

# SPA-LEED-Untersuchungen an epitaktischen Terbium-Silizid-Schichten auf Silizium(111)und Silizium(557)-Oberflächen

Master-Arbeit vorgelegt im Rahmen der Prüfung für den Master-Studiengang Physik

# Autor: Waldemar Schreiber

Matrikelnummer: 953179 Erstprüfender: Prof. Dr. rer. nat. Joachim Wollschläger Zweitprüfender: Prof. Dr. rer. nat. Christoph Tegenkamp Osnabrück, den 16. Februar 2017

# Inhaltsverzeichnis

1	Einlei	tung	1
2	Theo 2.1 2.2 2.3	retische GrundlagenDer Reziproke Raum	3 3 4 4 5 8 8 10 11
	2.4	Auger-Elektronenspektroskopie (AES)	13 13 14
3	Mate 3.1	rialsystem Terbium	20 20 20
	3.2	Silizium	21 22 23
4	Exper 4.1 4.2 4.3 4.4 4.5	rimentelle Grundlagen UHV-Kammer	25 25 27 28 29 30
5	Erget 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5	<b>Denisse</b> Auswertung der AES-Spektren und Kalibrierung der AufdampfrateVoruntersuchungen zu Silizium(111)Hauptuntersuchungen zu Si(111)5.3.1Untersuchung der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe5.3.2Disskussion der Messergebnisse von Si(111)Untersuchung der Silizium(557)-OberflächeUntersuchungen der mit Terbium bedampften Silizium(557)5.5.1Diskussion der Messergebnisse von Si(557)	33 33 38 39 48 69 71 77 85
6	Zusai	nmenfassung und Ausblick	87

# 1 Einleitung

Bei verschiedenen Arten der Präparation, sowie Wahl der Orientierungen der verwendeten Si-Oberflächen, wurde das Wachstum verschiedener Nanostrukturen beobachtet [6]. Dabei geriet das epitaktische Wachstum von Seltenerd-Siliziden in den Fokus der Forschung [2,3,4,5]. Nicht zu vernachlässigen sind die technischen Anwendungen der Silizide der Lanthanoide. So wurden auf n-dotierten Silziumwafern die niedrigsten bekannten Schottky-Barrieren ermittelt [7]. Für p-dotierte Siliziumwafer ergab sich eine erhöhte Schottky-Barriere [7]. Je nach Dotierung sind demnach Ohmsche Kontakte mit kleinerer Kontaktfläche zwischen dem n-Si und dem Silizid, oder Infrarotdetektoren zu realisieren. Die in dieser Arbeit mit Hilfe von SPA-LEED durchgeführten Untersuchungen beziehen sich speziell auf eine mit Terbium bedeckte Si(111)-Oberfläche. Silizium(111) ist spätestens, seitdem 1985 TAKAYANAGI et al. das DAS-Modell vorgeschlagenen haben, verstärkt für Untersuchungen der Oberflächenstrukturen und -Rekonstruktionen benutzt worden. Den zweiten Teil der Untersuchungen bildet eine vizinale Variätet des Si(111), welche ebenfalls mit Terbium bedampft wird. Aufgrund der expliziten Untersuchung vieler Siliziumoberflächen verschiedener Orientierungen stellt Silizium einen hervorragenden Kandidaten dar, um vizinale Oberflächen herzustellen zu können [1]. Untersuchungen vizinaler Oberflächen finden aufgrund ihrer besonderen Eigenschaften bereits seit geraumer Zeit statt [1,8]. Eine dieser besonderen Eigenschaften stellen die Stufen der vizinalen Oberflächen dar. Insbesondere das Auftreten von sog. Nanodrähten ist ein entscheidender Unterschied im Gegensatz zu ungestuften Oberflächen. Nanodrähte bilden sich durch Selbstorganisation auf den Nanofacetten und besitzen Breiten weit unter denen, die mit herkömmlichen lithographischen Methoden zu realisieren sind [9]. Den metallischen Nanodrähten, deren Dicke, der eines einzelnen Atoms entspricht, wird ein besonderer Stellungswert zugerechnet [10]. Eine Anwendung in technischen Bauteilen ist von großem Interesse [10]. Eine dieser vizinalen Oberflächen stellt das Si(557) dar.

# 2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zum Verständnis dieser Arbeit notwendigen theoretischen Grundlagen behandelt, um die durchgeführten Experimente und deren Resultate zu verstehen.

## 2.1 Der Reziproke Raum

Die verwendete Untersuchungsmethode zur Untersuchung der Oberfläche ist das SPA-LEED, dabei handelt es sich um eine beugende Methode, bei der Teilchen auf eine kristalline Struktur treffen. Mathematisch handelt es sich hierbei näherungsweise um eine ebene Welle, die auf das Kristallgitter trifft [11]. Die Punkte mit hoher Beugungsintensität sind die möglichen Lösungen dieses Problems, der sog. Fourier-Raum des Kristallgitters [11]. Das Kristallgitter wird reziprok abgebildet, sodass

$$\vec{K}_i = \frac{\vec{g}_j \times \vec{g}_k}{\vec{g}_i \times \vec{g}_j \times \vec{g}_k},\tag{2.1}$$

mit den Einheitsvektoren des Kristallgitters  $\vec{g}_i \vec{g}_j, \vec{g}_k$ .

## 2.2 Kristallvolumen und Überstrukturen

Ein unendlich ausgedehnter Kristall besteht aus einer periodischen Anordnung von Einheitszellen. Aufgrund dieser Periodizität sind die physikalischen und chemischen Eigenschaften überall im Kristall identisch [12]. Besitzt der Kristall allerdings eine Oberfläche, so ändern sich dort seine physikalischen Eigenschaften. Es fehlen Bindungspartner und dadurch können Rekonstruktioen stattfinden, falls dies energetisch günstiger ist. Dieser Bereich ist einige Atomlagen groß. Die Ebene, ab der die physikalischen Eigenschaften denen eines unendlich ausgedehnten Kristalls entsprechen, gibt die Grenzfläche zum Volumen an [12]. Die Basis des Überstrukturgitters wird als Linearkombiantion der Basisvektoren des Substratgitters dargestellt. Sind  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  die Basisvektoren des Substratgitters, so ergibt sich für die Basisvektoren der Überstruktur:

$$\vec{b}_1 = j \cdot \vec{a}_1 + k \cdot \vec{a}_2, \tag{2.2}$$

$$b_2 = l \cdot \vec{a}_1 + m \cdot \vec{a}_2 \tag{2.3}$$

bzw. in Matrixschreibweise,

$$\begin{pmatrix} \vec{b}_1 \\ \vec{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & k \\ l & m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \end{pmatrix}.$$
(2.4)

Die Basisvektoren werden im Beugungsbild reziprok abgebildet. D. h. es erfolgt eine Skalierung und eine Drehung um  $\frac{\pi}{2}$  bei  $\vec{b}_1$  bzw. um  $-\frac{\pi}{2}$  bei  $\vec{b}_2$ . Für die reziproken Gittervektoren folgt:

$$\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{\det A} \begin{pmatrix} b_{22} \\ -b_{21} \end{pmatrix}, \qquad (2.5)$$

$$\vec{b}_2^* = \frac{2\pi}{\det A} \begin{pmatrix} -b_{12} \\ -b_{11} \end{pmatrix}$$
 (2.6)

 $\operatorname{mit}$ 

$$\mathbf{A} = (b_{ij}) = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{21} \\ b_{12} & b_{22} \end{bmatrix}.$$
 (2.7)

# 2.3 Low Energy Electron Diffraction (LEED)

LEED ist eine Standarduntersuchungsmethode, in der mit Hilfe von niederenergetischen Elektronen, Oberflächenstrukturen und -bindungen untersucht werden können. Die Stärke des LEED, liegt in der geringen inelastischen freien Weglänge niederenergetischer Elektronen in Festkörpern [13]. Das Einsatzgebiet beschränkt sich im Regelfall auf sich im Ultrahochvakuum befindliche, saubere Einkristalle von Metallen und Halbleitern [13].

#### 2.3.1 Die Entwicklung des LEED

LEED wurde 1924 bei der Untersuchung von Sekundärelektronen, die durch Beschuss eines Nickelkristalls mit monoenergetischen Elektronen emittiert wurden, zufällig von DAVISSON und KUNSMAN entdeckt [13,14,15]. Unter Einbeziehung der DEBROGLIE-Wellenlänge gelang es ELSASSER 1926 die Beziehung

$$\lambda = \frac{h}{p} \approx \sqrt{\frac{150eV}{V}} \mathring{A}$$
(2.8)

herzuleiten. Wobei mit h das PLANCKsche Wirkungsquantum und mit p der Impuls gekennzeichnet sind. V ist die Beschleunigungsspannung in Elektronenvolt und  $V \leq 1$  keV. Somit ergibt sich für ein Elektron mit der kinetischen Energie  $E_{kin} = 150$  eV eine DEBROGLIE-Wellenlände  $\lambda \approx 1$  Å. Dies liegt in der Größenordnung des Lagenabstands benachbarter Atome in Festkörpern. 1927 fanden DAVISSON und GERMER [15], dass das Maximum der Intensität, der unter einem beliebigen Winkel elastisch gestreuten Elektronen, der Beziehung

$$n\lambda = a\sin\Theta \tag{2.9}$$

genügt. Hierbei ist  $\lambda$  durch Gl. 2.8 gegeben, *a* ist der Lagenabstand benachbarter Atome,  $\Theta$  der Einfallswinkel der Elektronen und  $n \in \mathbb{N}$  ist die Beugungsordnung. Aus der Kenntnis von  $\lambda$  und  $\Theta$  lassen sich direkt die Längen der Oberflächeneinheitszelle  $a_1$  und  $b_1$  berechnen [13].

#### 2.3.2 Kinematische Beugungstheorie

Aufgrund der starken COULOMB-Wechselwirkung der einfallenden Elektronen mit den Oberflächenatomen, werden die Elektronen im Festkörper mehrfach gestreut und unterliegen der dynamischen Beugungstheorie [16]. Neben zwei weiteren Beugungsexperimenten ist in Abb. 2.1 die Beugung mittels Elektronen abgebildet. Anhand der grau unterlegten Fläche ist die Eindringtiefe der verschiedenen Untersuchungsmethoden kenntlich gemacht.



Abbildung 2.1: Verschiedene Arten von Beugungsexperimeneten an einer Si(111)-Oberfläche. a) Röntgen-Strahlung, b) Elektronen und c) He-Atome. Der dunkelgrau unterlegte Bereich der Einheitszellen verdeutlicht die Eindringtiefe. Entnommen und angepasst aus [16].

Eine Vereinfachung dieser dynamischen Beugungstheorie stellt die kinematische Näherung dar. Hierbei wird angenommen, dass die Oberfläche periodisch aus Säuleneinheitszellen aufgebaut ist siehe Abb. 2.2. Die kinematische Näherung vernachlässigt seitliche Streuprozesse, während mehrfache Vorwärts- und Rückwertsstreuungsprozesse innerhalb einer Säuleneinheitszelle weiterhin berücksichtigt werden. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da die Amplitude, der atomar gestreuten Kugelwelle, winkelabhängig ist siehe Abb. 2.3. Streuprozesse finden überwiegend in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung statt [18]. Des Weiteren wird angenommen, dass die gestreuten Elektronen als ebene Wellen am Detektor ankommen. Diese Annahme wird durch die weitaus größere Entfernung zwischen der Elektronenquelle, der Probe und dem Detektor im Vergleich zur Wellenlänge der Elektronen  $\lambda_{e^-}$  gestützt und als FRAUNHOFER-Näherung bezeichnet. Eine ebene, an der 0-ten Säuleneinheitszelle, gestreute Welle am Ort  $\vec{r}$  kann als

$$\psi_0(\vec{k}_i, \vec{k}_f, \vec{r}) = f_0(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \cdot e^{i\vec{k}_f \vec{r}}$$
(2.10)

beschrieben werden. Dabei wird mit  $\vec{k_i}$  der einfallende Wellenvektor, mit  $\vec{k_f}$  der gestreute Wellenvektor und mit  $f_0$  der Formfaktor der 0-ten Säuleneinheitszelle bezeichnet. Betrachtet man die Streuung eines Elektrons an einer beliebigen Säuleneinheitszelle n an der Position  $\vec{r_n}$ , so führt eine Phasenverschiebung  $\Delta \phi = \vec{K} \cdot \vec{r_n}$ , mit  $\vec{K} = \vec{k_i} - \vec{k_f}$ , zu der allgemeinen Wellenfunktion:

$$\psi_n(\vec{k}_i, \vec{k}_f, \vec{r}_n) = e^{i\vec{k}_f \vec{r}} \cdot f_n(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \cdot e^{i\vec{K}\vec{r}_n}, \qquad (2.11)$$

mit  $f_n$  dem Formfaktor der *n*-ten Säuleneinheitszelle. Die Intensität ergibt sich als als das Absolutquadrat der Superposition der einzelnen Teilwellen

$$I(\vec{k}_{i}, \vec{k}_{f}, \vec{r}_{n}) = \frac{I_{0}}{N} \cdot \underbrace{\left| e^{i\vec{k}_{f}\vec{r}} \right|^{2}}_{=1} \cdot \left| \sum_{n=0}^{N} f_{n}(\vec{k}_{i}, \vec{k}_{f}) \cdot e^{i\vec{K}\vec{r}_{n}} \right|,$$
(2.12)



Abbildung 2.2: Die in der kinematischen Beugungstheorie gemachten Annahmen bzgl. der periodischen Struktur einer Oberfläche, basieren auf Säuleneinheitszellen, die sich auf der Volumenstruktur befinden. Dabei handelt es sich in a) um eine ideale Oberfläche, in b) und eine gestufte Oberfläche und in c) um eine Überstruktur. Entnommen und angepasst aus [17].

wobei N der Anzahl der Säuleneinheitszellen entspricht. Unter der Annahme gleicher Säuleneinheitszellen und dem selben Formfaktor ( $f_n = f_0$ ), ergibt sich vereinfachend für die Intensität:

$$I(\vec{k}_{i}, \vec{k}_{f}, \vec{r}_{n}) = \frac{I_{0}}{N} \cdot \left| \underbrace{f_{0}(\vec{k}_{i}, \vec{k}_{f})}_{F} \right|^{2} \cdot \left| \underbrace{\sum_{n=0}^{N} e^{i\vec{K}\vec{r}_{n}}}_{G} \right|^{2}$$
(2.13)

$$\Rightarrow I(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \propto \left| F(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \right|^2 \cdot \left| G(\vec{K}) \right|^2.$$
(2.14)



**Abbildung 2.3:** Polarplot vom Absolutquadrat der atomar gestreuten Amplitude niederenergetischer Elektronen, gestreut an Platin. Entnommen und angepasst aus [18].

F ist der dynamische Strukturfaktor einer Säuleneinheitszelle und somit aufgrund der kinematischen Näherung für alle Säuleneinheitszellen gleich. Der Gitterfaktor G enthält Informationen über die Periodizität der Säuleneinheitszellen, sowie über Position und Form der gebeugten Intensität. Insbesondere kann dieser zur Untersuchung der Kristallstruktur und der Morphologie der Probenoberfläche verwendet werden [17]. Die Absolutwerte der gebeugten Intensität werden hingegen durch F bestimmt, insbesondere den mehrfachen Streuprozessen wird dadurch Rechnung getragen. Wegen der nicht hinreichenden Beschreibung der Mehrfachstreuung durch die kinematische Beugungstheorie, wird stattdessen dem Gitterfaktor G besondere Aufmerksamkeit gewidmet. Dieser ergibt sich zu:

$$\left|G(\vec{K})\right|^{2} = G(\vec{K})G(\vec{K})^{*} = \sum_{n} \sum_{m} e^{i\vec{K}\vec{r}_{n}} e^{-i\vec{K}\vec{r}_{m}} = \sum_{n,m} e^{i\vec{K}(\vec{r}_{n}-\vec{r}_{m})},$$
(2.15)

wobei sich die Streuzentren an den Gitterpositionen

$$\vec{r}_n = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + (n_1, n_2) \vec{d} \tag{2.16}$$

befinden und somit für  $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$  gilt [19]. Dabei sind  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  die Oberflächengittervektoren und  $\vec{d}$  ein zur Oberfläche senkrecht stehender Vektor, dessen Länge dem Lagenabstand entspricht. Im Falle einer idealen ungestuften Oberfläche, vereinfacht sich Gl. 2.16 und die Positionen der Streuzentren liegen bei

$$\vec{r}_{n.ideal} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b}.$$
(2.17)

Der Streuvektor  $\vec{K}$  kann in seinen zur Oberfläche senkrechten und parallelen Anteil  $\vec{K} = \vec{k}_{\perp} + \vec{k}_{\parallel}$  separiert werden. Für eine ideale Oberfläche ohne Stufen, ist  $\vec{k}_{\perp}$  aufgrund der LAUE-Bedingung für konstruktive Interferenz, beliebig wählbar [20]. Damit ergibt sich  $\vec{K}$  zu  $\vec{K} = \vec{k}_{\parallel}$ . Folglich kann Gl. 2.15, zu

$$\left|g(\vec{K})\right|_{ideal}^{2} = \sum_{n} e^{i\vec{k}_{\parallel}\vec{r}_{n,ideal}} = \sum_{n1,n2} e^{i\vec{k}_{\parallel}(n_{1}\vec{a}+n_{2}\vec{b})},$$
(2.18)

vereinfacht werden. Die LAUE-Gleichungen besagen, dass sich das Skalarprodukt aus den primitiven Einheitsvektoren des Realraums und des reziproken Raums zu

$$\vec{a} \cdot \vec{k}_{\parallel} = 2\pi h \tag{2.19}$$

$$\vec{b} \cdot \vec{k}_{\parallel} = 2\pi k \tag{2.20}$$

ergibt [20], wobei h und k MILLER-Indizes sind, und ausgehend von Gl. 2.18 zu

$$\left|G(\vec{K})\right|_{ideal}^{2} = \sum_{n1,n2} e^{2\pi i (n_{1}h + n_{2}k)}$$
(2.21)

führen. Da  $n_1, n_2, h, k \in \mathbb{Z}$ , handelt es sich bei Gl. 2.21 um eine  $\delta$ -Verteilung der gebeugten Intensität. Das zu erwartende Beugungsmuster einer idealen Oberfläche wird durch diese  $\delta$ -Verteilung beschrieben.

### 2.3.3 Die Ewaldkonstruktion

Die Ewald-Konstruktion ist eine Veranschaulichung der LAUE-Bedingung  $\vec{k_i} - \vec{k_f} = \vec{G}$ für konstruktive Interferenz bei der Streuung am Kristallgitter [12]. Dabei ist wie bereits zuvor  $\vec{k_i}$  der Wellenvektor der einfallenden,  $\vec{k_f}$  der Wellenvektor der gestreuten Welle und  $\vec{G}$  der Gittervektor. Für den Gittervektor  $\vec{G}$  gilt  $\vec{G} = i\vec{a'} + j\vec{b'} + k\vec{c'}$ , wobei  $\vec{a'}, \vec{b'}, \vec{c'}$ die Basisvektoren des reziproken Kristallgitters und  $i, j, k \in \mathbb{Z}$  sind [12]. Für elastische Streuung am Kristallgitter muss die Bedingung  $|\vec{k_i}| = |\vec{k_f}|$  erfüllt sein. Eine Kugel mit dem Radius  $|\vec{k_i}| = |\vec{k_f}|$  zeigt erlaubte Reflexe auf, falls die Kugelschale die reziproken Gittervektoren schneidet. Abb. 2.4 links verdeutlicht eine EWALD-Konstruktion in zwei Dimensionen. Für den Fall einer Oberfläche ändert sich die EWALD-Kostruktion. Den Atomen an der Oberfläche stehen nur Bindungspartner in Richtung des Volumens zur Verfügung. Daraus resultiert ein viel größerer Abstand zum nächsten Streuzentrum als die Transferweite der Elektronen [12]. Die Reflexe im Beugungsbild rücken unendlich nah zusammen und es entstehen Beugungsstangen siehe Abb. 2.4 rechts.

### 2.3.4 Die modifizierte EWALD-Kugel

Bei einer SPA-LEED Apparatur wird während der Messung der Einfalls- und der Ausfallswinkel der Elektronen variiert, siehe Kap. 4.2. Dies hat zur Konsequenz, dass der Winkel zwischen dem einfallenden Wellenvektor  $\vec{k_i}$  und dem gestreuten Wellenvektor  $\vec{k_f}$ konstant bleibt. Im Gegensatz zum konventionellen LEED besitzt die EWALD-Kugel des SPA-LEED den Radius  $2|\vec{k_i}|$ . Einerseits wird dadurch ein größerer Bereich des reziproken Raums abgebildet und zugleich treten bei gleichen Energien wie beim LEED weniger Verzerrungen im Beugungsbild auf [21] vgl. Abb. 2.5.



Abbildung 2.4: EWALD-Kostruktion für ein kubisch primitives Kristallgitter links. Reziproke Beugungsstangen in der EWALD-Konstruktion an einer Oberfläche rechts. Dabei bezeichnet  $\vec{k}_i$  den unter einem Winkel  $\Theta$  einfallenden Wellenvektor und  $\vec{k}_f$ den Wellenvektor der gestreuten Welle.  $\vec{G}$  ist ein reziproker Gittervektor.  $a^*$  ist die reziproke Gitterkonstante. Entnommen und angepasst aus [12].



Abbildung 2.5: Die modifizierte EWALD-Kugel hat den Radius  $2|\vec{k}_i|$ . Anhand der gestrichelten Kreise ist deutlich zu erkennen, dass der Winkel  $\alpha$  zwischen dem einfallenden Wellenvektor  $\vec{k}_i$  und dem gestreuten Wellenvektor  $\vec{k}_f$  konstant bleibt. Um ihren Ursprung rotiert die Standard EWALD-Kugel. Die reziproken Stangen sind mit  $(0\bar{2}) - (03)$  gekennzeichnet. BRAGG-Punkte sind als graue Punkte zu erkennen. Entnommen und angepasst aus [21].

### 2.3.5 Die Streuphase

Im Experiment existieren keine idealen Oberflächen. So treten bei der Untersuchung von Probenoberflächen mit Hilfe von Elektronenbeugung Interferenzen unter den Elektronenwellen auf [17]. Die Streuphase gibt darüber Auskunft wann konstruktive bzw. destruktive Interferenz auftritt. Sie beschreibt den Gangunterschied in Einheiten der Elektronwellenlänge und ist dimensionslos [21].



Abbildung 2.6: Die Streuung zweier unter dem Winkel  $\Theta$  einfallender Elektronenwellen der DE-BROGLIE-Wellenlänge  $\lambda$  an einer Stufenkante, resultiert in einem Gangunterschied  $\Delta g$ . Der Lagenabstand ist mit d gekennzeichnet. Entnommen und angepasst aus [21].

Der Gangnunterschied zweier gestreuter Elektronenwellen  $\Delta g$ , ergibt sich mit Hilfe der BRAGG-Bedingung zu:

$$\Delta g = S\lambda_{\rm el} = 2d\cos\Theta. \tag{2.22}$$

Hierbei beschreibt  $\Theta$  den Einfallswinkel und d den Lagenabstand. Unter der Kenntnis des Betrags des Wellenvektors  $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$  und seines senkrechten Anteils  $\vec{k}_{\perp} = 2|\vec{k}|\cos\Theta$ , lässt sich die Streuphase S mit Hilfe der Gl. 2.22 angeben und lautet:

$$S = \frac{|\vec{k}_{\perp}|d}{2\pi}.$$
(2.23)

Hinsichtlich des Experiments besteht die größte Einflussnahme auf das Beugungsbild in der Variation der Elektronenenergie [17]. Der Zusammenhang zur Streuphase kann mit Hilfe der DE-BROGLIE-Wellenlänge  $\lambda = 2\pi\hbar/\sqrt{2m_{\rm e}E}$  hergestellt werden. Gl. 2.22 ergibt sich somit zu:

$$S = \frac{d\cos\Theta\sqrt{2m_{\rm e}E}}{\pi\hbar}.$$
(2.24)

Dabei ergeben sich für ganzzahlige Werte von S Intensitätsmaxima durch konstruktive Interferenz bzw. bei halbzahligen Werten von S Intensitätsminima, durch destruktive Interferenz.

#### 2.3.6 Die Morphologie der Oberfläche

Anhand von Reciprocal Space Maps (RSM), lassen sich Aussagen über die Morphologie der Oberfläche treffen. Reciprocal Space Maps entstehen, indem Messungen einer bestimmten Richtung (Linescan) bei verschiedenen Streuvektoren  $\vec{k}_{\perp}$  durchgeführt werden. Die Variation des Streuvektors  $\vec{k}_{\perp}$  erfolgt über die Elektronenenergie vgl. Gl. 2.23 bzw. Gl. 2.24. Abb. 2.7 verdeutlicht den Zusammenhang zwischen den Messgrößen einer RSM und dem Realraum. Weiterhin lassen sich auch bspw. amorphe Strukturen im periodischen Verbund des Substrats siehe 2.8 a) und Adsorbatinseln siehe Abb. 2.8 b), sowie auch Facetten und Vizinalitäten siehe Abb. 2.8 c) - d) auf bzw. in der Oberfläche nachweisen. Generell kann eine gestufte Fläche mathematisch als Faltung der Einheitszelle der Oberfläche *a* mit einer Kammfunktion der Periodizität  $m \cdot a$  angesehen werden [11]. Aus dem Faltungstheorem

$$F(f * g) \propto (Ff) \cdot (Fg) \tag{2.25}$$

folgt für den reziproken Raum, der die Fouriertransformierte der Oberfläche ist, dass dieser aus der Multiplikation der beiden einzelnen Fouriertransformierten besteht [11].



Abbildung 2.7: Modell des reziproken Raums unter der Annahme einer gestuften Oberfläche. Da die RSM die Fouriertransformierte der Oberfläche ist, werden sämtliche Größen reziprok abgebildet. Entnommen und angepasst aus [11].



Abbildung 2.8: a) Beugungsbild einer teilweise aus amorphen Strukturen aufgebauten Oberfläche. Die Beugungsreflexe erscheinen verwischt. b) Beugungsbild besitzt zusätzliche Beugungsreflexe aufgrund von Adsorbatinseln ungleicher Einheitszellengrösse als die des Substrats. c) RSM einer vicinalen Oberfläche. Das Profil der Beugungsstangen ändert sich in Abhängigkeit vom Streuvektor  $\vec{k}_{\perp}$ . Die periodische Stufenfolge spiegelt sich in der Verkippung der Beugungsstangen wieder.  $\Gamma$  bezeichnet die Terrassenbreite. d) Beugung an einer facettierten Oberfläche. Eine Verschiebung der Beugungsreflexe in Abhängigkeit des Streuvektors  $\vec{k}_{\perp}$  ist ebenfalls zu erkennen. Entsprechend der Neigung der Beugungsstangen lassen sich die Winkel der Facetten bestimmen. Die Orientierungen der Facetten sind mit MILLER-Indizes (*hkl*) gekennzeichnet, die Streuphase ist mit *S* angegeben. Entnommen und angepasst aus [21].

## 2.4 Auger-Elektronenspektroskopie (AES)

Die Auger-Elektronenspektroskopie ist eine Untersuchungsmethode zur Feststellung der chemischen Zusammensetzung einer Oberfläche. Dabei wird der AUGER-Effekt ausgenutzt. Beim Beschuss einer Probe durch Elektronen, deren kinetische Energie üblicherweise bei 1 - 10 keV liegt, wird eine durch die Austrittstiefe der AUGER-Elektronen gegebene Informationstiefe von 1 - 10 nm ermöglicht siehe Abb. 2.9 [22].



**Abbildung 2.9:** Schematische Darstellung über die Verteilung von Primär-Rückstreu- und AUGER-Elektronen, sowie der Röntgenstrahlen beim Beschuss einer Oberfläche mit Elektronen. Entnommen und angepasst aus [23].

### 2.4.1 Der AUGER-Effekt

Der AUGER-Effekt tritt bei allen Elementen mit einer höheren Ordnungszahl als der des Helium beoabachtet auf. Die AUGER-Elektronen entstehen durch ein Primärelektron, welches ein Elektron ionisiert, dass sich auf den inneren Schalen befindet. Das ionisierte Elektron wird dabei von einem Elektron aus energetisch höheren Schalen ersetzt. Dabei wird die frei werdende Energie in Form eines Röntgenquants mit der Energie  $h\nu_F$ (Röntgenfluoreszenz) abgestrahlt oder die Energie wird innerhalb des Atoms auf ein drittes Elektron übertragen. Dieses Elektron verlässt das Atom als sogenanntes AUGER-Elektron [22]. Die Wahrscheinlichkeit der Emission eines AUGER-Elektrons sinkt mit steigender Ordnungszahl, wohingegen die Wahrscheinlichkeit der Erzeugung eines Röntgenquants mit der Ordnungszahl ansteigt. Die kinetische Energie eines AUGER-Elektrons ergibt sich, aufgrund der an diesem Prozess beteiligten 3 Atomschalen, beispielsweise für ein  $KL_1L_{2,3}$ -AUGER-Elektron, zu:

$$E_{kin} = (E_K - E_{L_1}) - E_{L_{2,3}} - \Phi.$$
(2.26)

Dabei bezeichnet  $E_K$  die Energie des ionisierten Elektrons vor seiner Ionisierung auf der K-Schale,  $E_{L_1}$  die Energie des nachrückenden Elektrons auf der  $L_1$  Schale vor dem Nachrücken und  $E_{L_{2,3}}$  die Energie des Elektrons ist, welches als AUGER-Elektron



Abbildung 2.10: Schematische Darstellung des AUGER-Effekts. Dabei bezeichnen K und L die Elektronenschalen mit deren Energien  $E_L$  und  $E_K$ , sowie der Austrittsarbeit  $\Phi$ . Entnommen und angepasst aus [22].

emittiert wird, sich zu beginn aber auf der  $L_{2,3}$  Schale aufhält. Die Austrittsarbeit ist mit  $\Phi$  gekennzeichnet.

Die von der Probenoberfläche emittierten Sekundärelektronen besitzen kinetische Energien zwischen 0 eV und der Primärenergie. Unter der Vielzahl der auftretenden Energien, besitzt ein solches Spektrum Peaks, deren Energie charakteristisch für das untersuchte Probenmaterial ist siehe Abb. 2.10. Ein AES-Spektrum deckt typischerweise das Energieintervall von 20 - 1000 eV ab, ungeachtet dessen, dass die Primärenergie mehrere keV hoch sein kann. Laut [13] treten neben den charakteristischen Peaks, auch Peaks verursacht durch elastisch gestreute Elektronen, Verlustelektronen und durch Plasmonen auf vgl. Abb. 2.11. Bei Plasmonen handelt es sich um eine Ladungsdichtewelle, die sich in einem Elektronengas ausbreitet [16]. Eine bessere Darstellung der charakteristischen Peaks wird durch die Differentiation der erhaltenen Messdaten erreicht siehe Abb. 2.12.

#### 2.4.2 Quantitative Auger-Analyse

Der Strom eines AUGER-Elektrons der Energie  $E_{XYZ}$  eines bestimmten Elements A ergibt sich nach [27] zu:

$$I_{XYZ} = I_0 \rho \gamma_{XYZ} \sigma(E_{\rm p}, E_X) \{1 + r_{\rm M}(E_X, \alpha)\} T(E_{XYZ}) D(E_{XYZ})$$
$$\int_0^\infty N_A(z) \exp\left\{\frac{-z}{\lambda_{\rm M}} \cos\Theta\right\} {\rm d}z.$$
(2.27)

Wobei  $\rho$  den Oberflächenrauhigkeitsfaktor,  $\gamma_{XYZ}$  die Wahrscheinlichkeit eines AUGER-Übergangs der Reihenfolge XYZ, und  $\sigma$  den Wirkungsquerschnitt der Ionisation eines Kernniveaus mit der Bindungsenergie  $E_X$  durch ein Primärelektron der Energie  $E_p$  angibt.



Abbildung 2.11: Schematische Darstellung eines AUGER-Spektrums. Dargestellt sind wesentliche Merkmale bzw. Anteile. Gestrichelte Linien verdeutlichen die drei Hauptanteile des Hintergrunds bestehend aus den inelastisch gestreuten Primärelektronen, den Sekundärelektronen und dem AUGER-Schweif [24]. Entnommen und angepasst aus [25].



Abbildung 2.12: Differenziertes AUGER-Spektrum von Rhenium, aufgenommen bei einer Primärenergie  $E_p = 3$  keV. Zusätzlich angegebenen sind Energiewerte für einige Rh(MNN)-Übergänge. Zur Verdeutlichung der Peak-to-Peak Intensität  $I^H$ wurde der Rh(MNN)-Übergang bei 161 eV gewählt. Entnommen und angepasst aus [26].

Der Rückstreufaktor  $r_{\rm M}$ , berücksichtigt die zusätzliche Ionisation des Kernniveaus mit der Energie  $E_X$  in der Matrix M durch inelastisch gestreute Elektronen der Energien zwischen  $E_X$  und  $E_p$ . Der Winkel zwischen der Oberflächennormalen und dem einfallenden Elektronenstrahl wird durch  $\alpha$  gekennzeichnet. Der Faktor T berücksichtigt die Transmission des Spektrometers für Elektronen der Energie  $E_{XYZ}$  und D die Effizienz des Detektors bei der Energie  $E_{XYZ}$ . Die Verteilung der Atome vom Typ A bei einer Tiefe z wird durch  $N_{\rm A}(z)$  berücksichtigt. Die inelastische freie Weglänge der Elektronen der Energie  $E_{XYZ}$  in der Matrix M ist mit  $\lambda_{\rm M}$  und der Winkel der Emission in Bezug zur Oberflächennormalen mit  $\Theta$  angegeben.

Für den Fall, dass der Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  bekannt ist, wäre die direkte Verwendung in Gl. 2.27 möglich. Im Regelfall ist dies jedoch nicht möglich und der Gebrauch einer Approximation von  $\sigma$  ist unabdingbar. Die nach [27] bisher beste, mit den experimentellen Messergebnissen, übereinstimmende Approximation wird als GRYZINSKI's Wirkungsquerschnitt [28] bezeichnet und ergibt sich zu:

$$\sigma(E_{\rm p}, E_X) = \frac{\pi e^4 K_X}{E_X^2 U} \left(\frac{U-1}{U+1}\right)^{3/2} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2U}\right) \ln(2.7 + \sqrt{U-1}) \right\}.$$
 (2.28)

 $K_X$  gibt die Anzahl der Elektronen in der X-Schale an und U die Überspannung  $U = E_p/E_X$ . Ein Ausdruck für den Rückstreufaktor  $r_M$ , üblicherweise auch als  $R = (1 + r_M)$  angegeben, wurde von Reuter [29] durch Electron Probe Microanalysis (EPMA) Messungen bei 20 keV ermittelt und lautet:

$$R = 1 + 2.8(1 - 0.9E_X/E_p)\eta.$$
(2.29)

Wobei  $\eta = -0.0254 + 0.016 \text{ Z} - 1.86 \cdot 10^{-4} \text{ Z}^2 + 8.3 \cdot 10^{-7} \text{ Z}^3$ , mit Z der Ordnungszahl. Allerdings wurden durch Monte Carlo Rechnungen des Rückstreukoeffizienten [30] passendere Ausdrücke in Zusammenhang zu den Gegebenheiten eines AES-Experiments, bei Energien unter 10 keV und variierenden Einfallswinkeln des Primärelektronenstrahls, ermittelt. Es ergeben ich für drei verschiedene Winkel Rückstreufaktoren

$$R = 1 + (2.34 - 2.1 Z^{0.14}) U^{-0.35} + (2.58 Z^{0.14} - 2.98) \qquad \text{für } \Psi = 0^{\circ} \qquad (2.30)$$

$$R = 1 + (0.462 - 0.777 \,\mathrm{Z}^{0.20}) U^{-0.32} + (1.15 \,\mathrm{Z}^{0.20} - 1.05) \qquad \text{für } \Psi = 30^{\circ} \qquad (2.31)$$

$$R = 1 + (1.21 - 1.39 \,\mathrm{Z}^{0.13}) U^{-0.33} + (1.94 \,\mathrm{Z}^{0.13} - 1.88) \qquad \text{für } \Psi = 45^{\circ}. \tag{2.32}$$

Des Weiteren ergibt sich nach [31] die inelastische freie Weglänge für Elemente zu:

$$\lambda_{\rm M} = 5.38E^{-2} + 0.41(aE)^{1/2} \,\text{Monolagen}, \tag{2.33}$$

wobei a die Dicke der Monolagen in nm ist. Da eine AES-Versuchsdurchführung an statische Einstellungen bzgl. des Arbeitsbereiches geknüpft ist kann Gl. 2.27 zu

$$I_{XYZ} = K\sigma R \int_{0}^{\infty} N_A \exp\left\{\frac{z}{\lambda}\cos\Theta\right\} dz$$
(2.34)

vereinfacht werden. Unter der Annahme, dass das Element Z in der untersuchten Tiefe z mit der durchschnittlichen Atomdichte  $\bar{N}_A$  homogen verteilt ist, lässt sich Gl.2.34 als

$$I_{XYZ} = K\sigma R \bar{N}_{\rm A} \lambda \cos \Theta \tag{2.35}$$

angeben, wobei K alle Terme beinhaltet, die während eines AES-Versuchsablaufs konstant sind, wobei der Emissionswinkel  $\Theta$  im Regelfall ebenfalls konstant ist. Unter der Verwendung einer Standard Atomdichte  $\bar{N}_{A}^{s}$ , lässt sich das Verhältnis der durchschnittlichen Atomdichte zur durchschnittlichen Standardatomdichte angeben

$$\bar{N}_{\rm A}/\bar{N}_{\rm A}^{\rm s} = \frac{I_{XYZ}R^{\rm s}\lambda^{\rm s}}{I_{XYZ}^{\rm s}R\lambda}$$
(2.36)

und durch den gleichen Wirkungsquerschnitt $\sigma$  beider Atome, vereinfacht sich Gl. 2.36 zu:

$$N = S_{\mathcal{A}} I_{XYZ},\tag{2.37}$$

wobei  $S_A$  als relativer Sensitivitätsfaktor bezeichnet wird und entweder mit Hilfe der Gleichungen 2.30, 2.31, 2.32 und 2.33 berechnet wird, oder empirisch herangezogen wird vgl. Abb. 2.13. Unter Verwendung von Gl. 2.37 ergibt sich die durchschnittliche Oberflächenkonzentration einer Probe, zusammengesetzt aus mehreren Elementen, zu:

$$\bar{C} = \bar{N}_i \left/ \sum_i \bar{N}_i \right. \tag{2.38}$$

Falls es nicht möglich ist sich auf eine Standardprobe zu beziehen, lässt sich die relative Konzentration eines Elements X als der Quotient der stoffspezifischen Parameter für das Element X und der Summation über alle weiteren enthaltenen Elemente der Probe angeben [32,33]:

$$C_X = \frac{I_X^H}{S_X d_X} \left/ \sum_{\alpha} \frac{I_{\alpha}^H}{S_{\alpha} s_{\alpha}} \right.$$
(2.39)



Abbildung 2.13: Relative AUGER-Sensitivitätsfaktoren  $S_X$  bei unterschiedlichen Elektronenübergängen in Abhängigkeit von der Ordnungszahl Z. Entnommen aus [32] und angepasst.

Im Vergleich zu Gl. 2.37 handelt es sich bei  $I_X^H$  bzw.  $I_\alpha^H$  um Peak-to-Peak Intensitäten der charakteristischen Signale des differenzierten Spektrums vgl. Abb. 5.1. Die Faktoren  $d_X$  bzw.  $d_\alpha$  sind u. a. Skalierungsfaktoren zur Berücksichtigung der Sensitivität des Lockin-Amplifieres. Zur Untersuchung lediglich zweier Elemente, wie der Terbiumschichten auf Silizium in den hiesigen Experimenten vereinfacht sich Gl. 2.39 und es ergibt sich

$$C = \frac{I_X S_Y}{I_X S_Y + I_Y S_X}.$$
(2.40)

Dabei Steht X bzw. Y für eines der beiden Elemente. Die AUGER-Elektronen-Spektroskopie fand ihre Anwendung zur Bestimmung der aufgedampften Menge Terbium auf Si(111) und Si(557) Oberflächen in dieser Arbeit. Laut [17] sind Annahmen zu treffen, bzgl. derer die theoretischen Erkenntnisse in Einklang mit den Messergebnissen gebracht werden können. Kann von einem homogenen Film F, bspw. bei Lage-für-Lage Wachstum, auf dem Substrat S ausgegangen werden, so kann die normierte Intensität  $I_{rel}$  [17,34] mit

$$I_{Frel} = \frac{I_F S_S}{I_F S_S + I_S S_F} = 1 - e^{-D/\lambda_F}$$
(2.41)

angegeben werden. Hierbei ist mit D die Schichtdicke und mit  $\lambda_F \approx \lambda_S = \lambda$  die inelastische freie Weglänge von Elektronen in Materie angegeben. Die inelastische freie Weglänge ist näherungsweise gleich für den Film und das Substrat. Umgekehrt gilt für die normierte relative Intensität des Substrats:

$$I_{Srel} = \frac{I_S S_F}{I_S S_F + I_F S_S} = e^{-D/\lambda_F}.$$
(2.42)

Die in dieser Arbeit durchgeführte Methode zur Messung der aufgedampften Menge an Terbium erfolgte mit Hilfe eines Schwingquartzes. Unter der Annahme eines Lage-für-Lage Wachstums des Terbiums resultiert die aufgedampfte Schichtdicke [17], in  $D = c \cdot \Delta f$ , wobei  $\Delta f$  die absolute Änderung der Frequenz des Schwingaquartzes während des Aufdampfvorgangs darstellt und c ein konstanter Faktor ist. Aus den Messungen der Peak-to-Peak Intensitäten für verschiedene Bedeckungen  $\Theta$  lässt sich somit der Faktor c ermitteln und somit auch die Angabe der Schichtdicke D.

# 3 Materialsystem

Der Kern dieser Masterarbeit bestand aus Untersuchungen ultradünner Schichten verschiedener Dicken. Die aufgedampften Schichten bestehen aus dem Element Terbium. Als Substrate dienten Si(111), sowie eine vizinale Varietät des Silizium, das Si(557).

# 3.1 Terbium

Terbium ist ein Lanthanoid mit der Ordnungszahl 65 und das achte Element der Yttrium-Gruppe [35]. Aufgrund seiner Elektronenkonfiguration [XE]  $4f^96s^2$  wird es zu den Yttererden gezählt, benannt nach dem schwedischen Ort Ytterby und übergeordnet zu den Seltenerdmetallen [36]. Bis zu einer Temperatur von 1315 °C liegt es als  $\alpha$ -Terbium mit einem hexagonalen (hcp) Kristallgitter vor. Oberhalb der genannten Temperatur geht es in  $\beta$ -Terbium über, bis es bei 1356 °C schmilzt.

### 3.1.1 Terbiumsilicid

Ab einer Bedeckung von 3 Monolagen Terbiumsilicid bildet sich eine  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur [7,45]. Dabei handelt es sich um ein Mehrschichsystem von Terbium und Silizium. Diese Überstruktur besitzt eine Stöchiometrie von Tb<sub>3</sub>Si<sub>5</sub> und ergibt sich aus der A1B<sub>2</sub>-Struktur durch das Hinzufügen von periodisch angeordneten Fehlstellen [7] siehe. Abb. 3.1.



# 3.2 Silizium

Silizium ist ein Element der vierten Hauptgruppe mit der Ordnungszahl 14. Es besitzt eine Diamantstruktur. Die Gitterkonstante beträgt 5.43 Å. Die Si(111)-Oberfläche besitzt im unrekonstruierten Zustand eine rhomboedrische Einheitszelle mit der Gitterkonstante a = 3.84 Å, siehe Abb. 3.2.

in

die



Abbildung 3.2: Einheitszelle des Silizium links. Unrekonstruierte Si(111)-Oberfläche rechts. Die kleineren Atome befinden sich in der zweiten Reihe. Die Oberflächeneinheitszelle ist rot gekennzeichnet. Entnommen und angepasst aus [17].

### 3.2.1 Silizium (111)

Ein besonders hoher Stellenwert kann Si(111) zugeschrieben werden. Seine Präparation mittels eines Hochtemperatur-Heizprozesses im Ultrahochvakuum (UHV) [37], resultiert bei Temperaturen zwischen 600 - 860 °C [38,39] in einer  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion. Überhalb einer Temperatur von 860 °C bildet sich eine  $(1 \times 1)$ -Struktur aus [39]. Bei niedrigen Temperaturen hingegen entsteht eine  $(5 \times 5)$ -Struktur [40]. Ein Modell der  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion ist in Abb. 3.3 dargestellt. Dieses von TAKAYANAGI *et al.* 1985 vorgeschlagene sog. DAS-Modell (Dimer-Adatom-Stacking-Fault), beschreibt eine Oberflächenelementarzelle, die aus insgesamt 9 Dimeren und 12 Atomen besteht. Eine Besonderheit der Oberflächeneinheitszelle besteht darin, dass sie aus einer gefalteten (faulted half) und einer ungefalteten (unfaulted half) Halbzelle besteht. Dabei sitzen die Silizium Adatome in der ungefalteten Halbzelle auf den regulären Gitterplätzen der Volumen-Kristallstruktur, die der gefalteten auf Plätzen die zu den regulären Gitterplätzen der Volumen-Kristallstruktur versetzt sind [37]. Es liegen insgesamt 19 freie Bindungen pro Oberflächeneinheitszelle vor, was im Gegensatz zur  $(1 \times 1)$ -Rekonstruktion mit 49 freien Bindungen eine deutliche Reduzierung der Oberflächenenergie nach sich zieht [37].



Abbildung 3.3: Die  $(7 \times 7)$ -rekonstruierte Oberflächeneinheitszelle der Si(111)-Oberfläche nach TAKAYANAGI *et al.* besteht im DAS-Modell (Dimer-Adatom-Stacking-Fault) aus 12 Si-Adatomen in oberster Reihe. Die Aufsicht ist im unteren Bild, die Seitenansicht im oberen Bild dargestellt. Die blauen gestrichelten Ellipsen kennzeichnen die Dimere der 3. Lage. Die horizontal gestrichelte Linie entspricht dem Seitenschnitt. Die blau unterlegte Hälfte besitzt einen Stapelfehler und wird als *faulted half* bezeichnet. Die Hälfte ohne Stapelfehler als *unfaulted half*. Dazwischen verläuft die Spiegelebene, verdeutlicht durch die vertikal gestrichelte Linie. Entnommen und angepasst aus [16]

### 3.2.2 Silizium (557)

Einen weiteren wichtigen Bestandteil dieser Arbeit bildet die Untersuchung einer zur Si(111) verkippten Oberfläche. Die Si(557)-Oberfläche entsteht dabei indem ein Siliziumkristall der [111]-Orientierung unter einem Winkel von 9.45° in Bezug zur [ $\overline{112}$ ]-Orientierung geschnitten wird [16], siehe Abb. 3.4. Es herrscht weiterhin Uneinigkeit über die tatsächliche Rekonstruktion der Si(557)-Oberfläche. Jedoch existieren zwei Modelle von *Oh et al.* [41] und *Teys et al.* [42]. Beide Modelle sind sich jedoch über eine Aufteilung der Oberflächeneinheitszelle in eine (111)-Terrasse und eine Dreifachstufe einig. Für die Struktur der Stufen gibt es ebenfalls zwei unterschiedliche Modelle. HENZ-LER *et al.* [43] berichten von einer (113)-Facette, wohingegen KIRAKOSIAN *et al.* [9] zu einer (112)-Facette kommen. Abb. 3.5 zeigt Schematisch eine von zwei vorgeschlagenen Rekonstruktionen der Si(557)-Oberfläche.



Abbildung 3.4: Schematische Darstellung eines Silizium Kristalls mit [111]-Orientierung. Die Si(557)-Oberfläche entsteht unter einem Schnittwinkel von  $9.45^{\circ}$  gegenüber der [ $\overline{112}$ ]-Richtung.



**Abbildung 3.5:** Die Si(557)-Einheitszelle ergibt sich aus 17 Oberflächeneinheitszellen des Silizium und ist 5.7 nm groß. Unter der Annahme von [112]-Facetten bestehen die Stufen aus  $2\frac{2}{3}$  Einheitszellen und sind 0.88 nm groß. Die grauen Punkte symbolisieren Silizium Atome. Entnommen und angepasst aus [16].

# 4 Experimentelle Grundlagen

Dieses Kapitel widmet sich den verwendeten Versuchsapparaturen sowie der Probenpräparation. Dabei wird zunächst die UHV-Kammer und deren Besonderheiten beschrieben, sowie Details zu den verschiedenen Pumpen genannt. Es werden wichtige Informationen in Bezug auf die verwendeten Messgeräte bereitgestellt. Dazu zählen die Verdampfer, sowie das AES- und das SPA-LEED-System. Anschließend wird dieses Kapitel mit einem Absatz zur sinnvollen Wahl der Maße der zu verwendenden Probe, sowie der erfolgreichen Präparation der Probe in der UHV-Kammer, beendet.

## 4.1 UHV-Kammer

Die Notwendigkeit eines Ultrahochvakuums besteht darin, die zu untersuchende Oberfläche über einen möglichst langen Zeitraum frei von Adsorbaten zu halten. Weiterhin sinkt das Risiko dass die zur Untersuchung verwendeten Elektronen des AES oder des SPA-LEED auf ihrem Weg zur Probenoberfläche mit Restgasatomen Wechselwirken [7]. Die notwendigen Bedingungen werden durch eine Ultrahochvakuumkammer geschaffen siehe Abb. 4.1 bzw. 4.2. Der Betriebsdruck beträgt bei der verwendeten UHV-Kammer  $2 \cdot 10^{-10}$  mbar. Um einen solchen Betriebsdruck zu erreichen steht eine Drehschiebereine Turbomolekular- sowie eine Ionengetterpumpe mit der zusätzlichen Funktion eines Titan Sublimators zur Verfügung. Die Hauptkammer erhält im abgeschotteten Modus ihren Betriebsdruck einzig mit Hilfe der Ionengetterpumpe. Ein sich auf der Hauptkammer befindliches Manipulationssystem wird mit Hilfe einer Drehschieberpumpe, sowie einer kleinen Ionengetterpumpe auf Betriebsdruck gehalten. Dieses Manpulationssystem besitzt 5 Freiheitsgrade und lässt Bewegungen in x-, y- und z-Richtung zu. Der vierte Freiheitsgrad wird durch eine Drehbewegung, um die z-Achse, ermöglicht. Ein weiterer Winkelfreiheitsgrad erlaubt es die Probe in Bezug zur z-Achse zu kippen, siehe Abb. 4.7. Ein vorhandenes Schleusen- bzw. Transfersystem, sorgt dafür, dass der Betriebsdruck beim Wechseln einer Probe erhalten bleibt. Es ist an eine Turbomolekularpumpe mit nachgeschalteter Drehschieberpumpe gekoppelt.



Abbildung 4.1: Horizontaler Schnitt der UHV-Versuchskammer. Die Probe kann je nach Bedarf so ausgerichtet werde, dass einer der Verdampfer, das SPA-LEED oder das AES benutzt werden kann. Die Temperatur Messung erfolgt durch ein Fenster mit Hilfe eines Pyrometers. Links oben ist das Transfersystem abgebildet.



Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der verwendeten UHV-Kammer. In der Mitte befindet sich die Hauptkammer mit den beiden Verdampfern, dem AES-Apparat und der SPA-LEED-Vorrichtung. Links davon das Schleusensystem mit Stabilisierungsstreben. Oberhalb der Hauptkammer befindet sich das Manipulationssystem mit seinen fünf Freiheitsgraden. Unterhalb der Kammer ist die Ionengetterpumpe befestigt. Nicht im Bild sind die Drehschieberpumpen, die Turbomolekularpumpe sowie die kleine Ionengetterpumpe der Drehdurchführung.

## 4.2 Aufbau einer SPA-LEED-Apparatur

Eine Weiterentwicklung und wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit stellt das SPA-LEED dar. Wie beim LEED auch werden zur Untersuchung von Oberflächen niederenergetische Elektronen verwendet, dadurch wird sichergestellt, dass die Eindringtiefe der Elektronen bei wenigen Ångström liegt. Ein weiterer Unterschied zum LEED besteht darin, dass beim SPA-LEED das vollständige Beugungsbild stückweise entsteht, d. h. es werden immer nur Elektronen eines bestimmten Beugungswinkels vom Detektor erfasst [12]. Dies geschieht indem der Einfalls- und Ausfallswinkel der Elektronen variiert wird. Weiterhin besteht die Möglichkeit Abbildungen des reziproken Raums durch Reciprocal Space Maps anzufertigen (RSM), indem Scans entlang bestimmter Richtungen angefertigt werden und Aussagen über die Morphologie der Oberfläche getroffen werden können vgl. Kap. 2.3.5 bzw. Kap. 2.3.6. Den auffälligsten Unterschied zum LEED stellt die Tatsache dar, das der (00)-Reflex im Beugungsbild betrachtet werden kann, der im Normalfall von der Elekronenkanone verdeckt wird oder nur unter einer Verkippung der Probe auf dem Fluoreszenzschirm zu sehen ist. Dies geht allerdings mit einer Verzerrung des Beugungsbildes einher [21].



Abbildung 4.3: Ein 2 dimensionales SPA-LEED Bild einer Si(111)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elektronenenergie von 96 eV. In der Mitte befindet sich der (00)-Reflex. Die Reflexe der (7x7) Einheitszelle sind mit gelben Kreisen dargestellt.

Die SPA-LEED Apparatur besteht unter anderem aus einer Elektronenkanone, welche senkrecht zu einem Schirm mit einem Gitter verbaut ist und einer Fokussierungslinse vor der Probe. Zum Nachweis der Elektronen dient ein Channeltron, welches auf der Sekundärelektronenemission basiert siehe Abb. 4.4. Die Variation des Einfalls- bzw. Ausfallswinkels findet mit Hilfe eines Widerstandsnetzwerks statt, indem eine Ablenkspannung in x- bzw. y-Richtung an die Platten eines Oktopols angelegt wird. Platten im vorderen bzw. hinteren Oktopol haben entsprechend entgegengesetzte Polarität [21]. Das Channeltron befindet sich in vertikaler Richtung in Reihe mit der Elektronenkanone, dadurch unterscheidet sich der Weg der Elektronen zur Probe nur unwesentlich von ihrem

Rückweg bis zu ihrem Ziel dem Channeltron. Bei dem benutzten Laborgerät handelt es sich um ein Leybold-SPA-LEED der zweiten Generation, mit der Möglichkeit Elektronen auf bis zu 500 eV zu beschleunigen.



Abbildung 4.4: Vertikaler Schnitt durch eine SPA-LEED Anordnung. Zu erkennen sind die Elektronenkanone, das zur Detektion der gestreuten Elektronen verwendete Channeltron sowie die elektrostatische Ablenkungseinheit, bestehend aus Oktopolplatten. Der Abstand zwischen Eingangslinse und Probe ist mit *d* gekennzeichnet. Die vom dunklen in das Hellgraue übergehende Schattierung zeigt das Potenzial des elektrostatischen Ablenkungsfeldes. Ein möglicher Weg des einfallenden Elektronenstrahls wird durch die geschlossene grüne Linie, der im Channeltron ankommenden Elektronen, durch eine gestrichelte grüne Linie verdeutlicht. Entnommen und angepasst aus [21].

# 4.3 Aufbau eines AUGER-Spektroskops

Die in der Abb. 4.5 abgebildete Darstellung zeigt einen schematischen Aufbau eines AES. Grundsätzlich befindet sich die zu untersuchende Probe, zusammen mit der Elektronenkanone, dem Cylindrical Mirror Analyzer (CMA bzw. Zylinderspiegelanalysator) und dem Detektor in einer UHV-Kammer [13]. Aus der Elektronenkanone austretende Primärelektoenen veranlassen die Probe zu der Emission weiterer Elektronen vgl. Abb. 2.9 sowie Kap. 2.4.1. Der Zylinderspiegelanalysator sorgt dafür, dass nur Elektronen eines bestimmten Energiebereichs am Detektor ankommen. Mit Hilfe eines Lock-in-Amplifiers wird, zur besseren Bestimmung charakteristischer Peaks, ein differenziertes Spektrum vgl. Abb. 2.12, auf dem Display angezeigt. Das benutzte AES-System stammt von Perkin-Elmer.



Abbildung 4.5: Schematische Darstellung eines AES-Aufbaus. Eine sich in der UHV-Kammer befindliche Probe wird durch Primärektronenbeschuss zur Aussendung von Sekundärelektronen veranlasst. Ein Cylindrical Mirror Analyzer, stufenlos über einen Spannungsregler einstellbar, sorgt dafür, dass nur Elektronen bestimmter Energie am Elektronenvervielfacher ankommen. Der detektierte Strom wird durch den Lockin Amplifier verstärkt und und als differentielle Verteilung dN/dE dargestellt [27]. Entnommen und angepasst aus [27].

## 4.4 Der Verdampfer

Das verwendete Verfahren zum Aufbringen des Terbiums auf Silizium(111) bzw. Silizium (557) nennt sich Physical Vapor Deposition (PVD). Es wird eine Spannung von 1 kV an einen Tantaltiegel angelegt, welcher sich im inneren eines Kupferkörpers des verwendeten Verdampfers befindet, siehe Abb. 4.6. Die aus dem Wolfram-Filament austretenden Elektronen werden aufgrund der Potetialdifferenz in Richtung des Tantaltiegels beschleunigt, wo sie ihre kinetische Energie in Form von Wärme abgeben. Hierbei wird Terbium erhitzt, bis es verdampft. Es entsteht ein kegelförmiger Strahl aus Terbiumatomen. Das Austreten des Strahls wird mit Hilfe eines Shutters gesteuert. Dieser ist drehbar gelagert und ermöglicht es die Öffnungen des Kupferkörpers zu verdecken siehe Abb. 4.6. Eine integrierte Wasserkühlung sorgt dafür, dass der Kupferkörper nicht zu heiß wird und somit den Druck unnötig ansteigen lässt. Ein neben der obersten Öffnung angebrachter Schwingquartz ermöglicht es die aufgedampfte Menge an Terbium zu bestimmen. Die Frequenzänderung des Schwingquartzes wird durch die SAUERBREY-Gleichung [17,44] beschrieben

$$\Delta f = -S_f \frac{\Delta m}{A},\tag{4.1}$$

Hierbei beschreibt  $S_f$  die SAUERBREY-Konstante. Diese beinhaltet die Eigenfrequenz sowie die Dichte des Schwingquartzes. Die auf der Oberfläche A des Schwingquartzes adsorbierte Masse ist mit  $\Delta m$  angegeben.

Das Aufdampfen fand bei einer Spannung U = 1 kV und einem Filamentstrom von ca. 2.1 A statt. Dies resultierte in einem Emissionsstrom vom Filament zum Tiegel von ca. 25 mA. Dabei wurde in der Hauptkammer ein Maximaldruck von  $1.4 \cdot 10^{-9}$  mbar nicht überschritten.



Abbildung 4.6: Seitenansicht des verwendeten Verdampfers oben bzw. vertikaler Schnitt unten. Das Verdampfergut passiert beim Verdampfen zwei Öffnungen. Oberhalb der zweiten Öffnung befindet sich ein Shutter, der es ermöglicht den Austrittszeitpunkt sowie die Dauer des austretenden Strahls zu bestimmen. Zur Bestimmung der Aufdampfmenge befindet sich neben der äußeren Öffnung ein Schwingquartz. Das Filament sowie der Tantaltiegel liegen innerhalb des durch Wasserzuleitungen gekühlten Kupferkörpers. Innerhalb des Kupferkörpers befindet sich ein Tantaltiegel mit Verdampfergut, sowie ein Filament. Ein drehbarer Shutter ermöglich ein Verschließen der sich in einer Linie befindenden Öffnungen. Der Kupferkörper wird von Kontaktierungen durchdrungen und verfügt über eine Wasserkühlung.

### 4.5 Probenpräparation

Die Probenpräparation stellt einen wichtigen Punkt in Bezug auf eine erfolgreiche Versuchsdurchführung dar. Bei der Wahl der Probengröße sind gewisse Maßen einzuhalten.

Dabei ist darauf zu achten, dass die Länge und Breite der Probe nicht zu groß wird. siehe Abb. 4.7. Das heißt insbesondere für die Breite ca. 0.5 - 0.6 mm. Eine breite Probe ist zwar von Vorteil für eine SPA-LEED Untersuchung, jedoch lässt sich eine Probe größerer Breite nicht gleichmäßig auf eine Temperatur von 1120 - 1150 °C heizen. Das führt zu einer Oberflächenrekonstruktion, die nicht sinnvoll untersucht werden kann. Weiterhin spielt die richtige Wahl der Länge ebenfalls eine wichtige Rolle. Wird die Länge zu groß gewählt wird die Probe mit großer Wahrscheinlichkeit beim Festziehen der Kontaktierungsecken zerbrechen. Zerbricht sie nicht, so entsteht eine Verspannung aufgrund eines Gefälles zwischen den zwei Auflagepunkten der Probe, was ebenfalls zu einer nicht glecihmäßigen Verteilung der Hitze auf der Probe führen kann. Eine zu kurze Länge birgt die Gefahr, dass die Probe an den Kontaktierungspunkten sehr schnell schmilzt. Es hat sich als sinnvoll erwiesen, eine Länge der Probe zu wählen, sodass diese bis ca. 0.3 mm auf beiden Seiten unter die Kontaktierungsecken reicht.

Nachdem die Probe erfolgreich im Probenhalter befestigt wurde, erfolgt nach passieren des Schleusensystems die Positionierung des Probenhalters einschließlich der Probe in einer passenden Schiene am unteren Ende des Manipulatorarmes in der Hauptkammer. Daraufhin findet das Ausheizen der Probe statt. Mit Hilfe eines Pyrometers der Firma impac, wird ein Strom an die beiden Kontaktierungesecken des Probenhalters angelegt vgl. Abb. 4.7, sodass für mindestens zwei Stunden eine Mindesttemperatur von 600 °C nicht unterschritten wird. Dieser Vorgang ist notwendig, da die Probe unter Atmosphärendruck von Adsorbaten bedeckt ist. Anschließend wird die Probe schlagartig auf 1150 °C erhitzt und wieder abgekühlt. Dieser Vorgang wird als Flashen bezeichnet. Beim ersten Flashvorgang ist darauf zu achten, dass einerseits der Druck sehr schnell ansteigt und die genannten 1150 °C nicht ereicht werden. Andererseits wird die Probe nicht gleichmäßig geheizt. Dies stellt sich erst bei ca. dem dritten Flashvorgang ein. Dieses Vorgehen wird 5 - 7 Mal wiederholt und sorgt dafür, dass die Oberfläche von der Siliziumoxidschicht befreit wird [7]. Der letzte Flashvorgang unterscheidet sich von den Anderen beim Abkühlen der Probe. Dabei wird die Stromstärke langsam verringert und so gewählt, dass die Probe ca. 10 Minuten bei 600 °C verbleibt. Dabei wurden in dieser Arbeit die besten Rekonstruktionen bei Silizium(111) beobachtet. Silizium(557)unterscheidet sich bei der Probenpräparation hinsichtlich der Flashtemperatur und der Ausrichtung der Probe im Probenhalter. Da Si(557) eine Facettierung aufweist wird die Probe so ausgerichtet, dass die Stromrichtung entlang der Facetten verläuft und nicht entlang der Vizinalität. Andernfalls ist davon auszugehen, dass der Elektronenstrom möglicherweise eine Veränderung der Facetten begünstigt. Bei der Flashtemperatur ist zu beachten, das diese um ca. 30 °C niedriger ist und 1120 °C beträgt. Eine höhere Temperatur hat nicht zu besseren Rekonstruktionen geführt. Des Weiteren ist Si(557)nicht so Temperaturbeständig wie Si(111). Es schmilzt beim Flashen deutlich schneller und unvorhersehbarer.



Kippung des Probenhalters um bis zu 90°

Abbildung 4.7: Schematische Darstellung des verwendeten Probenhalters. Dabei besteht die Grundplatte aus Keramik, auf der zwei Quader aus Metall angebracht sind. Die Probe der Breite b sowie der Länge l, liegt auf den beiden Quadern und wird von zwei Kontaktierungs- bzw. Halteecken eingespannt, die mit Schrauben an den Quadern befestigt sind. Eine Verkippung der Probe ist um bis zu 90° möglich. Das linke Bild zeigt die Frontalansicht, das rechte Bild die Seitenansicht.

# 5 Ergebnisse

Dieses Kapitel beinhaltet die experimentell ermittelten Messergebnisse. In Kap. 5.1 werden die AES-Kalibrierungsmessungen behandelt. Diese werden durch AUGER-Spektren, der bei Raumtemperatur aufgedampften Menge an Terbium auf Silizium(111), verdeutlicht. Die AES-Kalibrierungsmessungen ermöglichen es einen Umrechnungsfaktor zu ermitteln. Bedingt durch das Benutzen eines Schwingquartzes, ermöglicht dies eine Umrechnung auf die tatsächlich aufgedampfte Menge an Terbium auf der Probenoberfläche. Den Kern der Untersuchungen der Silizium(111)-, sowie der Silizium(557) Oberfläche bilden SPA-LEED-Untersuchungen verschiedener Bedeckungen.

# 5.1 Auswertung der AES-Spektren und Kalibrierung der Aufdampfrate

Zur Kalibrierung der Aufdampfrate wurden die Peak-to-Peak-Intensitäten von Si- sowie Tb-signalen aus den erhaltenen AES-Messwerten berechnet. Dabei wurde für alle Auger-Auswertungen die Peak-to-Peak Intensität des Si (LMM)-Übergangs bei 92 eV gewählt. Für Terbium wurde drei (MNN)-Übergang  $I_{3 \text{ Tb}}$  gewählt, siehe Abb. 5.2, dessen Literaturwert mit 146 eV angegeben wird, in der durchgeführten Messung jedoch bei ca. 155 eV liegt [32]. Der Literaturwert wurde nicht für eine derart dünne Schicht bestimmt und lag weitestgehend als reines Element vor. Es ist von einem Chemical Shift auszugehen. D. h. die Valenzelektronen werden an die Oberflächenatome des Silizium abgegeben. Dies übt allerdings keinen Einfluss auf die Messergebnisse aus, da nur das Peak-to-Peak Verhältnis entscheidend ist. Die Wahl ausgerechnet dieses (MNN)-Übergangs beruht auf der Tatsache, dass dieser sich mit steigender Aufdampfmenge am besten auswerten lässt. Mit Hilfe der Peak-to-Peak-Intensitäten mehrerer Messungen lassen sich nach Gl. 2.41, sowie 2.42 die relativen Intensitäten bestimmen. Dies ermöglicht es die Proportionalitätskonstante c in Gl. 2.42 zu bestimmen. Dies ist notwendig um die Aufdampmenge, gemessen in Hertz, in Ångström zu bestimmen.



Abbildung 5.1: AES-Spektrum von Terbium auf Silizium(111) bei einer Aufdampfrate von 800 Hz. Zu erkennen sind die Peak-to-Peak-Intensitäten des Silizium (MNN)-Übergangs  $I_{Si}$  und des einen von drei Terbium (LMM)-Übergängen  $I_{Tb}$ .
Es wurden insgesamt 14 Messungen mit unterschiedlichen Bedeckungen von 50 Hz bis 4200 Hz an Si(111) durchgeführt. Fünf dieser AUGER-Spektren, inklusive des unbedampften Substrats, sind in Abb. 5.3 abgebildet. Anschließend wurden die relativen Anteile von Si bzw. Tb ermittelt. Das Aufdampfen erfolgte bei Raumtemperatur. So wird sichergestellt, dass das aufgedampfte Terbium amorph aufwächst. Der zugrunde liegende Wachstumsmechanismus ist das Lage-für-Lage-Wachstum. Tabelle 5.1 stellt eine Übersicht über die ermittelten Ergebnisse dar. Bei einer Aufdampmenge von 1200 Hz nimmt der Anteil an Si auf der untersuchten Oberfläche um ca 30 % ab. Das bedeutet für den Tb-Anteil eine Zunahme von 30 %. Bei einer Verdopplung der deponierten Menge auf 2400 Hz erfolgt eine Reduzierung des Siliziumanteils um weitere 40 % in Bezug auf den Ausgangswert. Da das Lage-für-Lage Wachstum durch eine Exponentialfunktion beschrieben wird und die erhaltenen Messergebnisse keiner linearen Gesetzmäßigkeit folgen, erfolgt ein Exponentialfit. Abb. 5.2 zeigt die in der Tab. 5.1 enthaltenen Werte in einem Plot, sowie einen Exponentialfit für die Anteile von Tb bzw. Si. Die Koeffizienten a und b der Gleichung

$$f(\Delta f) = a \cdot \exp(-b \cdot \Delta f) \tag{5.1}$$

ergeben sich aus dem Exponentialfit zu a = 1 und  $b = 4.095 \cdot 10^{-4}$ /Hz. Um auf die Schichtdicke in Ångström schließen zu können bedarf es einer Umrechnung der Form:

$$a \cdot \exp(b \cdot \Delta f) = a \cdot \exp(d/\lambda_{\rm Tb}).$$
 (5.2)

Wobei d die Schichtdicke in nm, sowie  $\lambda_{Tb}$  die mittlere freie Weglänge der Elektronen in Tb ist. Für die Schichtdicke d folgt unmittelbar aus

$$b \cdot \Delta f = d/\lambda_{\rm Tb} \tag{5.3}$$

$$\Rightarrow d = (\lambda_{\rm Tb} \cdot b) \cdot \Delta f. \tag{5.4}$$

Unter Einbeziehung der mittleren freien Weglänge (IMPF = inelastic mean free path), ergibt sich  $\lambda_{\rm Tb}$  bei einer Elektronenenergie von E = 150 eV zu:

$$\lambda_{\rm Tb} = \frac{143}{E^2} + 0.054 \cdot \sqrt{E} \approx 0.6677 \,\mathrm{nm} \tag{5.5}$$

Somit ergibt sich für den Umrechnungsfaktor ein Wert von 0.0027Å/Hz. Die, zu den in Abb. 5.3 aufgeführten AUGER-Spektren, aufgenommenen SPA-LEED-Beugungsbilder, sind in Abb. 5.4 dargestellt. Bei einer Bedeckung von 0 Å sind die  $(1 \times 1)$  Fundamentalreflexe sehr intensiv. Die  $(7 \times 7)$  Überstruktur des Si(111) ist deutlich zu erkennen. Die Reflexe sind scharf, was auf eine gut preparierte Oberfläche deutet. Bei einer Bedeckung von 0.27Å nimmt die Intensität der  $(7 \times 7)$ -Reflexe deutlich ab, sodass eine Vielzahl dieser nicht mehr zu erkennen ist. Die Untergrundintensität steigt merklich an. Die  $(1 \times 1)$ -Reflexe

sind weiterhin deutlich vorhanden. Bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å können nur noch wenige  $(7 \times 7)$ -Reflexe detektiert werden. Allerdings sind diese nur noch nahe den  $(1 \times 1)$ -Reflexen zu finden. Letztere sind deutlich aufgeweitet. Die Untergrundintensität ist sehr stark angewachsen und dominiert das Beugungsbild. Dies rührt vom amorphen Wachstum ohne jede Nah- bzw. Fernordnung. Gänzlich verschwunden sind die  $(7 \times 7)$ -Reflexe bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å. Selbst die  $(1 \times 1)$ -Reflexe sind nur noch sehr schwach zu erkennen. Im untersten Bild der Abb. 5.4, welches eine Aufdampfmenge von 2.16 Å aufweist, sind keinerlei Reflexe zu erkennen. Mit steigender Aufdampfmenge ist keinerlei Periodizität einer Überstruktur zu erkennen.

Aufdampfmenge [Hz]	Anteil an Si	Anteil An Tb
50	0.9797	0.0203
100	0.9578	0.0422
150	0.9551	0.0449
200	0.9474	0.0526
250	0.9446	0.0554
300	0.9392	0.0608
350	0.9305	0.0695
400	0.8908	0.1092
800	0.8643	0.1357
1200	0.7021	0.2979
1600	0.4733	0.5267
2400	0.2998	0.7002
3200	0.1850	0.8150
4200	0.1016	0.8984

**Tabelle 5.1:** Ermittelte Anteile an Si bzw. Tb auf der Probenoberfläche des Si(111) bei verschiedenen Aufdampfmengen bei Raumtemperatur.



Abbildung 5.2: Ermittelte Anteile an Silizium (schwarze Punkte) bzw. Terbium (blaue Punkte) auf der Probenoberfläche in Abhängigkeit der Aufdampfmenge. Die Messreihe kann durch einen exponentiellen Fit ausgedrückt werden.



Abbildung 5.3: AUGER-Spektren vor (0 Hz) bzw. nach dem Bedampfen (100-1600 Hz) des Si(111) Substrates mit Terbium. Die charakteristischen AUGER-Peaks von Silizium und Terbium sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. Der Si-Peak bei 92 eV ist bei allen Aufdampmengen vorhanden, während die drei Tb-Peaks nach dem Bedampfen im Spektrum sichtbar werden.





Abbildung 5.4: SPA-LEED-Untersuchungen einer mit verschiedenen Aufdampfmengen an Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche. Die Aufdampftemperatur entspricht der Raumtemperatur. Die Elektronenenergie liegt bei 96 eV. Grüne Kreise verdeutlichen die  $(1 \times 1)$ -Reflexe, gelbe Kreise die  $(7 \times 7)$ -Reflexe. Mit steigender Aufdampfmenge ist ein amorphes Wachstum zu erkennen.

## 5.2 Voruntersuchungen zu Silizium(111)

Es soll festgestellt werden, bei welcher Probentemperatur der Aufdampfvorgang für die Hauptuntersuchungen stattfinden soll. Dabei wurde eine Aufdampfmenge von 0.27 Å gewählt. Die gewählten Temperaturen betragen 600 °C, 650 °C und 700 °C. In Abb. 5.5 sind 2D-Beugungsbilder für die drei verschiedenen Temperaturen, aufgenommen bei einer Elektronenenergie von 96 eV, dargestellt.







Bei einer Temperatur von 600 °C sind die  $(1 \times 1)$ -Reflexe sowie die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe deutlich zu erkennen. Weiterhin sind  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe erkennbar. Mit steigender Temperatur werden  $(7 \times 7)$ -Reflexe sichtbar, die der  $(7 \times 7)$ -Überstruktur des Si(111)-Substrats zugeordnet werden können. Weiterhin zu erkennen sind die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 

R30°-Reflexe. U. a. entlang der Reflexe  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1) werden Streaks sichtbar deren Ursprung in einer  $(5 \times 2)$ -Struktur liegen könnte. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe werden in ihrer Intensität deutlich schwächer bis sie schließlich bei einer Temperatur von 700 °C nicht mehr zu erkennen sind. Deutlich schärfer werden dagegen die  $(1 \times 1)$ -, sowie die  $(7 \times 7)$ -Reflexe. Die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe nehmen in ihrer Intensität ab. Bei einer Temperatur von 600 °C werden mehr Reflexe unterschiedlicher Überstrukturen beobachtet. Dies hat zur Konsequenz, dass für alle weiteren Untersuchungen der mit Tb zu bedampfenden Si(111)-Oberfläche, eine Probentemperatur von 600 °C beim Aufdampfen gewählt wird.

## 5.3 Hauptuntersuchungen zu Si(111)

Bei einer Deposition von Tb ändert sich die Oberflächenrekonstruktion bereits bei kleinen Aufdampfmengen. Abb. 5.6 zeigt eine Auswahl an Beugungsbildern der Si(111)-Oberfläche, aufgenommen bei einer Aufdampfmenge von 0.135 Å und drei verschiedenen Elektronenenergien. Bei einer Elektronenenergie von 75 eV erkennt man neben den  $(1 \times 1)$ -Fundamentalreflexen (grün) auch Reflexe der  $(7 \times 7)$ -Überstruktur (gelb). Weiterhin sind  $(2 \times 1)$ -Reflexe zu erkennen (weiß eingekreist), deren Ursprung in einer  $(2 \times 1)$ - bzw.  $(2 \times 2)$ -Struktur liegen könnte. Die entlang der gestrichelten gelben Linie (0,1)-(0,0)-(0,1), siehe Abb. 5.6, durchgeführte 1D-Messung ist in Abb. 5.7 links oben dargestellt. Die  $(2 \times 1)$ -Reflexe befinden sich eindeutig bei  $\pm 50\%$  BZ. Dabei handelt es sich um den  $(0, -\frac{1}{2})$ -, sowie den  $(0, \frac{1}{2})$ -Reflex. Bei einer Elektronenenergie von 96 eV sind deutlich ausgeprägte  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe zu erkennen (rot). Es sind deutlich weniger (7 × 7)-Reflexe zu beobachten. Die  $(2 \times 1)$ -Reflexe bspw. entlang  $(\bar{1},1)$ -(0,0)- $(1,\bar{1})$  oder  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1), sind weiterhin vorhanden und in der 1D-Messung kenntlich gemacht, siehe Abb. 5.7. An den Positionen der  $(2 \times 1)$ -Reflexe in bspw. entlang  $(1,\bar{2})$ -(0,0)- $(\bar{1},2)$ , tauchen nun aufgespaltene  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe auf (blau). Damit ließen sich die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe auf die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur zurückführen. Denn die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur wurde erst für größere Bedeckungen beobachtet [6]. Das bei einer Elektronenenergie von 117 eV aufgenommene Beugungsbild weist keine  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe mehr auf. Ebenfalls nicht zu beobachten sind  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Dies deutet erneut auf ein Zustandekommen der  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe durch eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur.







Abbildung 5.6: 2DSPA-LEED-Aufnahmen einer mit Terbium bedeckten Silizium(111)-Oberfläche. Die Aufdampfmenge beträgt 0.135 Å. Neben fundamentalen  $(1 \times 1)$ -Reflexen (grün), sind  $(7 \times 7)$ -Reflexe (gelb) deutlich zu erkennen. Des Weiteren existieren  $(2 \times 1)$ -Reflexe (weiß eingekreist), sowie  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe (rot) und  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe (blau). Der gestrichelte gelbe Pfeil verläuft entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1) und zeigt in welche Richtung die 1D-Messungen in Abb. 5.7 aufgenommen wurden. Der gestrichelte grüne Pfeil verläuft entlang  $(\bar{1},2)-(0,0)-(1,\bar{2}).$ 





Abbildung 5.7: Zu den in Abb. 5.6 gehörende 1D-Messungen entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1)(gelb gestrichelte Linie) der mit 0.135 Å an Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche. Neben bei allen drei Energien deutlich zu erkennenden  $(1 \times 1)$ -, sowie  $(7 \times 7)$ -Reflexen (verdeutlicht durch schwarze Linien), treten  $(2 \times 1)$ -Reflexe auf. Die außergewöhnliche Form des (0,0)-Reflexes rechts oben ist auf ein Übersteuern des Channeltrons durch einen zu hohen Filamentstrom zurückzuführen.

Bei der nächsten Untersuchung erfolgte eine Verdopplung der deponierten Adsorbatmenge auf 0.27 Å. Für Elektronenenergien von 75 eV und 117 eV, siehe Abb. 5.8, ist ein ähnliches Beugugsbild zu erkennen, wie für die selben Energien wie in Abb. 5.6. Deutlich sichtbar sind die  $(1 \times 1)$ -, sowie die  $(7 \times 7)$ -Reflexe. Jedoch sind bei diesen beiden Energien keine  $(2 \times 1)$ -Reflexe mehr zu erkennen. Bei einer Energie von 96 eV entsteht ebenfalls ein ähnliches Beugungsbild. Neben den  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexen, sind nun deutlich mehr  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe zu erkennen. Dies gilt insbesondere für  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe, die sich an den Positionen der  $(2 \times 1)$ -Reflexe bei  $\pm 50\%$  BZ befinden würden. Einer dieser  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe ist in Abb. 5.8 vergrößert dargestellt. Weiterhin gut zu erkennen sind die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe und bei  $\pm 50\%$  BZ Streaks, diese sind mit orangenen Linien gekennzeichnet. Der entscheidende Unterschied wird jedoch erst durch einen 1D-Scan, entlang (0,1)-(0,0)-(0,1), sichtbar (siehe Abb. 5.8 rechts unten). Zwischen drei fundamentalen  $(1 \times 1)$ -Reflexen finden sich  $(7 \times 7)$ -Reflexe, welche durch gestrichelte Linien zu erkennen sind. Des Weiteren ist die Intensität eines Streaks bei  $\pm 50 \%$  BZ vorhanden und ist durch grüne Linien verdeutlicht. Es finden sich zusätzliche Reflexe. Diese und die bereits bei einer Aufdampfmenge von 0.135 Å vorhandenen  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe, können durch die Annahme von Antiphasengrenzen in Zusammenhang mit der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur in Verbindung gebracht werden. Wie bereits in [7] gezeigt, könnte eine Aneinanderreihung von  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Strukturen gefolgt von einer Antiphasengrenze zu den beobachtbaren Reflexen führen. Dabei muss für die Anzahl der  $n \ 2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3} \ \text{R30}^\circ$ -Strukturen gelten:  $n = 2m + 1 : m \in \mathbb{N}$ . Abb. 5.9 zeigt den prinzipiellen Aufbau einer solchen Struktur, die die aufgespaltenen Reflexe erklärt.



**Abbildung 5.8:** 2D SPA-LEED-Aufnahmen einer mit Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche. Die Aufdampfmenge entspricht 0.27 Å. Neben fundamentalen (1 × 1)-Reflexen (grün eingekreist) sind (7 × 7)-Reflexe deutlich zu erkennen. Bei einer Elektronenenergie von 96 eV werden  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe (blau gekennzeichnet), sowie  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe (rot eingekreist) deutlich sichtbar. Eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Aufspaltung bei 50% BZ ist vergrößert dargestellt. Die 1D-Messung erfolgte bei einer Elektronenenergie von 99 eV und verläuft entlang (0,1)-(0,0)-(0,1) (gelb gestrichelte Linie). Es sind 2 weitere Reflexe zu erkennen, deren Abstand ist mit  $\Delta \vec{k}_{||}$ angegeben. Diese können der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur zugeordnet werden.

Des Weiteren kann unter Einbeziehung der 2D-Beugungsbilder für die verschiedenen Aufdampfmengen ein mögliches Konzeptbild für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe angeben werden siehe Abb. 5.10.



Abbildung 5.9: Prinzipieller Aufbau einer Struktur, deren Superzelle aus  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Einheitszellen (grau), sowie aus Antiphasendomänen von der Größe einer  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur (weiß), besteht.  $a_{\rm S}$  und  $b_{\rm S}$  sind die Einheitsvektoren.



Abbildung 5.10: Konzeptbild unter der Berücksichtigung der 2D-Beugungsbilder verschiedener Aufdampfmengen Tb.  $(1 \times 1)$ -Reflexe der unrekonstruierten Si(111)-Oberfläche sind schwarz dargestellt und dienen der Orientierung. Nicht aufgespaltene  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind rot. Aufgespaltene  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind blau bzw. grau. Eine Vergrößerung der aufgespaltenen Reflexe ist beispielhaft aufgeführt. Mit Hilfe einer Raute mit der Seitenlänge *a* können die Positionen der Reflexe beschrieben werden.

Zur Orientierung wurden  $(1 \times 1)$ -Reflexe der unrekonstruierten Si(111)-Oberfläche in das Konzeptbild aufgenommen und sind schwarz. An deren Stellen befinden sich ebenfalls  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Unaufgespaltene  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind rot. Blau bzw. grau sind aufgespaltene  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Diese sind in der Abbildung beispielhaft vergrößert dargestellt. Die aufgespaltenen Reflexe bilden eine Raute der Seitenlänge *a*. Es gibt zwei Aufspaltungen deren Abstand verschieden voneinander ist.

Zur Bedeckungsabhängigen Untersuchung der entdeckten Reflexe erfolgte eine weitere Deposition von Tb auf der Si(111)-Oberfläche. Es erfolgte eine Verdopplung auf 0.54 Å im Vergleich zum vorherigen Experiment. Abb. 5.11 zeigt 2D-Beugungsbilder bei einer Bedeckung von 0.54 Å für Elektronenenergien von 75 eV, 96 eV und 117 eV. Bei einer Elektronenenergie von 75 eV lassen sich neben  $(1 \times 1)$ -Reflexen auch  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe beobachten. Ein erster entscheidender Unterschied zur vorherigen Bedeckung macht sich dadurch bemerkbar, dass  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sichtbar werden, die zuvor nicht beobachtet werden konnten. Dabei handelt es sich bspw. um  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe, die sich zwischen dem (0,0)-Reflex und den  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexen erster Ordnung befinden. Bei einer Elektronenenergie von 96 eV wird offensichtlich die outphase-Bedingung für diese Reflexe erfüllt, sodass diese nicht mehr zu beobachten sind. Allerdings werden ebenfalls, (große blaue Ellipsen), Aufspaltungen sichtbar, die denen bei einer Bedeckung von 0.27 Å entsprechen. Diese treten gehäuft auf und deuten somit auf die obige Struktur, der Aneinanderreihung mehrerer  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Einheitszellen, als Ursache hin. Die Intensität dieser Reflexe nimmt bei einer Erhöhung der Elektronenenergie auf 117 eV deutlich ab. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe die sich zwischen dem (0,0)-Reflex und den  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexen zweiter Ordnung befinden, sind jedoch wieder deutlich zu erkennen. Diese sind für eine Elektronenenergie von 117 eV gesondert in vergrößerter Form, siehe Abb. 5.11 rechts unten, dargestellt. Des Weiteren treten für alle drei Elektronenenergien keine  $(7 \times 7)$ -Reflexe mehr auf.



Abbildung 5.11: Beugungsbilder bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å. Bei allen drei Elektronenenergien sind  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe deutlich zu erkennen und durch kleine blaue Ellipsen kenntlich gemacht. Zusätzliche Aufspaltungen sind durch große blaue Ellipsen hervorgehoben und rechts oben gesondert vergrößert dargestellt.  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe zweiter Ordnung sind rot eingekreist. Unten rechts ist ein vergrößerter Ausschnitt des Beugungsbildes bei einer Elektronenenergie von 117 eV dargestellt, um die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe zwischen dem (0,0)-Reflex und den  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexen zweiter Ordnung zu verdeutlichen. Der dunkle Strich im Beugungsbild bei 75 eV ist auf ein kurzzeitig wirkendes elektrisches Feld zurückzuführen, was durch ein Gerät verursacht wurde, dass auf gleichem Potential liegt.

Im nächsten Schritt erfolgte eine Erhöhung der Aufdampfmenge auf 0.81 Å. Die 2D-

Beugungsbilder sind in Abb. 5.12 dargestellt. Bei einer Elektronenenergie von 71 eV sind die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe dritteer Ordnung sehr schwach ausgeprägt. Ein vergrößerter Ausschnitt um den (0,0)-Reflex ist im unteren Bild der Abb. 5.12 dargestellt. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe erster Ordnung sind beinahe nicht zu erkennen. Bei einer Elektronenenergie von 96 eV nimmt die Intensität der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe im Vergleich zur vorigen Bedeckung ebenfalls ab. Ein vergrößerter Ausschnitt zeigt eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung inklusive der zusätzlichen Reflexe. Entlang der Reflexe  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1),  $(\bar{1},1)$ -(0,0)-(1,0) und  $(\bar{1},1)$ -(0,0)- $(1,\bar{1})$  werden Streaks sichtbar.



(0,0)

 $(\frac{1}{3}, -\frac{2}{3})$ 

Abbildung 5.12: 2D-Beugungsbilder bei einer Aufdampfmenge von 0.81 Å. Intensive  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind mit blauen Ellipsen markiert.  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe erster Ordnung sind rot eingekreist. Große blaue Ellipsen verdeutlichen Bereiche in denen zusätzliche  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe auftreten. Ein solcher Bereich ist im rechten oberen Bild vergrößert dargestellt. Unten links ist ein vergrößerter Ausschnitt mit  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexen erster Ordnung.

Im letzten Schritt betrug die Aufdampfmenge 1.08 Å. Eine Auswahl an Beugungsbilder dreier verschiedener Elektronenenergien ist in Abb. 5.23 aufgeführt. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe konnten in diesem Fall bei Elektronenenergien von 75 eV und 117 eV beobachtet werden. Eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung erster Ordnung ist im unteren Bild vergrößert

abgebildet.  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe zweiter Ordnung sind bei allen drei Elektronenenergien vorhanden. Ein deutlicher Unterschied zu den vorherigen Aufdampfmengen besteht in der Ausbildung einer  $(5 \times 2)$ -Struktur in einer Rotationsdomäne (orange). Es ist weiterhin davon auszugehen, dass die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe ihren Ursprung in der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur haben. Insbesondere bei einer Elektronenenergie von 96 eV ist zu erkennen, dass bei einer Abnahme der Intensität der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe, die Intensität der  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe ebenfalls abnimmt. Zwar ist der Übergang an dem die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe tatsächlich von der  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur stammen fließend, jedoch handelt es sich bei der  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur um eine mehrlagige Rekonstruktion jenseits von 1 ML  $\approx 4$  Å.





Abbildung 5.13: 2D-Beugungsbilder bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å. Bei allen drei Elektronenengien sind  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe zweiter Ordnung vorhanden (rot).  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe erster Ordnung lassen sich bei 75 eV und 117 eV beobachten (blau). Beispielhaft ist eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung erster Ordnung vergrößert dargestellt. In einer Rotationsdomäne bildet sich eine  $(5 \times 2)$ -Struktur aus (orange).

(1,0)

## 5.3.1 Untersuchung der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe

Da vermutet wird, dass die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur für eine Vielzahl der beobachteten Reflexe in den Beugungsbildern verantwortlich ist, bedarf es einer genaueren Untersuchung der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Ein besonderes Augenmerk wird dabei auf die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Aufspaltung in Richtung der beiden  $(1 \times 1)$ -Reflexe  $(-\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$  und  $(\frac{1}{3}, -\frac{2}{3})$ , siehe grüne Linie in Abb. 5.6, gelegt. Ebenso auf die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung entlang der  $(1 \times 1)$ -Fundamentalreflexe  $(0,\overline{1})$ -(0,0)-(0,1) (siehe gelbe Linie in Abb. 5.6) und  $(\overline{1},1)$ -(0,0)- $(1,\overline{1})$ . Die Aufspaltung entlang  $(0,\overline{1})$ -(0,0)-(0,1) wurde erstmals bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å beobachtet, siehe Abb. 5.8. Die Nachfolgende Abb. 5.14 zeigt einen Fit, der zur 1D-Messung in Abb. 5.8 gehört und entlang der gelb gestrichelten Linie verläuft ( $(0,\overline{1})$ -(0,0)-(0,1)). Die äußeren Intensitätsmaxima können eindeutig der  $(7 \times 7)$ -Überstruktur zugeordnet werden. Bei -50% BZ verläuft ein Streak. Der Fit erfolgte mit Hilfe von fünf LORENTZfunktionen.



Abbildung 5.14: 1D-Fit für Reflexe im angegebenen Intervall entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)einer mit 0.27 Å an Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche bei einer Elektronenergie von 99 eV.  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  bezeichnet den Abstand zweier möglicher  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Der Fit erfolgte mit Hilfe von fünf LOR-ENTZfunktionen.

Die gemittelte Position der zusätzlichen Reflexe ergibt sich zu  $\pm (0, 45.50)\%$  BZ bzw.  $\pm (0, 54.52)\%$  BZ. Für den Wert der Aufspaltung folgt somit  $\Delta \vec{k}_{||} = (9.03 \pm 0.2)\%$  BZ. Die Mittelung erfolgt über symmetrieequivalente Reflexe.

Mit Hilfe mehrerer Energieabhängiger 1D-Scans gelang es einen Zusammenhang zwischen der Intensität der aufgespalteten Reflexe, sowie der Streuphase herzustellen. Abb. 5.15 zeigt zwei solcher Intensitätsverläufe, die den beiden zusätzlichen Reflexen der Abb. 5.14 zugeordnet werden können. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Intensitätsmaxima in einem Abstand von  $\Delta S \approx 1$  liegen. Die gemittelten Intensitätsmaxima ergeben sich für den linken Reflex zu  $S_1 \approx 4.17$  und  $S_2 \approx 5.24$  sowie für den rechten Reflex zu  $S_1 \approx 4.15$  und  $S_2 \approx 5.24$ . Streuphasenintervalle ohne aufgeführte Intensitätswerte in den Abbildungen beschreiben Bereiche in denen die Intensität so gering war, dass ein Anfitten der Messdaten nicht möglich war.



Abbildung 5.15: Intensitätsverläufe in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Tb-Bedeckung von 0.27 Å für die aufgespaltenen Reflexe. Die Scans erfolgten in Richtung des  $(0,\bar{1})$ -Reflexes. Es ist zu erkennen, dass sich die Differenz zweier Intensitätsmaxima zu  $\Delta S \approx 1$  ergibt. Die Intensität der linken Maxima ist geringer als die der rechten Maxima. Dabei beschreibt das linke Bild den Intensitätsverlauf des Reflexes bei (0, -54.52)% BZ und das rechte Bild den Intensitätsverlauf des Reflexes bei (0, -45.50)% BZ. In Streuphasenintervalle ohne Intensität war ein Anfitten der Messdaten nicht möglich.

Ein weiteres wichtiges Maß, das u. a. Rückschlüsse auf die Rauheit der Oberfläche zulässt, ist die Halbwertsbreite (FWHM). Abb. 5.16 zeigt den Verlauf der Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Streuphase für zwei zusätzliche Reflexe in Richtung des  $(0,\bar{1})$ -Reflexes siehe Abb. 5.14. Die Halbwertsbreite schwankt zwischen 1.7% BZ und 2.7% BZ. Streuphasenintervalle ohne aufgeführte Halbwertsbreiten in den Abbildungen beschreiben Bereiche in denen die Intensität so gering war, dass ein Anfitten der Messdaten nicht möglich war.



Abbildung 5.16: Halbwertsbreiten in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å für aufgespaltene Reflexe entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0). Das linke Bild beschreibt den Reflex bei (0, -54.52)% BZ, das Rechte den Reflex bei (0, -45.50)%BZ.

Möglicherweise handelt es sich im um eine Oszillation der Halbwertsbreite, dies kann jedoch wegen des kleinen Streuphasenintervalls nicht eindeutig festgelegt werden. Falls es sich tatsächlich um eine Oszillation handelt so besitzt die Halbwertsbreite an den selben Stellen Maxima, wie der Intensitätsverlauf. Die gemittelten Halbwertsbreiten sind der Tabelle 5.2 zu entnehmen.

Reflex	FWHM [ $\%$ BZ]
$\pm (0, -54.52)\%$ BZ	$2.06\pm0.03$
$\pm (0, -45.50)\%$ BZ	$2.12\pm0.03$

**Tabelle 5.2:** Gemittelte Halbwertsbreiten für die zusätzlichen Reflexe entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1).

Eine weitere Besonderheit dieser Bedeckung stellen 2 weitere zusätzliche Reflexe dar. Diese waren nur in Richtung des (0,1)-Reflexes zu beobachten und befinden sich zwischen  $(\frac{2}{7}, \frac{3}{7})$  und  $(\frac{4}{7}, \frac{5}{7})$ . Abb. 5.3.1 zeigt einen 1D-Scan bei einer Elektronenenergie von 84 eV. Die Positionen dieser Reflexe blieben bei Variation der Elektronenenergie konstant, was eine mögliche Facettierung ausschließt. Die Position des Linken Reflexes ergab sich im Mittel zu  $(0, 39.04 \pm 0.05)\%$  BZ. Die Position des rechten Reflexes ergab sich im Mittel zu  $(0, 60.00 \pm 0.05)\%$  BZ. Dies ergibt einen Wert für den Abstand der Reflexe untereinander von  $\Delta \vec{k}_{\parallel} = (20.96 \pm 0.05)\%$  BZ. Abb. 5.18 beschreibt den Intensitätsverlauf des zusätzlichen Reflexes zwischen dem  $(0, \frac{2}{7})$ -Reflex und dem  $(0, \frac{3}{7})$ -Reflex in Abhängigkeit der Streuphase.



**Abbildung 5.17:** 1D-Scan in Richtung des (0,1)-Reflexes bei einer Tb-Bedeckung von 0.27 Å und einer Elektronenenergie von 84 eV. Links vom  $(0, \frac{3}{7})$ -Reflex, sowie rechts vom  $(0, \frac{4}{7})$ -Reflex befindet sich jeweils ein zusätzlicher Reflex. Der Abstand dieser Reflexe ergibt sich zu  $\Delta \vec{k}_{\parallel} = (20.96 \pm 0.05)\%$  BZ, was auf eine  $(5 \times 2)$ -Struktur deutet.

Der Intensitätsverlauf, aufgetragen in Abb. 5.18, zeigt zwei deutliche Intensitätsmaxima bei  $S \approx 4.8 \pm 0.05$  sowie  $S \approx 5.8 \pm 0.05$  auf. Dies bedeutet eine Phasenverschiebung von  $S \approx 0.5$  im Vergleich zu den anderen beiden Reflexen. Die Intensitäten sind daher als Gegenphasig zu betrachten. Wie bereits zuvor wurde die Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Streuphase ebenfalls untersucht. Diese ist in Abb. 5.19 dargestellt. Die Werte befinden sich zwischen 1.2% Brillouinzone und 2.1% Brillouinzone. Im Mittel ergibt sich ein Wert von 1.65% BZ. Da der Wert der Aufspaltung ca. 20% Brillouinzone beträgt kommt nur eine  $(5 \times 2)$ -Struktur als Ursache für diese Reflexe in Betracht. Jedoch ist diese in den 2D-Beugungsbildern erst bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å sichtbar geworden.



Abbildung 5.18: Intensitätsverlauf in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Terbiumbedeckung von 0.27 Å für den Reflex bei (0, 39.04)% BZ. Die Intensitätsmaxima befinden sich bei  $\Delta S \approx 4.8$ , sowie bei  $\Delta S \approx 5.8$ .



Abbildung 5.19: Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Tb-Bedeckung von 0.27 Å für den Reflex bei (0, 39.04)% BZ

Eine weitere Untersuchung der Aufspaltung entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1), jedoch bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å, ist durch eine 1D-Messung links in Abb. 5.20 dargestellt. Die Elektronenenergie beträgt 102 eV. Deutlich zu erkennen sind  $(1 \times 1)$ -Reflexe. Bei  $\pm 50\%$  BZ sind teilweise deutliche Einflüsse der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sichtbar.  $(7 \times 7)$ -Reflexe sind nicht mehr vorhanden. Der Wert der Aufspaltung ergibt sich im Mittel zu 9.05 und basiert auf vier Aufspaltungen. Zwei entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1), sowie zwei entlang  $(\bar{1},1)$ -(0,0)- $(1,\bar{1})$ . Des Weiteren ist in Abb. 5.20 rechts ein Fit angegeben. Dieser ist mit Hilfe von 3 LORENTZfunktionen erstellt worden und stellt den für die Aufspaltung relevanten Intensitätsverlauf dar. Dabei lässt sich erneut deutlich beobachten, dass bei  $\pm 50\%$  BZ die Intensität der beiden  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sehr hoch ist. An dieser Stelle lässt sich sagen, dass es sich hierbei um die selben Reflexe, wie bei einer Bedeckung von 0.27 Å handelt, da die Aufspaltung ebenfalls bei einem Wert von  $\Delta \vec{k}_{\parallel} \approx 9\%$  BZ liegt.



Abbildung 5.20: 1D-Messung bei einer Elektronenenergie von 102 eV entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1) links. Die Aufdampfmenge beträgt 0.54 Å. Es tritt eine Aufspaltung auf.  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  bezeichnet den Abstand der Aufspaltung und beträgt im Mittel 9.05 % BZ. Rechts ist ein Fit des relevanten Bereichs, erstellt mit Hilfe von 3 LORENTZfunktionen. Bei  $\pm 50\%$  BZ ist ein deutlicher Peak zu erkennen. Anhand der Raute im rechten Bild wird verdeutlicht, dass diese Intensität von der anderen  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung stammt.

Wie bereits bei der Bedeckung zuvor wurden ebenfalls Intensitätsverläufe für die insgesamt acht erwähnten Reflexe entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0)-(0,1) und  $(\bar{1},1)$ -(0,0)- $(1,\bar{1})$  durchgeführt. Zwei dieser Intensitätsverläufe sind in Abb. 5.21 dargestellt. Es hat sich herausgestellt, dass die in-phase-Bedingung bei  $S \approx 4.18$  bzw.  $S \approx 5.22$  erfüllt wird. Dies steht ebenfalls im Einklang zu den bereits zuvor erhalten Ergebnissen bei einer Terbiumbedeckung von 0.27 Å.



Abbildung 5.21: Intensitätsverläufe der aufgespaltenen Reflexe entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0), bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å. Es sind jeweils zwei Intensitätsmaxima zu erkennen.

Des Weiteren wurde ebenfalls eine Analyse bzgl. der Halbwertsbreiten aller acht Reflexe durchgeführt. Beispielhaft sind zwei der acht Verläufe der Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Streuphase in Abb. 5.22 dargestellt. Es ist keinerlei Periodizität zu erkennen. Die Streuung ist sehr groß. Die gemittelte Halbwertsbreite ergibt sich für Reflexe bei  $\pm (0, 45.50)$  [%BZ] zu 2.6% BZ. Für Reflexe bei  $\pm (0, 54.52)$  [%BZ] ergibt sich 2.53% BZ.



Abbildung 5.22: Halbwertsbreiten in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å für aufgespaltene Reflexe entlang  $(0,\bar{1})$ -(0,0).

Bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å ist eine 1D-Messung bei 96 eV gelungen, die sich auf Abb. 5.23 bezieht. Die 1D-Messung verläuft entlang (0,1)-(0,0)- $(0,\overline{1})$  und lässt erkennen, dass es sich um die selben Reflexe wie bei einer Aufdampfmenge von 0.135 Å handelt, siehe Abb. . Zusätzlich ist ein Fit des erwähnten Bereichs aufgeführt. Dieser wurde mit Hilfe von fünf LORENTZfunktionen durchgeführt. Der Abstand der zwei Reflexe beträgt  $(19.92 \pm 0.1)\%$  BZ. Somit deutet dies eindeutig auf eine  $(5 \times 2)$ -Struktur in mindestens zwei Rotationsdomänen.





Abbildung 5.23: 1D- und 2D-Messung bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å oben. Eine  $(5 \times 2)$ -Struktur ist durch orange Kreise hervorgehoben.  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ R30°-Reflexe sind rot eingekreist. Das untere Bild zeigt einen Fit des Bereichs der Aufspaltung.  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  bezeichnet die Größe der Aufspaltung. Die 1D-Messung verläuft entlang (0,1)-(0,0)- $(0,\bar{1})$ . Somit bildet sich eine  $(5 \times 2)$ -Struktur in mindestens zwei Rotationsdomänen aus.

Tab. 5.3 gibt einen Überblick der ermittelten Werte im Hinblick auf die steigende Bedeckung.

Aufdampfmenge [Å]	Reflexe [% BZ]	$\Delta \vec{k}_{  } \ [\% \text{ BZ}]$	FWHM [% BZ]	$\Delta S$
0.97	$\pm(0, 45.50)$	9.03	2.12	1.07
0.27	$\pm(0, 54.52)$	9.03	2.06	1.09
0.54	$\pm(0, 45.50)$	9.05	2.60	1.04
0.04	$\pm(0, 54.52)$	9.05	2.53	1.03

**Tabelle 5.3:** Zusammenfassung der ermittelten Werte bzgl. der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung in Richtung der  $(1 \times 1)$ -Fundamentalreflexe (0,1)-(0,0)- $(0,\bar{1})$ .

Da in den 2D-Beugungsbildern zu erkennen war, dass die Aufspaltung der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe in  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Richtung ungleich der in Richtung der Fundamentalreflexe ist, erfolgt eine genauere Untersuchung dieser Reflexe. Eine Vielzahl der durchgeführten 1D-Messungen verläuft entlang des grün gestrichelten Pfeils, siehe Abb. 5.6. Abb. 5.24 zeigt zusätzlich eine Reciprocal Space Map, die bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å erstellt wurde. Die 1D-Messungen verlaufen entlang ( $\overline{1}$ ,2)-(0,0)-(1, $\overline{2}$ ). Man sieht eindeutig, dass die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe bei  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}$ % BZ Phasenverschoben sind. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe an den Positionen  $\pm(-31.47, 62, 94)$  besitzen auf dem abgebildeten Intervall von  $\vec{k}_{\perp}$  vier Intensitätsmaxima. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe an den Positionen  $\pm(-26.27, 62.94)$  besitzen auf dem selben Intervall jedoch nur zwei Intensitätsmaxima.



**Abbildung 5.24:** Reciprocal Space Map einer Si(111)-Oberfläche. Die 1D-Messungen zur Erstellung der RSM verlaufen entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$ . Die Aufdampfmenge beträgt 0.54 Å.

Die Anfangsbedeckung der Untersuchungen der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe liegt bei 0.27 Å. In Abb. 5.25 sind drei 1D-Messungen für Elektronenenergien von 72 eV, 96 eV sowie 114 eV aufgeführt, die entlang entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$  verlaufen. Bei einer Energie von 72 eV erkennt man deutlich  $(7 \times 7)$ - wie auch  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Außerdem entdeckt man um  $\pm \frac{50}{\sqrt{3}}\%$  BZ  $\approx \pm 28.87\%$  BZ einen  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflex. Um den Wert von  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ  $\approx \pm 86.60\%$  BZ bilden sich die bei einer Elektronenenergie von 96 eV deutlich zu erkennende  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Der Abstand der Reflexe ist mit  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  benannt. Bei einer Elektronenenergie von 114 eV werden nun beide  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\pm \frac{50}{\sqrt{3}}\%$  BZ  $\approx \pm 28.87\%$  BZ sichtbar. Da bei einer Elektronenenergie von 72 eV nur einer dieser Reflexe zu beobachten ist, deutet dies auf eine Phasenverschiebung unter diesen beiden Reflexen hin. Weiterhin ist von einer Phasenverschiebung zwischen der Aufspaltung um  $\pm \frac{50}{\sqrt{3}}\%$  BZ  $\approx \pm 28.87\%$  BZ, sowie der Aufspaltung um  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ  $\approx \pm 86.60\%$  BZ auszugehen. Dies liegt daran, dass bei einer Elektronenenergie von 96 eV nur die Aufspaltung um  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ  $\approx \pm 86.60\%$  BZ beobachtet werden kann.





Abbildung 5.25: 1D-Messungen einer mit Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche. Die Aufdampfmenge beträgt 0.27 Å. Die Messungen erfolgten entlang der ( $\bar{1}$ ,2)-(0,0)-(1, $\bar{2}$ ) Reflexe. Neben (7 × 7)- und teilweise sehr deutlich ausgeprägten  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexen, existieren auch  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe. Deren Aufspaltung ist mit  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  angegeben. Bei der höchsten Energie werden beide  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe nahe dem (1 × 1)-Reflex sichtbar.



**Abbildung 5.26:** Fits der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $-\frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ bei einer Elektronenenergie von 96 eV links, sowie um  $-\frac{50}{\sqrt{3}}\%$  BZ bei einer Elektronenenergie von 114 eV rechts. Die vollständigen Scans sind in Abb. 5.25 dargestellt. Die Fits sind mit Hilfe von 2 bzw. 3 LORENTZfunktionen durchgeführt worden, da bei  $-\frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ zusätzlich der Einfluss des Streaks einzubeziehen ist.  $\Delta \vec{k}_{\parallel}$  bezeichnet den Abstand der Aufspaltung und ist der Tab. 5.4 zu entnehmen.

Aufspaltung bei [%BZ]	$arDelta ec{k}_{  }  [\%  \mathrm{BZ}]$
$\pm \frac{150}{\sqrt{3}}$	$5.22\pm0.03$
$\pm \frac{50}{\sqrt{3}}$	$5.32\pm0.03$

**Tabelle 5.4:** Gemittelte Abstände für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30° Aufspaltung bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å. Die Richtung sowie die Position sind angegeben.

Betrachtet man die Intensitätsverläufe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe in Abb. 5.27, erkennt man jeweils ein Intensitätsmaximum für jeden Reflex. Die linken beiden Auftragungen beschreiben die Aufspaltung an der Position  $\frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ entlang (0,0)- $(1,\overline{2})$ . Man sieht eine Phasenverschiebung der Reflexe untereinander, dies würde auch die unterschiedliche Intensität der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe bei gleicher Energie in den 1D-Messungen erklären. Die rechten beiden Auftragungen beschreiben die Aufspaltung an der Position  $\frac{50}{\sqrt{3}}\%$  BZ entlang (0,0)- $(1,\overline{2})$ . In dem beschriebenen Streuphasenintervall lässt sich keine Phasenverschiebung der Intensitätsverläufe beobachten. Dies widerspricht der Beobachtung der 1D-Messung in Abb. 5.25 bei einer Elektronenenergie von 72 eV. Dort lässt sich eindeutig ein  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflex beobachten, während der Zweite beinahe nicht zu erkennen bzw. gar nicht zu erkennen ist. Da hier jedoch keine Aussage über den Intensitätsverlauf bei einer kleineren Streuphase getroffen werden kann, bleibt diese Frage an dieser Stelle noch offen.



**Abbildung 5.27:** Intensitätsverläufe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\frac{150}{\sqrt{3}}$ % BZ entlang (0,0)- $(1,\bar{2})$  links und um  $-\frac{50}{\sqrt{3}}$ % BZ entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0) rechts. Die Intensität ist in willkürlichen Einheiten angegeben.

Eine Untersuchung der Halbwertsbreiten von 8  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexen hat ergeben, dass diese sich im Bereich von (1 - 2.6)% BZ in Abhängigkeit der Streuphase befinden. Abb. 5.28 verdeutlicht beispielhaft den Verlauf Verlauf der Halbwertsbreite. In diesem Fall schwanken die Werte zwischen (1.2 - 2)% BZ. Aufgrund der sehr großen Streuung sind keinerlei Aussagen über die Periodizität möglich. Die ermittelten Werte der Halbwertsbreiten symmetrieequivalenter Reflexe sind der Tab. 5.5 zu entnehmen.



**Abbildung 5.28:** Verlauf der Halbwertsbreite eines  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexes. Es ist keine Periodizität zu erkennen.

Position der Reflexe [%BZ]	FWHM $[\%BZ]$
$\pm(-89.20, 178.40)$	$1.64\pm0.05$
$\pm(-84.00, 168.00)$	$1.71\pm0.05$
$\pm(-31.47, 62.94)$	$1.63\pm0.05$
$\pm(-26.27, 52.54)$	$1.81\pm0.05$

**Tabelle 5.5:** Gemittelte Halbwertsbreiten für symmetrieequivalente  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(0,\bar{2})$ . Die Aufdampfmenge beträgt 0.27 Å.

Im Folgenden soll eine Aufdampfmenge von 0.54 Å an Terbium auf Silizium(111) untersucht werden. Wie aus den Abb. 5.8 und 5.11 ersichtlich ist, wird der Untergrund bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å im Gegensatz zu 0.27 Å geringer und die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe erscheinen intensiver. Die in Abb. 5.29 aufgeführte 1D-Messung bei Elektronenenergien von 72 eV, 96 eV und 114 eV verläuft entlang ( $\bar{1}$ ,2)-(0,0)-(1, $\bar{2}$ ). Man erkennt bereits bei 72 eV  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\pm \frac{50}{\sqrt{3}}$ % BZ. Dies gilt ebenso für 114 eV. Bei einer Energie von 96 eV ist jeweils nur einer der beiden  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sichtbar. Selbige waren zuvor bei halber Aufdampfmenge nicht zu erkennen.





**Abbildung 5.29:** 1D-Messungen einer mit Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche. Die Aufdampfmenge beträgt 0.54 Å. Die Messungen erfolgten entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$ . Bei Energien von 72 eV und 114 eV sind acht  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe erkennbar. Bei 96 eV nur sechs.

Die gemittelten Abstände für symmetrie equivalente  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind in Tab. 5.6 aufgeführt. Diese sind denen bei einer Bedeckung von 0.27 Å ähnlich und liegen zwischen (5.1-5.22)% BZ.

Aufspaltung bei [%BZ]	$\Delta \vec{k}_{  }$ [%BZ]
$\pm \frac{150}{\sqrt{3}}$	$5.17\pm0.01$
$\pm \frac{50}{\sqrt{3}}$	$5.22\pm0.01$

**Tabelle 5.6:** Gemittelte Abstände für symmetrieequivalente  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30° Aufspaltungen bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(,\bar{2})$ .

Die Intensitätsverläufe offenbaren eine Phasenverschiebung von S = 0.25 für  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe an den Positionen um  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ, siehe Abb. 5.30 obere Auftragungen. Im Gegensatz zu einer Bedeckung von 0.27 Å ist es gelungen Messergebnisse zu erzielen, die erkennen lassen, dass die in-phase-Bedingung für  $S \in [4, 6]$  vier Mal erfüllt wird. Die untere Auftragung von Abb. 5.30 verdeutlicht den Anteil des Intensitätsverlaufes der rechten oberen Auftragung in Abb. 5.30 an der Gesamtintensität beider Intensitätsverläufe. D.h.

Anteil an der Gesamtintintensität
$$(S) = \frac{I_1(S)}{I_1(S) + I_2(S)}.$$
 (5.6)

Diese Art der Auftragung ermöglicht es die dynamischen Effekte der Elektronenbeugung abzuschwächen. Die Phasenverschiebung lässt sich als der Abstand von einem lokalen Maxima zum nächsten lokalen Minima bestimmen und wird im Folgenden als  $\Delta \sigma$ bezeichnet.



dung dar.  $\Delta \sigma$  bezeichnet die Phasenverschiebung der zwei Intensitäten.

4.25 4.5 4.75 5 5.25 Streuphase [S] 4 5.5 5.75 6

Weiterhin konnten die Reflexe um  $\pm \frac{50}{\sqrt{3}}\%$  BZ ebenfalls auf dem Streuphasenintervall [4,6] untersucht werden. Aus den Auftragungen in Abb. 5.31 wird ersichtlich, dass jeweils ein Reflex weniger Intensitätsmaxima auf demselben Streuphasenintervall besitzt. Vermutlich ist die Anzahl der Intensitätsmaxima halb so groß.

6



**Abbildung 5.31:** Intensitätsverläufe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $-\frac{50}{\sqrt{3}}$ % BZ entlang ( $\bar{1}$ ,2)-(0,0). Ein Reflex weist nur halb so viele Intensitätsmaxima auf wie der Andere.

Die Untersuchung der Halbwertsbreiten hat in einigen Fällen ergeben, dass die Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Streuphase möglicherweise oszilliert siehe Abb. 5.32. Dieses Verhalten lässt sich möglicherweise auf die Oszillation der Intensität zurückführen. Aus diesem Grund wurden die ermittelten Halbwertsbreiten, wie bereits zuvor, gemittelt und in Tab. 5.7 zusammengefasst.



**Abbildung 5.32:** Halbwertsbreiten für zwei  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å entlang ( $\bar{1}$ ,2)-(0,0)-(1, $\bar{2}$ ). Möglicherweise handelt es sich um eine Oszillation der Halbwertsbreite.

Die Halbwertsbreiten der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}$ % BZ, liegen in derselben Größenordnung wie bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å. Jedoch erkennt man, dass die Halbwertsbreite der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\pm \frac{50}{\sqrt{3}}$ % BZ deutlich abgenommen

hat. Einer der Gründe ist möglicherweise darauf zurück zu führen, dass die Untergrundintensität geringer geworden ist. Der zweite Grund besteht darin, dass beinahe keine  $(7 \times 7)$ -Reflexe im 2D-Beugungsbild siehe Abb. 5.11 zu erkennen sind. Lediglich in den 1D-Messungen sind kleine Intensitäten sichtbar, siehe Abb. 5.29. Diese waren bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å noch sehr deutlich zu erkennen.

Position der Reflexe [%BZ]	FWHM [%BZ]
$\pm(-89.02, 178.40)$	$1.65\pm0.05$
$\pm(-84.00, 168.00)$	$1.64\pm0.05$
$\pm(-31.47, 62.94)$	$1.43 \pm 0.05$
$\pm(-26.27, 52.54)$	$1.47\pm0.05$

**Tabelle 5.7:** Halbwertsbreiten für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$ . Die Aufdampfmenge beträgt 0.54 Å

Im nächsten Schritt bei der Untersuchung der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe, erfolgte eine Erhöhung der Aufdampfmenge auf 0.81 Å. Unglücklicherweise gelang es bei keiner Winkeleinstellung sowohl  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $-\frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ als auch um  $\frac{150}{\sqrt{3}}\%$ BZ bei einer 1D-Messung zu erfassen. Ein Beispiel der genannten Problematik ist an der 1D-Messung aus Abb. 5.33 kenntlich gemacht. Nur Reflexe, die sich in der postiven Brillouinzone befinden, können zugeordnet werden.  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\pm \frac{150}{\sqrt{3}}\%$ BZ konnten ebenfalls nicht ausgewertet bzw. angefittet werden, da deren Intensität zu gering ist. Aus diesen Gründen konnten nur die beiden Reflexe um  $\frac{150}{\sqrt{3}}\%$  BZ entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$  untersucht werden. Außerdem konnten ab einer Energie Elektronenenergie von ca. 105 eV auch diese Reflexe nicht mehr eindeutig identifiziert werden.



Abbildung 5.33: 1D-Messung bei einer Elektronenernergie von 90 eV und einer Aufdampfmenge von 0.81 Å. Reflexe im negativen Bereich der Brillouinzone sind nicht eindeutig zu identifizieren. Im Positiven Bereich der Brillouinzone erkennt man eindeutig  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe.  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind durch gestrichelte Linien kenntlich gemacht.

Die Aufspaltung dieser zwei  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe ergab sich zu  $(5.10 \pm 0.01)\%$ BZ. Die Intensitätsverläufe, siehe Abb. 5.34 obere Auftragungen, sind im selben Maße Phasenverschoben wie zuvor. Der Anteil des linken oberen Intensitätsverlaufes an der Summe beider Intensitäten ist in der unteren Auftragung von Abb. 5.34 aufgeführt. Eine Periodizität im Verlauf der Halbwertsbreite lässt sich erahnen und ist für einen der beiden Reflexe in Abb. 5.35 dargestellt. Das mögliche Zustandekommen wurde bereits zuvor bei einer Bedeckung von 0.54 Å besprochen. Die gemittelten Halbwertsbreiten der beiden Reflexe ergeben sich zu  $(1.84 \pm 0.05)\%$  BZ sowie zu  $(1.79 \pm 0.05)\%$  BZ.





**Abbildung 5.34:** Intensitätsverläufe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\frac{150}{\sqrt{3}}\%$ BZ entlang (0,0)-(1, $\overline{2}$ ) oben. Die Aufdampfmenge beträgt 0.81 Å. Den Anteil der oberen linken Intensität an der Gesamtintensität stellt die untere Abbildung dar.  $\Delta\sigma$  bezeichnet die Phasenverschiebung und ergibt sich zu  $\Delta\sigma \approx 0.3$ .

Abbildung 5.35: Halbwertsbreiten für einen  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflex bei einer Aufdampfmenge von 0.81 Å entlang (0,0)-(1, $\overline{2}$ ). Möglicherweise handelt es sich um eine Osillation der Halbwertsbreite.

Die letzte und höchste Aufdampfmenge an Terbium beträgt 1.08 Å. Die Phasenverschiebung der Intensitäten beträgt erneut  $S \approx 0.25$ . Betrachtet man Abb. 5.36 erkennt man dass die Maxima der beiden  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe bei $S \approx 4.75$  bzw.  $S \approx 5$  auftreten. Der Abstand zweier Maxima des gleichen Reflexes beträgt  $\approx 1$ . Die Größe der Aufspaltung ist denen aus den Voruntersuchungen ähnlich und liegt bei über 5% BZ. Alle ermittelten Werte sind Tab. 5.8 zu entnehmen.



**Abbildung 5.36:** Intensitätsverläufe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe um  $\frac{150}{\sqrt{3}}$ % BZ entlang (0,0)-(1, $\overline{2}$ ). Die Aufdampfmenge beträgt 1.08 Å. Die Phasenverschiebung der Reflexe beträgt  $\Delta S \approx 0.25$ .

Aufspaltung bei [%BZ]	$ec{\Delta k_{  }}$ [%BZ]
$\pm \frac{150}{\sqrt{3}}$	$5.16\pm0.02$
$\pm \frac{50}{\sqrt{3}}$	$5.20 \pm 0.02$

**Tabelle 5.8:** Gemittelte Abstände für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å.

Bei der Betrachtung der Halbwertsbreiten wurde festgestellt, dass die gemittelten Halbwertsbreiten deutlich höhere Werte ergeben, als alle Ergebnisse der kleineren Aufdampfmengen. In Abb. 5.37 ist der Verlauf der Halbwertsbreite eines  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexes dargestellt. Die Messwerte liegen in diesem Fall zwischen (1.3 - 2.8)% BZ. Die gemittelten Werte aller acht Reflexe sind in Tab. 5.9 aufgeführt.



Abbildung 5.37: Halbwertsbreiten für einen  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflex bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å entlang (0,0)-(1, $\overline{2}$ ). Die Streuung der Messwerte ist sehr groß.

Position der Reflexe [%BZ]	FWHM [%BZ]
$\pm(-89.02, 178.04)$	$2.22\pm0.05$
$\pm(-84.00, 168.00)$	$2.09 \pm 0.05$
$\pm(-31.47, 62.94)$	$2.13\pm0.05$
$\pm(-26.27, 52.54)$	$2.09 \pm 0.05$

**Tabelle 5.9:** Halbwertsbreiten für symmetrieequivalente  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$ . Die Aufdampfmenge beträgt 1.08 Å.

Eine Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe in Richtung der (1 × 1)-Fundamentalreflexe, ist in Tab. 5.10 aufgeführt. Im Folgenden wird mit  $\Delta S$  der Abstand zweier Intensitätsmaxima eines Reflexes bezeichnet.

Aufdampfmenge [Å]	0.27	0.54	0.27	0.54
Reflex	$\pm(0, \cdot)$	52.54)	$\pm(0, \cdot)$	45.50)
$\Delta \vec{k}_{  }$ [%BZ]	9.03	9.05	9.03	9.05
FWHM [%BZ]	2.06	2.53	2.12	2.6
$\Delta S$	1	1	1	1

**Tabelle 5.10:** Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe an den Positionen ±(0, 52.54).

Mit zunehmender Bedeckung steigt der Abstand der Reflexe nur minimal an. Die Halbwertsbreite steigt jedoch um bis zu 25%. Da eine sehr große Streuung unter den Ergebnissen vorlag ist keine Aussage über die Rauhigkeit der Oberfläche zu treffen. Weder die Phasenverschiebung noch der Abstand lokaler Intensitätsmaxima ändert sich. Somit bleibt der Lagenabstand der wachsenden Schicht mit steigender Bedeckung konstant.

Eine Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe entlang  $(\bar{1},2)$ -(0,0)- $(1,\bar{2})$ , ist in Tab. 5.11, Tab. 5.12, Tab. 5.13 und Tab. 5.14 dargestellt.

Aufdampfmenge [Å]	0.27	0.54	0.81	1.08
Reflex	$\pm(-26.27, 52.54)$			
$arDeltaec{k}_{  }$ [%BZ]	5.32	5.22	Ang. n. mögl.	5.2
FWHM [%BZ]	1.81	1.47	Ang. n. mögl.	2.09
$\Delta S$	Ang. n. mögl.	0.5	Ang. n. mögl.	Ang. n. mögl.

**Tabelle 5.11:** Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe an den Positionen ±(26.27, 52, 54).

Aufdampfmenge [Å]	0.27	0.54	0.81	1.08
Reflex	$\pm(-31.47, 62.94)$			
$\Delta \vec{k}_{  }$ [%BZ]	5.32	5.22	Ang. n. mögl.	5.2
FWHM [%BZ]	1.63	1.43	Ang. n. mögl.	2.13
$\Delta S$	Ang. n. mögl.	1	Ang. n. mögl.	Ang. n. mögl.

**Tabelle 5.12:** Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe an den Positionen  $\pm(-31.47, 62.94)$ .

Aufdampfmenge [Å]	0.27	0.54	0.81	1.08		
Reflex	$\pm(-84.00, 168.00)$					
$\Delta \vec{k}_{  }$ [%BZ]	5.22	5.17	5.10	5.16		
FWHM [%BZ]	1.71	1.64	Ang. n. mögl.	2.09		
$\Delta S$	Ang. n. mögl.	1	1	1		

**Tabelle 5.13:** Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe an den Positionen  $\pm(-84.00, 168.00)$ .

Aufdampfmenge [Å]	0.27	0.54	0.81	1.08	
Reflex	$\pm(-89.02, 178.04)$				
$\Delta \vec{k}_{  }$ [%BZ]	5.22	5.17	5.10	5.16	
FWHM [%BZ]	1.64	1.65	1.84	2.22	
$\Delta S$	Ang. n. mögl.	1	1	1	

**Tabelle 5.14:** Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe an den Positionen  $\pm(-89.02, 178.04)$ .

Bildet man den Mittelwert aller erhaltenen Werte für die Aufspaltungen in  $\sqrt{3}$ -Richtung, so ergibt sich ein Wert von 5.2% BZ. Im 2D-Beugungsbild ergibt sich der dieser Aufspaltung zu:

$$\Delta \vec{k}_{||} = \frac{100\% \,\mathrm{BZ}}{n \cdot \sqrt{3}} = 5.2\% \,\mathrm{BZ} \quad n \in \mathbb{N}$$

$$(5.7)$$

$$\Rightarrow n = \frac{100\%\text{BZ}}{5.2\%\text{BZ}\cdot\sqrt{3}} \approx 11.10.$$
(5.8)

Damit ist die zugrunde liegende Struktur, die ursächlich für die aufgespaltenen Reflexe verantwortlich ist, von der Form  $11\sqrt{3} \times 11\sqrt{3}$ . Da es sich bei dieser Struktur um eine Raute handelt ergibt sich für die zweite Aufspaltung (5.10)

$$\Delta \vec{k}_{||} = 2 \cdot 5.2\% \,\text{BZ} \cdot \cos(30^\circ) \approx 9.00\% \,\text{BZ}.$$
(5.9)

Der aus den 1D-Messungen ermittelte Wert ergibt sich zu  $\Delta \vec{k}_{||} = 9.04\%$  BZ. Damit ist die zugrunde liegende Struktur, die  $11\sqrt{3} \times 11\sqrt{3}$ -Struktur.

## 5.3.2 Disskussion der Messergebnisse von Si(111)

Nach einer sorgfältigen Präparation von Siliziumproben mit [111]-Orientierung wurden verschiedene Aufdampfmengen an Terbium auf die  $(7 \times 7)$  rekonstruierte Oberfläche aufgebracht. Die optimale Probentemperatur während des Aufdampvorgangs wurde zu 600 °C bestimmt. Bereits bei einer Aufdampfmenge von 0.135 Å bildete sich neben einer  $(2 \times 1)$ -Struktur und der  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion des Substrats eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Struktur aus, siehe Abb. 5.15. Während bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å die Reflexe der  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion deutlich an Intensität verlieren, lassen sich deutlich mehr Reflexe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur beobachten. Des Weiteren bildet sich in mindestens einer Rotationsdomäne eine  $(5 \times 2)$ -Struktur bzw. eine  $(5 \times 1)$ -Struktur mit Streaks in der  $(\times 2)$ -Richtung, jedoch wurden diese Reflexe nur sehr schwach in den 1D-Messungen beobachtet. Bei steigender Aufdampfmenge von bis zu 0.81 Å tritt nur die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur auf. Insbesondere treten aufgespaltene Reflexe in drei Rotationsdomänen auf. Bei der höchsten aufgedampften Menge an Terbium von ca. 1 Å konnten deutliche Reflexe der  $(5 \times 2)$ -Struktur in mindestens einer Rotationsdomäne beobachtet werden. Dieses Auftreten der  $(2 \times 1)$ -,  $(5 \times 2)$ - und  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur bei niedrigen Bedeckungen (submonolagen Bereich), deckt sich mit dem Wissensstand der Fachliteratur, siehe Referenz [44,45].

Struktur $\rightarrow$ Aufdampfmenge [Å] $\downarrow$	$(7 \times 7)$	$(2 \times 1)$	$(5 \times 2)$	$2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3} \text{ R30}^{\circ}$ mit Antiphasengrenze
0	×			
0.135	×	×		×
0.27	×		×	×
0.54				×
0.81				Х
1.08			Х	×

**Tabelle 5.15:** Auftretende Überstrukturen oder Rekonstruktionen auf Si(111) bei einer Probentemperatur von 600 °C während des Aufdampfvorgangs.

Ein besonderes Augenmerk wurde auf die Aufspaltung der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe gelegt. Diesbezüglich wurden 1D-Messungen durchgeführt und die Aufspaltung in Richtung der  $(1 \times 1)$ -Reflexe zu  $\approx 9\%$  BZ bestimmt. Die Aufspaltung in  $\sqrt{3}$ -Richtung ergab sich zu  $\approx 5.2\%$  BZ. Somit konnte für die beobachteten  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe die  $11\sqrt{3} \times 11\sqrt{3}$ -Struktur als Ursache bestimmt werden. Dabei handelt es sich um eine Aneinanderreihung von fünf  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Einheitszellen, gefolgt von einer Antiphasengrenze der Größe  $\sqrt{3}$ . Des Weiteren konnte ein Trend zur Verkleinerung der Aufspaltung mit steigender Bedeckung beobachtet werden. Dies ist ein Anzeichen für eine ansteigende mittlere Domänengröße. Anhand der Streuphasendifferenzen  $\Delta S = 1$  kann vermutet werden, dass sich der Lagenabstand bei steigender Bedeckung nur unwesentlich vom Substrat
unterscheidet. Die aufgedampften Atome chemiesorbieren vermutlich an der Oberfläche des Siliziums, sodass sich die aufwachsenden Strukturen zunächst wahrscheinlich in lateraler Richtung und nicht in das Substrat migrieren bzw. in Schichten aufwachsen. Bei steigender Bedeckung war ebenfalls ein Anstieg der Halbwertsbreiten zu beobachten. Dies spiegelt die zunehmende Steigung der Varianz der Domänengrößenverteilung wider.

### 5.4 Untersuchung der Silizium(557)-Oberfläche

Zu Beginn der Si(557)-Untersuchungen wird zunächst die präparierte Oberfläche untersucht. Abb. 5.38 zeigt ein 2D-Beugungsbild der Probenoberfläche nach der Präparation. Man erkennt (7 × 7)- Reflexe der rekonstruierten Silizium(111)-Oberfläche, verdeutlicht durch gelbe Kreise. Des Weiteren sieht man Einflüsse einer (×2)-Struktur, beispielhaft durch eine grüne Linie verdeutlicht. Zwischen zwei Hauptreflexen, rot eingekreist, liegen 16 Reflexe, von denen einige blau eingekreist sind [10]. Dies symbolisiert die siebzehnfache Größe der Si(557)-Einheitszeile in Bezug zur Silizium(111)-Einheitszelle siehe Abb. 3.5. Betrachtet man zusätzlich Abb. 5.39 ist deutlich zu erkennen, dass es sich um eine vizinale Oberfläche handelt. Im Vergleich zu einer Elektronenenergie von 96 eV befinden sich die [557]-Reflexe an anderen Positionen. Des Weiteren wurde eine 1D-Messung durchgeführt siehe Abb. 5.40. Man erkennt sechzehn Reflexe zwischen den Hauptreflexen. Es sind beispielhaft einige Reflexe ausgewählt und deren Abstände  $\Delta \vec{k}_{||}$  zueinander ermittelt worden. Im Mittel ergab sich ein Abstand von  $\Delta \vec{k}_{||} = (5.76 \pm 0.15)\%$  BZ. Der tatsächliche Wert ergibt sich zu  $\frac{100}{17} \approx 5.88\%$  BZ.



Abbildung 5.38: 2D-Beugungsbild einer Si(557)-Oberfläche.Die Reflexe der (7) $\times$ 7)-Oberflächeneinheitszelle sind durch gelbe Ellipsen dargestellt. Eine  $(\times 2)$ -Struktur ist mit einer grünen Linie verdeutlicht. Zwischen zwei Hauptreflexen (rot), befinden sich 16 Nebenreflexe, von denen einige blau gekennzeichnet sind. Aufgenommen bei einer Elektronenenergie von 131 eV.



2D-Abbildung 5.39: Beugungsbild einer Si(557)-Oberfläche.Die Reflexe der (7) $\times$ 7)-Oberflächeneinheitszelle sind durch gelbe Ellipsen dargestellt. Eine  $(\times 2)$ -Struktur ist mit einer grünen Linie verdeutlicht. Zwischen zwei Hauptreflexen (rot), befinden sich 16 Nebenreflexe, von denen einige blau gekennzeichnet sind. Aufgenommen bei einer Elektronenenergie von 131eV. 1D-Messungen verlaufen entlang der gelb gestrichelten Linie

**Abbildung 5.40:** 1D-Messung entlang  $(\bar{1},0)$ -(0,0)-(1,0) (gelb gestrichelte Linie in Abb. 5.39) bei einer Elektronenergie von 101 eV. Zwischen zwei Hauptreflexen liegen sechzehn Reflexe. Beispielhaft sind die Abstände einiger Reflexe angegeben.

Mit Hilfe einer Reciprocal Space Map (RSM) wird anschließend eine näherungsweise Abbildung des reziproken Raumes für die Si(557)-Oberfläche erstellt. Der entscheidende Bereich liegt in einem Elektronenenergieintervall zwischen ca. 60 eV und 135 eV bzw. in Einheiten der Streuphase zwischen S = 4 und S = 6. Die aufgenommene Reciprocal Space Map ist in Abb. 5.41 dargestellt. Man erkennt Stangen, die eindeutig der Si(557)-Oberfläche zugeordnet werden konnten. Zwei rote Linien verdeutlichen zwei dieser Stangen. Deren Abstand ist mit  $\Delta \vec{k}_{||} = \frac{2\pi}{L_1}$  angegeben. Der vertikale Abstand ergibt sich zu  $\Delta \vec{k}_{\perp} = \frac{2\pi}{d_1}$ . Bereiche destruktiver Interferenz sind mit grünen Linien verdeutlicht. Für die entsprechenden Abstände gilt für  $\Delta \vec{k}_{||} = \frac{2\pi}{L_2}$ , sowie für  $\Delta \vec{k}_{\perp} = \frac{2\pi}{d_2}$ . Dabei bezeichnet L die Länge und d die Höhe im Realraum an. sind der Si(113)-Oberfläche, aufgebaut aus zwei Nanofacetten siehe Abb.3.5, zuzuschreiben.



Abbildung 5.41: Reciprocal Space Map einer Silizium (557)-Oberfläche. Rote Stangen verdeutlichen die Reflexe der [557]-Oberfläche. Die [113]-Facette ist durch destruktive 'Linien' in der RSM zu erkennen, grün verdeutlicht. L bezeichnet die Länge der Silizium (557)-Einheitszelle in Richtung der Vizinalität.

Die Größe der Silizium(557)-Einheitszelle ergibt sich zu

$$\Delta \vec{k}_{||} = \frac{2\pi}{L_1} \approx 0.1089 \,\text{\AA}^{-1} \stackrel{\circ}{=} 5.67\% \,\text{BZ}$$
(5.10)

$$\Rightarrow L_1 = \frac{2\pi}{\Delta \vec{k}_{||}} \approx (57.76 \pm 0.03) \,\text{\AA}. \tag{5.11}$$

Da man im Beugungsbild den Reihenabstand  $a_{\rm R}$  und nicht den Gitterfaktor beobachtet,

berechnet sich dieser zu:

$$a_{\rm R} = a_{(111)} \cdot \cos(30^{\circ}) \tag{5.12}$$

$$= \frac{\sqrt{3} \cdot a_{(111)}}{2} \tag{5.13}$$

$$= 3.326 \text{ Å}.$$
 (5.14)

Dies ermöglicht eine Umrechnung der Länge einer Si(557)-Einheitszelle auf die Einheitszelle des unrekonstruierten Silizium:

$$L = \frac{57.76}{3.326} \approx 17.37 \,\text{\AA}.$$
 (5.15)

Eine Si(557)-Einheitszelle ist somit 17 Si-Einheitszellen lang. Dieser Wert stimmt mit dem in der Literatur angegebenen überein [9]. Die Länge der beiden [113] Nanofacetten kann zu

$$\Delta \vec{k}_{||} = \frac{2\pi}{L_2} \approx 0.5326 \tag{5.16}$$

$$\Rightarrow L_2 = \frac{2\pi}{\Delta \vec{k}_{||}} \approx (11.80 \pm 1.21) \,\text{\AA}$$
(5.17)

bestimmt werden. Ein weiterer Vorteil einer Reciprocal Space Map, liegt in der Bestimmung der Anzahl der Stufen einer vizinalen Oberfläche mit Hilfe der Terrassenhöhe d. Der Abstand zweier unmittelbar benachbarter Reflexe der Silizium(557)-Oberfläche ergibt sich zu:

$$\Delta \vec{k}_{\perp} = \frac{2\pi}{d_1} \approx 1.15 \,\text{\AA}^{-1} \tag{5.18}$$

$$\Rightarrow d_1 = \frac{2\pi}{\Delta \vec{k}_\perp} = (9.67 \pm 0.48) \,\text{\AA}. \tag{5.19}$$

Der Lagenabstand von Silizium(111) beträgt  $\approx 3.1356$  Å und deutet somit auf eine Dreifachstufe. Eine lange [111]-Terrasse, sowie zwei Nanofacetten, die für die [113]-Orientierung ursächlich sind. Weiterhin lässt sich der Abstand zweier unmittelbar benachbarter Reflexe der Silizium(113)-Oberfläche ebenfalls bestimmen.

$$\Delta \vec{k}_{\perp} = \frac{2\pi}{d_2} \approx 0.9339, \ \text{\AA}^{-1}$$
(5.20)

$$\Rightarrow d_2 = \frac{2\pi}{\Delta \vec{k}_\perp} = (6.7280 \pm 0.45) \,\text{\AA}$$
(5.21)

$$\Rightarrow \text{Anzahl der Stufen} = \frac{6.7280}{3.1356} = 2.146 \tag{5.22}$$

Dieser Wert deutet darauf, dass es sich um zwei Nanofacetten handelt. Dies steht ebenfalls im Einklang mit dem in Abb. Abb. 3.5 dargestellten Modell.

Zur Klärung der destruktiven [113]-Stangen in der Reciprocal Space Map wurde in [10] mit Hilfe der kinematischen Näherung ein Beugungsbild berechnet siehe Abb. 5.42. Unter der Annahme einer durchgehend periodischen Oberfläche. Bestehend aus [111]-Terassen, sowie einer Dreifachstufe der [113]-Orientierung. So entstehen Bereiche destruktiver Interferenz wenn die Streuamplituden sowie die Streuphasen benachbarter Atome oder Atomreihen in einem endlichen Bereich des reziproken Raumes ungefähr gleich sind vgl. Gl. 2.22.



Abbildung 5.42: Mit Hilfe der kinematischen Näherung berechnetes Beugungsbild der Si(557)-Oberfläche. Unter der Annahme einer strikten Abfolge von [111]-Terrasse, sowie einer Dreifachstufe der [113]-Orientierung. Drei entscheidende Merkmale werden richtig beschrieben. Die Si(557)-Reflexe, sowie die von der [111]-Terrasse stammenden 3 Fundamentalreflexe. Des Weiteren ist die Dreifachstufe der [113]-Orientierung durch destruktive Stangen erkennbar. Entnommen und angepasst aus [10].

Abb. 5.43 zeigt die Halbwertsbreiten eines  $(1 \times 1)$ -Reflexes links, sowie eines [557]-Reflexes rechts. Um Aussagen über die Periodizität treffen zu können ist das Streuphasenintervall zu gering. Dies liegt daran, dass sich das Anfitten der Reflexe nicht für alle Energien durchführen lässt. Betrachtet man erneut Abb. 5.41 erkennt man eine Vielzahl an Bereichen mit sehr geringer oder keiner Intensität. Wählt man eine bestimmte Stange zur Untersuchung der Halbwertsbreite aus, so wird diese teilweise zu großen Teilen nicht im ganzen verfügbaren Intervall von  $\Delta \vec{k}_{\perp}$  abgebildet. Jedoch lässt sich erahnen, dass es Maxima im Verlauf der Halbwertsbreite der  $(1 \times 1)$ -Reflexe bei S = 4.5, sowie bei S = 5 gibt. An diesen Positionen ließen sich ebenfalls Intensitätsmaxima beobachten. Grundsätzlich ist anzumerken, dass die gemittelte Halbwertsbreite der (557)-Oberfläche  $\overline{FWHM}_{Si557}=2.696$  deutlich kleiner ist, als die gemittelte Halbwertsbreite eines Fundamentalreflexes der Si(111)-Oberfläche  $\overline{FWHM}_{Si111}=3.481$ . Bezogen auf den Realraum bedeutet das eine größere Domänengröße. Die mittlere Domänengröße beträgt 123.37 Å. Dies entspricht mehr als der doppelten Oberflächeneinheitszelle.



Abbildung 5.43: Halbwertsbreiten eines  $(1 \times 1)$ -Reflexes links, sowie eines (557)-Reflexes einer präparierten Si(557)-Oberfläche rechts.

## 5.5 Untersuchungen der mit Terbium bedampften Silizium(557)-Oberfläche

Abb. 5.44 zeigt eine Auswahl an 2D-Beugungsbildern bei einer Aufdampfmenge von  $0.54\,\text{\AA}$  bei verschiedenen Temperaturen.



**Abbildung 5.44:** 2D-Beugungsbilder der bedampften Si(557)-Oberfläche. Die Aufdampfmenge beträgt 0.81 Å. Es sind eindeutig  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe zu erkennen, rot eingekreist. Weitere Reflexe sind durch blaue Ellipsen dargestellt. Diese hängen mit der Vizinalität der Oberfläche zusammen. Mit steigender Temperatur ähnelt das Beugungsbild dem einer unbedampften Si(557)-Oberfläche.

Aufgrund der entlang der gelb gestrichelten Linie, entdeckten Reflexe, wurde für alle nachfolgenden Experimente, eine Probentemperatur von 600 °C beim Aufdampfen des

Terbiums gewählt.

Die in Abb. 5.45 dargestellten 2D-Beugungsbilder sind bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å links bwz. 0.54 Å rechts, aufgenommen worden. Es sind  $(7 \times 7)$ -Reflexe, sowie Reflexe einer  $(\times 2)$ -Struktur zu erkennen. Entlang der gelben Linie ist jedoch eine Veränderung zur unbedampften Oberfläche zu erkennen. Bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å werden schwache  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe sichtbar und sind durch rote Kreise kenntlich gemacht. Des Weiteren sind mögliche  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe, durch blaue Ellipsen verdeutlicht zu erkennen. Auch hier ist entlang  $(\bar{1},0)$ -(0,0)-(1,0) eine andere Periodizität zu erahnen als ohne Terbium. Anhand zweier 1D-Messungen ist der Verlauf entlang  $(\bar{1},0)$ -(0,0)-(1,0) für beide Bedeckungen in Abb. 5.46 zu dargestellt.



Abbildung 5.45: 2D-Beugungsbilder einer Si(557)-Oberfläche bei einer Elektronenenergie von 75 eV. Bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å sind weiterhin neben den  $(7 \times 7)$ -Reflexen Einflüsse der  $(2 \times 1)$ -Struktur sichtbar. Bei einer Bedeckung von 0.54 Å werden  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe sichtbar, rot eingekreist. Durch blaue Ellipsen sind mögliche  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe gekennzeichnet.

Man erkennt deutlich, dass zwischen zwei Hauptreflexen keine sechzehn Reflexe vorzufinden sind wie es bei einer unbedampften Probenoberfläche der Fall wäre. Stattdessen deuten die 1D-Messungen auf eine Siebenzähligkeit siehe Abb. 5.46. Der Abstand zweier dieser Reflexe ergab sich im Mittel zu  $(14.07 \pm 1)\%$  BZ. Der tatsächliche Wert für die Abstände bei einer Siebenzähligkeit ergibt sich zu  $\approx 14.29\%$  BZ. Die 1D-Messungen deuten auf eine Veränderung der Terrassen. Die strikte Ordnung, gebildet aus [111]-Terassen und [113]-Nanofacetten, ist durch das Aufdampfen größtenteils oder auch ganz verloren gegangen. Es lässt sich anhand der 1D-Messung erahnen, dass noch einige (557)-Reflexe bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å vorhanden sind. Die Siebenzähligkeit lässt sich auf die Si(111)-Terrasse zurückführen, welche in der typischen (7 × 7)-Struktur rekonstruiert, siehe Kap. 3.2.2. Die ungewöhnliche Form der linken 1D-Messung in Abb. 5.46 ist auf die gewählte Winkeleinstellung der SPA-LEED-Apparatur zurückzuführen.



Abbildung 5.46: 1D-Messungen einer Silizium(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elektronenenergie von 96 eV. Bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å lässt sich eine Siebenzähligkeit erkennen. Des Weiteren gibt es Si(557)-Reflexe. Bei einer Bedeckung von 0.81 Å ist eine eindeutige Benennung der  $(7 \times 7)$ -Reflexe nicht möglich, da diese wahrscheinlich mit Reflexen der [113]-Orientierung interferieren.

Weiterhin wurden zwei zusätzliche Untersuchungen bzgl. der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å und 1.08 Å durchgeführt. Abb. 5.47 zeigt die entsprechenden zwei Beugungsbilder. Bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å sind neben  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexen (rot), eindeutig  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe (blau) zu erkennen. Bei einer Aufdampfmenge sind die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe ebenfalls vorhanden, jedoch kann man die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Aufspaltung nicht mehr eindeutig erkennen. Diese Erkenntnisse lassen darauf schließen, dass die  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe ihren Ursprung möglicherweise in der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur haben. Dafür spricht auch die geringe Bedeckung von 0.54 Å.



**Abbildung 5.47:** 2D-Beugungsbilder der bedampften Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elektronenenrgie von 96 eV und einer Aufdampfmenge von 0.54 Å links bzw. 1.08 Å rechts.  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe sind rot gekennzeichnet.  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur Reflexe sind blau gekennzeichnet. Die Aufspaltung ist gesondert vergrößert dargestellt.

Eine Reciprocal Space Map bei der nächst höheren Bedeckung von 0.81 ist in Abb. 5.48 aufgeführt. Es sind Stangen der Silizium(111)-Oberfläche sichtbar, sowie zwei weitere Arten von Stangen. Eine Art Stangen konnte der Silizium(113)-Oberfläche zugeordnet werden. Die Zweite einer Silizium(001)-Oberfläche. Der Abstand zweier Stangen der Silizium(113)-Oberfläche wurde zu

$$\Delta \vec{k}_{||} = \frac{2\pi}{L} \approx 0.6622 \,\text{\AA}^{-1} \tag{5.23}$$

$$\Rightarrow L = \frac{2\pi}{\Delta \vec{k}_{||}} = (9.49 \pm 0.45) \,\text{\AA}$$
(5.24)

bestimmt. Unter Einbeziehung des Reihenabstandes  $a_{\rm R}$ :

$$L = (2.85 \pm 0.5) \cdot a_{\rm R} \,\text{\AA}.\tag{5.25}$$



Abbildung 5.48: Reciprocal Space Map einer Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Aufdampfmenge von 0.81 Å. Es sind  $(1 \times 1)$ -Fundamentalreflexe der Silizium(111)-Oberfläche erkennen, dargestellt durch einen gelben Pfeil. Des Weiteren sind Stangen der [113]-Nanofacetten durch grüne Pfeile gekennzeichnet, sowie eine Stange der [001]-Orientierung mit einem blauen Pfeil.

Dies würde darauf deuten, dass die Reflexe eindeutig den zwei Nanofacetten mit [113]-Orientierung zugeordnet werden können. Die tatsächliche Länge beträgt  $2\frac{2}{3} \cdot a_{\rm R} \approx 2.67 \cdot a_{\rm R}$ . Bei der Untersuchung  $\Delta \vec{k}_{\perp}$  der zur [113]-Orientierung gehörenden Reflexe ergab sich  $\Delta \vec{k}_{\perp}$  zu:

$$\Delta \vec{k}_{\perp} = \frac{2\pi}{d} \approx 0.9 \,\text{\AA}^{-1} \tag{5.26}$$

$$\Rightarrow d = \frac{2\pi}{\Delta \vec{k}_{\perp}} = (6.98 \pm 0.38) \,\text{\AA}$$
(5.27)

Dieses Ergebnis deutet auf eine Doppelstufe hin, da  $\frac{6.98 \text{ Å}}{3.135 \text{ Å}} \approx 2.23$ , was im Einklang zu den Ergebnissen der Literatur steht [16]. Ein Vergleich der ermittelten Größen bzgl. der

ĺ	[113]	unbedampft	bedamft 0.81 Å	unbedampft theor.
	<i>L</i> [Å]	$11.8 \pm 1.2$	$9.49 \pm 0.45$	8.87
	d [Å]	$6.73 \pm 0.30$	$6.98 \pm 0.38$	6.27

[113]-Orintierung einer unbedampften mit einer bedampften Si(557)-Oberfläche ist der Tab. 5.16 zu entnehmen.

**Tabelle 5.16:** Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die (113)-Facetten. L bezeichnet die Länge der Facetten und d die Terrassenhöhe.

Bei einer Betrachtung der Halbwertsbreiten eines  $(1 \times 1)$ -Reflexes, eines Reflexes der [113]-Facette siehe Abb. 5.49, sowie eines Reflexes der [001]-Facette, lassen sich die Domänengrößen abschätzen. Es ergibt sich eine mittlere Domänenegröße  $D_{(113)} \approx 41,94$  Å, sowie  $D_{(111)} \approx 42,94$  Å und  $D_{(001)} \approx 13.69$  Å. Für die Summe der drei mittleren Domänengrößen ergibt sich  $D_{\text{ges}} \approx 98.57$  Å. Für die Si(557)-Oberfläche ergibt sich  $D_{(557)} \approx 123.37$  Å. Diese Werte sind mit großer Sorgfalt zu genießen und stellen lediglich grobe Anhaltspunkte dar, denn die Streuung in der Halbwertsbreite der [113]-Reflexe ist sehr groß.



Abbildung 5.49: Halbwertsbreiten eines  $(1 \times 1)$ -Reflexes links, sowie eines Reflexes der [113]-Nanofacette rechts.



**Abbildung 5.50:** Modell der Si(557)-Oberfläche vor (oben) und nach dem Bedampfen (unten). Die Nanofacetten bzw. die [111]-Terassen wachsen zu Ungunsten der jeweils anderen Orientierung Es bilden sich [001]-Nanofacetten, jedoch bleibt eine makroskopische Si(557)-Oberfläche bestehen.

Vergleicht man die 2D-Beugungsbilder in Abb. 5.51, so erkennt man bei weiterer Erhöhung der Aufdampfmenge weiterhin Reflexe der [113]-Nanofacetten. Ob die mit roten Kreisen dargestellten Reflexe einer  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur zugeordnet werden können ist unwahrscheinlich. Es ist eher von einer  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur auszugehen, da diese Reflexe auch weit unter der Bedeckung von einer Monolage auftauchen. Des Weiteren kann aufgrund der Ergebnisse bzgl. Si(111) darauf geschlossen werden, dass sich eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur bildet.







**Abbildung 5.51:** 2D-Beugungsbilder einer Si(557)-Oberfläche bei Aufdampfmengen von 2.16 Å, 4.32 Å und 8.64 Å. Die Elektronenenergie beträgt 96 eV. Blaue Ellipsen kennzeichnen Reflexe der [113]-Nanofacetten. Rote Kreise kennzeichnen  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe, deren Ursprung evtl. in einer  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur liegt.

#### 5.5.1 Diskussion der Messergebnisse von Si(557)

Zunächst wurden Untersuchungen an der unbedampften Si(557)-Oberfläche durchgeführt. Es konnte festgestellt werden, dass die [111]-Terrassen in einer  $(7 \times 7)$ -Struktur rekonstruieren und dass die Si(557)-Einheitszelle aus 17 Oberflächeneinheitszellen ( $\approx 57.76$  Å) des Silizium besteht. Die Einheitszelle besitzt eine Dreifachstufe, die aus zwei Nanofacetten der [113]-Orientierung, sowie der [111]-Terrasse besteht. Die [113]-Orientierung äußert sich durch das Auftreten destruktiver Stangen in der RSM. Die SPA-LEED-Messungen zeigten erkennbare  $(\times 2)$ -Reflexe, welche ihren Ursprung in parallel zu den Stufen orientierten Dimeren haben, siehe [16]. Die in der Referenz [16] beobachtete  $(5 \times 5)$ -Rekonstruktion konnte nicht nachgewiesen werden. Dies spricht für einen sehr kleinen Fehlwinkel der Si(557)-Oberfläche in Bezug zur realen Oberfläche. Fehlwinkel von mindestens  $\pm 1^{\circ}$  können durch eine entsprechende Anzahl an  $(5 \times 5)$  rekonstruierten Terrassen ausgeglichen werden [47], die in eine sonst ausschließlich  $(7 \times 7)$  rekonstruierte Oberfläche eingebaut werden [13]. Eine weitere Ursache für das Auftreten der  $(5 \times 5)$ -Rekonstruktion wurde durch einen fehlerhaften Präparationsschnitt verursacht [16]. Beim Bedampfen des Si(557) mit Terbium, wurde eine Probentemperatur von 600 °C während des Aufdampfvorgangs gewählt. Bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å konnte die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur beobachtet werden, die durch aufgespaltene Reflexe in den 2D-Beugungsbildern beobachtet werden konnte. Bei doppelter Aufdampfmenge waren die Reflexe nicht mehr so deutlich aufgespalten. In den 1D-Messungen konnte gezeigt werden, dass die langreichweitige Ordnung der Si(557)-Oberfläche bei steigender Aufdampfmenge verschwindet. Neben der zuvor beobachteten Siebzehnzähligkeit trat eine Siebenzähligkeit auf, die von den [111]-Terrassen herrührt. Die RSM-Messung deckte eine Refacettierung der Si(557)-Oberfläche auf. Neben den [113]-Facetten treten [001]-Facetten auf. Es konnte ein prinzipielles Modell der Si(557)-Oberfläche erstellt werden. Dieses zeigt eine Veränderung der [113]-Nanofacetten zu Ungunsten der [111]-Terrassen auf. Dem entsprechend erfolgt an anderen Stellen ein Wachstum der [111]-Terrassen, sodass aus makroskopischer Sicht die Si(557)-Oberfläche bestehen bleibt.



**Abbildung 5.52:** Modell der Si(557)-Oberfläche vor (oben) und nach dem Bedampfen (unten). Die Nanofacetten bzw. die [111]-Terassen wachsen zu Ungunsten der jeweils anderen Orientierung Es bilden sich [001]-Nanofacetten, jedoch bleibt eine makroskopische Si(557)-Oberfläche bestehen.

Mit steigender Aufdampfmenge werden die aufgespaltenen Reflexe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur nicht mehr beobachtet.  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Relfexe bleiben jedoch. Ab welcher Aufdampfmenge diese Reflexe tatsächlich ihren Ursprung in der  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur besitzen ist nicht eindeutig zu beantworten, da der Übergang fließend verläuft. Tab. 5.17 gibt einen Überblick über die auftretenden Strukturen bzw. Rekonstruktionen.

$\begin{array}{c} \text{Struktur} \rightarrow \\ \text{Aufdampfmenge} [\text{Å}] \downarrow \end{array}$	$(7 \times 7)$	(×2)	$2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3} \text{ R30}^{\circ}$
0.27	×	×	
0.54		×	×
0.81			×
1.08			X

**Tabelle 5.17:** Auftretende Überstrukturen oder Rekonstruktionen auf Si(557) bei einer Probentemperatur von 600 °C während des Aufdampfvorgangs.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Einer der beiden Kerne dieser Masterarbeit ist die Untersuchung der mit Terbium bedampften Si(111)-Oberfläche. Die verwendete Untersuchungsmethode ist das SPA-LEED. Die aufgedampfte Menge an Terbium wurde mit Hilfe von AES bestimmt.

Die Probentemperatur wurde während des Aufdampfvorgangs zu 600 °C gewählt. Bei dieser Temperatur wurden mehr Reflexe und auch Strukturen beobachtet. Bei Aufdampfmengen von (0 - 0.27) Å wurde die  $(7 \times 7)$ -Rekonstruktion der Si(111)-Oberfläche beobachtet. Bei der kleinsten Aufdampfmenge von 0.135 Å konnte eine  $(2 \times 1)$ -Struktur, eine  $(5 \times 2)$ -Struktur in mindestens einer Rotationsdomäne und eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur beobachtet werden. Die  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur konnte bis zur höchsten Aufdampfmenge von  $\approx 1$  Å beobachtet werden. Bei  $\approx 1$  Å konnte allerdings wieder die  $(5 \times 2)$ -Struktur in mindestens einer Rotationsdomäne beobachtet werden. Aufgrund der ermittelten Werte für die Aufspaltung der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe, konnte ein Strukturmodell vorgeschlagen werden. Hierbei handelt es sich um die  $11\sqrt{3} \times 11\sqrt{3}$ R30°-Struktur. Eine Aneinanderreihung von fünf  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Strukturen und einer Antiphasendomäne Größe einer  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Einheiszelle. Es wurden Intensitätsverläufe der  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe in Abhängigkeit der Streuphase angefertigt. Daraus konnte gefolgert werden, dass sich der Lagenabstand der aufwachsenden Schicht nur unwesentlich von dem des Silizium unterscheidet. Das lässt darauf schließen, dass die Atome an der Oberfläche adsorbieren und sich lateral anordnen.

Für zukünftige Untersuchungen wäre es von Vorteil, insbesondere die sich in Richtung der  $(1 \times 1)$ -Fundamentalreflexe, befindenden und aufgespaltenen  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Reflexe genauer zu untersuchen. Dabei liegt der interessante Bereich der Untersuchungen zwischen 0.5 Å und 1 Å. Eine Untersuchung der vorgeschlagenen  $11\sqrt{3} \times 11\sqrt{3}$  R30°-Struktur mit Hilfe von ortsauflösenden Messmethoden, wie dem STM oder AFM wären von sehr großem Wert. Weiterhin ist die Bedeckungsabhängige Evolution der  $(5 \times 2)$ -Struktur zu klären. Hierbei ist es erforderlich für jede mögliche Rotationsdomäne Untersuchungen anzustellen um zu beobachten ob diese im Bereich zwischen (0.3 - 1) Å ebenfalls auftritt.

Den zweiten Kern bilden Untersuchungen der Si(557)-Oberfläche. Sowohl unbedampft, als auch mit Terbium bedampft. Bei der unbedampften Oberfläche konnte eine (7 × 7)-Rekonstruktion der Si(111)-Oberflächen beobachtet werden. Reflexe einer (×2)-Struktur, die auf Dimere zurückzuführen ist sind ebenfalls zu beobachten. Die Länge der Einheitszelle wurde zu 17 Oberflächeneinheitszellen der unrekonstruierten Si(111)-Oberfläche bestimmt. Weiterhin konnte eine Dreifachstufung der Si(557)-Oberfläche ermittelt werden. Destruktive Stangen in der RSM sind den zwei [113]-Facetten zuzuschreiben. Nach einer Aufdampfmenge von  $\approx 0.5$  sowie 1 Å konnte eine  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur beobachtet werden. Aufgrund der RSM konnte beobachtet werden, dass eine Refacettierung stattfindet. Es entstehen Nanofacetten mit [001]-Orientierung. Ein schematisches Modell der Refacettierung ergab eine Vergrößerung der Si(111)-Terrassen in einem Teil der Oberfläche bzw. Verkleinerung in einem Anderen, sodass sich [001]-Nanofacetten ausbilden. Auf makroskopischer Ebene bleibt die Si(557)-Oberfläche deshalb erhalten. Mit steigender Bedeckung sind neben Reflexen der [113]-Facetten auch  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Reflexe in den Beugungsbildern zu erkennen. Ab welcher Aufdampfmenge sich diese Reflexe auch tatsächlich einer  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Struktur zuordnen lassen und bis zu welcher Aufdampfmenge von einer  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$  R30°-Struktur ausgegangen werden kann, ist nicht eindeutig zu beantworten. Von großem Interesse wäre es von Vorteil zu bestimmen ob die Terbiumatome zunächst auf den [113]-Facetten oder den [111]-Terassen desorbieren. Eine Untersuchung der  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  R30°-Rekonstruktion, die durch die Stufenkanten limitiert wäre ebenfalls interessant. In der Literatur wurde auf den [113]-Terrassen von sog. Nanodrähten berichtet [16]. Dabei handelt es sich um 1D Rekonstruktionen der Si(557)-Oberfläche. Um Aussagen über Quantendrähte treffen zu können wären STM Messungen von Nöten.

# Danksagung

An dieser Stelle ist es Zeit sich bei denen Personen zu bedanken, die es mir ermöglicht haben an diesem Punkt anzukommen. In erster Linie danke ich natürlich Prof. Dr. Wollschläger, der mir ermöglicht hat diese Arbeit in der Arbeitsgruppe 'Dünne Schichten und Grenzflächen' anzufertigen. Ungeachtet dessen wie viel er zu tun hatte oder in welcher Situation er sich befand, sein großartiger Charakter verleitet andere Menschen dazu fröhlich zu sein. Er versteht wahrlich was von Humor. Ein großer Dank gebührt ebenfalls Prof. Dr. Christoph Tegenkamp, der die Rolle des Zweitprüfenden übernommen hat. Weiterhin möchte ich meinem Betreuer Frederic Timmer danken, der mir bei der Zusammenstellung und Korrektur der Masterarbeit, sowie Einweisung in dieses Gebiet der Physik sehr geholfen hat. Er hatte immer Zeit sich meiner Probleme anzunehmen. Natülich sei an dieser Stelle allen Mitgliedern der AG 'Dünne Schichten und Grenzflächen' für die super Atmosphäre gedankt.

Der Größte Dank geht natürlich an meine Familie. Ohne die stetige Unterstützung meiner Eltern wäre ich nicht an diesem Punkt in meinem Leben angelangt. Ich habe vieles von Ihnen gelernt, was mir in meinem Leben von großer Bedeutung ist. Unabhängig von Ihrer Situation haben Sie an letzter Stelle an sich gedacht. Vielen vielen Dank.

Ein sehr großer Dank geht ebenfalls an meine Freundin Jessica. Sie hat mich ebenfalls in jeder Lage unterstützt und mich immer wieder optimistisch gemacht. Für ihre große Geduld mit mir, insbesondere in der Zeit der Masterarbeit bin ich sehr dankbar und froh Sie an meiner Seite zu haben. Ihrer Familie sei an dieser Stelle ebenfalls gedankt. Auch Sie haben alles getan um mir das Anfertigen dieser Arbeit zu ermöglichen.

# Tabellenverzeichnis

5.1	Ermittelte Anteile an Si bzw. Tb auf der Probenoberfläche des Si(111) bei	
	verschiedenen Aufdampfmengen bei Raumtemperatur	35
5.2	Gemittelte Halbwertsbreiten für die zusätzlichen Reflexe entlang der	
	Hauptdiagonale $(0,\overline{1})$ - $(0,0)$ - $(0,1)$	50
5.3	Zusammenfassung der ermittelten Werte des 1. Teils der Auswertung	55
5.4	Gemittelte Abstände für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30° Aufspaltung bei einer	
	Aufdampfmenge von 0.27 Å	58
5.5	Gemittelte Halbwertsbreiten für symmetrie equivalente $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-	
	Reflexe entlang $(\overline{1},2)$ - $(0,0)$ - $(1,\overline{2})$	59
5.6	Gemittelte Abstände für symmetrie equivalente $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30° Aufspal-	
	tungen bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å	60
5.7	Halbwertsbreiten für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe entlang $(\bar{1},2)$ - $(0,0)$ - $(1,\bar{2})$	
	bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å	63
5.8	Gemittelte Abstände für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30° Aufspaltung bei einer	
	Aufdampfmenge von 1.08 Å $\ldots$	65
5.9	Halbwertsbreiten für symmetrie equivalente $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe ent-	
	lang $(\bar{1},2)$ - $(0,0)$ - $(1,\bar{2})$ bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å	66
5.10	Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-	
	Reflexe an den Positionen $\pm (0, 52.54)$	66
5.11	Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-	
	Reflexe an den Positionen $\pm (26.27, 52, 54)$	66
5.12	Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-	
	Reflexe an den Positionen $\pm (-31.47, 62.94) \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	67
5.13	Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-	
	Reflexe an den Positionen $\pm(-84.00, 168.00)$	67
5.14	Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-	
	Reflexe an den Positionen $\pm(-89.02, 178.04)$	67
5.15	Auftretende Überstrukturen oder Rekonstruktionen auf $Si(111)$ bei einer	
	Probentemperatur von 600 °C während des Aufdampfvorgangs	69
5.16	Gegenüberstellung der ermittelten Ergebnisse für die (113)-Facetten	82
5.17	Auftretende Überstrukturen oder Rekonstruktionen auf Si $(557)$ bei einer	
	Probentemperatur von 600 °C während des Aufdampfvorgangs	86

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Überblick über verschiedene Beugungsexperimemnte	5	
2.2	Annahmen der Oberflächenstrukturen für die kinematische Beugungstheorie	6	
2.3	Polarplot vom Absolutquadrat der atomar gestreuten Amplitude niede-		
	renergetischer Elektronen, gestreut an Platin	7	
2.4	Ewaldkonstruktionen	9	
2.5	Schematische Darstellung der modifizierten EWALD-Kugel	9	

2.6	Schematische Darstellung zur Entstehung des Gangunterschieds	10
2.7	Messgrößen und Zusammenhänge in einer RSM	11
2.8	Reciprocal Space Maps verschiedener Oberflächen	12
2.9	Schematische Darstellung der AUGER Eindringtiefe	13
2.10	Schematische Darstellung des Auger-Effekts.	14
2.11	AES-Spektrum.	15
2.12	AES-Spektrum von Rhenium	15
2.13	Relative AUGER-Sensitivitätsfaktoren	18
3.1	Struktur einer 3 ML-Schicht von $Tb_3Si_5$	21
3.2	Einheitszelle des Silizium sowie unrekonstruierte Oberfläche von Si(111).	22
3.3	DAS-Modell von Si(111)	23
3.4	Schematische Darstellung eines Silizium Kristalls mit (111)-Orientierung	24
3.5	Seitenansicht der Si(557)-Einheitszelle	24
4.1	Horizontaler Schnitt der Versuchskammer	25
4.2	Schematische Darstellung der Versuchskammer	26
4.3	SPA-LEED-Beugungsbild einer Si(111)-Oberfläche	27
4.4	Vertikaler Schnitt durch eine SPA-LEED-Apparatur	28
4.5	Aufbau eines Auger-Spektroskopie-Messplatzes.	29
4.6	Aufbau des verwendeten Verdampfers	30
4.7	Aufbau des verwendeten Probenhalters	32
5.1	AES-Spektrum von Terbium auf Silizium(111) bei einer Aufdampfmenge	
	von 800 Hz.	33
5.2	Anteile von Silizium bzw. Terbium an der Probenoberfläche in Abhängig-	
	keit der Aufdampfrate.	35
5.3	Auger-Spektren 0 Hz - 1600 Hz	36
5.4	SPA-LEED-Untersuchungen von Tb auf Si(111) aufgedampft bei Raum-	
	temperatur	37
5.5	SPA-LEED-Untersuchungen der mit Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche	
	gleicher Schichtdicke, aufgenommen bei 96 eV für drei verschiedene Auf-	
	dampftemperaturen	38
5.6	Beugungsbilder von Tb auf Si(111) bei einer Aufdampfmenge von 0.135 Å	40
5.7	1D-Scans entlang $(0,\bar{1})$ - $(0,0)$ - $(0,1)$ von Si $(111)$ bei einer Bedeckung von	
	0.135 Å	41
5.8	Beugungsbilder von Tb auf Si(111) bei einer Aufdampfmenge von 0.27 Å	42
5.9	Prinzipieller Aufbau einer $11\sqrt{3} \times 11\sqrt{3}$ R30°-Struktur	43
5.10	2D-Konzeptbild der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe	43
5.11	Beugungsbilder von Tb auf Si(111) bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å	45
5.12	2D-Beugungsbilder bei einer Aufdampfmenge von 0.81 Å	46
5.13	Beugungsbilder von Tb auf Si(111) bei einer Aufdampfmenge von 1.08 Å	47
5.14	1D-Fit für $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe entlang $(0,\bar{1})$ - $(0,0)$ einer mit 0.27 Å	
	an T b bedeckten Si(111)-Oberfläche bei einer Elektronenergie von 99 eV $$	48
5.15	Intensitätsverläufe in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Bedeckung	
	von 0.27 Å für aufgespaltene Reflexe entlang $(0,\bar{1})$ - $(0,0)$	49
5.16	Halbwertsbreiten in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Aufdampfmenge	
	von 0.27 A für aufgespaltene Reflexe entlang $(0,\bar{1})$ - $(0,0)$	50

5.17	1D-Scan in Richtung des $(0,1)$ -Reflexes bei einer Tb-Bedeckung von $0.27$	
	Å und einer Elektronenenergie von 84 eV.	51
5.18	Intensitätsverlauf in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Terbiumbede-	
	ckung von 0.27 A für den Reflex zwischen $(0, \frac{2}{7})$ und $(0, \frac{3}{7})$	51
5.19	Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Streuphase bei einer Tb-Bedeckung	
	von 0.27 A für den Reflex bei $(39.04, 19.52)\%$ BZ	52
5.20	1D-Messung und Fit bei einer Elektronenenergie von 102 eV entlang $(0,\overline{1})$ $(0,0)$ $(0,1)$ h is in A. Glassical for $0.54$ Å	50
5 01	(0,1)- $(0,0)$ - $(0,1)$ bet einer Aufdamptmenge von 0.54 A	53
5.21	Intensitatsverlaufe der aufgespaltenen Reflexe entlang $(0,1)$ - $(0,0)$ , bei einer	<b>F</b> 0
r 99	Aufdampimenge von 0.54 A	53
0.22	Haldwertsbreiten in Abnangigkeit der Streupnase bei einer Aufdampinnenge von $0.54$ Å für aufgegneltene Defleue antleng $(0.\bar{1})$ $(0.0)$	54
5 99	von 0.54 Å für aufgespatiene Renexe entlang $(0,1)$ - $(0,0)$	54 55
5.25	D- und 2D-Messung mki. Fit bei einer Aufdampinnenge von 1.08 A	50
0.24 5.95	1D Messungen einer mit Thebedeckten Si(111) Oberfläche bei einer Auf	50
0.20	dampmongo von $0.27$ Å ontlang der Reflevo $(\bar{1}, 2)$ $(0, 0)$ $(1, \bar{2})$	57
5 26	Fits einer 1D-Messung bei einer Elektronenenergie von 96 eV und 114 eV	51
0.20	entlang der $(\bar{1} 2)$ - $(0 0)$ - $(1 \bar{2})$ Beflexe bei einer Aufdampfmenge von 0.54 Å	58
5.27	Intensitätsverläufe der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe bei einer Bedeckung von	00
0.21	0.27 Å	59
5.28	Verlauf der Halbwertsbreite eines $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexes bei einer	00
0.20	Bedeckung von $0.27$ Å.	59
5.29	1D-Messungen einer mit Tb bedeckten Si(111)-Oberfläche bei einer Auf-	
	dampmenge von 0.54 Å entlang $(\overline{1},2)$ - $(0,0)$ - $(1,\overline{2})$	60
5.30	Intensitätsverläufe der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe um $\frac{150}{\sqrt{2}}$ % BZ bei einer	
	Bedeckung von 0.54 Å	61
5.31	Intensitätsverläufe der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R $30^{\circ}$ -Reflexe um $-\frac{50}{5}\%$ BZ bei einer	-
	Bedeckung von $0.54$ Å	62
5 32	Halbwertsbreiten für zwei $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ B30°-Beflexe bei einer Aufdampf-	02
0.02	menge von 0.54 Å entlang $(\bar{1},2)$ - $(0,0)$ - $(1,\bar{2})$	62
5.33	1D-Messung bei einer Elektronenernergie von 90 eV und einer Aufdampf-	-
	menge von $0.81$ Å	63
5.34	Intensitätsverläufe der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe um $\frac{150}{\sqrt{2}}$ % BZ bei einer	
	Bedeckung von 0.81 Å	64
5.35	Halbwertsbreiten für einen $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflex bei einer Aufdampf-	-
	menge von 0.81 Å entlang $(0,0)$ - $(1,\overline{2})$	64
5.36	Intensitätsverläufe der $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflexe um $\frac{150}{\sqrt{2}}$ % BZ bei einer	
	Bedeckung von 1.08 Å	65
5.37	Halbwertsbreiten für einen $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ R30°-Reflex bei einer Aufdampf-	
	menge von 1.08 Å entlang $(0,0)$ - $(1,\overline{2})$	65
5.38	2D-Beugungsbild einer Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elek-	-
	tronenenrgie von 96 eV	71
5.39	2D-Beugungsbild einer Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elek-	
	tronenenrgie von 96 eV	72

5.40	1D-Messung entlang $(\bar{1},0)$ - $(0,0)$ - $(1,0)$ bei einer Elektronenergie von 101 eV	72
5.41	Reciprocal Space Map einer Silizium(557)-Oberfläche.	73
5.42	Berechnete RSM für Si $(557)$	75
5.43	Halbwertsbreiten eines $(1 \times 1)$ -, sowie eines (557)-Reflexes.	76
5.44	2D-Beugungsbilder der bedampften Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei	
	einer Elektronenenrgie von 75 eV und einer Aufdampfmenge von 0.81 Å.	77
5.45	2D-Beugungsbilder einer Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elek-	
	tronenen rgie von 75 eV und einer Aufdampfmenge von 0.35 Å bzw. $0.81$	
	Å	78
5.46	1D-Messungen einer Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Elektro-	
	nenenrgie von 96 eV und einer Aufdampfmenge von 0.27 Å bzw. $0.54$	
	Å	79
5.47	2D-Beugungsbilder der bedampften Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei	
	einer Elektronenen rgie von 96 eV und einer Aufdampfmenge von 0.54 Å $$	
	bzw. 1.08 Å	80
5.48	RSM einer Si(557)-Oberfläche aufgenommen bei einer Aufdampfmenge	
	von 0.81 Å.	81
5.49	Halbwertsbreiten eines (1 $\times$ 1)-Reflexes, sowie eines Reflexes der Nanofacette	82
5.50	Modell der Si(557)-Oberfläche vor und nach dem Bedampfen $\ldots$	83
5.51	2D-Beugungsbilder einer Si(557)-Oberfläche bei Aufdampfmengen von	
	2.16 Å, 4.32 Å und 8.64 Å	84
5.52	Modell der Si(557)-Oberfläche vor und nach dem Bedampfen	86

### Literatur

- [1] Henzler, M., Ranke, W., Chiarotti, G., Landolt-Boernstein, New Series, Group III: vol. 24, Physics of Solid Surfaces, Springer, Berlin, Heidelberg, S. 225, 1993.
- [2] Baglin, J. E., d'Heurle, F. M., Petersson, C. S., Appl. Phys. Lett. 36, S. 594, 1980.
- [3] Tu, K. N., Thompson, R. D., Tsaur, B. Y., Appl. Phys Lett. 38, S. 626, 1981.
- [4] Knapp, J. A., Picraux, S. T., Appl. Phys. Lett. 48, S. 466, 1986.
- [5] Netzer, F. P., Phys. Condens. Matter t, S. 991, 1995.
- [6] Franz, M., Appelfeller, S., Rychetsky, M., Dähne, M., Surf. Sci. 609, S. 215, 2013.
- [7] Oelke, R., SPA-LEED Untersuchungen von Dy-induzierten Nanostrukturen auf Si-Oberflächen. Masterarbeit, Universität Osnabrück, 2015.
- [8] Henzler, M., Surf. Sci. 19, S. 159, 1970.
- [9] Kirakosian, A., McChesney, J. L., Bennewitz, R., Crain, J. L., Himpsel, F. J., Surf. Sci. 498, L109, 2002.
- [10] Henzler, M., Zhachuk, R., The step structure of the Si(557) surface, Thin Solid Films 428, S. 129-132, ELSEVIER, 2001.
- [11] Wiethoff, C., Morphologische Transformation der Silizium (112) Oberfläche durch Metalladsorption: Facettierung vs. Stabilisierung. Dissertation, Universität Duisburg-Essen, 2010.
- [12] Bruns, D., SPA-LEED-Untersuchungen zur Epitaxie von Praseodymoxidschichten auf Si(111). Diplomarbeit, Universität Osnabrück, 2008.
- [13] O'Connor, D. J., Sexton, B. A., Smart, R. St. C., Surface Analysis Methods in Materials Science. Springer, Berlin, 2003.
- [14] Calbick, C. J., The Physics Teacher. S. 1-8, 1963.
- [15] Davisson, C. J., Germer, L. H., Phys. Rev. 30,705, 1927.
- [16] Krieg, U., 1D-Plasmonen in Ag-Nanodrähten auf vicinalem Si(557). Dissertation, Universität Hannover, 2014.
- [17] Bruns, D., Structure and morphology of ultrathin iron and iron oxide films on Ag(001). Dissertation, Universität Osnabrück, 2012.
- [18] Van Hove, M. A., Weinberg, W. H., Chan, C. M., Low Energy Electron Diffraction, Springer, Berlin, 1986.
- [19] Gevers. S., Praseodymia on non-passivated and passivated Si(111) surfaces. PhD thesis, University of Osnabrück, 2011.
- [20] Herzog, P. Kopitzki, K., Einführung in die Festkörperphysik. Teubner, 2002.

- [21] Hoegen, M. H. von, Growth of semiconductor layers studied d'by spot profile analyzing low energy electron diffraction. Zeitschrift für Kristallographie, 214, S. 591-629, 1999.
- [22] Haefer, R. A., Oberflächen- und Dünnschicht-Technologie. Springer, Berlin, 1987.
- [23] Vickerman, J. C., Gilmore, I. S., Surface Analysis The Principal Techniques. Wiley, 2009.
- [24] Hofmann, S., Auger- and X-Ray Photoelectron Spectroscopy in Materials Science. Springer, Berlin, 2013.
- [25] Langeron, J. P., Surf. Interface Anal. 14, S.381, 1989.
- [26] McGuire, G. E., Auger Electron Spectroscopy Reference Manual. Plenum Press, New York & London, 1979.
- [27] Fröhlich, H., Hirsch, P. B., Mott, N. F., Heeger, A. J., Brook, R., Surface Analytical Techniques. Clarendon Press, Oxford, 1990.
- [28] Gryzinski, M., Phys. Rev. A138, S. 305, 1965.
- [29] Reuter, W., Shinoda, G., Kohra, K., Ichinokawa, T., Proc. 6th int. Conf. X-ray optics and Microanalysis. University of Tokyo, 1972.
- [30] Ichimura, S., Shimzu, R., Langeron, J. P., Surf. Sci. 124, L49, 1983.
- [31] Seah, M. P., Dench, W. A., Surf. Interface. Anal. 1,2, 1979.
- [32] Davis, L., Palmberg, P., MacDonald, N., Handbook of Auger Electron Spectroscopy. Second edition. Physical Electronics Division, Perkin-Elmer Corporation, 1976.
- [33] Langer, T,. Untersuchung ultradünner Schichten mit Auger Spektroskopie. Diplomarbeit, Universität Osnabrück, 2008.
- [34] Oura, K., Lifshits, V. G., Saranin, A. A., Zotov, A. V., Katayama, M., Surface Science An Introduction. Springer, Berlin, 2003.
- [35] Uversky, V. N., Kretsinger, R. H., Permyakov, E. A., Encyclopedia of Metalloproteins, 2013.
- [36] Sicius, H., Seltenerdmetalle: Lanthanoide und dritte Nebengruppe Eine Reise durch das Periodensystem. Springer, Berlin, 2015.
- [37] Fritsche, R. Van der Waals-terminierte Si(111) Oberflächen und Grenzflächen Präparation, Morphologie und elektronische Eigenschaften. Dissertation, TU Darmstadt, 2004.
- [38] Feenstra, R. M., Lutz, M.A., Formation of the 5x5 reconstruction on cleaved Si(111) surfaces studied by scanning tunneling microscopy. Phys. Rev. B, 42(8), S. 5391-5394, 1990.
- [39] Ikawa, K., Sato, M., Step wandering on Si(111) vicinal face near the 1x1 <-> 7x7 transition temperature with drift of adatoms parallel to steps. Physical Review E 77, 062601, 2008.
- [40] Qian, G. X., Chadi, D. J., Total energy calculations on the Takayanagi model for the Si(111) 7x7 surface. 4(4), S. 1079-82, 1986.

- [41] Oh, D. H. et al, Atomic structure model of the reconstructed Si(557) surface with a triple step structure: Adatom-parallel dimer model. Phys. Rev. B /7:S. 155430, 2009.
- [42] Teys, S. A. et al, Orientation and structure of triple step staircase on vicinal Si(111) surfaces. Surf. Sci. 600(21), S.4878-4882, 2006.
- [43] Henzler, M, Zhachuk, R., The step structure of the Si(557) surface. Thin solid films 428, S. 129-132, 2003.
- [44] Sauerbrey, G., Verwendung von Schwingquarzen zur Wägung dünner Schichten und zur Mikrowägung. Zeitschrift für Physik A, 155, S. 206-222, 1959.
- [45] Vandré, S., Kalka, T., Preinesberger, C., Manke, I., Eisele, H., Dähne-Prietsch, M., Meier, R., Weschke, E., Kaindl, G., Growth and electronical structure of Dy-silicide on Si(111). Appl. Surf. Sci., S. 123-124:100, 1998.
- [46] Vandré, S., Kalka, T., Preinesberger, C., Dähne-Prietsch, M., Epitaxial growth and electronic structure of lanthanide silicides on n-type Si(111) Journal of Vacuum Science and Technology B, 17:1682, 1999.
- [47] Kim, M. K., et al. Control of a quasi-one-dimensional phase of a Si nanostructure Vicinal Si(557) surfaces. Phys. Rev. B 81, S. 085312, 2010.

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

Osnabrück, den 16. Februar 2017

<sup>(</sup>Waldemar Schreiber)