D-Bild sind die  $\times 5$ -Streaks der LCW-Phase gut zu erkennen. Auch auf der Hauptachse ist eine Kette von Reflexen ähnlich denen der LCW-Phase bei höheren Aufdampftemperaturen (vgl. Abb. 5.9 und 5.18 jeweils links). Bis auf wenige scharfe Reflexe sind diese jedoch deutlich breiter und verschmierter. Der Linescan auf der rechten Seite in Abb. 5.25 ist nicht direkt mit dem SPA-LEED aufgenommen worden. Er ist nachträglich mit einem Matlab-Skript aus dem 2D-Bild extrahiert worden, was ein relativ starkes Rauschen zur Folge hat. Wegen der schlechten Qualität dieses Scans sind hier keine Funktionen angepasst worden, um Halbwertsbreiten zu bestimmen. Dennoch lässt sich erahnen, dass sich die Peaks merklich weniger vom Untergrund abheben und breiter sind, als bei höheren Aufdampftemperaturen. Zusammen mit den Eindrücken aus dem 2D-Bild kann man also sagen, dass die Ordnung der LCW-Phase bei dieser Temperatur deutlich schwächer ausgeprägt ist. Dies kann schlicht darauf zurückgeführt werden, dass bei dieser niedrigen Temperatur die Beweglichkeit der Si-Atome und der adsorbierten Gold-Atome auf der Oberfläche geringer ist. Es ist damit vorstellbar, dass sie nach der Adsorption vermehrt kleine Tropfen bzw. Inseln bilden und sich nicht zu der LCW-Phase entsprechenden Plätzen auf der Oberfläche bewegen können. In diesem Fall könnte ein Nachheizen im



**Abbildung 5.24** – Halbwertsbreite und Intensität für einen Peak in Abhängigkeit der Elektronenenergie für eine Bedeckung 2000 Hz bei einer Substrattemperatur von 800°C beim Aufdampfen sowie die mittlere energieabhängige Halbwertsbreite der in Abb. 5.4 dargestellten Reflexe der sauberen Substratoberfläche zum Vergleich.



**Abbildung 5.25** – Links: 2D-Bild für eine Bedeckung von 600 Hz bei einer Substrattemperatur von 400°C beim Aufdampfen, aufgenommen bei 130 eV. Rechts: Aus dem 2D-Bild extrahierter Linescan der selben Präparation bei der gleichen Elektronenenergie.

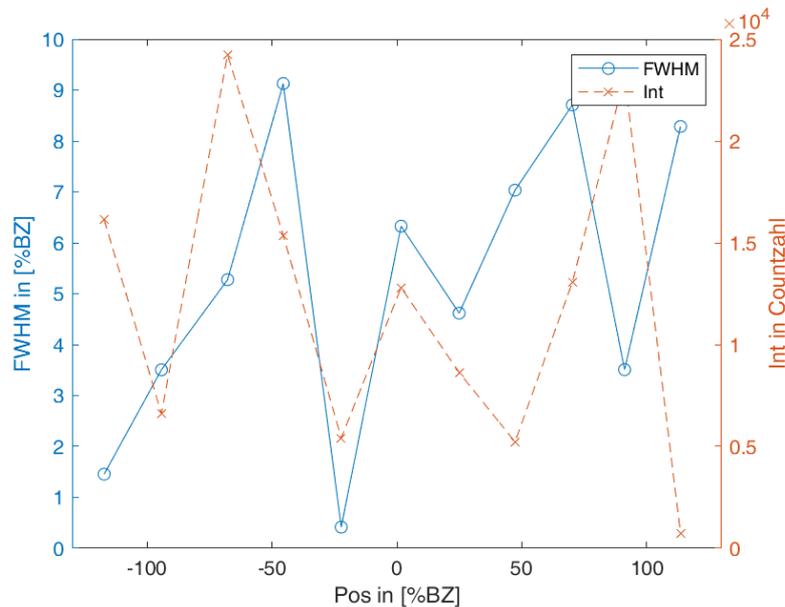


**Abbildung 5.26** – Links: 2D-Bild für eine Bedeckung von 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von 400°C beim Aufdampfen, aufgenommen bei 130 eV. Rechts: Entzerrter Linescan der selben Präparation bei der gleichen Elektronenenergie.

Anschluss an das Aufdampfen zu einer höheren Beweglichkeit und damit zu einer besseren Ordnung der LCW-Phase führen, dies ist hier allerdings nicht überprüft worden. Da schon Anhand von 2D-Bild und Linescan eine relativ schlechte Ordnung ersichtlich wird, ist hier keine RSM zur weiteren Analyse angefertigt worden.

### 5.3.8 1600 Hz/400°C (HCW)

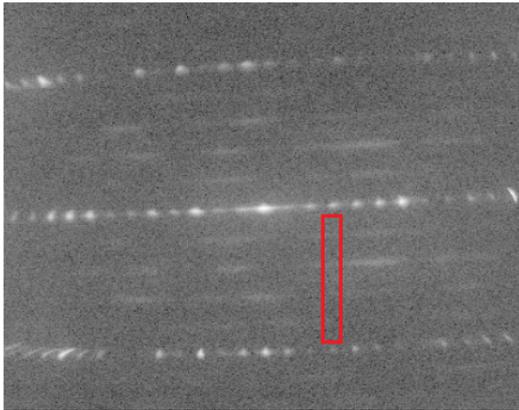
Für die Aufdampftemperatur 400°C ist ebenfalls eine HCW-Phase präpariert worden. Das 2D-Bild und der dazugehörige Linescan bei 130 eV sind in Abb. 5.26 dargestellt. Im 2D-Bild ist die Struktur der HCW-Phase grundsätzlich zu erkennen. Neben den  $\times 2$ -Streaks tauchen hier teilweise wieder die  $\times \bar{g}$ -Streaks auf jeder Seite auf, wie es bei dieser Bedeckung und beiden anderen Aufdampftemperaturen schon der Fall ist (vgl. Abb. 5.12 und 5.20 jeweils rechts). Wie bei 600 Hz Bedeckung bei 400°C sind die Reflexe auf der Hauptachse bis auf wenige scharfe deutlich breiter als bei höheren Aufdampftemperaturen. Dies spiegelt sich auch im Linescan wider. Für diesen sind die Halbwertbreiten der Peaks in Abhängigkeit ihrer Position in Abb. 5.27 dargestellt. Hier stechen die beiden extrem schmalen Peaks heraus, deren Halbwertsbreite sogar geringer ist als nahezu aller bei vorherigen Konfigurationen aus Bedeckung und Aufdampftemperatur vermessenen Peaks. Die restlichen Peaks haben hingegen überwiegend deutlich größere Halbwertsbreiten als für Präparationen mit höheren Substrattemperaturen. Dies legt den Schluss nahe, dass auch für die HCW-Phase die geringere Beweglichkeit der Gold-Adsorbatatome bei niedrigerer Temperatur zu einer schlechteren Ordnung dieser Phase führt. Von daher ist auch hier keine RSM zur tiefergehenden Analyse angefertigt worden. So kann also geschlossen werden, dass sich 400°C als Substrattemperatur beim Aufdampfen, zumindest ohne Nachheizen, bei diesem System nicht zur Erzeugung von Nanodrähten eignet.



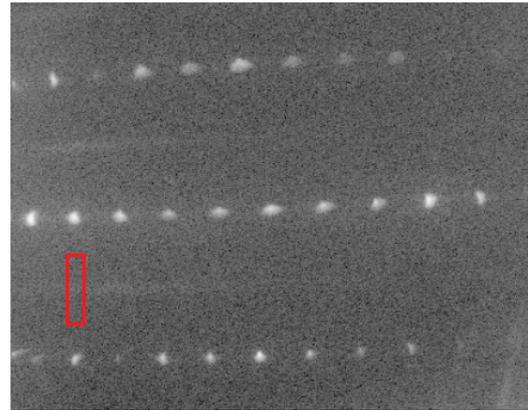
**Abbildung 5.27** – Halbwertsbreite in Abhängigkeit ihrer Position ( $\cong K_{\parallel}$ ) in %BZ für eine Bedeckung von 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von 400°C beim Aufdampfen und einer Elektronenenergie von 130 eV. Es sind dabei die Halbwertsbreiten der Peaks dargestellt, die eindeutig mit der HCW-Phase in Verbindung gebracht werden können.

## 5.4 Dimerisierung der Au-Doppelkette

An dieser Stelle soll die Dimerisierung der Au-Doppelkette und damit der  $\times 2$ -Streak genauer betrachtet werden. Dieser Streak entsteht durch eine Periodenverdopplung in Richtung der Au-Doppelkette durch eine gegenseitige Verkippung benachbarter Dimere, wie in Abschnitt 4.1.3 bereits behandelt wird. Die Halbwertsbreite dieses Streaks senkrecht zu seiner Verlaufsrichtung ist ein Zeichen für die Qualität dieser Ordnung und soll hier in Abhängigkeit der Bedeckung untersucht werden. Da die Intensität des Streaks stark von der Position in der RSM und der Bedeckung abhängt, wird er für zwei verschiedene Bedeckungsbereiche an unterschiedlichen Positionen vermessen. Der erste Bereich geht von 400 Hz bis 1200 Hz, der zweite Bereich von 1300 Hz bis 2200 Hz. Außerhalb dieser Bereiche konnte keine Intensität des  $\times 2$ -Streaks gemessen werden. Die Positionen, an denen in den jeweiligen Bereichen gemessen wird, sind in den 2D-Bildern in Abb. 5.28 mit roten Rechtecken markiert. Die Linescans in diesen Bereichen sind dabei nachträglich aus den 2D-Bildern extrahiert worden, weshalb die Qualität nicht optimal ist. Dennoch können gut Funktionen angepasst und so Halbwertsbreiten bestimmt werden. Die so bestimmten Halbwertsbreiten in Abhängigkeit der Bedeckung sind in Abb. 5.29, der Wechsel der vermessenen Positionen ist mit einer vertikalen Linie markiert. Es ist ein Verlauf der Halbwertsbreite mit mehreren lokalen Minima zuerkennen. Das erste und kleinste Minimum bei 800 Hz kann mit der LCW-Phase in Verbindung gebracht werden. Diese Bedeckung liegt zwar etwas über dem identifizierten Optimum von 600 Hz für die LCW-Phase, betrachtet man aber noch einmal Abb. 5.7, so scheint auch



600 Hz, 130 eV



1600 Hz, 130 eV

**Abbildung 5.28** – 2D-SPA-LEED-Bilder für 600 Hz und 1600 Hz Bedeckung bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen, jeweils aufgenommen bei 130 eV Elektronenenergie. Die Bereiche, in denen Linescans zur Bestimmung der Halbwertsbreite des  $\times 2$ -Streaks aufgenommen worden sind, sind mit roten Rechtecken markiert.

bei 800 Hz noch eine gute LCW-Ordnung vorzuliegen. Somit geht eine gute Ordnung der Au-Dimere mit einer guten LCW-Ordnung einher. Ein weiteres Minimum ist bei 2000 Hz zu erkennen. Diese Bedeckung liegt etwas oberhalb der idealen Bedeckung für die HCW-Phase, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, entstehen dabei bereits Facetten auf der Oberfläche. Der Verlauf der Halbwertsbreite ist in diesem Bereich von 1600 Hz bis 2200 Hz allerdings relativ flach. Somit scheint es, dass bei höheren Bedeckungen im Bereich der HCW-Phase sich die Ordnung der Au-Dimere stabilisiert. Die Halbwertsbreite ist dort aber größer als im ersten lokalen Minimum, sodass geschlossen werden kann, dass bei 800 Hz und damit bei der LCW-Phase die beste Ordnung der Au-Dimere vorliegt.

## 5.5 Untersuchung von Facetten bei hohen Bedeckungen

Wie in Abschnitt 5.3.6 bereits angedeutet wird, entstehen bei höheren als für die HCW-Phase üblichen Bedeckung Facetten auf der Oberfläche. Die Entstehung von  $\text{Si}(111)\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ -Facetten findet sich auch in der Literatur [33]. Diese Facetten und ihre Entstehung sollten in diesem Abschnitt genauer untersucht werden. Nach den Ergebnissen aus den Abschnitten 5.2 und 5.3 wird als Substrattemperatur beim Aufdampfen 600°C gewählt. Angefangen bei einer Bedeckung von 2000 Hz wird sie in Schritten von 400 Hz bis 3600 Hz erhöht und jeweils ein 2D-SPA-LEED-Bild und eine RSM nach gleichem Vorgehen wie zuvor aufgenommen. Aus Gründen, die während der Auswertung ersichtlich werden, sind die Ergebnisse hier in umgekehrter Reihenfolge, angefangen bei der höchsten Bedeckung, präsentiert.

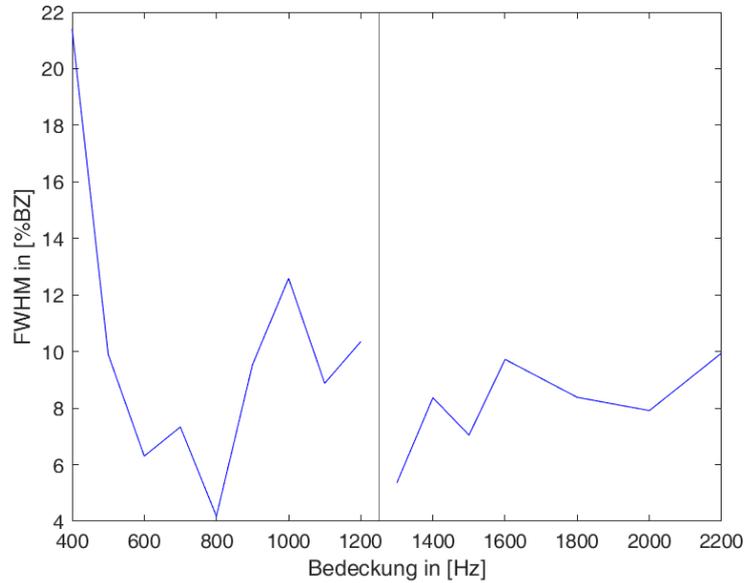
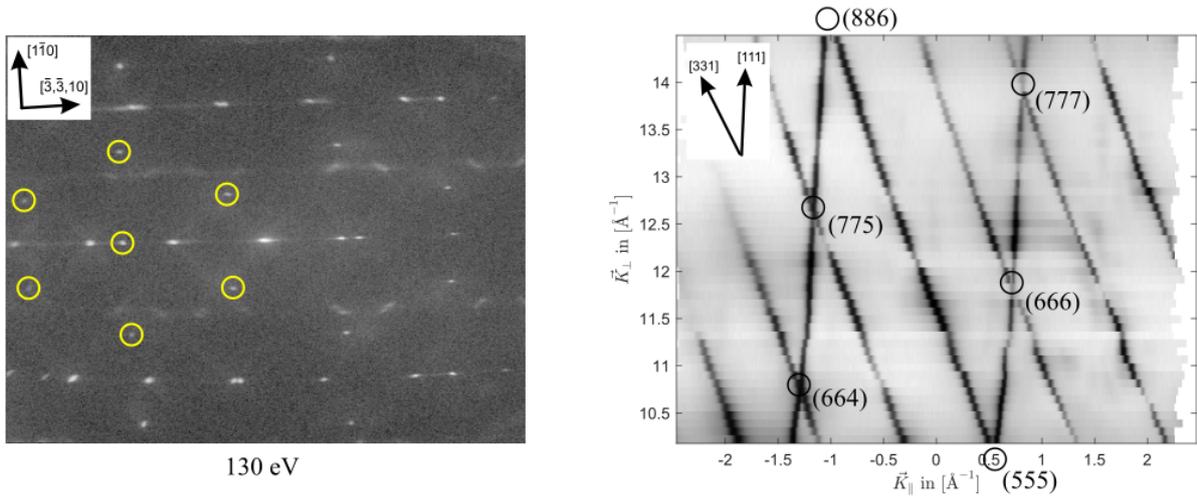


Abbildung 5.29 – FWHM des  $\times 2$ -Streaks in Abhängigkeit der Bedeckung.

### 5.5.1 3600 Hz

Hier wird zuerst mit 3600 Hz die größte Bedeckung gezeigt und ausgewertet. In Abb. 5.30 ist die RSM und ein entsprechendes 2D-Bild dargestellt. Im 2D-Bild sind die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexe der Si(111)-Facetten teilweise mit gelben Kreisen markiert. Diese Reflexe sind merklich schärfer als noch bei geringeren Bedeckungen, bei denen sie bereits aufgetaucht sind (vgl. Abb. 5.6 c) und Abb. 5.22 rechts). Des Weiteren befinden sich auf der Hauptachse neue Reflexe mit periodischen Abständen, die nicht mehr der HCW-Phase zuzuordnen sind. In der Mitte zwischen den Achsen sind neben den  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexen nun weitere, etwas breitere und leicht schräg stehende Reflexe zu sehen. Generell sind aber keine Reflexe der HCW-Phase mehr zu erkennen. Dies spiegelt sich auch in der RSM wider. Hier sind zwei Gruppen von Beugungsstangen zu sehen, für die angenommen wird, dass sie aus Facetten auf der Oberfläche resultieren. Die nach der 3D-Bragg-Bedingung berechneten Bragg-Reflexe für den entsprechenden Ausschnitt des reziproken Raums sind in Abb. 5.30 eingezeichnet. Mit ihnen können die Orientierungen der Facetten bestimmt werden. Zwei dazu nötige Reflexe, die außerhalb des vermessenen Bereichs liegen, sind dazu ebenfalls mit eingezeichnet ((555) und (886)). Demnach handelt es sich bei den beiden Stangen mit relativ großem Abstand um eine Si-(111)-Facette und bei den anderen engeren Stangen um eine Si(331)-Facette. Um diese Beobachtung weiter zu untermauern, soll die RSM auf morphologische Größen hin untersucht werden.

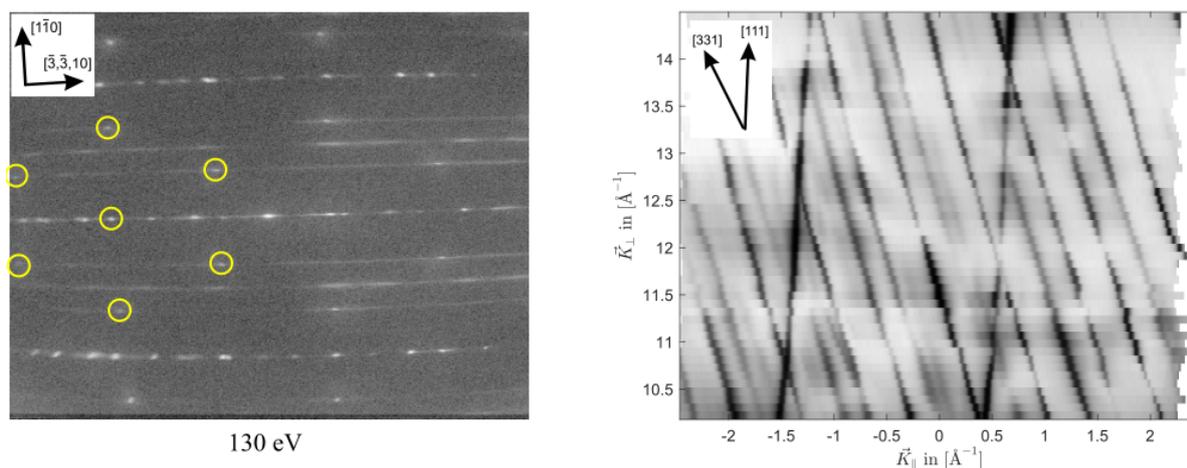
Aus dem Abstand der Beugungsstangen ergibt sich für die (111)-Facette ein Realraumabstand von  $3,30 \text{ \AA}$ , welcher dem Reihenabstand der Siliziumatome in Stufenrichtung auf einer Si(111)-Facette entsprechen sollte. Dieser stimmt mit  $3,32 \text{ \AA}$  gut mit dem gemessenen Wert überein. Sind die Si(111)-Terrassen senkrecht zum Elektronenstrahl ausgerichtet, was hier und bei vorangegangenen Messungen das Ziel gewesen ist, sollten



**Abbildung 5.30** – Rechts: RSM für die Bedeckung 3600 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV. Die Bragg-Reflexe für diesen Ausschnitt des reziproken Raums und zwei, die knapp außerhalb liegen, sind ebenfalls eingezeichnet.

die Stangen der (111)-Facetten parallel zur  $K_{\perp}$ -Achse sein. Die Orientierung, also der Winkel zur  $K_{\perp}$ -Achse, ist hier  $(3,51 \pm 0,04)^{\circ}$  und damit nah an dem zu erwartenden Wert von  $0^{\circ}$ . Die geringe Abweichung kann mit einer leichten Fehlstellung der Probe vor dem SPA-LEED-Instrument, ähnlich wie bei vorangegangenen Messungen, begründet werden. So ist dies ein weiteres Indiz für (111)-Facetten, es zeigt aber auch noch einmal, dass die Position der Probe vor dem SPA-LEED-Instrument nicht optimal eingestellt worden ist. Für die (331)-Facetten ergibt sich analog aus dem Abstand senkrecht zu den Stangen ein Realraumabstand von  $7,87 \pm 0,20 \text{ \AA}$ , der sehr gut zu dem Literaturwert von  $7,8 \text{ \AA}$  [24] als Größe der Einheitszelle der Si(331)-Oberfläche passt. Untersucht man für diese Facetten die Orientierung, so lässt sich ein Winkel von  $(-18,80 \pm 0,44)^{\circ}$  bestimmen. Mit der Orientierung der (111)-Facetten lässt sich der Winkel zwischen diesen beiden Facetten als Differenz der beiden Orientierungen berechnen. Der Winkel zwischen (111)- und (331)-Facetten ist so der RSM entsprechend  $(22,31 \pm 0,44)^{\circ}$  und stimmt damit mit dem für diese Facetten zu erwartenden Wert von  $22^{\circ}$  überein. Alle Indizien zusammenfassend kann also mit großer Sicherheit davon ausgegangen werden, dass sich hier Si(111)- und Si(331)-Facetten bilden. Interessanterweise passt dies auch gut zu Ergebnissen in der Literatur, wonach schon die reine Si(553)-Oberfläche aus diesen Facetten zusammengesetzt sein soll [24].

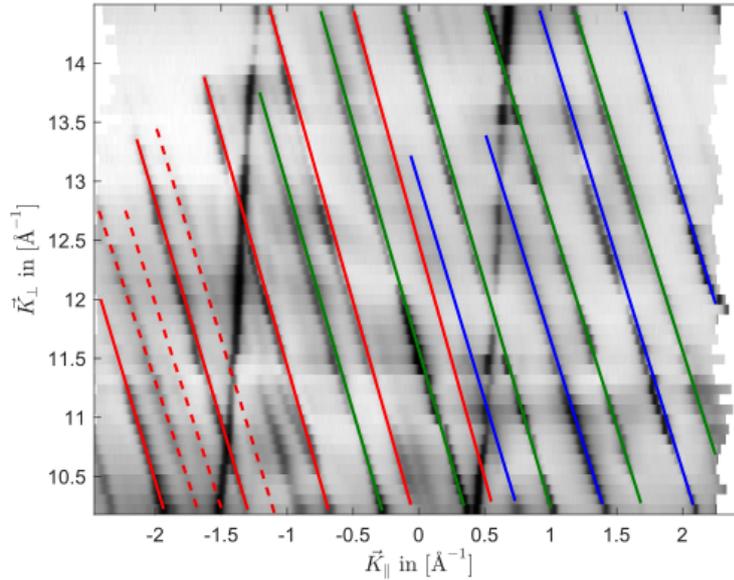
Die hier vorgestellte Bedeckung soll nun als ideale Si(553)-Au-Facettenoberfläche angenommen werden. Von ihr ausgehend sollen dann im Folgenden die niedrigeren Bedeckungen in absteigender Reihenfolge betrachtet werden, um die Entwicklung von der HCW-Phase zu den Facetten zu untersuchen.



**Abbildung 5.31** – Rechts: RSM für die Bedeckung 3200 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

### 5.5.2 3200 Hz

Die RSM für 3200 Hz Bedeckung sowie das entsprechende 2D-Bild sind in Abb. 5.31 dargestellt. Die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexe sind im 2D-Bild mit gelben Kreisen markiert und gut zu erkennen, auch wenn sie etwas unschärfer sind als noch bei der höheren Bedeckung. Auf der Hauptachse sind hier im Vergleich zu vorher deutlich mehr Reflexe mit erst einmal nicht erkennbarer Periodizität zu sehen. Zwischen den Achsen sind neben den  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexen drei Reihen von Streaks zu sehen, mit dem mittleren genau zwischen den Achsen. Dies ist sehr ähnlich schon bei einigen Präparationen der HCW-Phase beobachtet worden (vgl. Abb. 5.12 und Abb. 5.26), dort werden sie als  $\times 2$ - bzw.  $\times 3$ -Streaks bezeichnet. Es ist allerdings auffallend, dass die  $\times 3$ -Streaks in der gleichen Ebene wie  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexe liegen. In der RSM sind die Beugungsstangen der (111)-Facetten gut wieder zu erkennen. Für sie ergibt sich eine Orientierung von  $(3, 52 \pm 0, 62)^\circ$  und ein Realraumabstand von  $3,26 \text{ \AA}$ , was wieder gut zu den Literaturwerten für diese Facette passt. Eine Betrachtung der Gegenfacetten liefert hingegen keine so eindeutigen Hinweise. Die Orientierung der Beugungsstangen ist mit  $(-15, 17 \pm 0, 30)^\circ$  etwas kleiner als bei 3600 Hz und damit auch der Winkel zwischen den Facetten. Eine Periode dieser Beugungsstangen über den gesamten vermessenen Bereich ist auf den ersten Blick nicht klar zu erkennen. Es ist dennoch versucht worden, Regelmäßigkeiten und so etwas wie eine Periode für diese Beugungsstangen in der RSM zu finden. Um das Vorgehen dabei zu verdeutlichen, ist in Abb. 5.32 eine bearbeitete Version der RSM aus Abb. 5.31 gezeigt. Überraschenderweise liegt hier ein ähnliches Muster wie bei der Präparation mit 1600 Hz bei einer Substrattemperatur von 800°C vor. Es können verschiedene Gruppen von Beugungsstangen mit jeweils vergleichbarer Periode identifiziert werden, die sich dann gegenseitig überlagern. Diese Gruppen sind in Abb. 5.32 mit durchgezogenen Linien in rot, grün und blau gekennzeichnet. Aus den Perioden der jeweiligen Gruppen ergeben

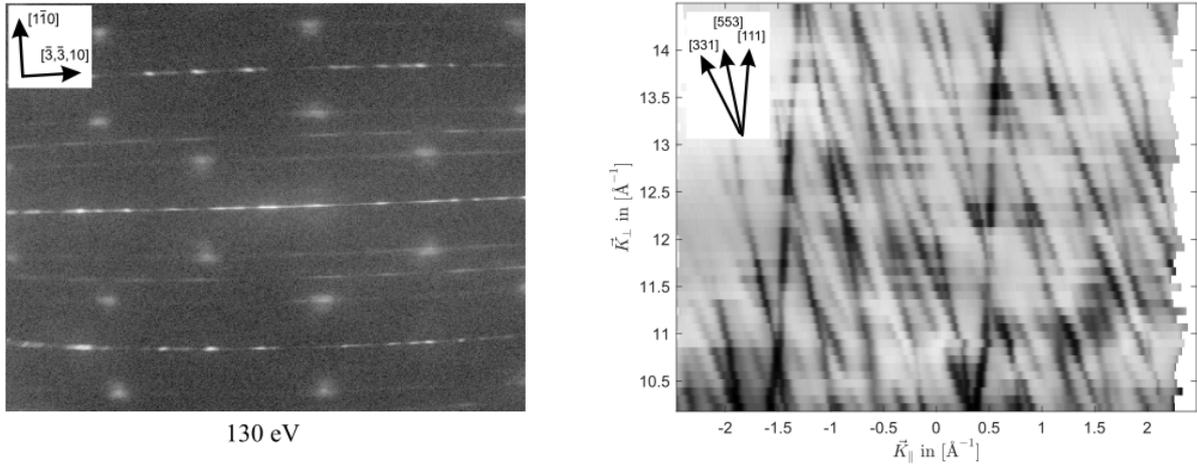


**Abbildung 5.32** – RSM aus Abb. 5.31. Die Markierungen werden im Text erläutert.

sich dann die Realraumabstände  $(9,69 \pm 0,27) \text{ \AA}$  (rot),  $(9,42 \pm 0,13) \text{ \AA}$  (grün) und  $(9,34 \pm 0,43) \text{ \AA}$  (blau). Diese sind für (331)-Facetten zu groß. Zusammen mit der zu kleinen Orientierung sprechen sie also eher gegen (331)-Facetten bei dieser Bedeckung. Links in Abb. 5.32 sind zusätzliche Stangen mit gestrichelten roten Linien markiert. Der Grund dafür wird nach dem folgenden Abschnitt mit geringeren Bedeckungen deutlich. Zusammen mit den mit durchgezogenen roten Linien markierten Stangen in direkter Nachbarschaft ergibt sich dort eine Periode von  $(0,205 \pm 0,013) \text{ \AA}^{-1}$ . Berechnet man aus dem vierfachen dieser Periode einen Realraumabstand (Grund dafür siehe Abschnitt 5.5.3), so erhält man  $(7,24 \pm 0,12) \text{ \AA}$ . Dieser Wert passt einigermaßen zu (331)-Facetten. Die Struktur, aus der dieser Wert bestimmt worden ist, ist aber bei weitem nicht die dominierende Eigenschaft in der RSM. Dies sind vielmehr die sich überlagernden Gruppen, deren Periode und Orientierung eher gegen die Bildung von (331)-Facetten sprechen. Stattdessen könnten verkippte oder vicinale (331)-Flächen vorliegen.

### 5.5.3 2800 Hz

In Abb. 5.33 ist die RSM und das entsprechende 2D-Bild für 2800 Hz Bedeckung zu sehen. Im 2D-Bild sind die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexe wieder gut zu erkennen, diesmal jedoch deutlich unschärfer als noch bei 3200 Hz. Die Streaks zwischen den Achsen sind ebenfalls noch gut zu sehen. Auf der Hauptachse befinden sich viele Reflexe, ohne das zuerst einmal eine Periode zu erkennen wäre. In der RSM sind die Beugungsstangen der (111)-Facetten wieder gut zu erkennen. Für sie erhält man eine Orientierung von  $(2,96 \pm 0,35)^\circ$  und einen Realraumabstand von  $3,27 \text{ \AA}$ , was erneut gut zu den Si-(111)-Facetten passt. Zudem sind hier erstmals wieder Stangen der HCW-Phase zu sehen. In Abb. 5.34 sind

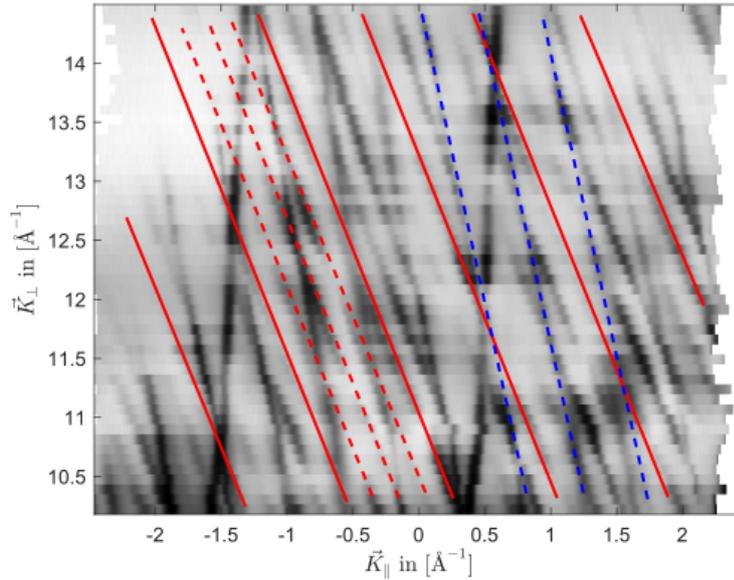


**Abbildung 5.33** – Rechts: RSM für die Bedeckung 2800 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

von diesen exemplarisch drei mit gestrichelten blauen Linien markiert. Aus deren Periode ergibt sich eine Terrassenlänge von  $(14,06 \pm 0,48) \text{ \AA}$ , was gut zu dem Literaturwert und den Messergebnissen in dieser Arbeit für die HCW-Phase passt. Diese Stangen haben zudem eine Orientierung von  $(-9,82 \pm 0,58)^\circ$ . Damit ist der Winkel zwischen den (111)-Facetten und der HCW-Oberfläche  $(11,78 \pm 0,93)^\circ$  und stimmt damit gut mit dem zwischen diesen Flächen zu erwartendem Winkel von  $12,3^\circ$  [4] überein. Neben diesen beiden Beugungsstangen gibt es noch eine dritte Sorte von Stangen, die nun genauer analysiert werden sollen.

Die Orientierung dieser Stangen stimmt mit  $(-19,99 \pm 0,73)^\circ$  gut mit der der (331)-Facetten bei 3600 Hz überein. Auch der Winkel zwischen diesen Stangen und denen der (111)-Facetten passt mit  $(22,94 \pm 1,20)^\circ$  gut zu dem Literaturwert. Deswegen soll der Versuch unternommen werden, diese Stangen mit den (331)-Facetten zu identifizieren. In Abb. 5.34 sind jene Beugungsstangen, die von ihren Positionen her mit den Stangen der (331)-Facetten in Abb. 5.30 übereinstimmen, mit roten Linien markiert. Bei genauerer Betrachtung fällt dann auf, dass sich zwischen diesen markierten Stangen dann jeweils drei weitere befinden, mal mehr, mal weniger deutlich sichtbar. Für einen Zwischenraum sind diese Stangen exemplarisch mit gestrichelten roten Linien markiert. Aus der Periode der durchgezogenen Linien erhält man einen Realraumabstand von  $(3,71 \pm 0,35) \text{ \AA}$ , welcher gut zu der Annahme von Si(331)-Facetten passt. Unter Berücksichtigung der gestrichelten Zwischenstangen erhält man eine kleinere Periode und damit den Realraumabstand  $(30,76 \pm 3,20) \text{ \AA}$ . Diese Periodenvervierfachung gegenüber den Beugungsstangen der (331)-Facetten bei 3600 Hz deutet auf eine  $\times 4$ -Überstruktur bei dieser Bedeckung hin.

Aufgrund der hier gefundenen Periode bzw. Vierfachperiode für die (331)-Facetten ist die entsprechende Untersuchung mit den gestrichelten roten Linien bei 3200 Hz Bedeckung nachträglich durchgeführt worden (siehe Abschnitt 5.6.2). In dem Fall werden allerdings



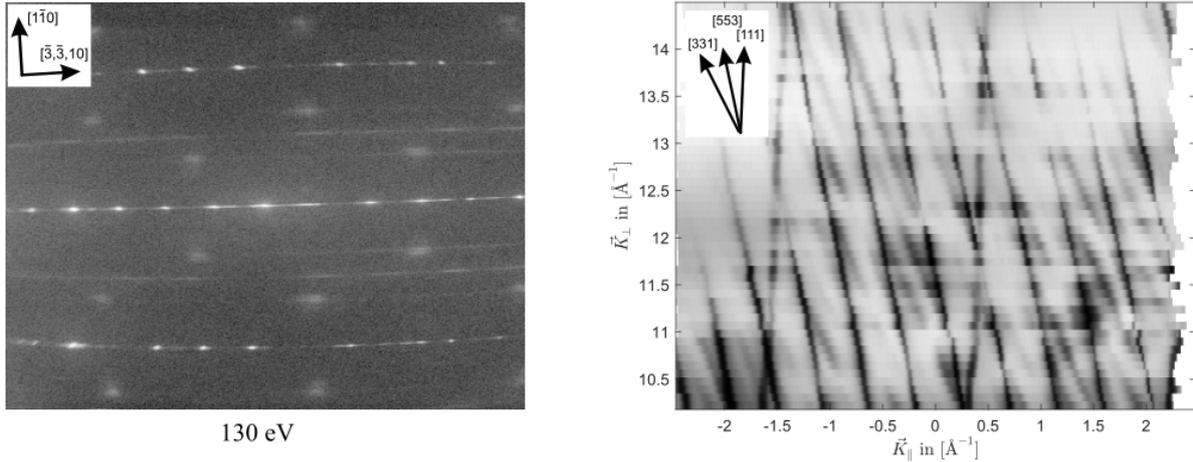
**Abbildung 5.34** – RSM aus Abb. 5.33. Die Markierungen werden im Text erläutert

bei der Bestimmung einer Periode alle Stangen (durchgezogen oder gestrichelt markiert) als gleichwertig behandelt, da eine eindeutige Zuordnung zu Stangen bei 3600 Hz wegen der grundsätzlich abweichenden Struktur der RSM schwierig ist.

#### 5.5.4 2400 Hz

Die RSM und das zugehörige 2D-Bild sind in Abb. 5.35 gezeigt. Im 2D-Bild sind viele Eigenschaften der vorherigen Bedeckung wie die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexe und die  $\times 2$ - und  $\times 3$ -Streaks wieder zu erkennen. Auf der Haupt- und auf den Nebenachsen sind jedoch Reflexe der HCW-Phase zu erkennen, was bei höheren Bedeckung so einfach nicht möglich ist. Auch in der RSM sind die Beugungsstangen der HCW-Phase neben denen der (111)-Facetten deutlich zu erkennen. Für die HCW-Stangen ergibt sich die Terrassenlänge  $(14,07 \pm 0,45) \text{ \AA}$ , was gut zum Literaturwert und vorherigen Messungen passt. Aus den Stangen der (111)-Facetten resultiert ein Realraumabstand von  $3,24 \text{ \AA}$ . Zwischen beiden Stangenarten liegt ein Winkel von  $(12,83 \pm 0,73)^\circ$ . All dies spricht für eine Mischung aus Si(111)-Facetten und einer HCW-Phase auf der Oberfläche.

Neben diesen beiden Stangesorten ist aber wieder eine dritte Art zu sehen, hier jedoch deutlich weniger stark ausgeprägt als noch bei 2800 Hz. Wegen der schwachen Ausprägung konnten nicht mehr wie bei der erwähnten höheren Bedeckung einzelne Beugungsstangen mit all den (331)-Stangen bei 3600 Hz identifiziert werden. Dies konnte nur für zwei Beugungsstangen (rote Linien) mit dazugehörigen Zwischenstangen (gestrichelte rote Linien), markiert in Abb. 5.36, durchgeführt werden. Daraus ergeben sich die Realraumabstände  $(7,28 \pm 0,50) \text{ \AA}$  für die durchgezogenen Linien bzw.  $(29,12 \pm 2,02) \text{ \AA}$  unter Berücksichtigung der gestrichelten Linien. Der erste Wert ist zwar selbst mit Fehler



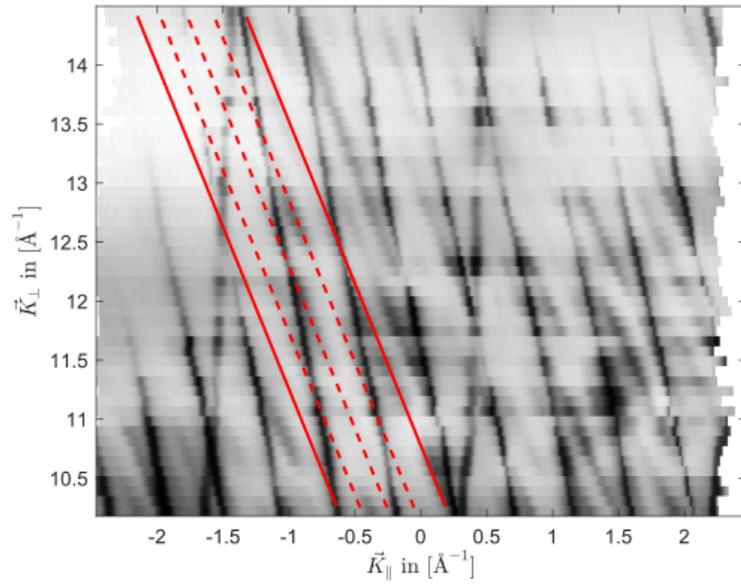
**Abbildung 5.35** – Rechts: RSM für die Bedeckung 2400 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.

noch etwas kleiner als der Literaturwert für eine Si(331)-Facette, zusammen mit einem Winkel von  $(22,90 \pm 1,02)^\circ$  zwischen den entsprechenden Beugungsstangen und denen der (111)-Facetten kann man aber mit ziemlicher Sicherheit davon ausgehen, dass hier erneut Si(331)-Facetten auf der Oberfläche vorliegen. Dass es auch hier eine Periodenvervierfachung gibt, deutet wieder auf eine Überstruktur hin.

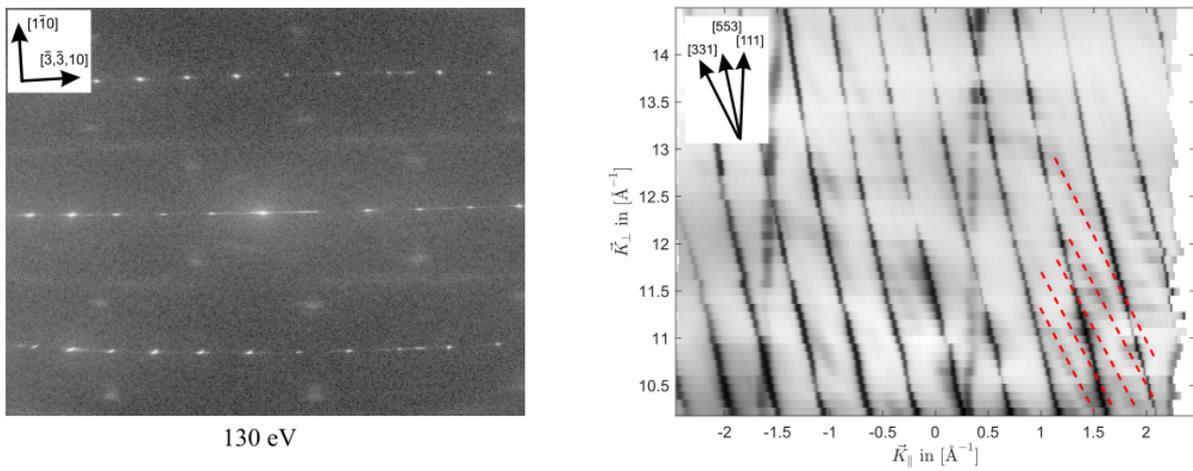
### 5.5.5 2000 Hz

Für 2000 Hz ist die RSM und das entsprechende 2D-Bild in Abb. 5.37 dargestellt. Das 2D-Bild ist dem bei der gleichen Bedeckung und einer Aufdampftemperatur von 800°C sehr ähnlich. Es setzt sich zusammen aus einem Bild für eine HCW-Phase und den  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexen der Si(111)-Facetten. Letztere sind allerdings deutlich unschärfer und schwächer als noch bei höheren Bedeckungen. Auch in der RSM stellen die Beugungsstangen der HCW-Phase und der (111)-Facetten die dominanten Merkmale dar. Ganz schwach sind vor allem rechts noch Stangen zu sehen, die mit (331)-Facetten in Verbindung gebracht werden können. Diese sind in Abb. 5.37 mit gestrichelten roten Linien markiert.

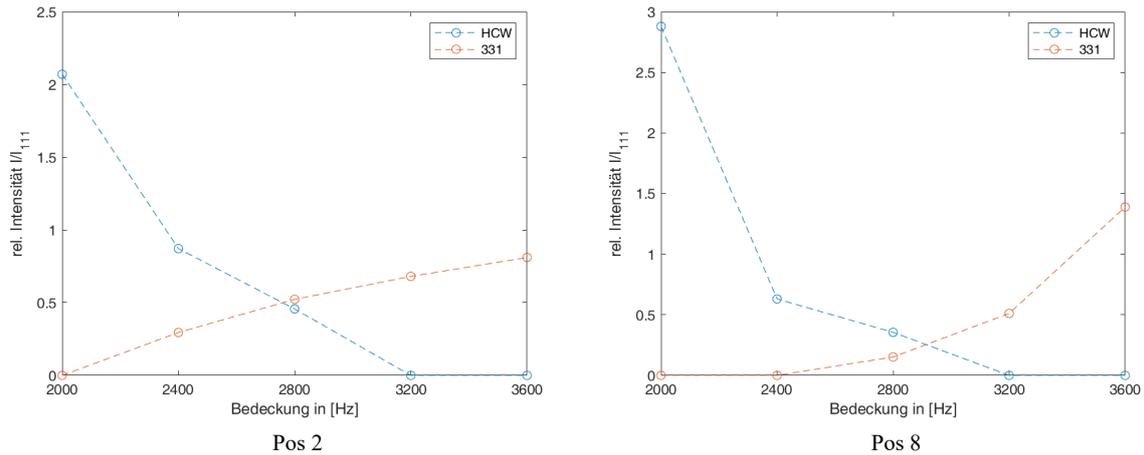
Für die HCW-Phase ergibt sich hier die Terrassenlänge  $(14,10 \pm 0,68) \text{ \AA}$  und für die (111)-Facetten ein Realraumabstand von  $3,21 \text{ \AA}$ . Der Winkel zwischen diesen beiden Stangensorten ist  $(13,09 \pm 0,98)^\circ$ . Somit stimmen alle Werte mit den für diese Strukturen zu erwartenden überein. Aus der Periode der gestrichelt markierten Stangen ergibt sich ein Realraumabstand von  $(29,92 \pm 3,58) \text{ \AA}$ . Dieser stimmt gut mit den zuvor bestimmten Abständen für die Vierfachperiode überein. Ein Abstand für die „einfache“ Periode ist hier nicht bestimmt worden, da die Stangen nicht über ausreichend große Bereiche in der RSM gut zu erkennen sind und eine Abstandsbestimmung über größere Bereiche damit als nicht sinnvoll erscheint. Die bestimmte Vierfachperiode zusammen mit der Orientierung  $(23,91 \pm 0,86)^\circ$  der Stangen deuten jedoch immer noch auf (331)-Facetten



**Abbildung 5.36** – RSM aus Abb. 5.35. Die Markierungen werden im Text erläutert



**Abbildung 5.37** – Rechts: RSM für die Bedeckung 2000 Hz bei einer Substrattemperatur von 600°C beim Aufdampfen. Links: 2D-Bild für die gleiche Präparation, aufgenommen bei 130 eV.



**Abbildung 5.38** – a) Intensität eines HCW-Reflexes und eines Si(331)-Facetten-Reflexes, jeweils normiert auf die Intensität des Reflexes einer Si(111)-Facetten in Abhängigkeit der Bedeckung. Die Intensitäten sind an Position 2 in den RSMs der Abschnitte 5.6.1 bis 5.6.5 bestimmt worden. b) Das Gleiche für die Position 8 (für beide Positionen siehe Abb. B.1 in Anhang B).

hin. Sie sind bei dieser Bedeckung aber nur noch sehr schwach ausgeprägt.

An dieser Stelle ist ein Vergleich der hier untersuchten Präparation mit der gleichen Bedeckung bei 800°C Aufdampftemperatur (siehe Abschnitt 5.4.6) interessant. Betrachtet man die RSM in Abb. 5.22, so fallen neben den HCW-Stangen zwei und oben links eine weitere „halbe“ Beugungsstange auf. Aus diesen resultiert mit  $3,02\text{\AA}$  ein ähnlicher Realraumabstand wie für Si(111)-Facetten. Ihre Orientierung passt mit  $(-23, 14 \pm 0, 95)^\circ$  viel besser zu einer Si(331)-Facette. Bei den verschmierten Stangen im Hintergrund kann was keine sinnvolle Periode bestimmt werden, ihre Orientierung passt mit  $(-1, 56 \pm 0, 77)^\circ$  gut zu (111)-Facetten. Vernachlässigt man, dass der bestimmte Realraumabstand nicht wirklich zu (331)-Facetten passt, scheint bei dieser Temperatur die Entstehung von (331)-Facetten der Entstehung von (111)-Facetten bevorzugt zu werden. Dies steht im Gegensatz zu dem Verhalten bei 600°C. Warum dies so ist, kann im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht geklärt werden. Dazu müsste eventuell noch eine Bedeckungsserie bei höheren Bedeckungen und 800°C Substrattemperatur beim Aufdampfen durchgeführt werden.

## 5.5.6 Reflexprofile

Um die Entwicklung der HCW-Phase und der Facetten noch genauer zu bestimmen, werden die Reflexprofile, insbesondere die Intensität der Reflexe, in Abhängigkeit der Bedeckung untersucht. Da die Intensität der untersuchten Reflexe neben der Oberflächenbeschaffenheit und damit von der konkreten Bedeckung auch noch von Versuchsparametern wie z.B. der Intensität des Elektronenstrahls oder dem Druck in der Vakuumkammer abhängt, ist die Intensität des HCW- und des (331)-Reflexes jeweils auf die des (111)-Reflexes in unmittelbarer Nachbarschaft in der RSM normiert worden. Dies ist

an acht verschiedenen Positionen in den RSMs, an denen die Reflexe nah beieinander liegen, durchgeführt worden. Eine RSM, in der die untersuchten Positionen markiert sind, befindet sich in Abb. B.1 in Anhang B. In Abb. 5.38 sind die Verläufe für die Positionen 2 und 8 dargestellt, die restlichen Positionen befinden sich ebenfalls in Anhang B. Die bedeckungsabhängigen normierten Intensitätsverläufe für die beiden genannten Reflexe sind in Abb. 5.38 dargestellt. Es ist gut zu erkennen, wie die Intensität der HCW-Reflexe mit steigender Bedeckung abnimmt und ab 3200 Hz ganz verschwindet. Das Gleiche ist für die anderen untersuchten Peaks im Anhang B zu beobachten. Dies ist auch zu erwarten und entspricht den Beobachtungen der vorherigen Abschnitte, wo mit zunehmender Bedeckung die HCW-Phase immer weiter von den (111)- und (331)-Facetten verdrängt wird. Im Gegenzug nimmt die relative Intensität der (331)-Reflexe mit der Bedeckung zu, was ebenfalls zu erwarten ist. Der genaue Verlauf und die letztendliche Intensität hängt aber sehr von der Position ab, an der der Reflex vermessen worden ist. Der Trend ist überwiegend ein ansteigender, zumindest wenn man die Anfangs- und Endintensität betrachtet. Die Intensität relativ zum (111)-Reflex unterscheidet sich aber teilweise stark an unterschiedlichen Positionen. Dies soll darauf zurückzuführen sein, dass nicht alle Positionen für alle Bedeckungen optimal zu vermessen sind, da sich teilweise Reflexe überlagern, was eine genaue Bestimmung der Intensitäten der einzelnen Reflexe erschwert. Zudem können dynamische Effekte dazu führen, dass es zu starken Intensitätsänderungen in Abhängigkeit der Energie gibt. Insgesamt zeigen diese Plots dennoch gut, wie die HCW-Phase mit steigender Bedeckung verschwindet und nach und nach durch Facetten ersetzt wird. Dabei entstehen zuerst Si(111)-Facetten, welche bereits bei 2000 Hz gut zu erkennen sind. Si(331)-Facetten sind erst ab einer Bedeckung von 2400 Hz zu sehen und dann auch mit wie schon erwähnt geringerer Intensität als die Si(111)-Facetten. Es fällt zudem auf, dass die relative Intensität des (331)-Reflexes außer bei 3600 Hz an Position 8 nicht über einen Wert von 1 steigt, die Intensität dieses Reflexes also in aller Regel kleiner als die des (111)-Reflexes ist. Somit scheint vor allem bei mittleren aber auch bei höheren Bedeckungen die (111)-Facette das dominierende Merkmal auf der Oberfläche zu sein und deren Bildung denen von (331)-Facetten bevorzugt zu sein.

## 6 Zusammenfassung

In dieser Masterarbeit sind Au-induzierte Atomdrahtsysteme auf der vicinalen Si(553)-Oberfläche untersucht worden. Dabei ist neben den aus der Literatur bekannten stabilen LCW- [4] und HCW-Phasen [2, 3] auch die Bildung von Facetten bei noch höheren Goldbedeckungen betrachtet worden. Als bildgebende Messmethode dient die Elektronenbeugung, speziell ein SPA-LEED-Instrument, eine weiterentwickelte Form des konventionellen LEED.

Mittels einer Bedeckungsserie sind die Bedeckungen identifiziert worden, bei denen eine LCW- bzw. eine HCW-Phase vorliegen. Im Anschluss sind für diese Bedeckungen *Reciprocal Space Maps* (RSMs) angefertigt worden, mit Hilfe derer Aussagen über Morphologie und Qualität der präparierten Oberfläche gemacht werden können. Dabei ist insbesondere auch die Substrattemperatur beim Aufdampfen des Goldes variiert worden, um deren Einfluss auf die Bildung der Atomdrahtsysteme zu bestimmen. Bei 600°C Aufdampftemperatur sind hierbei die besten Ergebnisse erzielt worden. Für beide Phasen stimmen die aus den RSMs bestimmten morphologischen Größen mit Literaturwerten überein und in den Systemen herrscht eine gute Ordnung. Für 800°C sind in der LCW-Phase immer noch gute Ergebnisse erzielt worden, die Präparation einer reinen HCW-Phase ist bei dieser Temperatur hingegen nicht mehr gelungen. Vielmehr zeigt sich bei einer Bedeckung, die bei 600°C der HCW-Phase entspricht, ein Bild, das eine Art Zwischenphase darstellt und im Rahmen dieser Arbeit nicht abschließend gedeutet werden kann. Bei 400°C konnten zwar beide Phasen präpariert werden, die Auswertung hat aber eine mit höheren Temperaturen verglichen relativ schlechte Ordnung ergeben. Bei höheren Bedeckungen als für die HCW-Phase üblich hat sich herausgestellt, dass sich Facetten bilden. Nach einer Auswertung der RSM für die höchste Bedeckung liegt der Schluss nahe, dass es sich dabei um Si(111)- und Si(331)-Facetten handelt. Eine sukzessive Erhöhung der Bedeckung von der HCW-Phase bis zu dieser Bedeckung zeigt, wie die Strukturen der HCW-Phase nach und nach durch die Facetten verdrängt werden. Dabei kommt es bei mittleren Bedeckungen zu einer scheinbaren Vervierfachung der Periode der Si(331)-Facetten. Auch hier gibt es bei einer Bedeckung eine Art Zwischenphase, die der ansonsten beobachteten Entwicklung entgegensetzen scheint und deren Ursache hier nicht abschließend geklärt werden kann.

Insgesamt konnten viele Ergebnisse aus der Literatur gut reproduziert werden. Die neben den stabilen Phasen beobachteten Zwischenphasen konnte allerdings nicht vollständig gedeutet werden. Dazu wäre es in Zukunft von Interesse, diese genauer und vor allem mit anderen Messmethoden zu untersuchen. Daraus könnte dann eventuell weitere Informationen über die Morphologie dieser Strukturen und gegebenenfalls auch deren Ursache gewonnen werden. Dies könnte weitere Einsichten in die Bildung atomarer Drähte auf Halbleiteroberflächen liefern.

## 7 Abstract

In this masters thesis Au-induced atomic wires on a vicinal Si(553) surface have been investigated. Two stable phases are well known in literature, the LCW-Phase [4] and the HCW-Phase [2, 3]. Those were studied in this thesis as well as facettes that form at even higher Au-coverages on the surface. The means for investigation has been electron diffraction, specifically a SPA-LEED-instrument which is an advanced form of conventional LEED.

A coverage series helped to identify the coverages necessary to form LCW- or HCW-phases. For these coverages *Reciprocal Space Maps* (RSMs) were made to gain further information about morphology and quality of the prepared surfaces. For this the temperature of the substrat during Au-deposition by vaporization also has been altered in order to determine the effect of that parameter on the formation of the atomic wire systems. For a temperature of 600°C during deposition the best results have been obtained. For both phases the results match well with results in literature and the overall order is quit good. For 800°C a good LCW-phase was prepared but the preparation of a pure HCW-phase proved to be difficult. For the same coverage for this phase as at 600°C there seems to be a kind of intermediate phase. The structure and origin of this intermediate phase could not be determined in this thesis. At 400°C both phases were prepared but the order of the surface proved to be relatively bad compared with higher temparatures during Au-deposition.

At even higher coverages as for the HCW-phase the formation of facettes on the surface has been detected. Investigation of the RSM at the highest coverage has lead to the assumption that these are Si(111)- and Si(331)-facettes. Successively increasing the coverage from a HCW-phase to the mentioned highest corverage has shown how the features of a HCW-Phase decrease at higher coverages while the features of the facettes increase. At intermediate coverages there seems to be a quadrupling of the period of the (331)-facettes and at one specific coverage there occurs an other intermediate phase comparable to that found before at 800°C. Both phenomena could not be fully explained in this thesis.

All in all many results in literature were reproduced fairly well. Some observations, especially the intermediate phases, were not wholly explained in this thesis. In order to do that it would be interesting to study these phases in more detail with other means of investigation. Thus could be obtained more information about the morphology of these phases und maybe their origin. In the end this could lead to an even further insight into the formation of atomic wires on semiconductor surfaces.

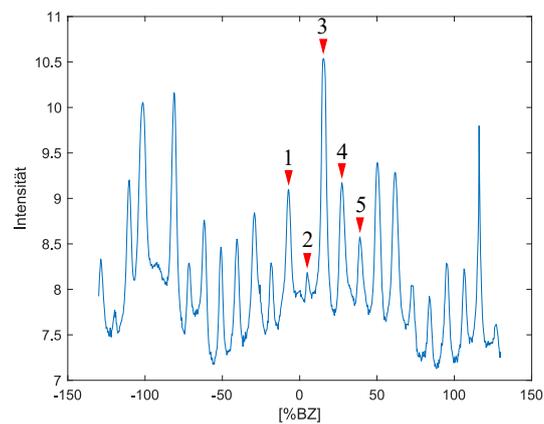
# Literaturverzeichnis

- [1] M. Jałochowski, M. Strodotzak, and R. Zdyb. Gold-induced ordering on vicinal Si(111). *Surface Science*, 375(2-3):203–209, 1997.
- [2] M. Krawiec. Structural model of the Au-induced Si(553) surface: Double Au rows. *Physical Review B*, 81(11), 2010.
- [3] W. Voegeli, T. Takayama, T. Shirasawa, M. Abe, K. Kubo, T. Takahashi, K. Akimoto, and H. Sugiyama. Structure of the quasi-one-dimensional Si(553)-Au surface: Gold dimer row and silicon honeycomb chain. *Physical Review B*, 82(7), 2010.
- [4] I. Song, J. S. Goh, S.-H. Lee, S. W. Jung, J. S. Shin, H. Yamane, N. Kosugi, and H. W. Yeom. Realization of a strained atomic wire superlattice. *ACS Nano*, 9(11):10621–10627, 2015.
- [5] J. Bahlmann. IV-LEED Untersuchungen an Ag(001): Experimentelle Einflüsse und Datenanalyse. Master's thesis, Universität Osnabrück, 2017.
- [6] A. Alexander. SPA-LEED Untersuchungen zum Wachstum von Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> auf Sr-TiO<sub>3</sub>(001). Master's thesis, Universität Osnabrück, 2019.
- [7] M. P. Seah and W. A. Dench. Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard data base for electron inelastic mean free paths in solids. *Surface and Interface Analysis*, 1(1):2–11, 1979.
- [8] C.-M. Chan, A. Van Hove, and W. H. Weinberg. *Low-Energy Electron Diffraction - Experiment, Theory and Surface Structure Determination*. Springer Series in Surface Sciences 6, 1986.
- [9] M. Horn von Hoegen. Growth of semiconductor layers studied by spot profile analysing low energy electron diffraction – part i1. *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, 214(10), 1999.
- [10] C. Wiethoff. *Morphologische Transformation der Silizium (112) Oberflächendurch Metalladsorption: Facettierung vs. Stabilisierung*. PhD thesis, Universität Duisburg-Essen, 2010.
- [11] J. Wollschläger. Diffraction from surfaces with randomly distributed structural defects. *Surface Science*, 328(3):325–336, 1995.
- [12] S. Gevers. SPA-LEED-Untersuchungen von Praseodymoxidschichten auf Si(111)-Substraten. Master's thesis, Universität Osnabrück, 2007.

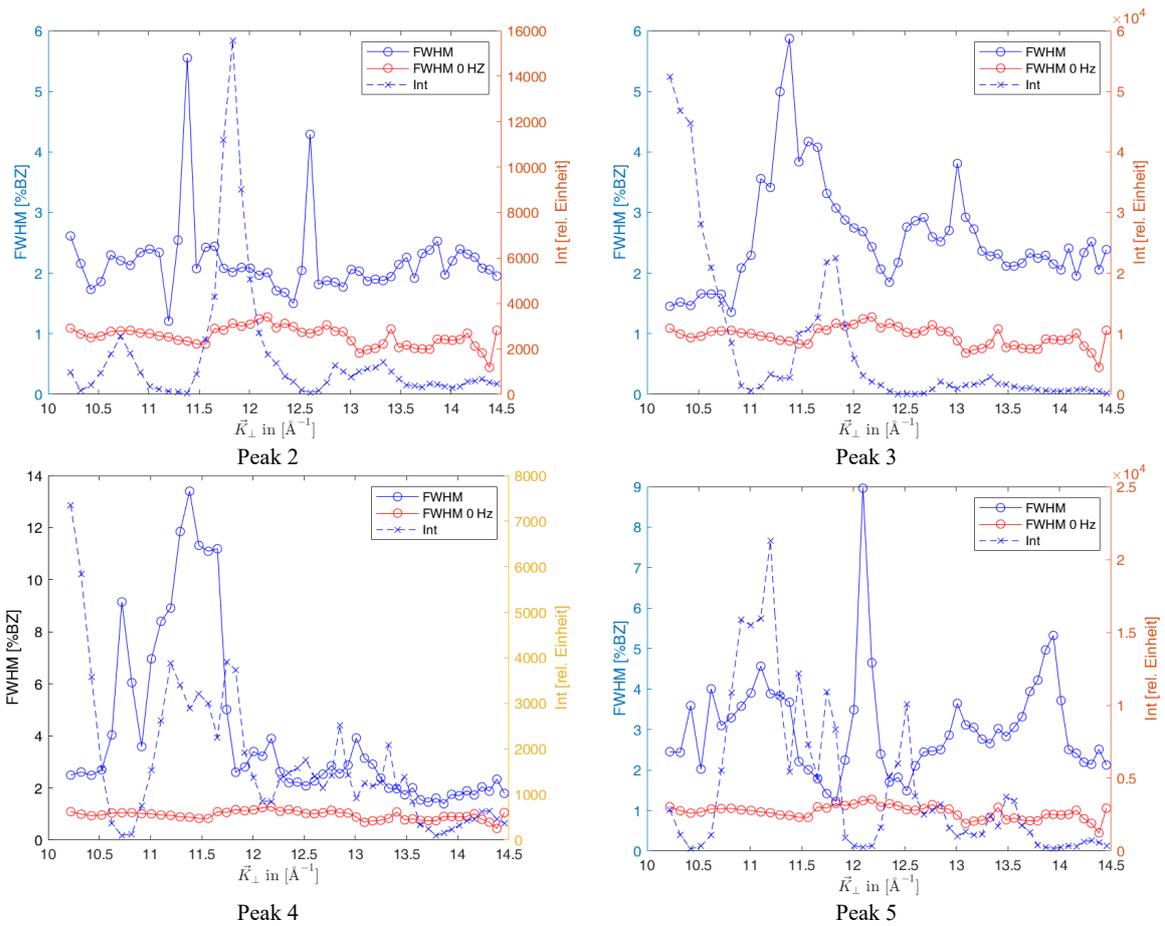
- [13] U. Scheithauer, G. Meyer, and M. Henzler. A new LEED instrument for quantitative spot profile analysis. *Surface Science*, 178(1-3):441–451, 1986.
- [14] T. Röwekamp. Entwicklung einer Software für eine SPA-LEED-Oktolpolarsteuerung. Master’s thesis, Universität Osnabrück, 2013.
- [15] A. A. Saranin, A. V. Zotov, K. Oura, V. G. Lifshits, and M. Katayama. *Surface Science - An Introduction*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2003.
- [16] R. M. Feenstra and M. A. Lutz. Formation of the  $5\times 5$  reconstruction on cleaved Si(111) surfaces studied by scanning tunneling microscopy. *Physical Review B*, 42(8):5391–5394, 1990.
- [17] K. Ikawa and M. Sato. Step wandering on Si(111) vicinal face near the  $1\times 1\leftrightarrow 7\times 7$  transition temperature with drift of adatoms parallel to steps. *Physical Review E*, 77(6), 2008.
- [18] R. Fritsche. *Van der Waals-terminierte Silizium (111) Oberflächen und Grenzflächen*. PhD thesis, Technische Universität Darmstadt, 2005.
- [19] G.-X. Qian. Total-energy calculations on the Takayanagi model for the Si(111)  $7\times 7$  surface. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, 4(4):1079, 1986.
- [20] C. Battaglia, K. Gaál-Nagy, C. Monney, C. Didiot, E. F. Schwier, M. G. Garnier, G. Onida, and P. Aebi. New Structural Model for the Si(331)- $(12\times 1)$  Surface Reconstruction. *Physical Review Letters*, 102(6), 2009.
- [21] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi, and M. Takahashi. Structure analysis of Si(111)- $7\times 7$  reconstructed surface by transmission electron diffraction. *Surface Science*, 164(2-3):367–392, 1985.
- [22] W. Mönch. *Semiconductor Surfaces and Interfaces, 2ed.* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1995.
- [23] U. Krieg. 1d-plasmonen in Ag-nanodrähten auf vicinalem Si(557), 2014.
- [24] S. Hara, M. Yoshimura, and K. Ueda. Atomic Structure of Si(553) Surface Revealed by Scanning Tunneling Microscopy. *Japanese Journal of Applied Physics*, 47(7):6102–6104, 2008.
- [25] J. Wei, E. D. Williams, and R. L. Park. Low-energy electron diffraction study of the reconstruction and orientational stability of Si(331). *Surface Science*, 250(1-3):L368–L372, 1991.
- [26] J. Aulbach. *Gold-Induced Atomic Wires on Terraced Silicon Surfaces: Formation and Interactions of Silicon Spin Chains*. PhD thesis, Universität Würzburg, 2018.

- [27] A. K. S. Chauhan, A. Niazi, L. Nair, and G. Gupta. In-induced stable ordering of stepped Si(553) surface. *Applied Surface Science*, 337:145–150, 2015.
- [28] J. Aulbach, S. C. Erwin, R. Claessen, and J. Schäfer. Spin Chains and Electron Transfer at Stepped Silicon Surfaces. *Nano Letters*, 16(4):2698–2704, 2016.
- [29] D. Bruns, S. Gevers, and J. Wollschläger. Formation and morphology of step bunches during B-segregation on vicinal Si(111). *Surface Science*, 605(9-10):861–867, 2011.
- [30] S. C. Erwin, I. Barke, and F. J. Himpsel. Structure and energetics of Si(111)-(5×2)-Au. *Physical Review B*, 80(15), 2009.
- [31] S. G. Kwon and M. H. Kang. Identification of the Au Coverage and Structure of the Au/Si(111)-(5×2)Surface. *Physical Review Letters*, 113(8), 2014.
- [32] J. R. Ahn, P. G. Kang, K. D. Ryang, and H. W. Yeom. Coexistence of Two Different Peierls Distortions within an Atomic Scale Wire: Si(553)-Au. *Physical Review Letters*, 95(19), 2005.
- [33] I. Barke, F. Zheng, S. Bockenhauer, K. Sell, V. v. Oeynhausen, K. H. Meiwes-Broer, S. C. Erwin, and F. J. Himpsel. Coverage-dependent faceting of Au chains on Si(557). *Physical Review B*, 79(15), 2009.

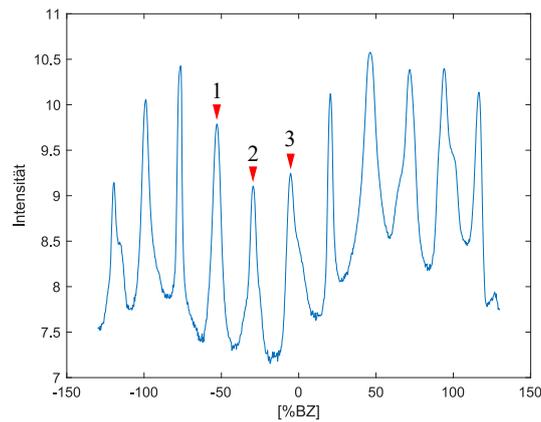
# A Anhang zu Abschnitt 5.3



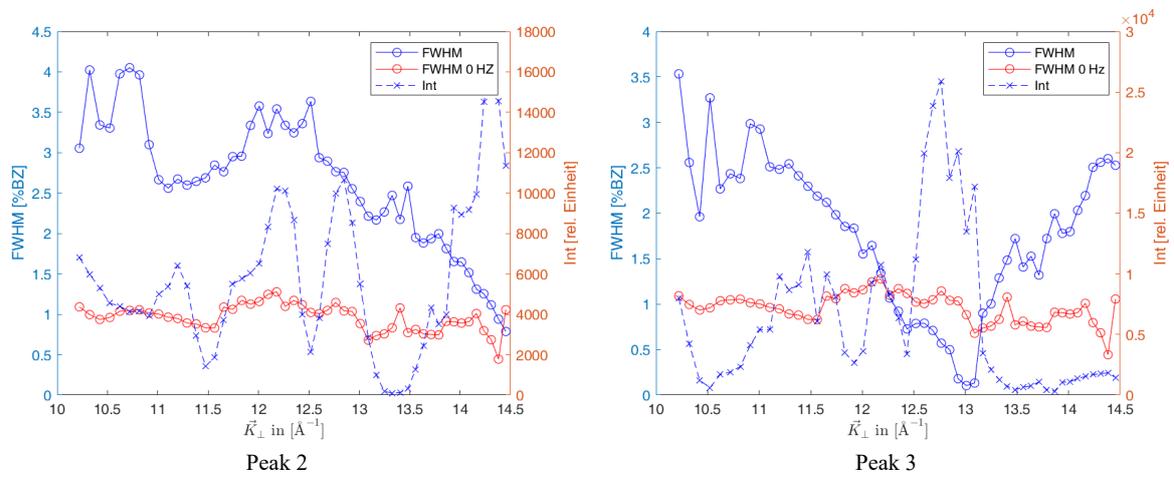
**Abbildung A.1** – Linescan bei 600 Hz Bedeckung und einer Aufdampftemperatur von 600°C, aufgenommen bei 100 eV Elektronenenergie. Markiert sind die in Abb. 5.11 und Abb. A.2 dargestellten Peaks.



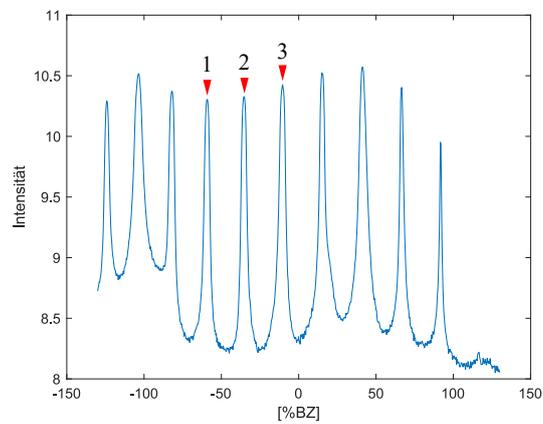
**Abbildung A.2** – FWHM und Intensität in Abhängigkeit der Energie der in Abb. A.1 und nicht in Abschnitt 5.3 gezeigten Peaks sowie die energieabhängige FWHM der unbedeckten Si(553)-Oberfläche.



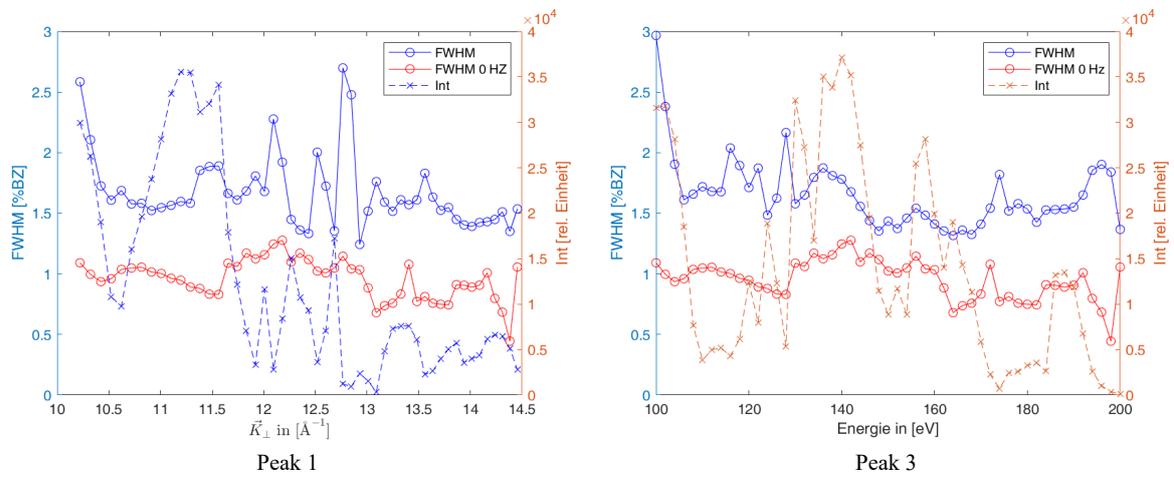
**Abbildung A.3** – Linescan bei 1600 Hz Bedeckung und einer Aufdampftemperatur von  $600^\circ\text{C}$ , aufgenommen bei 100 eV Elektronenenergie. Markiert sind die in Abb. 5.14 und Abb. A.4 dargestellten Peaks.



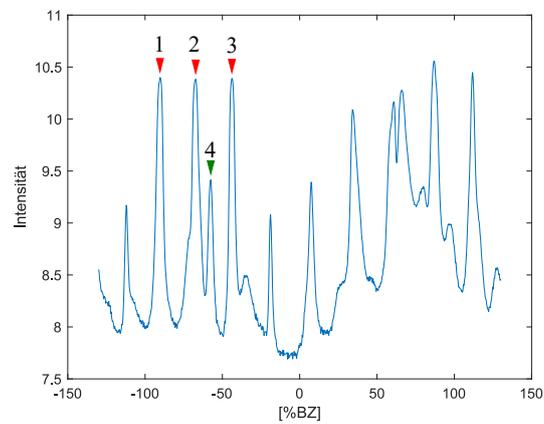
**Abbildung A.4** – FWHM und Intensität in Abhängigkeit der Energie der in Abb. A.3 und nicht in Abschnitt 5.3 gezeigten Peaks sowie die energieabhängige FWHM der unbedeckten Si(553)-Oberfläche.



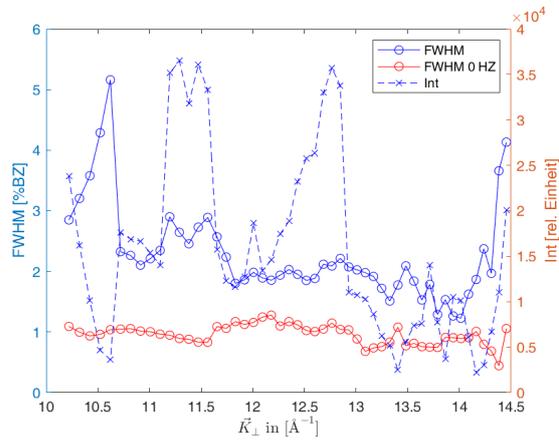
**Abbildung A.5** – Linescan bei 1800 Hz Bedeckung und einer Aufdampfptemperatur von  $600^{\circ}\text{C}$ , aufgenommen bei 100 eV Elektronenenergie. Markiert sind die in Abb. 5.17 und Abb. A.6 dargestellten Peaks.



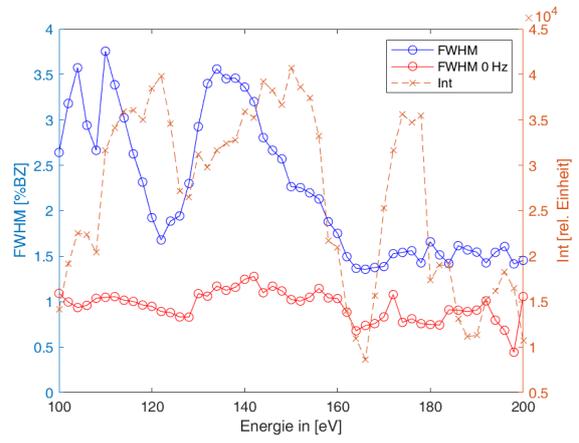
**Abbildung A.6** – FWHM und Intensität in Abhängigkeit der Energie der in Abb. A.5 und nicht in Abschnitt 5.3 gezeigten Peaks sowie die energieabhängige FWHM der unbedeckten Si(553)-Oberfläche.



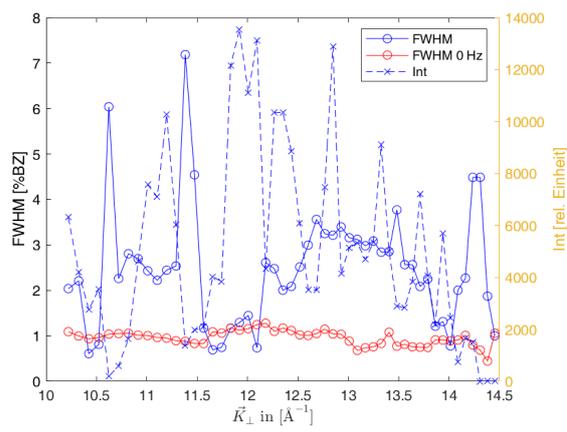
**Abbildung A.7** – Linescan bei 2000 Hz Bedeckung und einer Aufdampfptemperatur von 800°C, aufgenommen bei 120 eV Elektronenenergie. Markiert sind die in Abb. 5.24 und Abb. A.8 dargestellten Peaks.



Peak 1



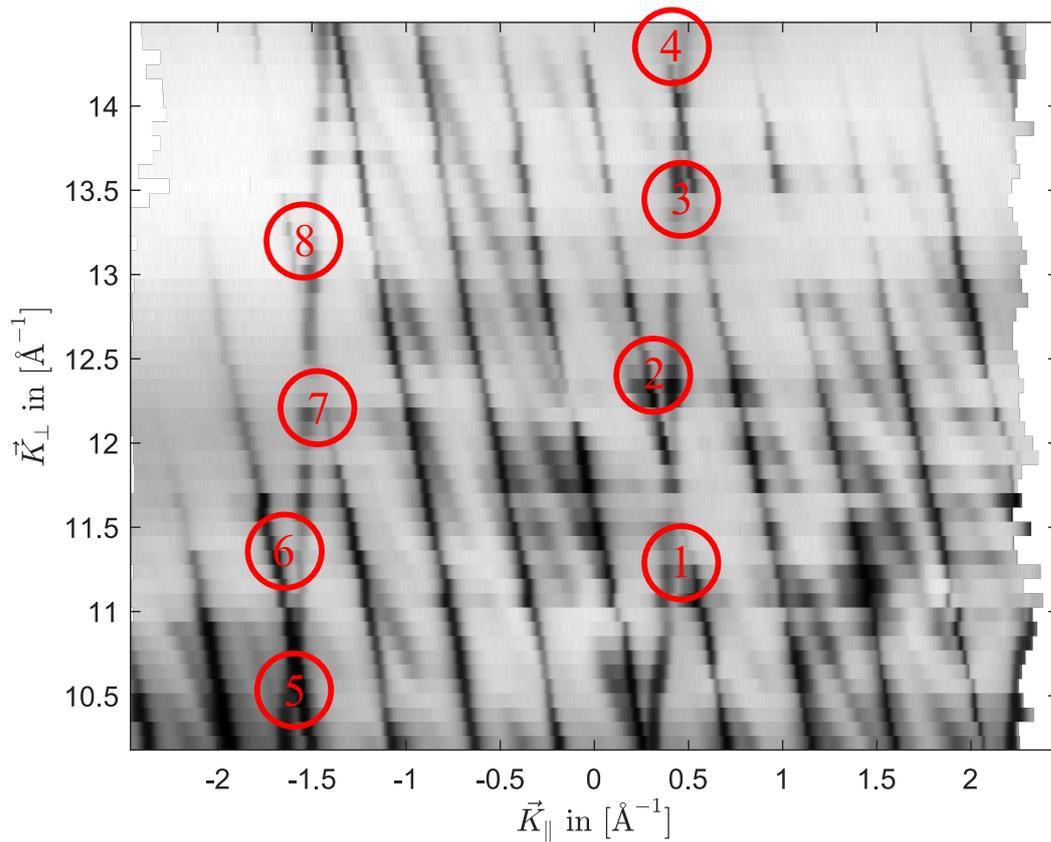
Peak 3



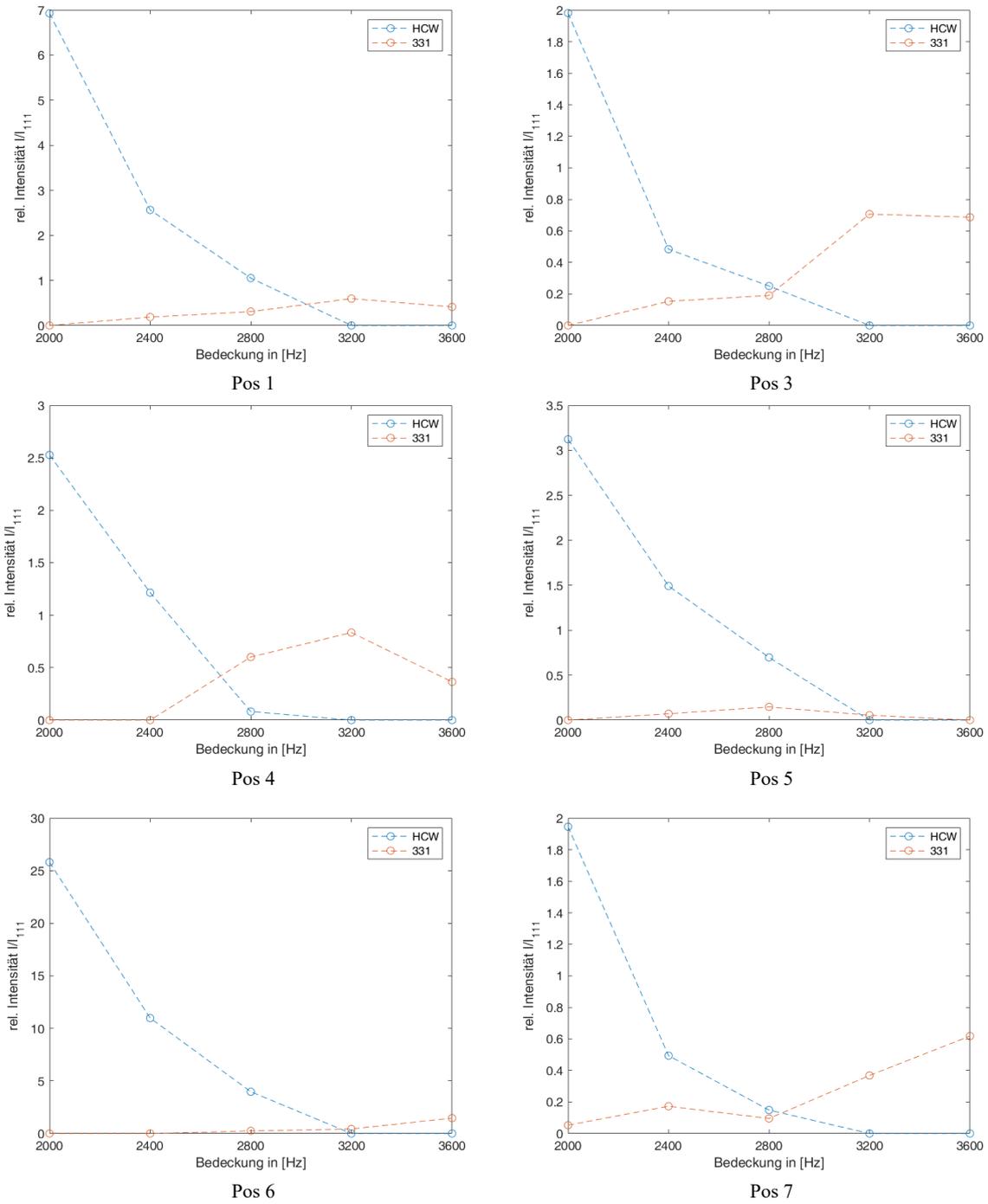
Peak 4

**Abbildung A.8** – FWHM und Intensität in Abhängigkeit der Energie der in Abb. ?? und nicht in Abschnitt 5.3 gezeigten Peaks sowie die energieabhängige FWHM der unbedeckten Si(553)-Oberfläche.

## B Anhang zu Abschnitt 5.5



**Abbildung B.1** – RSM aufgenommen bei 2400 Hz Bedeckung und 600°C Aufdampf-temperatur. Markiert sind Positionen, an denen Intensitäten der verschiedenen Reflexe in Abhängigkeit der Bedeckung bestimmt worden sind.



**Abbildung B.2** – Intensität des HCW- und des (331)-Facetten-Reflexes in Abhängigkeit der Bedeckung, jeweils normiert auf die Intensität des Reflexes der (111)-Facette für verschiedene in Abb. B.1 gezeigte Positionen.

## **Danksagung**

Zuerst möchte ich Prof. Dr. Joachim Wollschläger danken für die Möglichkeit, meine Masterarbeit in seiner Arbeitsgruppe zu schreiben und für viele fruchtbare Diskussionen während dieser Zeit.

Dann möchte ich Jascha Bahlmann für die Betreuung während der Masterarbeit danken, für tatkräftige Unterstützung im und außerhalb des Labors.

Außerdem danke ich Prof. Dr. Simone Sanna dafür, dass er sich für diese Arbeit als Zweitprüfer zur Verfügung gestellt hat und dafür, dass er die Untersuchung des Systems Si(553)-Au in unserer Arbeitsgruppe überhaupt erst angeregt hat.

## **Eidesstattliche Versicherung**

Hiermit versichere ich, die vorliegende Masterarbeit selbstständig, ohne fremde Hilfe und ohne Benutzung anderer als der von mir angegebenen Quellen angefertigt zu haben. Alle aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche gekennzeichnet. Die Arbeit wurde noch keiner Prüfungsbehörde in gleicher oder ähnlicher Form vorgelegt.

Osnabrück, den 17. August 2020