

Hochauflösende  
LEED – Untersuchungen  
des Wachstums  
einkristalliner Metallschichten

Dem Fachbereich Physik  
der Universität Hannover  
zur Erlangung des Grades  
Doktor der Naturwissenschaften  
Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

von

Dipl. Phys. G. Meyer  
geboren am 24. April 1956  
in Minden / Westfalen

1987

Referent: Prof. Dr. M. Henzler

Korreferent: Dr. habil. K. Jacobi

Tag der Promotion: 30. Juni 1987

## Inhaltsverzeichnis

	Seite
Zusammenfassung	
1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen	3
2.1 Kinematische LEED-Theorie	3
2.2 Gestufte Oberflächen	4
2.3 Kommensurable und inkommensurable Adsichten	7
2.4 Einfluß von Gitterschwingungen in LEED	8
2.5 Wachstumsmoden	9
3. Experimenteller Aufbau	10
3.1 Vakuumsystem	10
3.2 Das SPA-LEED System	10
3.3 Die Verdampferquellen	15
3.4 Der Kristallhalter	15
3.5 Kristallpräparation	16
3.6 Reinigung der Probe im UHV	17
4. Pb/Cu(111)	19
4.1 Überblick	19
4.2 Die Pb-Gitterkonstante im Bereich der Monolage	22
4.3 Das Wachstum oberhalb der Monolage	27
4.4 Kompression im Bereich einer Monolage	31
4.5 Schmelzverhalten der Pb - Schichten	34
4.6 Diskussion	36

	Seite
5. Ag/Al(111)	40
5.1 Messergebnisse	40
5.2 Diskussion	43
6. Cu/Cu(111)	44
6.1 Messergebnisse	44
6.1.1. Bedeckungsabhängigkeit	44
6.1.2. Veränderung der Substrattemperatur	47
6.2. Auswertung und Diskussion	55
7. Schluß	65
Abkürzungsverzeichnis	67
Literaturverzeichnis	68

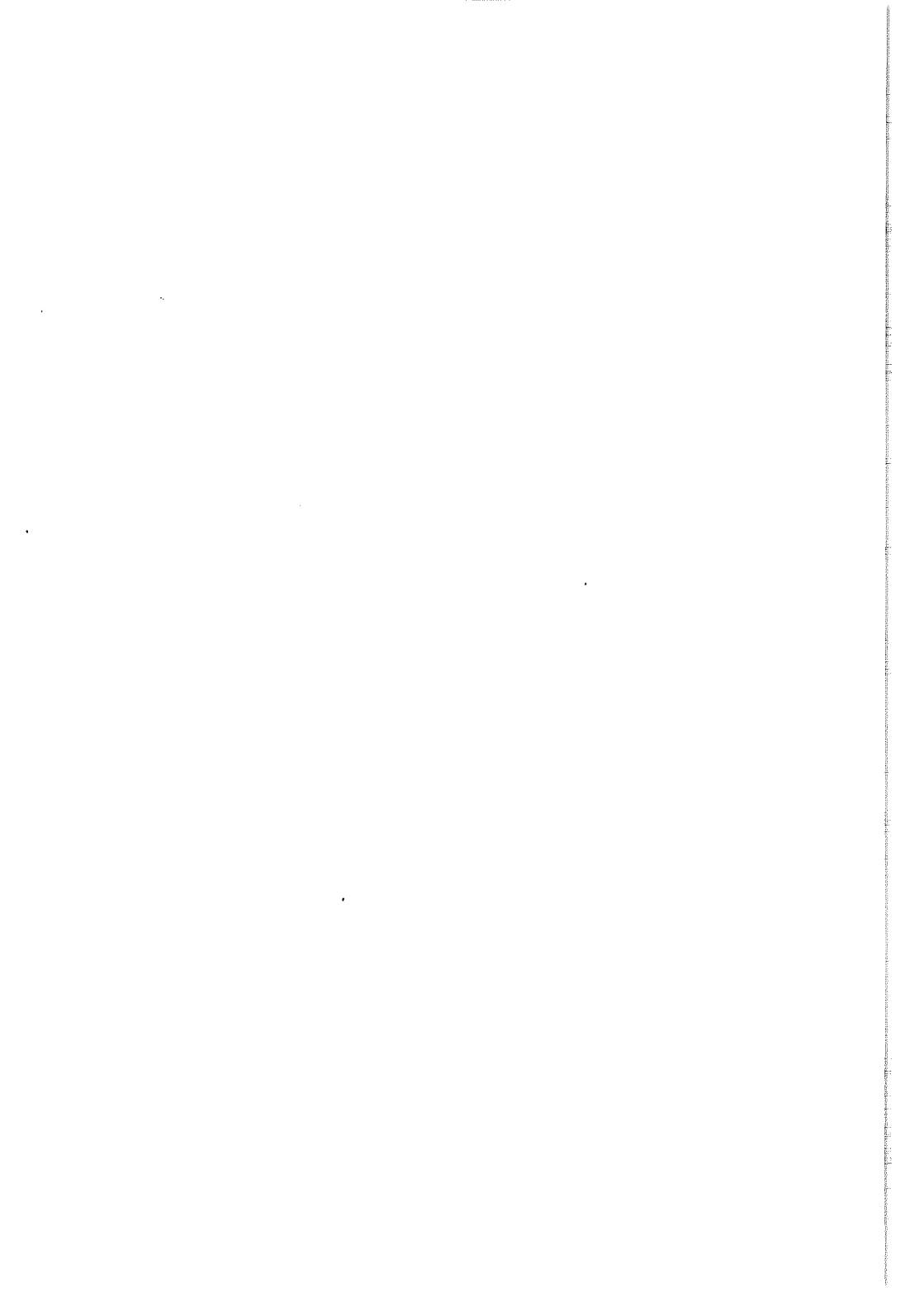
## Zusammenfassung

Das epitaktische Wachstum von Pb/Cu(111), Ag/Al(111) und Cu/Cu(111) wurde mit einem hochauflösenden LEED-System untersucht. Alle drei Systeme wachsen epitaktisch. Es wurden Lage und Profil der Beugungsreflexe ausgewertet.

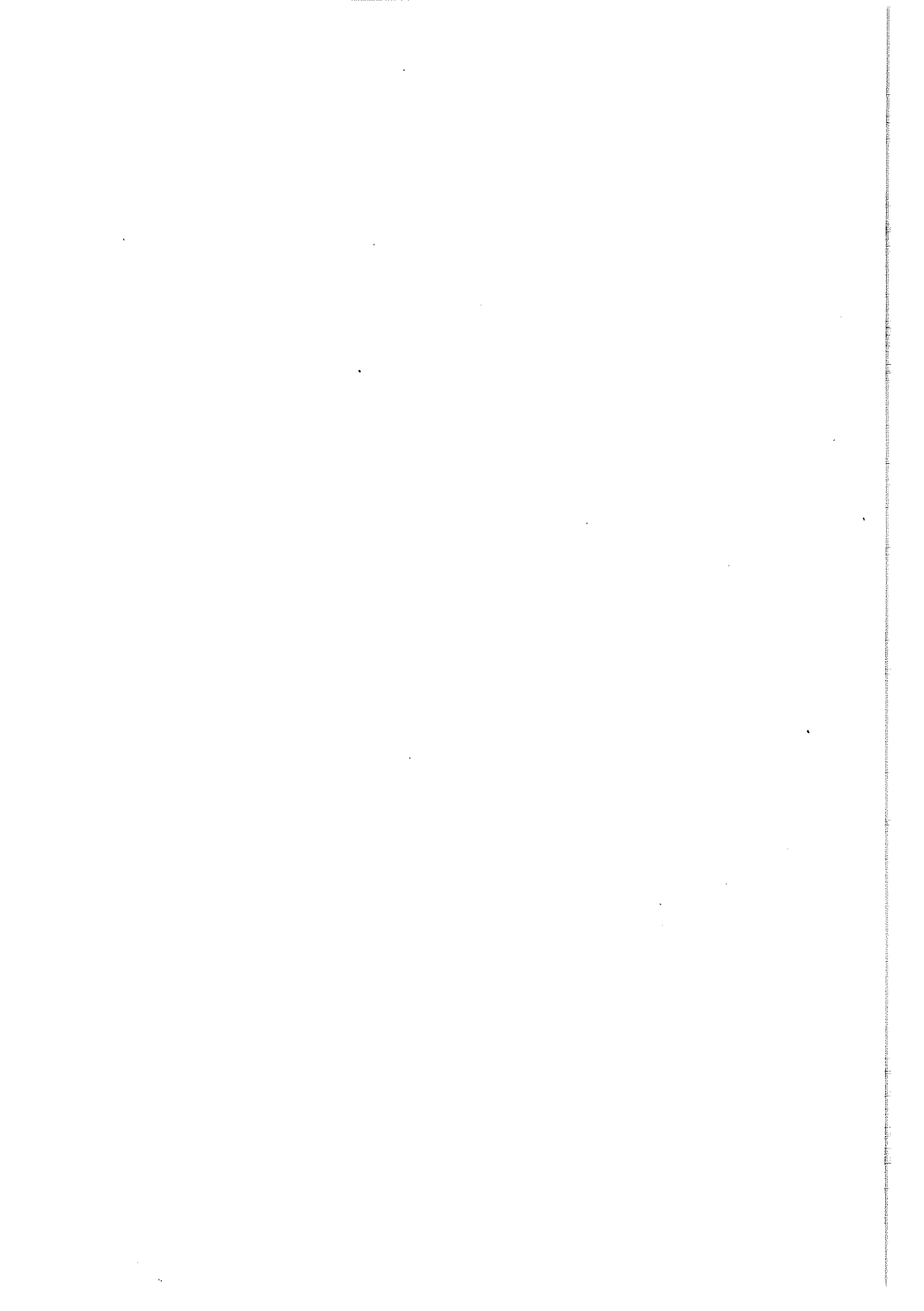
Blèi wächst zu Beginn auf Cu(111) mit einer Gitterkonstante auf, die je nach Aufdampftemperatur 0.3% -0.8% größer ist als der normale Pb-Volumenabstand. Bei einer Bedeckung von einer Monolage komprimiert die Pb-Schicht, hervorgerufen durch eine starke Wechselwirkung mit dem Substrat. Die Kompression geht in diesem Bereich linear mit der Bedeckung bis ein Endwert von 3.2% Kompression erreicht wird. Die Kompression ist höher, als in der bekannten p(4x4)-Überstruktur (2.65%). Die Gitterkonstante der Schicht wird nicht durch die Periodizität der Unterlage beeinflusst. Mit der Kompression ist eine Erhöhung des Schmelzpunktes um mehr als 200 K auf über 800 K verbunden. Für Bedeckungen oberhalb der Monolage wird bei  $T > 300$  K ein 3d-Insel- und bei  $T = 200$  K ein Schicht-für-Schicht-Wachstum beobachtet.

Ag wächst auf Al(111) zunächst pseudomorph auf (d.h. Ag ist 0.9% komprimiert) und komprimiert nach Erreichen der geschlossenen Monolage auf insgesamt 5.4%. Die Kompression wird dadurch erklärt, daß die Gitterkonstante der freien 2d-Ag-Schicht kleiner ist als die entsprechende Volumengitterkonstante.

Cu/Cu(111) zeigt im untersuchten Bereich kein Schicht-auf-Schicht-Wachstum. Das Fehlen von Oszillationen besagt, daß hier die Terrassenkanten eine unüberwindliche Schwelle für die Diffusion darstellen. Im Vergleich zu Silizium ist der Einfluß von Kristalldefekten auf das Wachstum bedeutend, da fehlerfreie Cu-Kristalle nicht verfügbar waren.









## 1. Einleitung

Die Untersuchung epitaktischen Wachstums ist eines der Schwerpunktgebiete der Oberflächenphysik. Neben einer großen technologischen Bedeutung, insbesondere für die Halbleitertechnologie, ist sie aber auch in Bezug auf grundlagenorientierte Fragestellungen von großem Interesse. Es hat sich gezeigt, daß das Wachstum sehr empfindlich auf das Vorhandensein von Defekten reagiert. (Fremdatome, Kristallfehler..). Selbst das Wachstum auf idealen Oberflächen muß Stadien durchlaufen, wo es Abweichungen von der idealen Oberfläche gibt. (Keimbildung, 2d-Inseln). Die Reflexprofilanalyse von LEED-Beugungsreflexen ( LEED = Low Energy Electron Diffraction ) bietet hier die Möglichkeit mit geringem rechnerischen Aufwand Aussagen über die strukturelle Beschaffenheit der Oberfläche zu machen /1/. Im Rahmen der kinematischen Näherung der LEED-Theorie lassen sich qualitativ und quantitativ eine Reihe von Obeflächen-defekten beschreiben. (Stufen, Domänen, Facetten, Inseln). Die maximal nachweisbare Größe dieser Defekte wird bestimmt durch die Instrumentenfunktion des verwendeten LEED-Systems und die Genauigkeit mit der die Parameter des Reflexprofils bestimmt werden können.

Die große Transferweite (>200nm) und die hohe Dynamik des hier benutzten LEED-Systems kommen diesen Forderungen entgegen. So lassen sich die Keimbildungsphase sowie das nachfolgende Wachstum von Beginn an untersuchen. Hochauflösende SPA-LEED Messungen (SPA - LEED : Spot Profil Analysing - LEED ) gibt es bislang nur für Si/Si(111). Dieses System ist von großem technologischen Interesse. Cu/Cu(111) hat gegenüber diesem System den Vorteil daß es eine einfachere Kristallstruktur besitzt (Cu - fcc ,Si - Diamant) . Ein Nachteil von Metallen ist aber, daß sich ihre Kristalle bei weitem nicht so gut herstellen lassen , wie es für Halbleiter heutzutage Standard ist. (Si läßt sich absolut versetzungsfrei ziehen).

Für heteroepitaktische Systeme kommen noch eine Vielzahl von Faktoren hinzu /2,3/. Das sind der Gitterkonstantenunterschied (misfit) zwischen Substrat und Adsorbat, die unterschiedlichen Oberflächenenergien, Legierungsbildung oder Diffusion des Adsorbats in das Substrat und viele weitere Faktoren. Das wirft viele interessante Fragen auf . Wie ist die Orientierung der Monoschicht relativ zur Unterlage und welche Gitterkonstante hat die Monoschicht? Welchen Einfluß hat die Periodizität der Unterlage auf die Monoschicht und wie wirkt sich die Bindung zur Unterlage auf die Wechselwirkung zwischen den Adsorbatatomen aus? Pb/Cu(111) bietet sich hier an, da es schon mehrfach untersucht worden ist und ein relativ einfaches System darstellt /4-7/.(Keine Diffusion in das Substrat, keine Vielzahl an Überstrukturen, glatte Unterlage, gute Untersuchbarkeit). Die Kompression von Pb um ca.3% bei Erreichen einer Monolage liegt für normale LEED-Systeme im Bereich der Auflösungsgrenze, macht also zur eingehenderen Untersuchung ein hochauflösendes LEED-System erforderlich. Das Schmelzen solcher Pb-Schichten erlaubt die Beobachtung von 2d-Phasenübergängen.

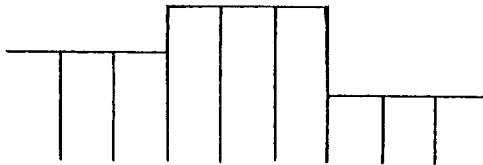
Es gibt mehrere Gründe für das Auftreten einer Kompression in einer 2d-Schicht. Zum einen kann eine starke Adsorbat-Substrat-Wechselwirkung zu einer erhöhten Dichte in der ersten Schicht führen. Das Substrat versucht soviel Adatome wie möglich zu binden. Der andere Fall ist ,daß eine 2d-Schicht von vorherein eine andere Gitterkonstante als der entsprechende Volumenkristall hat. Durch die erhöhte Ladungsträgerkonzentration zwischen den Atomen in der Schicht ergibt sich ein geringerer Bindungsabstand. Aus diesem Grund wurde System Ag/Al(111) untersucht, das ebenfalls eine Kompression zeigt.

## 2. Theoretische Grundlagen

### 2.1. Kinematische LEED-Theorie

Die Beugung von niederenergetischen Elektronen wird seit langem zur Untersuchung der Struktur von Oberflächen benutzt /8,9/. Gegenüber Röntgenbeugung besteht hierbei der Vorteil hoher Oberflächenempfindlichkeit, das heißt einer geringen Eindringtiefe der Elektronen. Grund dafür sind die hohen elastischen Streuquerschnitte der Elektronen. Damit verbunden ist aber, daß man zur Beschreibung der Streuung die Vielfachstreuung berücksichtigen muß.

Unter gewissen Voraussetzungen läßt sich aber doch eine Einfachstreuung zur Beschreibung heranziehen. Dazu fasst man alle Atome einer Einheitszelle oder noch grössere Bereiche, wie zum Beispiel Terrassen, mitsamt den darunterliegenden Volumenatomen zu einer Streueinheit zusammen.



Damit ergibt sich für die Amplitude der Streuung

$$A = \sum_i f_i(\vec{k}, \vec{k}') \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_i)$$

Sämtliche Mehrfachstreueffekte werden in die  $f_i(\vec{k}, \vec{k}')$  gesteckt. In den  $f_i(\vec{k}, \vec{k}')$  steckt also die Information über die Anordnung und das Streuverhalten der Atome in dieser Streueinheit. Aussagen darüber lassen sich über eine Vielfachstreuungstheorie (dynamische LEED-Theorie) erhalten.

Die gemessene Intensität ist dann

$$I = \sum_{i,j} f_i f_j^* \exp(i(\vec{k} - \vec{k}')(\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \quad \vec{s} = \vec{k} - \vec{k}'$$

Sind alle  $f_i$  identisch, also es gibt nur eine Sorte von Streuern, so gilt

$$I = |f|^2 \sum_{i,j} \exp(i\vec{s}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)) = F \cdot G$$

Das heißt die gemessene Intensität ist das Produkt aus dem Formfaktor  $F$ , der den Einfluß der Einheitszelle beschreibt, und dem Gitterfaktor  $G$ , der die Information über die Anordnung der Streueinheiten beschreibt.

Die Summe läßt sich auch als Integral über eine Dichtefunktion  $\rho(\vec{r})$  beschreiben, d.h.

$$A = f \int \rho(\vec{r}) \exp(i\vec{s} \cdot \vec{r}) d\vec{r}$$

$$I = |f|^2 \int \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') \exp(i\vec{s}(\vec{r} - \vec{r}')) d\vec{r} d\vec{r}'$$

$$I = |f|^2 \int \varphi(\vec{r}) \exp(i\vec{s}\vec{r}) d\vec{r} \quad \varphi(\vec{r}) = \int \rho(\vec{R}) \rho(\vec{r} + \vec{R}) d\vec{r}'$$

$\varphi(\vec{r})$  ist die Autokorrelationsfunktion und beschreibt die Wahrscheinlichkeit 2 Atome im Abstand  $\vec{r}$  voneinander zu finden.

## 2.2. Gestufte Oberflächen

Ideal geordnete Oberflächen liefern im Beugungsbild Reflexe, deren Form  $\delta$ -Funktionen sind. Reflexe solcher Form bekommt man, wenn die Autokorrelationsfunktion im unendlichen nicht verschwindet. Alle anderen Anteile der Autokorrelationsfkt. führen zu Reflexen mit endlicher Breite, deren Profilform

von dem jeweiligen Ordnungszustand der Oberfläche abhängt. Zur Auswertung der Reflexprofile von gestuften Oberflächen, wie sie zum Beispiel bei Epitaxieuntersuchungen auftreten, wurden zwei verschiedene Verfahren angewandt.

Das erste Verfahren /10/ läßt beliebige Terrassenverteilungen zu, beschränkt sich aber auf die Gegenphasebedingung. Man erhält ein Zweizustandsmodell der Oberfläche, da alle Streuer auf zwei Schichten projiziert werden können.

Es gilt dann mit

$$N_{\Gamma} = \int_{-\pi}^{+\pi} (1 - \cos k) I(k) \cos(k \Gamma) dk / \int_{-\pi}^{+\pi} (1 - \cos k) I(k) dk$$

$$\text{und} \quad \tilde{N}_g = \sum_{\Gamma} \exp(i g \Gamma) N_{\Gamma}$$

$$P_{\Gamma} = - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dg \exp(i g \Gamma) \tilde{N}_g / (1 + \tilde{N}_g)$$

$P(\Gamma)$  ist die Terrassenbreitenwahrscheinlichkeit für eine Terrasse mit der Breite  $\Gamma$ . Die  $P(\Gamma)$  lassen sich also direkt aus der gemessenen Reflexprofilform  $I(k)$  bestimmen. Im weiteren wird noch die Größe

$$P'(\Gamma) = P(\Gamma) \Gamma / \sum_{\Gamma} P(\Gamma) \Gamma$$

benutzt, d.h. die Wahrscheinlichkeit ein Atom in einer Terrasse mit der Breite  $\Gamma$  zu finden.

Bei dem zweiten Verfahren /11/ geht man von einer geometrischen Verteilung der Stufen aus. (D.h. die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Stufe ist konstant, also ortsunabhängig). Damit läßt sich die Theorie reversibler Markov-Ketten anwenden.

Es stellt sich heraus ,daß sich die Intensität allgemein schreiben läßt:

$$I(S_x, S_z) = \frac{N_0}{a} \left( \sum_n \delta(S_x - 2\pi n/a) \cdot (A(S_z) \cdot \delta(S_x) + \sum_p B(S_z) \text{Lor}(S_x, \lambda_p)) \right)$$

$$\text{Lor}(S_x, \lambda_p) = (-2/a \ln \lambda_p) / (1/a^2 \cdot \ln^2 \lambda_p + S_x^2)$$

Die Intensität setzt sich also zusammen aus einer Summe von Lorentzfunktionen verschiedener Hwbe. und einer  $\delta$ -Funktion. Die Anzahl der Lorentzfunktionen ist durch die Anzahl der beteiligten Schichten festgelegt, also bei n Schichten gibt es n-1 Lorentzfunktionen. Die relative Wichtung der Funktionen hängt von der Phase  $S_z$  ab. D.h. bei nur zwei Schichten bleibt die Hwb. der Reflexverbreiterung konstant.

Für die Autokorrelationsfunktion gilt dann

$$\varphi(u_x, u_z) = \alpha_0(u_z) + \sum_p \alpha_p(u_z) \lambda_p u_x^{u/a}$$

Der Anteil  $\alpha_0(u_z)$  bestimmt die Größe der  $\delta$ -Funktion in der gemessenen Intensität, d.h. der Anteil der Autokorrelationsfkt., der über große Entfernungen erhalten bleibt. Das Auftreten der  $\delta$ -Funktion bleibt auch für nicht-geometrische Stufenverteilung bestehen.

Ist man nur an der vertikalen Rauigkeit interessiert, so braucht man nur die Abhängigkeit der Intensität der  $\delta$ -Funktion betrachten /12/. Es gilt

$$I_{00}(k_z) = G_{00} \left( \sum_n p_n^2 + 2 \sum_{n_1, n_0} p_{n_1} p_{n_0} \cos(k_z(n_1 - n_0)d) \right)$$

wobei mit  $p_n = \theta_n - \theta_{n+1}$  der für die Elektronen sichtbare Anteil der n-ten Schicht bezeichnet ist.

Da sich bei Energieänderung der Formfaktor der Streuer empfindlich ändern kann, benutzt man zur Auswertung  $I_{00}/(I_{00}+I_s)$  mit  $I_s$  als Intensität der Schulter. Gilt für beide Intensitäten der gleiche Formfaktor, so fällt dieser heraus.

Es sei abschließend noch einmal betont, daß alle vorgestellten Auswertemethoden von identischen Streueinheiten ausgehen, d.h. Abweichungen im Formfaktor für z.B. Kantenatome sind nicht enthalten.

### 2.3. Kommensurable und inkommensurable Adsichten

Betrachtet man die bei der Heteroepitaxie vorliegenden Adsichten, so wird deren Anordnung auf der Oberfläche durch die Wechselwirkung der Adsorbatsatome untereinander und mit dem periodischen Potential der Unterlage bestimmt.

Die in der Adsicht vorhandene Periodizität bezeichnet man als kommensurabel, wenn zwischen den Translationsvektoren der Adsorbatschicht und der Unterlage ein rationales Verhältnis besteht. Im Beugungsbild macht sich das im Auftreten äquidistanter Überstruktureflexe zwischen den Normalreflexen bemerkbar. (Doppelbeugung an Unterlage und Adsicht oder Struktur der Adsicht durch die Unterlage moduliert). Für inkommensurable Strukturen gilt dieses rationale Verhältnis nicht mehr. Es kommt dann zum Auftreten von sogenannten Satellitenreflexen um die Normalreflexe.

Besonderes Interesse haben in den letzten Jahren Übergänge zwischen diesen beiden Anordnungen gefunden. (C-I Übergänge). Am eingehendsten wurden dabei Edelgas-Adsorbatsysteme untersucht, da sie sowohl experimentell als auch theoretisch am leichtesten zu behandeln sind./13,14/.

## 2.4. Einfluß von Gitterschwingungen im LEED

Die inelastische Streuung von LEED-Elektronen mit Phononen ist nur mit einer geringen Energieänderung verbunden. Diese Elektronen, auch als quasielastisch bezeichnet, sind mit üblichen meßtechnischen Mitteln nicht von den elastischen zu trennen. Üblicherweise beschreibt man den Einfluß der Gitterschwingungen in einem Modell, das die Streuung an einem stationären Gitter beschreibt, deren Atome statistisch aus der Ruhelage ausgelenkt sind / 8/. Das ist im Prinzip eine Näherung, da z.B. bei tiefen Temperaturen nicht alle Phononen gleichmäßig angeregt sind und eine Korrelation der Auslenkungen der Atome erhalten bleibt.

Beschreibt man die Orte der Atome über  $\vec{R}_i = \vec{r}_i + \vec{u}_i$  so gilt

$$I(\vec{S}, t) = |f|^2 \sum_{j,k} \exp(i\vec{S}((\vec{r}_j + \vec{u}_j) - (\vec{r}_k + \vec{u}_k)))$$

Man mißt nur den zeitlichen Mittelwert  $\langle \rangle$

$$I(\vec{S}) = \langle I(\vec{S}, t) \rangle = |f|^2 \sum_{j,k} \exp(i\vec{S}(\vec{r}_j - \vec{r}_k)) \cdot \langle \exp(i\vec{S}(\vec{u}_j - \vec{u}_k)) \rangle$$

Ist  $|\vec{u}_j| \ll \lambda$  so gilt  $\langle \exp(i\vec{S}(\vec{u}_j - \vec{u}_k)) \rangle = \exp(-1/2 \langle (\vec{S}(\vec{u}_j - \vec{u}_k))^2 \rangle)$

$$\begin{aligned} I(\vec{S}) &= |f|^2 \exp(-\langle (\vec{S}\vec{u})^2 \rangle) \left( \sum_{j,k} \exp(i\vec{S}(\vec{r}_j - \vec{r}_k)) \exp(\langle (\vec{S}\vec{u}_j)(\vec{S}\vec{u}_k) \rangle) \right) \\ &= |f|^2 \exp(-\langle (\vec{S}\vec{u})^2 \rangle) \left( \sum_{j,k} \exp(i\vec{S}(\vec{r}_j - \vec{r}_k)) (1 + \langle (\vec{S}\vec{u}_j) \rangle \langle (\vec{S}\vec{u}_k) \rangle + \dots) \right) \\ &= |f|^2 (I_0 + I_1 + I_m) \end{aligned}$$

Der erste Term ist der Nullphononen- oder Bragg-anteil,  $I_1$  der Einphononen-,  $I_m$  der Multiphononenanteil.

$e^{\langle (\vec{S}\vec{u})^2 \rangle}$  heißt der Debye-Waller-Faktor, der hier

$$e^{\langle (\vec{S}\vec{u})^2 \rangle} = e^{-2W} = \exp \left( -12h^2 T \cos^2\theta / (Mk_B \Theta_D^2 \lambda^2) \right)$$



Beschränkt man sich auf den Bragganteil so gilt

$$I = I_0 e^{-2W}$$

### 2.5. Wachstumsmoden

Man unterscheidet 3 Wachstumsarten./15,16/. Das sind das Schicht-für-Schicht-Wachstum (Frank van der Merwe, complete wetting, Typ I) ,Schicht + 3d-Inseln Wachstum (Stranski-Krastanov, incomplete wetting, Typ II) und das 3d-Insel Wachstum (Vollmer-Weber, non-wetting, Typ III).

Thermodynamisch unterscheiden sich diese Wachstumsmoden durch die Abhängigkeit ihres chemischen Potentials von der Schichtdicke  $n$ . Schichtwachstum tritt nur auf solange gilt  $d\mu/dn|_T > 0$ . Im umgekehrten Fall  $d\mu/dn|_T < 0$  wächst das Adsorbat in 3d-Inseln auf. Ist am Anfang  $d\mu/dn|_T > 0$  und wechselt später das Vorzeichen so haben wir den Stranski-Krastanov-Modus.

Verantwortlich für das unterschiedliche Wachstum ist die parallel zur Oberfläche vorhandene Spannung in der Adsorbat-Schicht, die vom Substrat hervorgerufen wird. Das kommt zum einen durch eine hohe Bindungsenergie zum Substrat, d.h. das Substrat versucht so viele Adsorbatatome wie möglich zu binden./17,18/. Zum anderen muß die Periodizität des Substrats berücksichtigt werden und somit die Orientierung der Adsorbat-Schicht relativ zur Unterlage./18/. Ein anderer wichtiger Punkt ist ,daß die Bindungsverhältnisse (elektronische Struktur) in einer 2d-Schicht von denen im Volumen abweichen können. Die Gleichgewichtsgitterkonstante in der 2d-Schicht (oder auch in Clustern) weicht dann vom Volumenwert ab. Dieser Zusammenhang wird durch theoretische Arbeiten unterstützt, muß aber experimentell noch nachgewiesen werden.

### 3. Experimenteller Aufbau

#### 3.1. Vakuumsystem

Die Messungen wurden in zwei verschiedenen Ultrahochvakuumapparaturen durchgeführt. In der ersten wurden die Voruntersuchungen an Pb/Cu(111) und Cu/Cu(111) sowie die Kristallpräparation durchgeführt. Es standen eine kommerzielle 4-Gitter-LEED-Optik sowie ein CMA-Analysator für die Augermessungen zur Verfügung.

Die SPA-LEED Messungen wurden in dem zweiten Rezipient durchgeführt. Der Rezipient ist zweifach mit einer weichmagnetischen Speziallegierung ausgekleidet, um die für SPA-LEED Messungen störenden Magnetfelder abzuschirmen. Es stehen dort zwei übereinander angeordnete Meßebenen zur Verfügung. In der oberen erfolgte die Kristallpräparation und in der unteren befinden sich das SPA-LEED, die Verdampferquellen und ein Halbkugelanalysator für Augermessungen. Abb.3.1 zeigt einen Überblick über die untere Messebene.

Das Vakuumsystem wird mit einer 1801/sec Ionengetter- und einer stickstoffkühlbaren 11001/sec Titansublimationspumpe gepumpt. Nach mehrtägigem Ausheizen, was wegen der doppelten Auskleidung, die als Strahlungsschild wirkt, nötig ist, wird ein Basisdruck von  $5 \cdot 10^{-9}$  Pa erreicht.

#### 3.2. Das SPA-LEED System

In diesem Abschnitt sollen die wesentlichen Eigenschaften des benutzten SPA-LEED Systems dargestellt werden /19,20/.

Eine Übersicht über das gesamte Messsystem ist in Abb.3.2. dargestellt. Das System kann in zwei Betriebsarten benutzt werden. Im Schirmbetrieb besteht zunächst die Möglichkeit

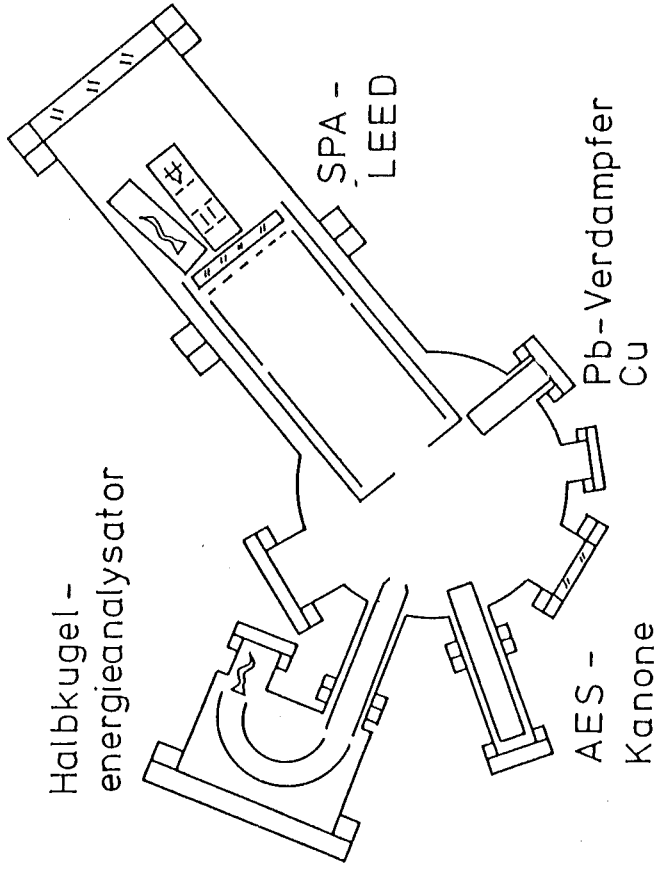


Abb.3.1: Schnitt durch die UHV-Apparatur in der SPA-LEED-Meßebe-ne.

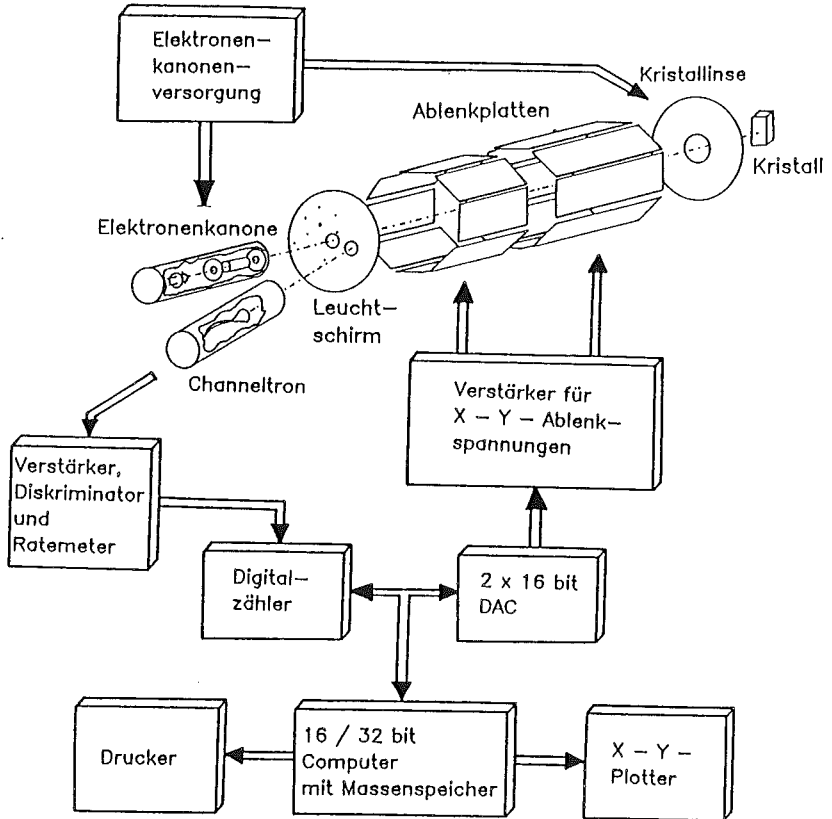


Abb.3.2: Gesamtüberblick über das SPA-LEED-System

sich einen schnellen Gesamtüberblick über das Beugungsbild zu verschaffen, analog dem einer 4-Gitter-LEED-Optik.

Im Hauptbetriebsmodus des SPA-LEED wird die gestreute Intensität mit einem Channeltron nachgewiesen. Dazu wird mit Hilfe zweier hintereinanderliegender elektrischer Oktopole das Beugungsbild über eine Eintrittsblende von in diesem Fall 0.1mm Durchmesser geschwenkt. Die rein elektrische Ablenkung vermeidet dabei alle Schwierigkeiten, die mit einer mechanischen Bewegung verbunden sind. Eine Linse direkt vor dem Kristall bildet die Elektronenquelle im Maßstab 1:1 auf die Channeltroneintrittsblende ab. Der Rasterbereich des Oktopols liegt bei ca.  $\pm 18^\circ$ . Es ließen sich bislang Transferweiten von bis zu 210 nm nachweisen. (Si(111))

Da sowohl die einfallenden ( $\vec{k}_0$ ) als auch die gestreuten ( $\vec{k}_1$ ) Elektronen durch den Oktopol abgelenkt werden, muß man eine leicht modifizierte Ewaldkonstruktion benutzen. Abb 3.3. Der Winkel zwischen  $\vec{k}_0, \vec{k}_1$  ist durch die mechanische Konstruktion festgelegt und beträgt  $9.5^\circ$ .

Die Datenaufnahme erfolgt mit dem in Abb 3.2. gezeigten Computersystem. Es besteht die Möglichkeit lineare Scans, Bogenscans und zweidimensionale Flächenscans aufzunehmen. Die Lage der Scans wird in Polarkoordinaten eingestellt, wodurch die Symmetrien des reziproken Raumes in einfacher Weise berücksichtigt werden. Typische Messzeiten pro Punkt liegen zwischen 30 msec und 1 sec. Linearscans haben zwischen 100 bis 1000 Punkten, Flächenscans  $30 \times 30$  bis  $100 \times 100$  Punkte. Die Messzeit für Linearscans bewegt sich daher im Bereich einiger Minuten, die der Flächenscans bei 10-20 Minuten. Zusätzlich neben den Scandaten werden weitere Werte wie Probenstrom, Temperatur etc. aufgenommen. Die so gewonnenen Daten können dann direkt weiteren Auswerteverfahren unterzogen werden.

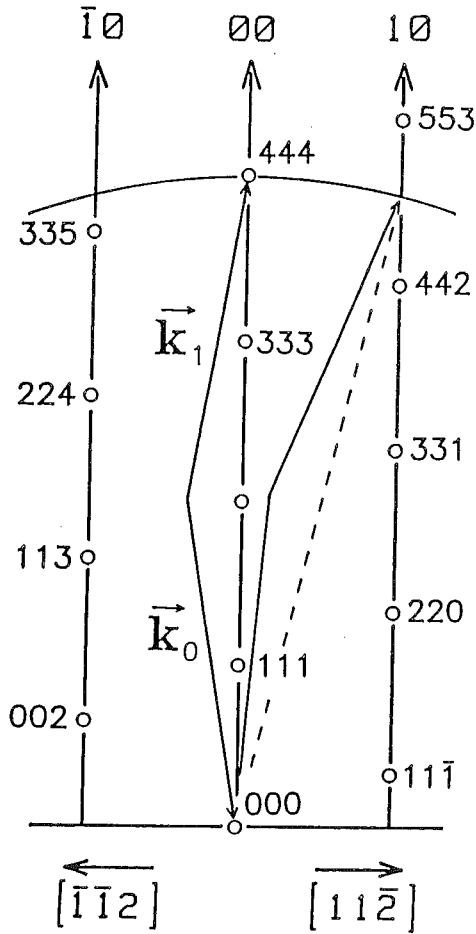


Abb.3.3: Reziprokes Gitter für eine Cu(111)-Oberfläche mit modifizierter Ewaldkonstruktion. Der Mittelpunkt der Ewaldkugel liegt hier beim 000 und der Radius ist durch den Betrag des Streuvektors gegeben.

### 3.3. Die Verdampferquellen

Die Verdampfung des Blei (5N5 Ventron) erfolgte aus einer Molybdäntasche heraus. Diese wurde durch Wolframdrähte gehalten, die als Heizung für die Tasche dienten. Generell braucht man zum Verdampfen Temperaturen die über dem Schmelzpunkt von Blei 601K liegen, d.h. im Bereich von 800K bis 1000K. Die Aufdampfraten lassen sich damit in weiten Bereichen von typisch .1ML/Min bis 10ML/Min einstellen. Eine Verdampferfüllung reichte für mehr als 1000ML. Die Verdampfungsrate wurde über eine am Verdampfer angebrachte Schwingquarzwage bestimmt. Auf Grund der hohen Masse der Bleiatome ergaben sich Frequenzänderungen von 150 Hz/ML.

Da Cu Wolfram benetzt und keine grossen Aufdampfmengen benötigt wurden, wurde das Cu aus einer Cu-Perle die an einem Wolframdraht hing verdampft. Typische Verdampfungsraten lagen bei .1ML/Min bis 1ML/Min. Die Verdampfungsrate wurde ebenfalls mit einer üblichen Schwingquarzwage bestimmt. (80 Hz/ML)

Nach sorgfältigem Ausgasen der Verdampfer stieg der Druck während des Verdampfens nicht über  $3 \cdot 10^{-8}$  Pa an.

### 3.4. Der Kristallhalter

Der Cu-Kristall (10mm\*10mm\*1mm) wurde zwischen 2 Wolframdrähten (0.25mm) gehalten (Abb.3.4.). Dazu wurden vorher mit einer Funkenerosionssäge 2 seitliche Nuten in den Kristall gesägt. Beim Einbau wurde darauf geachtet, daß der Kristall möglichst spannungsfrei saß. Der Kristall konnte über das Heizen der Wolframhalterungsdrähte (direkter Stromdurchgang) geheizt werden. Über Kühlung des Halterungsblockes konnte der Kristall noch gekühlt werden. Die Kristalltemperatur ließ sich damit im Bereich von 120K bis 1300K

einstellen. Die Temperaturmessung erfolgte über ein NiCr-Ni Thermoelement, welches an der Rückseite des Cu-Kristalls mit einem Keramikkleber angebracht wurde. Das ergab eine stabile mechanische Verbindung und einen guten Wärmekontakt über den gesamten Temperaturbereich. Verunreinigungen durch dieses Verfahren konnten nicht festgestellt werden. Mit einem PID-Regler konnte die Temperatur auf .5 K konstant gehalten werden.

### 3.5. Kristallpräparation

Dieses Thema soll im folgenden näher betrachtet werden. Für die im Rahmen dieser Arbeit gemachten Untersuchungen wurden möglichst fehlerfreie Oberflächen benötigt. Das heißt also, daß auch das Volumenmaterial frei von Fehlern sein muß. Ein Material wie Silizium, welches sich völlig versetzungsfrei herstellen läßt, wäre aus dieser Sicht am besten geeignet. Bei Metallen ist das aber nicht möglich. Zusätzlich erhöht die nachfolgende Präparation weiter die Fehlerdichte.

Als Rohmaterial diente ein in (111)-Richtung gezogener Cu-Einkristall. (Metal Crystals & Oxides LTD, Cu SNS, Bridgeman gezogen in Graphittiegeln). Von diesem wurden mit einer Funkenerosionssäge  $10 \times 10 \times 1.2$  mm große Cu-Stücke abgesägt. Um die dabei entstandene relativ dicke gestörte Schicht ( $\geq 0.1$  mm) abzutragen, wird der Kristall zunächst in  $\text{HNO}_3$  geätzt (10-20 sec). Danach erfolgte die Präzisionsorientierung des Kristalls ( $< 0.1^\circ$ ) / 22/. Dabei wird die Orientierung in einem Röntgendiffraktometer bestimmt und der Kristall danach passend geläppt. Nach dem Läppen wird der Kristall dann noch kurz in  $\text{HNO}_3$  geätzt. Zu diesem Zeitpunkt hat der Kristall dann eine Fehlorientierung von  $.1^\circ$  sowie eine Röntgenhalbwertsbreite von  $< .3^\circ$ .

Als nächster Schritt wird ein chemo-mechanisches Polieren



des Kristalls durchgeführt /23/. Man nimmt dazu ein Baumwolltuch, spannt es über eine Glasplatte und tränkt es leicht mit folgender Ätzflüssigkeit. Man mischt 90ml HCl + 10ml Polyethylen-glycol 400. Diese Mischung wird gesättigt mit Kupfer II chlorid (Falls vorhanden auch mit gasförmigem HCl). Weiterhin setzt man eine Lösung aus 1g von 2mercaptobenzothiazol(oder anderes Mercaptoderivat) in 100ml konzentrierter HCl an. Diese Lösung wird kurz vor dem Polieren der anderen Lösung zugegeben. Leichtes hin-und herreiben auf dem Tuch liefert dann nach kurzer Zeit eine polierte Oberfläche. Nach dem Polieren wird die Probe in warmer 10% Orthophosphorsäure gespült und dann in Aceton aufbewahrt. Die RöntgenHwbn. liegen jetzt bei ca.  $0.1^\circ$  bis  $0.15^\circ$  Vor dem Einbau der Cu-Probe ins UHV wurde die Probe dann noch einmal chemisch geätzt. Dazu wird die Probe ca. 3-4 mal für 3-4 sec in eine Polierätze getaucht. Zusammensetzung:  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  (1:1:1),  $60^\circ - 70^\circ \text{ C}$  warm /24/.

Die ersten Proben wurden nicht mit dem chemo-mechanischen Verfahren sondern durch mechanisches Polieren mit Diamantpaste präpariert. Die RöntgenHwbn. waren für diese Proben um mehr als den Faktor 2 schlechter. (Ob das generell für mechanisches Polieren gilt kann nicht gesagt werden.)

Bei allen Polier- und Läppvorgängen war die Probe in Cu eingebettet um ein Abrunden des Kristalls zu vermeiden. In bezug auf dieses Verhalten verhielt sich das chemo-mechanische Polierverfahren auch besser. Um die Abrundung des Kristalls zu überprüfen wurde die WinkelHwb. eines Laserstrahls ausgewertet. Es ergaben sich Abweichungen von  $0.1^\circ$ .

### 3.6. Reinigung der Probe im UHV

Tempert man Cu im UHV über 1000K so segregieren Kohlenstoff und Schwefel an der Oberfläche aus. Zur Reinigung der Probe wird daher mehrfaches Sputtern und Tempern durchgeführt.

Gesputtert wird mit Argonionen von ca. 600 - 700 eV Energie. Bei Argondrucken von  $1 \cdot 10^{-2}$  Pa ergaben sich Kristallströme von 4uA, was einer Sputterrate von ca. 1ML/min entspricht. Nach jedem Sputterzyklus von ca. 20 min wurde die Probe auf 1000-1100K getempert. Dieses Verfahren wurde solange wiederholt, bis sich im Auger-Spektrum keine Verunreinigungen mehr nachweisen ließen. (Verhältnis der Peak to Peak Intensitäten von Cu(63eV) und C(271eV) größer 200).

Durch dieses Verfahren wird das Volumen nicht vollständig verarmt, aber es kommt im oberflächennahen Bereich zu einer Verarmung. Die Proben ließen sich danach bis zu einer Temperatur von 800-900 K tempern ohne daß Kohlenstoff an die Oberfläche kam. Nach längerem Heizen bei Temperaturen über 1100 K erscheinen wieder Kohlenstoff und Schwefel an der Oberfläche.

#### 4. Pb/Cu(111)

In den folgenden Abschnitten werden die Messergebnisse der Heteroepitaxieuntersuchungen von Pb auf Cu(111) Flächen dargestellt. Die Messungen erstrecken sich auf die Bestimmung der Gitterkonstanten der Pb-Schichten, des Wachstumsmodus bei verschiedenen Substrattemperaturen und des Schmelzpunktes. Es wurden meist Pb-Bedeckungen von 0-5 Monolagen teilweise bis 200 ML, bei Aufdampftemperaturen von 200K bis 550K untersucht.

##### 4.1. Überblick

Die Volumengitterkonstanten von Pb und Cu sind  $4.950 \text{ \AA}$  und  $3.615 \text{ \AA}$  . /8/. Das Verhältnis beider ist also .738 ,damit also fast 3:4. Für Bedeckungen  $< 1\text{ML}$  wächst Pb mit nahezu seiner Volumengitterkonstante auf. Die Pb-Schicht ist in diesem Bereich also inkommensurabel zur Unterlage. Im LEED sind dann neben den Cu-Reflexen die Pb-Reflexe sowie deren Kombinationen zu sehen. (Abb. 4.1a). Bei Tempern zeigt sich ein Verschwinden der Pb-Reflexe bei ca 600K. Dort liegt auch der Volumenschmelzpunkt von Blei (601K). Erhöht man die Bedeckung über eine Monolage Pb hinaus (1ML Pb soll im folgenden eine Pb-Schicht mit normalem Pb-Volumenabstand sein) so sieht man eine Kompression des Bleis in der ersten Schicht. Mit dieser Kompression verbunden ist eine Erhöhung der Schmelztemperatur von 150K bis 200K. Diese komprimierte Schicht hat annähernd den Abstand  $4/3$  vom Cu-Abstand. Eine Abweichung von diesem Wert kann mit einem normalem LEED nicht beobachtet werden. Daher wird diese Schicht in der Literatur als kommensurable  $p(4 \times 4)$  Schicht bezeichnet. (Abb. 4.1b)

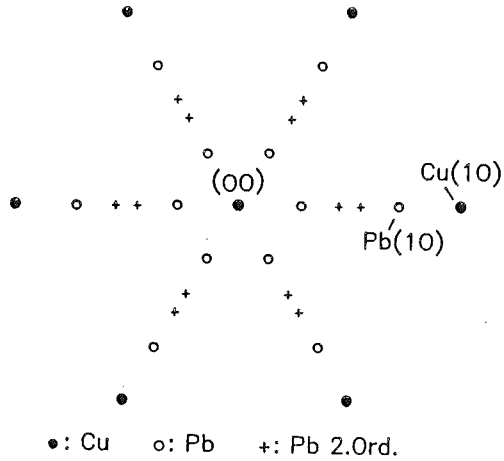


Abb.4.1.a: Schematisches LEED-Bild einer Pb-Schicht mit normalem Volumenabstand auf Cu(111). Nur die Pb-Reflexe zwischen den Cu-Normalreflexen sind eingetragen.

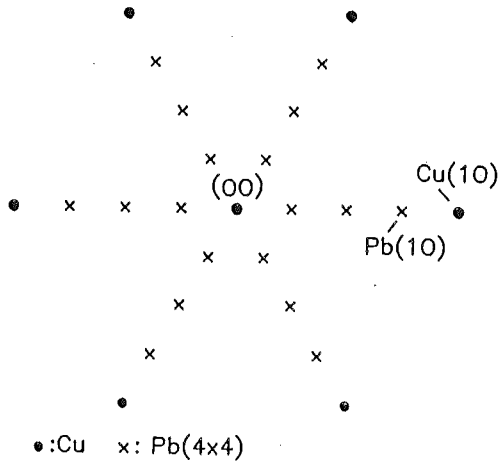


Abb.4.1.b: LEED-Bild einer p(4x4)-Überstruktur von Pb/Cu(111). Die Pb Reflexe 2.Ordnung fallen zusammen. Die Schicht ist um 2.65% komprimiert.

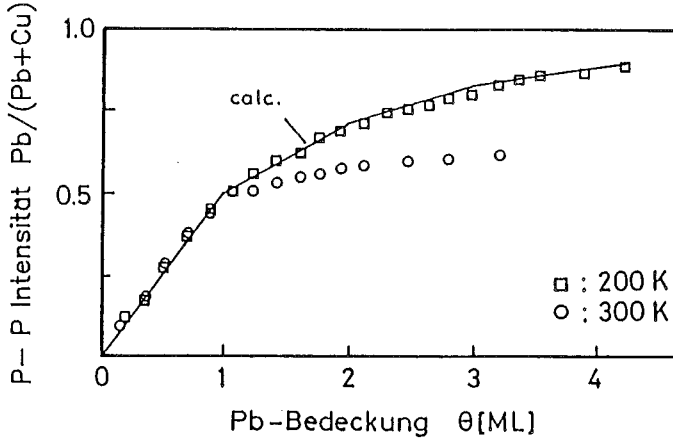


Abb.4.2.: Bedeckungsabhängigkeit des Augersignals (Verhältnis  $\text{Pb}(93\text{eV})/(\text{Pb}(93\text{eV})+\text{Cu}(60\text{eV}))$ ) während Pb-Adsorption. Die eingetragene Linie ist für ein Schicht für Schicht-Wachstum berechnet. Bei  $T = 300\text{ K}$  ist ein 3d-Inselwachstum zu sehen.

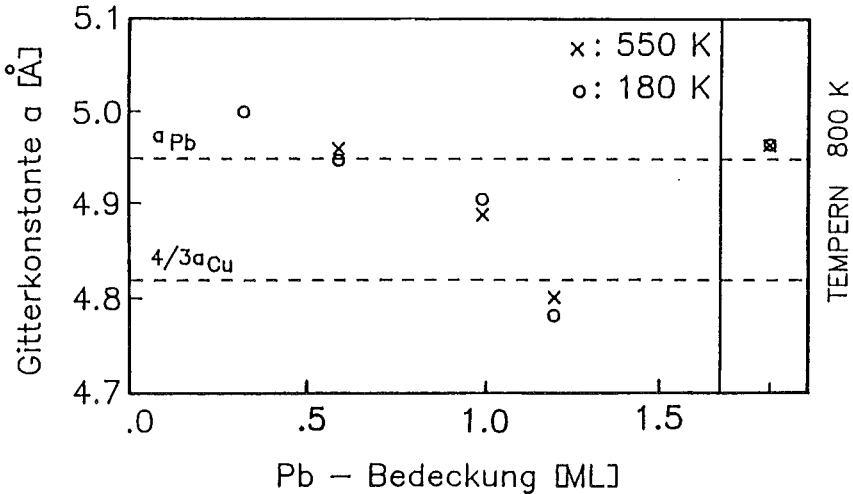


Abb.4.3.: Abhängigkeit der Gitterkonstante der Pb-Schicht für Aufdampftemperaturen von 180 K und 550 K. Die Gitterkonstante der maximal komprimierten Schicht ist bei beiden Temperaturen kleiner als in einer  $4 \times 4$ -Überstruktur.

Das Wachstum oberhalb der Monolage hängt von der Substrattemperatur ab. Bei gekühlter Probe (200 K) sind nach 3ML nur Pb-Reflexe zu sehen ,während bei höheren Temperaturen ( $T > 300\text{K}$ ) auch bei großen Bedeckungen (bis zu 200ML bei  $T = 550\text{K}$ ) neben Pb-Reflexen sowohl die Cu-Reflexe als auch die Reflexe der "p(4x4)" Schicht zu beobachten sind. Entsprechende Auger-Daten dazu sind in Abb. 4.2 aufgetragen. Die durchgezogene Linie entspricht einem theoretisch berechneten Schicht-für-Schicht Wachstum./25/. Pb wächst also bei 200K in einem Schicht-für-Schicht Wachstum auf, während es bei 300K in 3d-Inseln (Stranski-Krastanov-Mode) aufwächst.

Unter Ausnutzung der hohen Winkelauflösung und Dynamik des SPA-LEED Instruments wurden im folgenden die einzelnen Epitaxiebereiche im Detail untersucht.

#### 4.2. Die Pb-Gitterkonstante im Bereich der Monolage

Ausgehend von der reinen Cu-Oberfläche wurde in Schritten von 0.3 ML Pb aufgebracht. Die Ergebnisse für die zwei Substrattemperaturen 180K und 550K sind in Abb. 4.3 und Tabelle 4.1 dargestellt. Man sieht, daß bei beiden Substrattemperaturen das Pb zu Beginn mit einer größeren Gitterkonstante als der Pb-Volumengitterkonstante aufwächst. Ebenso erreichen beide eine Gitterkonstante die kleiner ist ,als sie für eine kommensurable p(4x4) Struktur sein müßte. Dies läßt sich in den LEED-Daten leicht daran erkennen, daß die Pb-Reflexe 2.Ordnung aneinander vorbeilaufen.(Abb.4.4). Nach Tempern auf 800K haben beide Schichten die gleiche Gitterkonstante. Die relative Halbwertsbreite (RHwb) des Pb(10)-Reflexes weist auf der gekühlten Fläche einen höheren Wert auf als auf der bei 550K, die Schicht ist also ungeordneter. Ein weiterer interessanter Punkt ist, daß bei 550K nach 1/3 ML noch kein Pb-Reflex zu sehen ist.(An der  $\sqrt{3}$  Position sind optisch keine Reflexe beobachtet worden.)

$\Theta$ Pb [ML]	T=180 K			
	$a$ [Å]	Komp.%	Hwb.%	I <sub>Cu</sub> /I <sub>Pb</sub>
.33	4.992	-0.86	4.6	-
.66	4.946	0.08	2.9	50
1.0	4.905	0.90	2.2	5
1.2	4.785	3.30	1.5	1
Tempern 800 K	4.966	-0.33	.8	1

$\Theta$ Pb [ML]	T=550 K			
	$a$ [Å]	Komp.%	Hwb.%	I <sub>Cu</sub> /I <sub>Pb</sub>
.33	-	-	-	-
.66	4.963	-0.26	1.5	10
1.0	4.890	1.20	1.4	1
1.2	4.802	3.00	.9	.6
Tempern 800 K	4.968	-0.37	.8	1

Tabelle 4.1 : Für Aufdampftemperaturen von 180 K und 550 K und 4 Bedeckungen ist die Gitterkonstante der Pb-Schicht und die zugehörige Kompression aufgetragen. Zusätzlich sind die relative Halbwertsbreite des Pb(10) und das Intensitätsverhältnis von Cu(10) zu Pb(10) angegeben. Bei T=550 K und  $\Theta = 0.33$  ML war kein Pb-Reflex zu sehen.

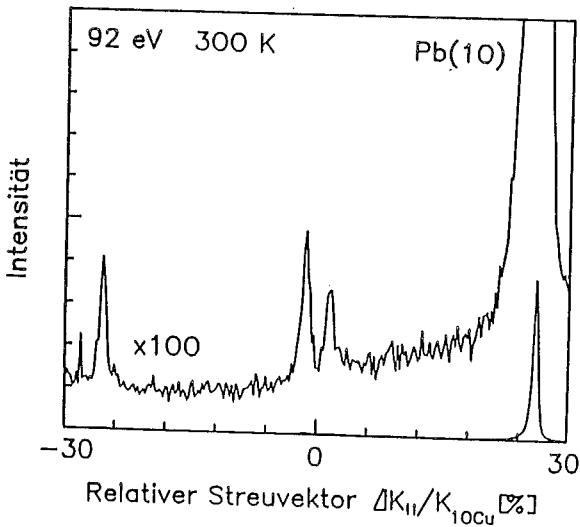
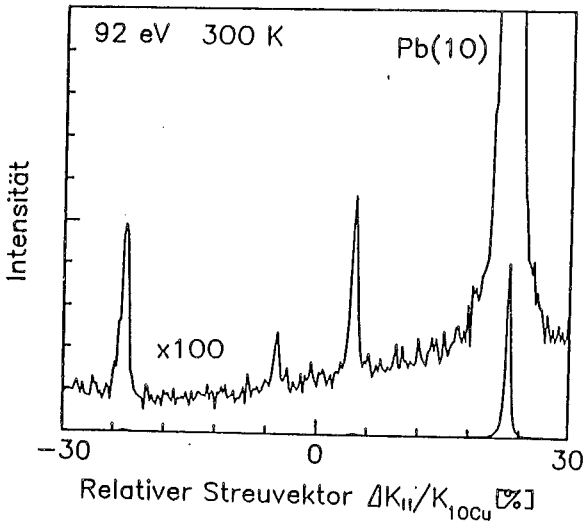


Abb.4.4.: Linearscan zwischen (00) und Cu(10). Die Lage der Pb-Reflexe 2.Ord. in der Mitte des Scans ist für die komprimierte Schicht (Bild unten) gegenüber der nicht komprimierten (Bild oben) vertauscht. Die komprimierte Schicht ist höher komprimiert als bei einer 4x4-Struktur.



Zur Bestimmung der Gitterkonstanten der Pb-Schicht wurden sowohl der Abstand Pb(10)-Cu(10) als auch der Abstand der Reflexe 2.Ordnung des Pb herangezogen. Bei den Reflexen 2.Ordnung handelt es sich um die durch Doppelbeugung an Substrat und Pb-Schicht entstandenen Reflexe: Cu(20)+Pb( $\bar{2}$ 0) und Cu( $\bar{1}$ 0)+Pb(20). Da der erstgenannte Reflex bei allen Messungen (gleiche Energie 92eV) immer eine höhere Intensität hatte als der zweite, lassen sich beide gut voneinander unterscheiden.

Die Genauigkeit der oben erhaltenen Gitterkonstante soll folgende Abschätzung erläutern. Gemessen wurde immer der Abstand Pb(10)-Cu(10) und der Abstand der 2.Ord. Reflexe. Wo das nicht möglich war ist die Genauigkeit geringer (z.B. hohe Bedeckungen und tiefe Temperaturen).

Definiert man das Verhältnis  $d_{2\text{ord}}/d_{\text{Pb10-Cu10}} = x$  so gilt:

$$a_{\text{Pb}} = a_{\text{Cu}} \cdot (4 - x) / (3 - x)$$

für  $x \ll 3$  gilt dann  $a_{\text{Pb}} = 4/3 \cdot a_{\text{Cu}} \cdot (1 + x/12 + \dots)$

Zum Fehler in  $x$  tragen 2 Faktoren bei. Der erste sind die Nichtlinearitäten in der Ablenkempfindlichkeit des SPA-LEED-Systems, die mit 5% abgeschätzt werden. Ungenauigkeiten in der Abstandsbestimmung der Maxima für  $d_{\text{Pb10-Cu10}}$  sind bedeutend kleiner als 5%. Für die Bestimmung des Abstandes der Reflexe 2.Ordnung fallen sie aber ins Gewicht. D.h.  $d_{2\text{ord}} = d_{2\text{ord}} + \Delta d_{2\text{ord}}$ . Es kommt also auf das Verhältnis von  $\Delta d_{2\text{ord}}/d_{\text{Pb10-Cu10}}$  an, das auf 2% abgeschätzt wird. Setzt man beide Werte ein so erhält man einen Fehler in der berechneten Pb-Gitterkonstante von  $\pm 0.1\%$ .

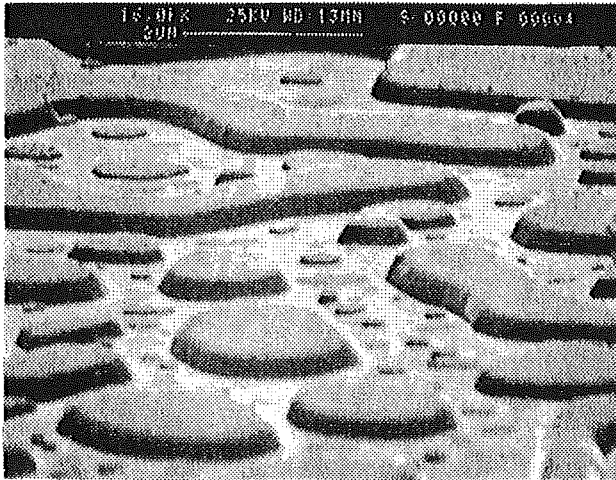
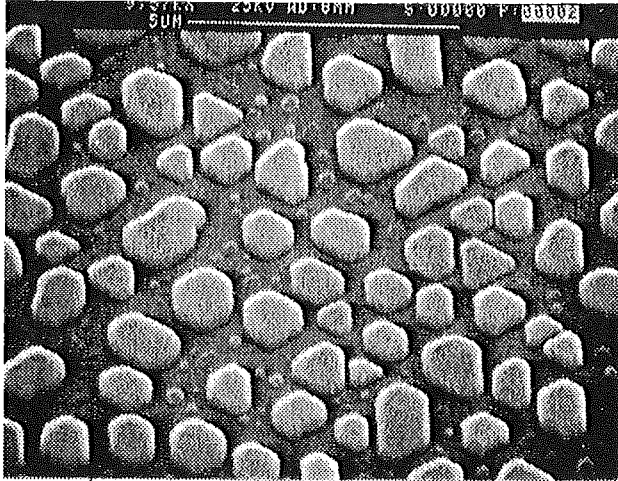


Abb.4.5.: REM-Aufnahme nach Aufdampfen von 200ML Pb auf Cu(111) bei T=550 K. Es sind flache 3d-Pb-Inseln zu sehen. Sie sind ca 1000 nm breit und 100 nm hoch.

#### 4.3. Das Wachstum oberhalb der Monolage

Für Bedeckungen oberhalb einer Monolage hängt das Wachstum von der Substrattemperatur ab. Die in Abb. 4.2 aufgetragenen Auger-Daten sind schon weiter vorne vorgestellt worden.

T > 300 K

Im gesamten untersuchten Bedeckungsbereich von bis zu 200ML Pb (bei T = 550K) sieht man die Reflexe der komprimierten Pb-Schicht sowie die von nicht komprimiertem Blei. Das heißt Blei wächst in großen 3d-Inseln auf. Eine entsprechende REM-Aufnahme ist in Abb. 4.5 zu sehen. Man kann große flache Inseln erkennen. Der dazugehörige LEED-Scan ist in Abb. 4.6 gezeigt. Die Auswertung der Gitterkonstanten liefert eine Kompression von .09% bei einer Reflexhalbwidthsbreite von 1.2%. Das Blei hat also innerhalb der Messgenauigkeit seine normale Volumengitterkonstante.

T = 200 K

Hier sind nach 5ML Pb nur noch die Reflexe der nicht komprimierten Schicht zu sehen (Abb. 4.7a). Bei 3ML Pb ist noch ein Rest der komprimierten Schicht in der Flanke des Pb(10)-Reflexes zu erkennen. Um Aussagen über die Lage des Pb-Reflexes machen zu können, wurde die Probe kurz auf 300K getempert, worauf die anderen Reflexe wieder auftauchten. (Abb. 4.7b). Die mechanische Positionsstabilität wurde vorher überprüft. Die Auswertung ergibt eine Kompression von 1.1% ( $a = 4.90 \text{ \AA}$ ) sowie eine RHwB von 2.8%. Nach Tempern auf 300K beträgt die Kompression .43% ( $a = 4.93 \text{ \AA}$ ) bei einer RHwB von 1.2%. Die auf der gekühlten Probe aufgedampften Schichten sind also leicht komprimiert und ungeordneter.

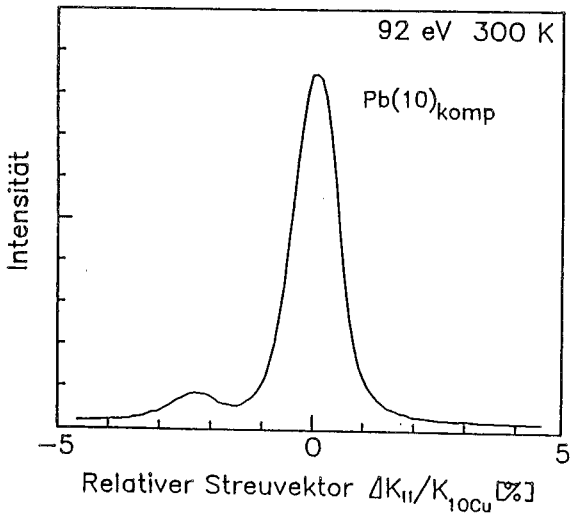
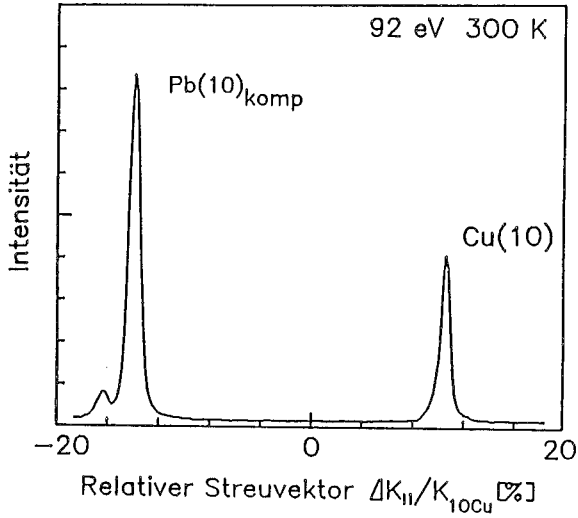


Abb.4.6.: Linearscan nach Aufdampfen von 200 ML Pb bei 550K. (siehe Abb.4.5.) Der kleine Reflex neben dem Pb(10) der komprimierten Monolage kommt von 3d-Pb-Inseeln.Seine Lage entspricht dem von Pb mit normalem Volumenabstand.

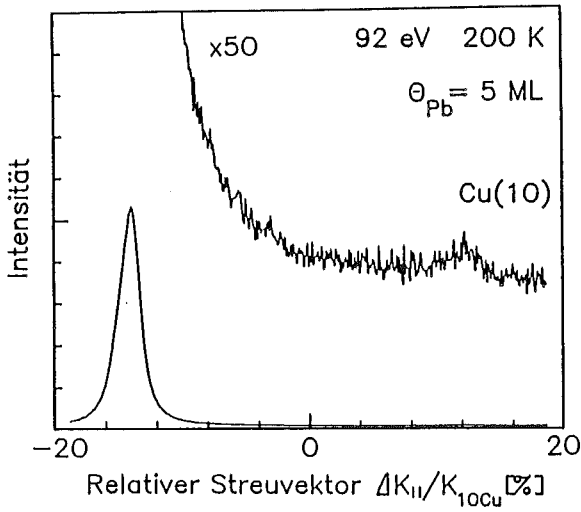


Abb.4.7.a: Linearscan nach Aufdampfen von 5 ML Pb bei 200K. Es ist nur ein Pb-Reflex zu erkennen. Die Schicht ist um 1.1% komprimiert.

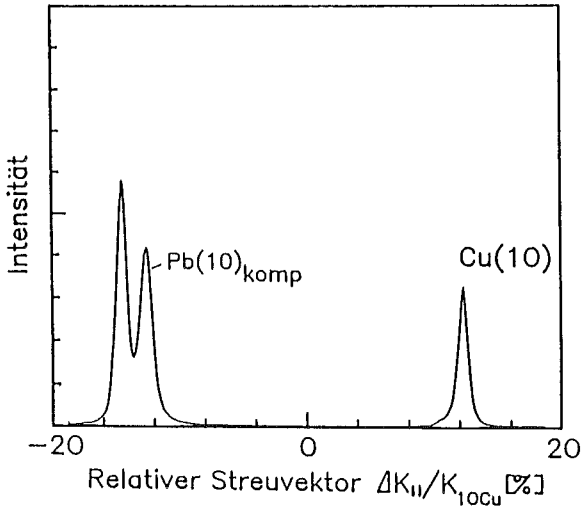


Abb.4.7.b: Pb-Schicht von Abb.4.7.a nach Tempern auf 300K. Die Pb-Schicht ist aufgebrochen. Diese Messung dient zur Eichung der Kompression der Schicht von Abb.4.7.a.

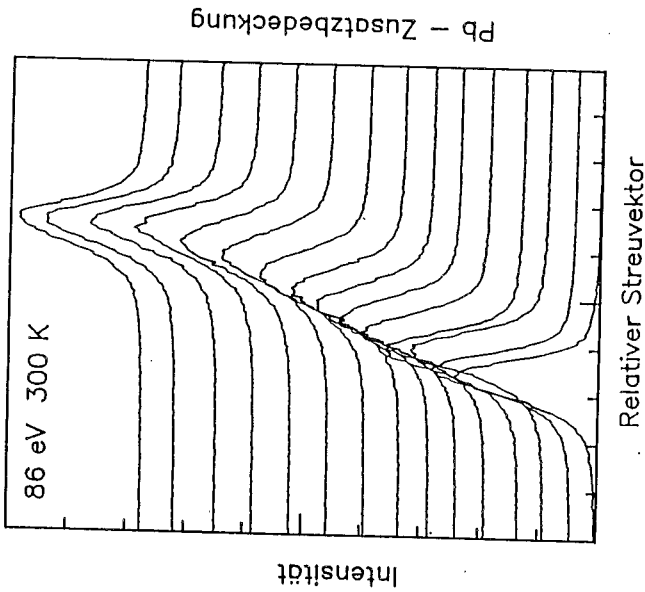


Abb. 4.8.a.: Verschiebung des Pb(10)-Reflexes bei zusätzlichen Aufdampfen von Pb auf eine geschlossene komprimierte Pb-Monolage. Es ist keine merkliche Änderung der  $\text{fwhm}$ . des Reflexes während der Verschiebung zu sehen.

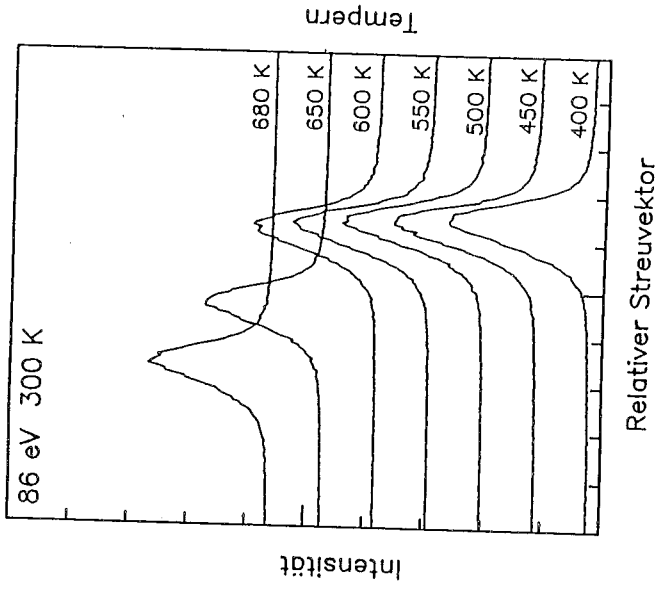


Abb. 4.8.b.: Verhalten des Pb(10)-Reflexes unter schrittweisem Tempern ausgehend von einer komprimierten Schicht. Es ist immer nur ein Reflex zu sehen, der sich verschiebt.

#### 4.4. Kompression im Bereich einer Monolage

Wie vorher gezeigt wurde findet bei  $\Theta = 1\text{ML}$  in einem kleinen Bedeckungsbereich eine starke Kompression in der Pb-Schicht statt. Dieser Übergang wurde im folgenden näher untersucht. Um von definierten Verhältnissen auszugehen wurde dazu zunächst mehr als eine Monolage Pb aufgedampft, so daß sich eine komprimierte Schicht gebildet hatte. Diese wurde dann durch Tempern (längere Zeit bei 700K) in die nicht-komprimierte Schicht überführt. Tempern verringert die Bedeckung in der ersten Schicht. Diese Schicht ist gut geordnet (typische Pb RHwB .8% - 1%). Auf diese wurde dann in kleinen Schritten Pb aufgedampft und jeweils die Verschiebung des Reflexes gemessen. (Abb. 4.8a, 4.9). Man sieht eine nahezu lineare Abhängigkeit der Gitterkonstante mit der Zusatzbedeckung. Bei Bedeckungen oberhalb des Knickpunktes geht das Blei dann in die darüberliegenden Schichten, die Kompression ist abgeschlossen.

Nachfolgendes Tempern ergibt homogene Verringerung der Kompression, die sich in einer Reflexverschiebung ausdrückt. (Abb. 4.8b). Dieses Temperverhalten wurde nicht immer beobachtet. In Abb. 4.10 ist ein anderes Verhalten zu erkennen. Während es beim Aufdampfen zu einer Reflexverschiebung kommt, treten beim Tempern gleichzeitig 2 Reflexe auf. D.h. es muß Bereiche komprimierten und nicht-komprimierten Bleis geben, deren Ausdehnung größer als die Kohärenzlänge des LEED-Systems ist. Im oberen rechten Teilbild ist auch zu erkennen, daß es nach dem Aufdampfen noch Teilbereiche gibt, die nicht vollständig komprimiert sind. Diese Messung wurde auf einem anders präparierten Cu-Kristall durchgeführt. (mechanisch poliert und  $1^\circ$  Grad fehlorientiert).

Es gibt eine Einschränkung zu den Angaben der Gitterkonstanten in Abb. 4.9. Die Messungen wurde ohne Eichung über Reflexe 2. Ordnung gemacht, sondern an vorhandene Ergebnisse über Anfangs- und Endwert angepaßt. Um eine mechanische

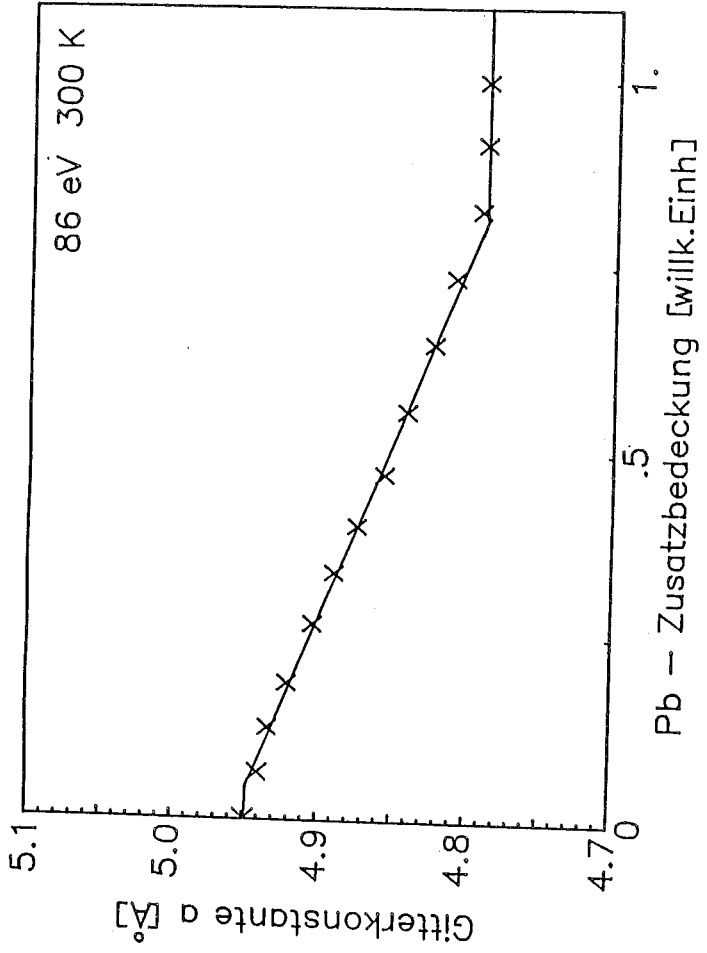


Abb.4.9. : Lineare Abhängigkeit der Gitterkonstante der Pb-Schicht mit der Pb-Zusatzbedeckung. (Daten von Abb.4.8.a)



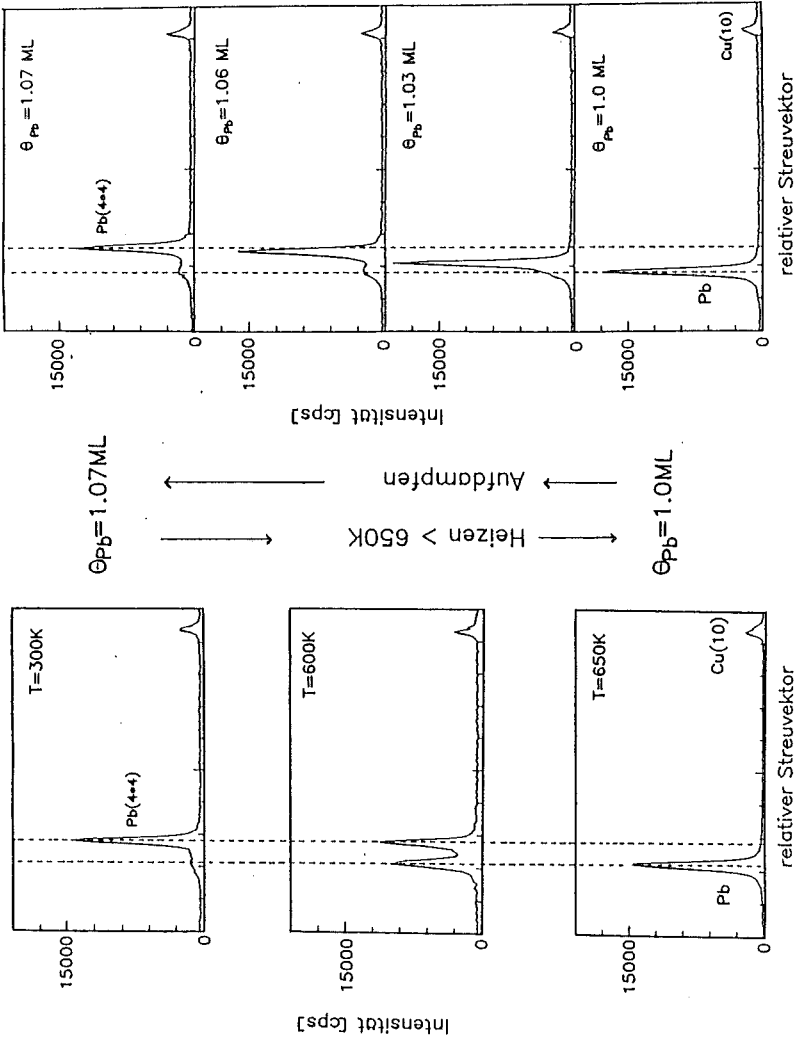


Abb. 4.10.: Kompressions- und Dekompressions-übergang auf einer mechanisch polierten Oberfläche. Beim Tempern treten Doppelreflexe auf. Es gibt große Domänen (groß gegen die Kohärenzlänge des LEED-Systems) unterschiedlicher Gitterkonstante. Die Messung zeigt den Einfluß einer nicht perfekten Oberfläche auf das Verhalten der Pb-Schicht.

Bewegung der Probe während der Messung zu vermeiden, wurde die zusätzliche Bleimenge unter einem flachem Einfallswinkel aufgedampft ( $10^\circ$ ). Durch den kleinen Winkel lassen sich kleine Bedeckungsänderungen leicht handhaben, aber die Eichung der absolut aufgedampften Menge ist dadurch erschwert. Die zusätzliche aufgebrauchte Pb-Menge liegt aber auf jeden Fall unterhalb von 0.2ML.

#### 4.5. Schmelzverhalten der Pb-Schichten

Zur Untersuchung des Schmelzverhaltens der Pb-Schicht wurde die Abhängigkeit der Pb(10)-Intensität (Maximalintensität) von der Temperatur aufgenommen. Trägt man diese logarithmisch gegen die Temperatur auf, so erhält man anfangs eine Gerade deren Steigung dem Debye-Waller-Faktor entspricht und bei höheren Temperaturen einen starken Abfall, der auf das Schmelzen der Schicht zurückgeführt wird.

Ausgehend von einer komprimierten Schicht wurde diese in mehreren Schritten getempert und jeweils der Debye-Waller-Faktor, die Schmelztemperatur und die Gitterkonstante der Schicht bestimmt. Durch das Tempern bei höheren Temperaturen verringert sich immer ein wenig die Bedeckung in der Pb-Schicht, so daß dadurch die Bedeckung variiert werden kann.

Ein Schmelzen der komprimierten Schicht konnte bei den hier durchgeführten Messungen nicht beobachtet werden, da bevor dieser erreicht wird, sich die Bedeckung in der Schicht ändert. Es läßt sich aber eine untere Grenze von ungefähr 800K für den Schmelzpunkt angeben. Diese Werte wurden zum einen durch gleichzeitiges Aufdampfen während des Temperns, oder schnelles Hochheizen erhalten.

In Abb. 4.11 sind die nach 5 einzelnen Temperschritten aufgenommenen Daten aufgetragen. Man erkennt für kleine

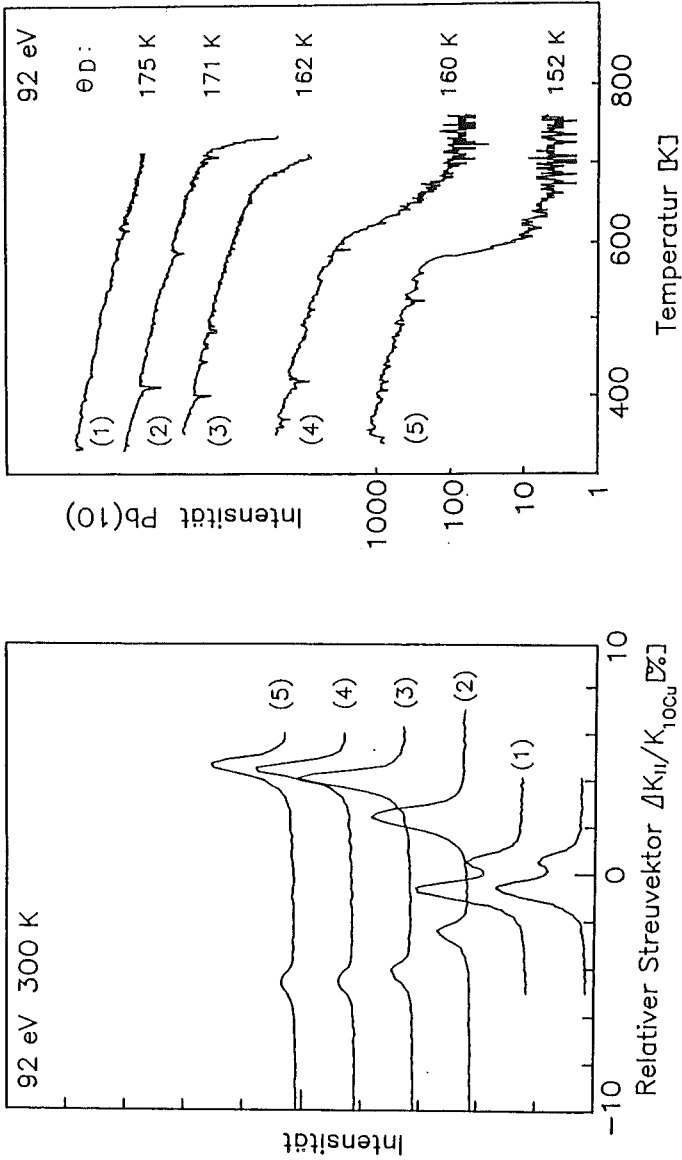


Abb.4.11.: Es ist der Zusammenhang zwischen dem Schmelzverhalten der Pb-Schicht und ihrer Kompression dargestellt. Nach jedem von 5 Tempermentschritten ist jeweils die Lage der Pb 20rdn. Reflexe (linkes Teilbild) und die Temperaturabhängigkeit des Pb(10)-Reflexes (rechtes Teilbild) gemessen worden.

Temperaturen einen exponentiellen Abfall der Intensität mit steigender Temperatur. Für jede Kurve wurde der Debye-Waller-Faktor berechnet und daraus die Debye-Temperatur berechnet (siehe Abb. 4.11). Die Debye-Temperatur ändert sich von 170 K auf 152 K, das sind ca. 13%. Weiterhin ändert sich die Gitterkonstante nur während der ersten drei Temperschritte deutlich, während sich die Schmelztemperatur auch später noch ändert. Nach den Temperschritten (4) und (5) ist beim Schmelzen eine bogenförmige Verbreiterung der Pb-Reflexe zu beobachten. Die Verbreiterung nimmt dabei mit steigender Temperatur zu.

#### 4.6. Pb/Cu(111) Diskussion

In diesem Abschnitt sollen die hier vorgestellten Daten diskutiert und mit den Ergebnissen anderer Autoren verglichen werden./4-7/.

Betrachtet man die Daten von Abb.4.3 für die Bedeckung von 0.3ML so erkennt man, daß es bei 180K in der ersten Schicht Bereiche gibt mit Gitterabständen, die größer sind als die von Volumen-Blei. Bei 550K ist aber kein Pb-Reflex zu sehen. Das Blei muß aber in der ersten Schicht sein, da später der Kompressionsübergang der ersten Schicht bei derselben Aufdampfmenge erreicht wird. Die 0.3 ML lassen sich in einer geordneten  $\sqrt{3}$  - Überstruktur auf der Oberfläche anordnen, da diese aber nie beobachtet wurde, fällt diese Möglichkeit heraus. Geht man von einer statistischen Anordnung der Pb-Atome auf Gitterplätzen der Cu-Unterlage aus, so zeigt sich, daß man ca. 40% einer Pb-Monolage unterbringen kann. (Dieser Wert wurde über eine Simulation des Aufwachsvorganges erhalten). Dies reicht aus um die im Experiment aufgebrachten 0.3 ML Pb unterzubringen. Erlaubt man auch die Besetzung anderer 3-zähliger Plätze, die sozusagen einer Stapelfehleranordnung entsprechen, so lassen sich 54% unterbringen.

Messungen mit isothermer Desorptionsspektroskopie an Pb/Cu(111) /6/ ( Desorptionstemperatur 750 K ) zeigen eine konstante Desorptionsrate ,d.h. Desorption nullter Ordnung , im Bereich von 1 bis 0.38 ML . Unterhalb 0.38ML nimmt die Desorptionsrate stark ab.Das deutet auf eine höhere Bindungsenergie des Bleis bei kleinen Bedeckungen hin,d.h. anderen Bindungsplätzen.

Am bemerkenswertesten ist sicherlich,daß die Pb-Schicht stärker komprimiert als es für eine kommensurable  $p(4 \times 4)$  Überstruktur notwendig wäre. Die Schicht durchläuft somit diese kommensurable Anordnung und wird dann wieder inkommensurabel. Die maximale Kompression hängt von den Aufdampfbedingungen und der Höhe der Temperung ab,d.h.wie gut die Schicht geordnet ist. Die beste Ordnung zeigen solche Schichten,wo zunächst eine komprimierte Schicht erzeugt wird und die dann wieder durch Tempern in eine nicht-komprimierte Schicht umgewandelt wird. Von einer solchen Schicht ausgehend wurde wie in Abb. 4.9 gezeigt der Übergang in die komprimierte Schicht untersucht. Sowohl die lineare Abhängigkeit zwischen Gitterkonstante und Zusatzbedeckung ,als auch die höhere Kompression,als zur  $p(4 \times 4)$  erforderlich ist,deuten darauf hin ,daß die Periodizität der Unterlage einen geringen Einfluß auf die Kompression der Adschicht hat. Geht man von einer glatten Unterlage aus,so bleiben als bestimmende Kräfte zum einen die starke Bindung an das Substrat und die innere Spannung in der Pb-Schicht übrig.

Die Energie,die für die Kompression der Pb-Schicht erforderlich ist ,läßt sich abschätzen. Man geht dazu davon aus,daß die elastischen Eigenschaften eines dreizähligen Gitters mit denen eines isotropen elastischen Mediums übereinstimmen./18,34/. Setzt man für die Lamé-Koeffizienten /34/ der Schicht deren Volumenwerte an und betrachtet eine 3%-Kompression,so ergibt sich eine Energie von  $2.4 \cdot 10^{-14}$  erg = 0.015 eV pro Atom.

Blei zeigt auch auf anderen Flächen eine Kompression der ersten Monolage /2/. Messungen von Pb/Ni(111) zeigen auch das Auftreten einer 4x4 Überstruktur in welcher die Blei-Schicht ebenfalls komprimiert ist (4.6% )./28/. Es gibt ebenfalls Hinweise , daß die komprimierte Schicht wie auf Cu ebenfalls inkommensurabel ist, allerdings ist die Abweichung von der 4x4 Struktur mit einem normalen LEED-System schwer aufzulösen./29/. Die komprimierte Schicht ist auch bis weit oberhalb des Bleivolumenschmelzpunktes stabil (770 K). Bei höheren Temperaturen werden weitere geordnete Strukturen beobachtet.

Für höhere Bedeckungen muß das Blei auf der komprimierten Unterlage aufwachsen. Aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten ist die Grenzflächenenergie so groß geworden, daß 3d-Inselwachstum vorliegt. Dieses Verhalten ist z.B. auch für Edelgase bekannt, sogenanntes "reentrant incomplete wetting". Die starke Substrat-Adsorbat-Bindung führt zu einer dichten ersten Schicht und damit zu einem misfit zwischen der ersten Schicht und den entsprechenden Volumenstrukturen./17/.

Bei tiefen Temperaturen scheint die Diffusion so gering zu sein, daß es schnell zu einer geschlossenen Schicht kommt. Man erhält dann ein Pseudo-Schicht-für-Schicht-Wachstum. Pseudo soll heißen ,daß hier kinetische Gründe (geringe Diffusion) das Schicht für Schicht Wachstum hervorrufen. / 2/. Ein entsprechendes Verhalten ist auch für Pb/Cu(100) beobachtet worden /45/.

Aus Abb.4.11 ist zu erkennen, daß der Schmelzpunkt der komprimierten Schicht um mehr als 100 K über dem Volumenschmelzpunkt von Blei liegt. Wie schon vorher erwähnt liegt der Schmelzpunkt aber noch höher, da beim Tempern die Bedeckung in der ersten Schicht abnimmt. Wie aus Abb.4.11 zu erkennen ist, ändert sich die Gitterkonstante zunächst

stark, und später nur noch wenig. Die Schmelztemperatur geht aber auch gerade in diesen Bereichen noch zurück. In diesem Bereich sieht man aber, daß sich die Pb-Reflexe beim Schmelzen bogenförmig verbreitern. Da nicht die integrale Intensität der Reflexe, sondern deren Maximalintensität gemessen wurde, geht dies in die Messung ein. Bogenförmige Verbreiterungen können z.B. dadurch entstehen, daß das Blei in 2d-Inseln auf der Oberfläche ist, deren Orientierung zur Unterlage mit steigender Temperatur eine Schwankung um die Orientierung der Unterlage zeigt.

Aus Abb.4.11 ist eine Verringerung der Debye-Temperatur der Blei-Schicht nach den einzelnen Temperschritten zu entnehmen. Allerdings ist diese Abnahme relativ gering (13%). Für einen quantitativen Vergleich mit der Abnahme der Schmelztemperatur sind die Daten nicht ausreichend. Interessant ist aber, daß 2 bekannte theoretische Modelle, die das Schmelzen beschreiben, eine Abhängigkeit zwischen Schmelztemperatur  $T_m$  und Debyetemperatur  $\Theta_D$  von  $T_m \sim \Theta_D^2$  liefern. Das eine ist das sogenannte Lindemann-Kriterium /30/. Danach schmilzt der Festkörper, wenn die mittlere Auslenkung der Atome ein bestimmtes Verhältnis des nächsten Nachbarabstandes überschreitet (typisch 10%). Das zweite ist ein reines 2d-Modell und beschreibt das Schmelzen über das Auftreten von Versetzungen. /31-33/. Eine Änderung der Debyetemperatur um 13% hätte somit eine Änderung der Schmelztemperatur um 28% zur Folge. Die Schmelztemperatur hängt also sehr empfindlich von der Debyetemperatur ab. Eine 28% Änderung der Schmelztemperatur bezogen auf 600 K sind ungefähr 200 K. Das liegt im Bereich der beobachteten Schmelzpunkterhöhung.

## 5. Ag/Al(111)

Die Messungen an diesem System wurden durch Messungen von Frick und Jacobi /35/ angeregt und zusammen mit Herrn Frick durchgeführt. Dort /35/ wurden die elektrischen Eigenschaften von Ag-Schichten mit UPS und AES untersucht. Als Substrat wurde Al(111) gewählt, um zum einen in den UPS - Daten Substrat und Adschicht gut trennen zu können (Ag d-Metall mit entsprechender ausgeprägter Struktur in den UPS-Spektren durch starke d-Band Emission, Al sp-Metall energetisch breite Anteile in den Spektren) und um zum anderen eine geringe Wechselwirkung zwischen Substrat und Adschicht zu haben /35/. Aus AES - Daten ist bekannt, daß Ag bei 300K und 500K im Stranski-Krastanov-Mode aufwächst.

In diesem Abschnitt soll ein interessantes Verhalten der ersten Monolage behandelt werden. Dazu wird Ag bei Substrattemperaturen von 520K aufgedampft. (Messtemp. ist 300K). Da bei diesen Temperaturen der Großteil des angebotenen Silbers wieder verdampft, wurde zur Bedeckungseichung das Augersignal-Verhältnis von Ag zu Al benutzt. Zur Eichung der Ag-Bedeckung wurden die Auger-Daten von /35/ herangezogen.

### 5.1. Messergebnisse

Im Bereich  $\theta < 1\text{ML}$  sieht man keine zusätzlichen Reflexe im LEED-Bild. Das Ag wächst also in diesem Bereich pseudomorph auf der Al-Unterlage auf. Da die Gitterkonstante von Ag  $4.086 \text{ \AA}$  und die von Al  $4.049 \text{ \AA}$  ist, ist die Ag-Schicht gegenüber ihrem Volumenabstand um .9% komprimiert. Nach weiterem Aufdampfen tauchen im LEED-Bild um die Al-Reflexe Satellitenreflexe auf. In Abb. 5.1 sind der Ag( $\bar{1}0$ )- und der Al( $\bar{1}0$ )-Reflex für verschiedene Bedeckungen aufgetragen. Mit steigender Bedeckung komprimiert hier die Al-Schicht. Abb. 5.2 zeigt die Umgebung des (00) mit den Satellitenreflexen bei der Maximalkompression. Zur Bestimmung der Kompression



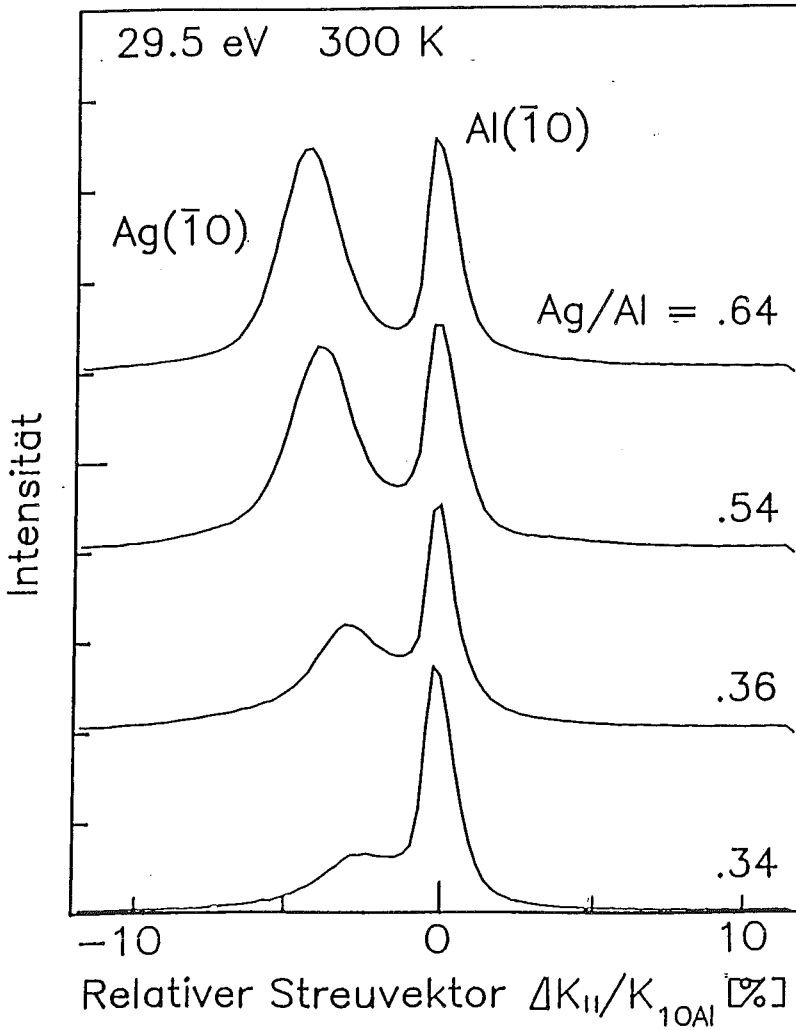


Abb.5.1.: Linearscan in ( $\bar{1}\bar{1}2$ )-Richtung für verschiedene Bedeckungen von Ag/Al(111). Bei einer Bedeckung von 1ML ist das Ag/AL Auger-Verhältnis = 0.26 /35/.

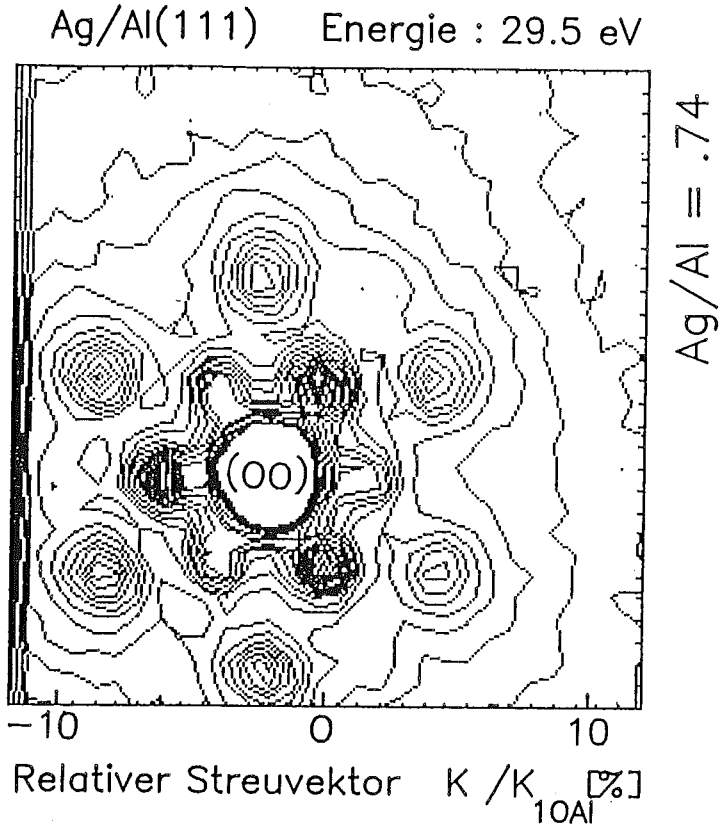


Abb.5.2.: Flächenscan der Umgebung des (00) -Reflexes für eine Bedeckung von Ag/Al = .74 . Die Reflexe kommen durch Doppelbeugung zustande. Der innere Reflexkranz ist 3-zählig ( Reflexe der Art  $Ag(\bar{1}0)+Al(10)$  ) und der äußere ist sechszählig . (Reflexe der Art  $Ag(\bar{1}\bar{1})+Al(11)$ )

lassen sich alle zwölf Reflexe heranziehen. Es ergibt sich als Gesamtkompression  $4.5\% + .9\% = 5.4\%$ . Die Ag-Schicht ist also um  $5.4\%$  ( $a = 3.83 \text{ \AA}$ ) gegenüber ihren Volumenabstand komprimiert.

## 5.2. Diskussion

Eine Erklärung des Kompressionsverhaltens ließe sich wie folgt geben. Für das Verhalten der 1. Monolage sind mehr die Eigenschaften der 2d-Schicht als die des Volumenmaterials von Bedeutung. D.h. die elektronische Struktur der Adsicht ist abweichend von der des Volumenmaterials. Anschaulich heißt das, daß die Elektronen die im Volumen die Bindung zu den Nachbarschichten machen, jetzt auch in der Schicht verbleiben. Die erhöhte Ladungskonzentration führt zu einer erhöhten Bindungsenergie und damit, wie in diesem Fall zu einer Kontraktion in der Schicht.

Ein ähnliches Verhalten wurde für Cs auf W(110) beobachtet /36,37/. Hier ist der Cs-Cs Abstand um  $11\%$  geringer als im Volumen. Der Gleichgewichtsabstand einer 2d-Schicht läßt sich auch theoretisch berechnen. Basierend auf Dichtefunktionalmethoden erhält man für obige Cs-Schicht ebenfalls  $11\%$  Kontraktion /37/, für eine Al(100)-Schicht  $10\%$  und für eine Al(111) -Schicht  $7\%$ . /38,39/.

## 6. Cu/Cu(111)

### 6.1. Messergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Meßdaten zu den Cu-Epitaxie Messungen vorgestellt. Generell wurden alle Messungen bei einer Substrattemperatur von 135K aufgenommen. Die Aufdampftrate war bei allen Messungen 1.5 ML/min. Zum Tempern wurde die Probe 30 sec auf der angegebenen Temperatur gehalten. Vor Beginn(ca. 10min) einer Messreihe wurde der Kristall auf 700K getempert, um eventuell vorhandene Adsorbate (CO) zu desorbieren. Eine genaue absolute Eichung der Aufdampfmengen war auf Grund fehlender Eichmöglichkeiten (keine Oszillationen des Zentralreflexes mit der Bedeckung, wie es bei Schichtwachstum beobachtet wird ) nicht möglich. Die Eichung der Aufdampfmengen erfolgte so nur über die Frequenzänderung des Schwingquarzes unter Berücksichtigung der Geometrie und ist mit einem Fehler von max. ca.15 % behaftet.

#### 6.1.1. Bedeckungsabhängigkeit

Die Aufdampftemperatur bei der folgenden Messung lag bei 135K. Es wurde in .25ML-Schritten bis 2.5ML aufgedampft und nach jedem Aufdampfen ein Reflexprofil aufgenommen. Abschließend wurde die Probe dann schrittweise getempert. In Abhängigkeit von der Bedeckung wurde das Reflexprofil des (00)-Reflexes bei der Gegenphasenspannung  $S=2.5$  (54eV) gemessen. Die Abhängigkeit des Reflexprofils in  $(11\bar{2})$ -Richtung von der Bedeckung ist für  $S=2.5$  und  $S=2.75$  in Abb. 6.1 und Abb. 6.2 angegeben. Das entsprechende Verhalten nach Tempern ist in Abb. 6.3 dargestellt. Für diese Messungen existieren keine 2d-Scans. Aus den Daten einer anderen Messreihe die unter den gleichen Bedingungen aufgenommen wurde läßt sich erkennen, daß die Reflexe bei  $S=2.5$  kreis-symmetrisch sind, während sie bei  $S=2.75$  eine 3-zählige

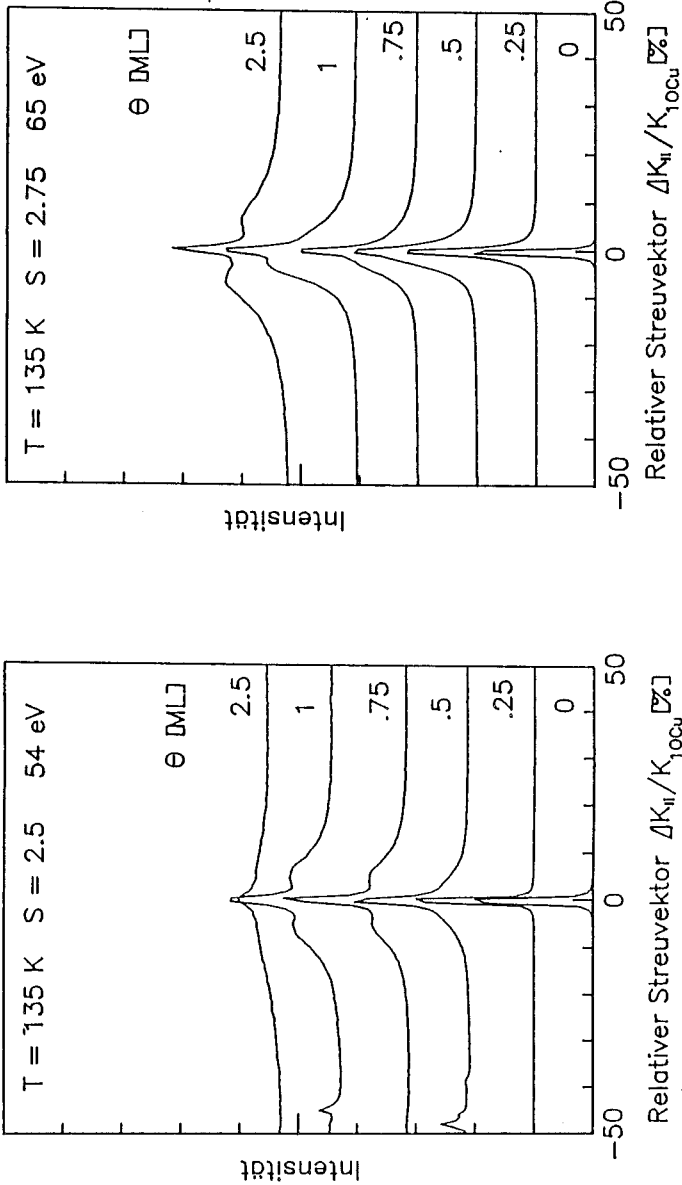


Abb.6.1.: Bedeckungsabhängigkeit des (00)-Profils bei 135 K und Phase 2.5

Abb.6.2.: Bedeckungsabhängigkeit des (00)-Profils bei 135 K und Phase 2.75

Abb.6.2.: Bedeckungsabhängigkeit des (00)-Profils bei 135 K und Phase 2.75

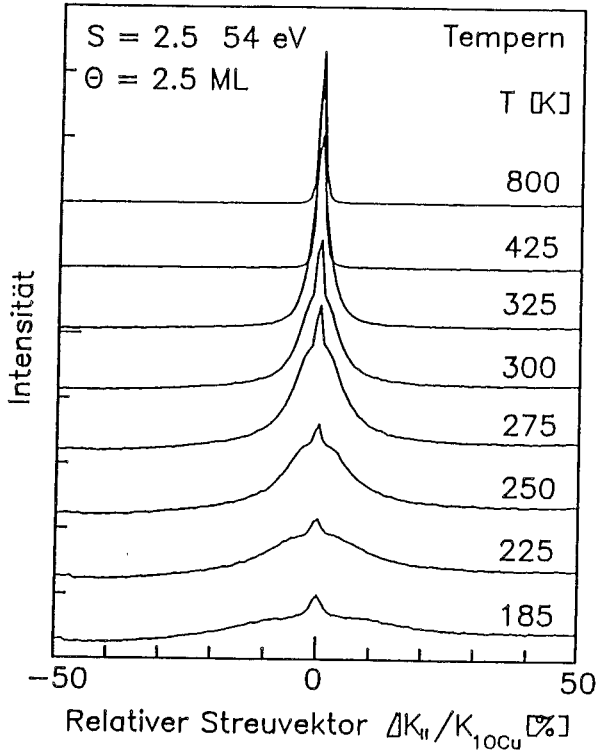


Abb.6.3.: Tempverhalten des (00)-Reflexes nach Aufdampfen von 2.5 ML Cu bei 135 K

Symmetrie aufweisen. Diese Aussagen beziehen sich nur auf die Messungen der nicht getemperten Proben.

### 6.1.2 Veränderung der Substrattemperatur

Bei den folgenden Messungen wurden immer 2.5 ML Cu aufgedampft. Die Aufdampftemperatur wurde von Messung zu Messung variiert. Hier wurden nicht nur Schnitte, sondern auch 2-dim Felder aufgenommen. In Abb. 6.4 sind 2d-Höhenlinienplots des (00)-Reflexes bei verschiedenen Aufdampftemperaturen aufgetragen. Die Höhenlinien sind so gewählt, daß man einen Überblick über den Fuß des Reflexes und den Untergrund bekommt, d.h. 2 - 50% der Maximalintensität bei Unterdrückung des Bereiches von 50 - 100 %. Es zeigt sich eindeutig, daß der Reflex bei tiefen Temperaturen rund ist, und oberhalb von 215 K eine sechszählige Symmetrie hat. Die Reflexe haben dabei im Außenbereich eine sternförmige Struktur, mit den Ausläufern in  $11\bar{2}$ -Richtung, d.h. in Richtung der Normalreflexe. Im inneren der Reflexe, d.h. bei kleinen  $k$ , werden sie kreissymmetrisch. Nur die Messung bei 325 K weicht von diesem Verhalten ab. In Abb. 6.5 sind die Höhenlinien soweit verschoben worden, daß die Spitze des Reflexes zu sehen ist. Es zeigt sich, daß der Reflex in diesem Bereich nicht mehr kreissymmetrisch ist, es treten Aufspaltungen auf. D.h. es gibt Facetten mit einem kleinen Neigungswinkel gegen die Oberfläche. Außerdem ist eine Richtungsänderung dieser Facetten mit steigender Aufdampftemperatur zu beobachten. Bei 245 K liegt die Aufspaltung in  $11\bar{2}$ -Richtung, bei 270 K in  $01\bar{1}$ -Richtung und bei 325 K in  $\bar{1}2\bar{1}$ -Richtung. Aus der Energieabhängigkeit der Aufspaltung kann man den Facettenwinkel bestimmen. Abb. 6.6 zeigt die Energieabhängigkeit der Aufspaltung in 2d-Scans bei einer Bedeckung von 5 ML, aufgedampft bei 300 K. Man erkennt, daß die Aufspaltung in  $01\bar{1}$ -Richtung liegt. Die Form der Aufspaltung läßt auch zu, daß sie eine Überlagerung von zwei Aufspaltungen in den angrenzenden Normalreflexrichtungen

### Cu/Cu(111) (00)-Reflex

$\Theta = 2.5 \text{ ML}$        $S = 3.5$        $105 \text{ eV}$

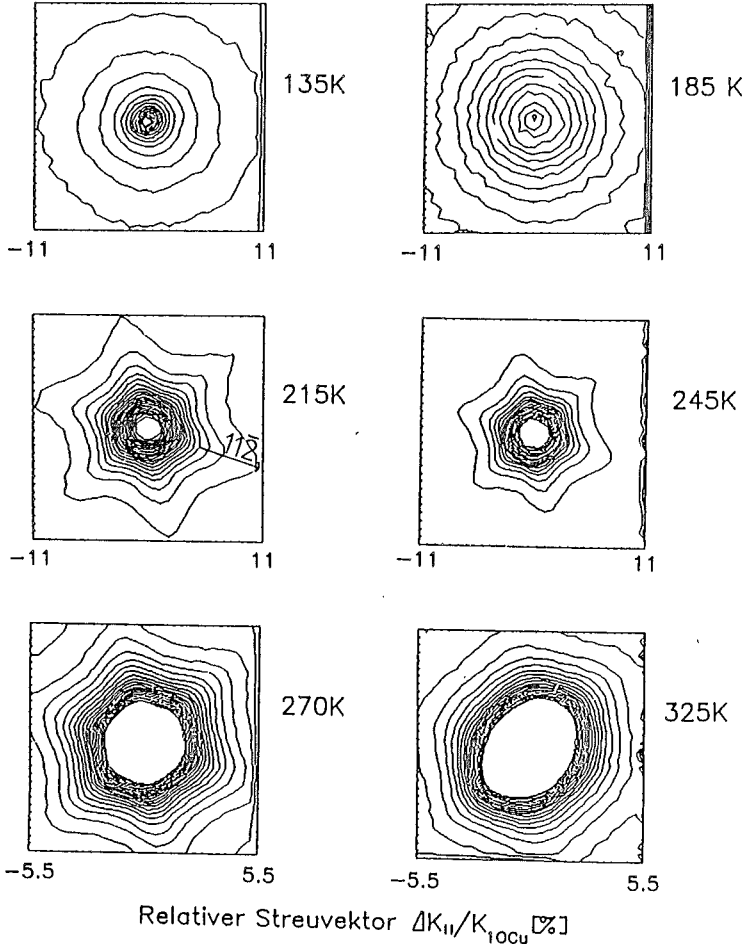


Abb.6.4.: Flächen-scans des (00)-Reflexes nach Aufdampfen von 2.5ML Cu bei 6 verschiedenen Substrattemperaturen. Die Höhenlinien erfassen einen Bereich von 2-50% der Maximalintensität. Der zentrale Teil des Reflexes ist ausgespart.



# Cu/Cu(111) (00)-Reflex

$\theta = 2.5 \text{ ML}$

$S = 3.5 \quad 105 \text{ eV}$

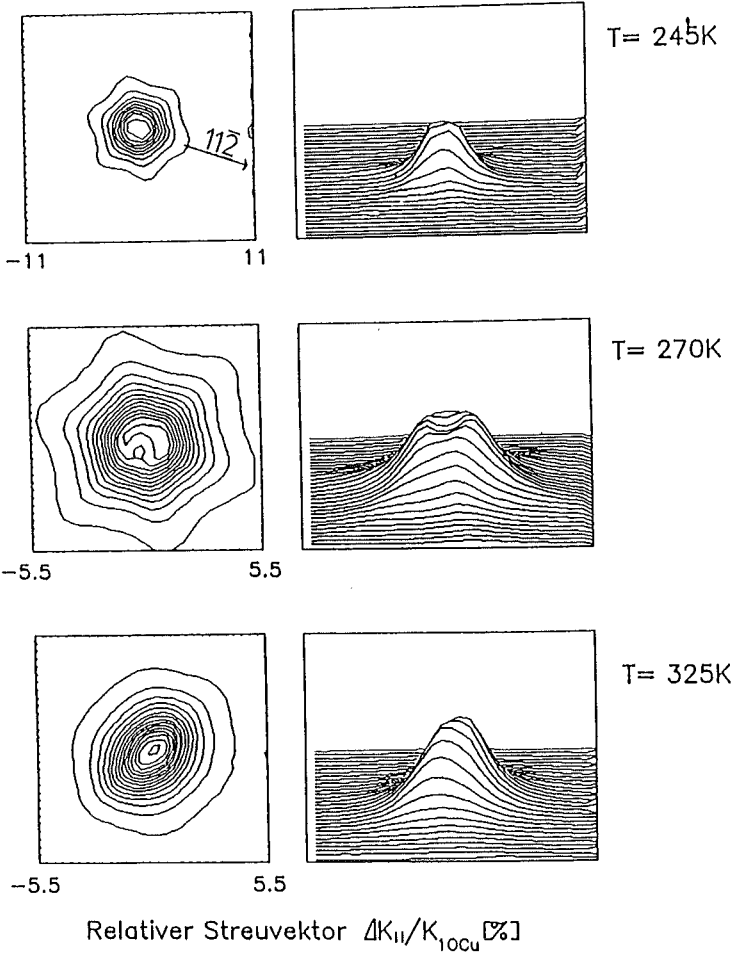


Abb.6.5.: Flächenscans des (00)-Reflexes nach Aufdampfen von 2.5ML Cu bei 3 verschiedenen Substrattemperaturen. Aufgrund von Facetten sind die Reflexe in der Mitte nicht kreisymmetrisch.

Cu/Cu(111) (00)-Reflex

$\theta = 5 \text{ ML}$   $T = 300 \text{ K}$

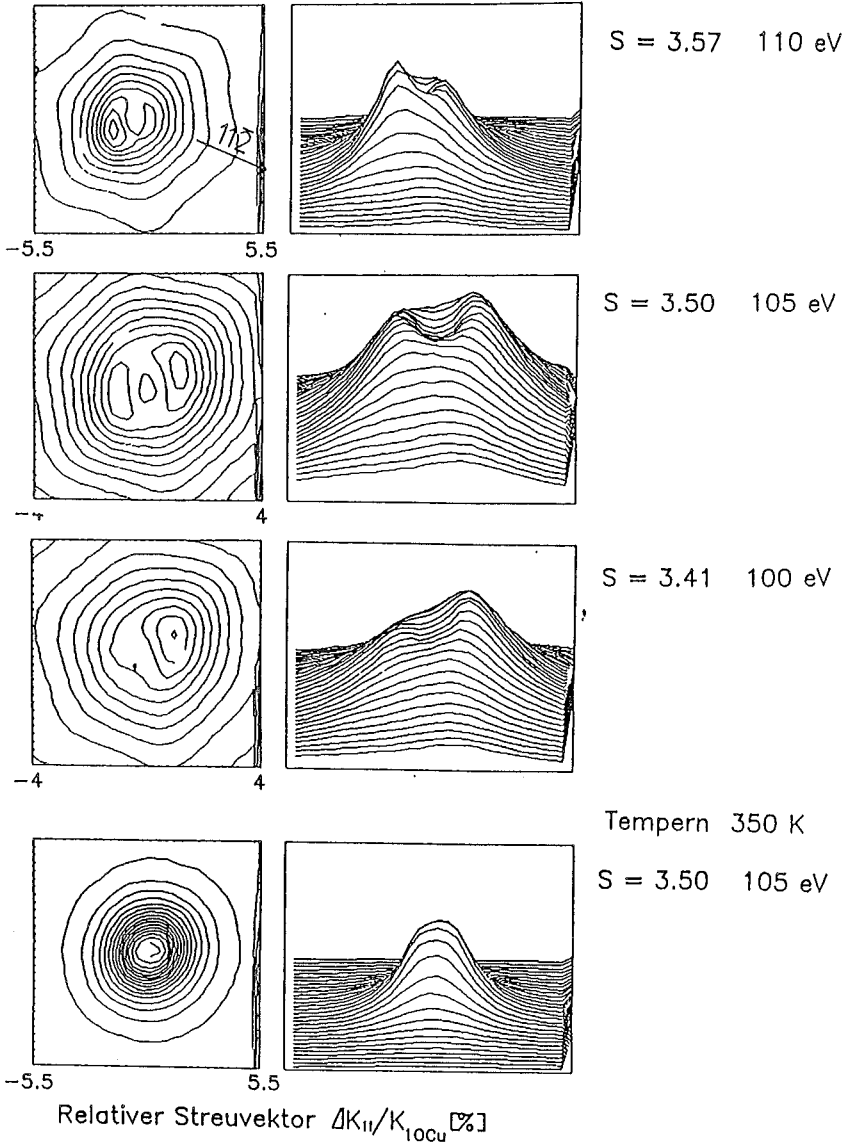


Abb.6.6.: Energieabhängigkeit des (00)-Reflexes nach Aufdampfen von 5.0ML Cu bei  $T = 300 \text{ K}$ . Die Flächenscans zeigen eine Aufspaltung in  $(01\bar{1})$ -Richtung. Nach Tempern auf 350 K ist diese verschwunden.

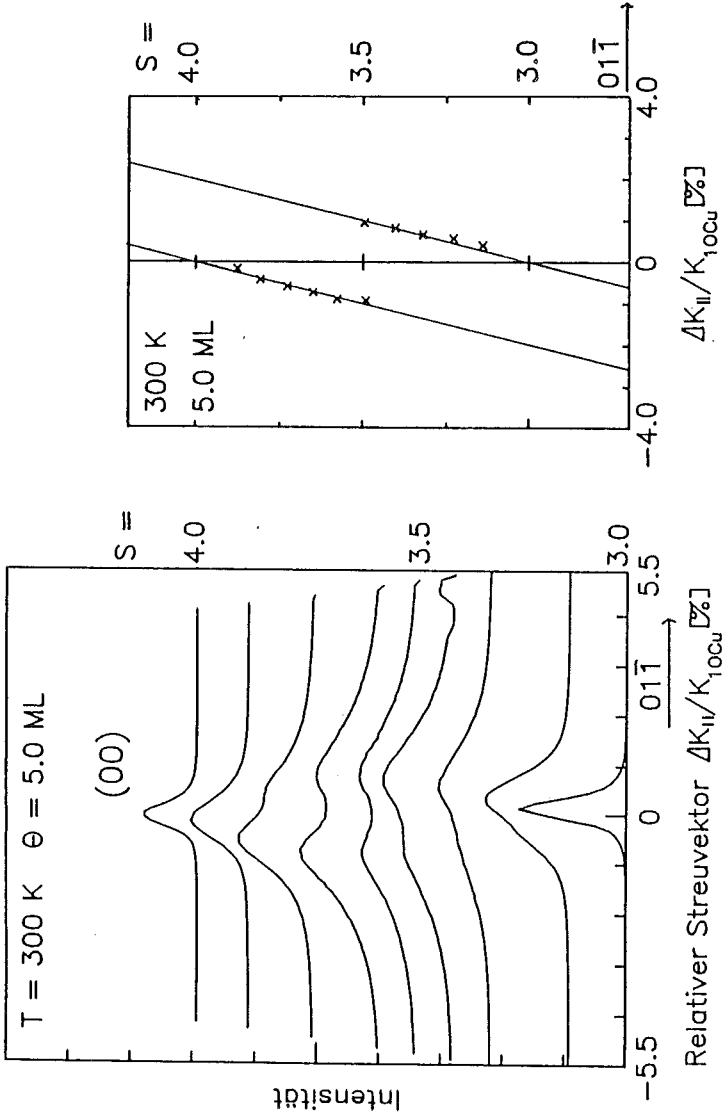


Abb. 6.7. a.: Linearscans in  $(01\bar{1})$ -Richtung die die Energieabhängigkeit der Aufspaltung in Abb. 6.6. zeigt.  
Abb. 6.7. b.: Ewaldkonstruktion mit den Daten aus Abb. 6.7. a. Der Neigungswinkel der eingezeichneten Facette beträgt  $0.9^\circ$ .

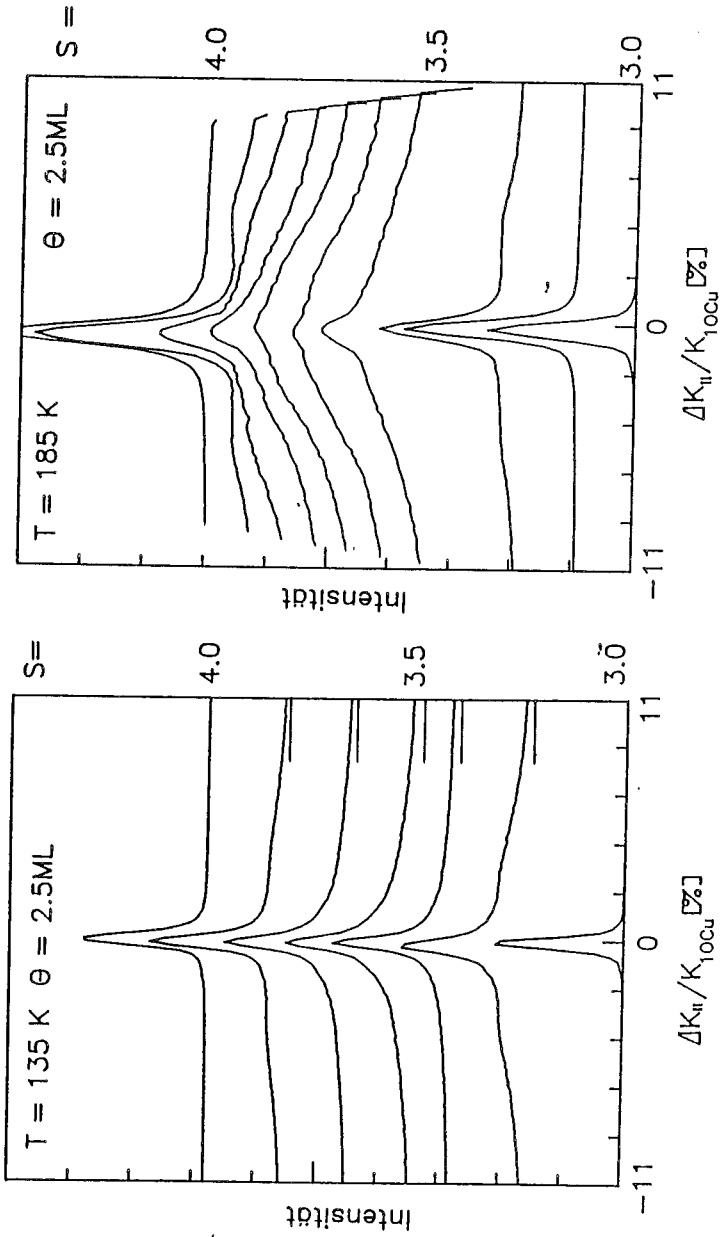


Abb. 6.8: Energieabhängigkeit des (00)-Reflexes bei 135 K und 185 K. Die Reflexe sind bei diesen Temperaturen kreisssymmetrisch.

ist. Eine lineare Scanserie in  $01\bar{1}$ -Richtung ist in Abb. 6.7a gezeigt. Man sieht deutlich, daß es eine bevorzugte Richtung der Facetten in  $01\bar{1}$ -Richtung gibt. Zur Bestimmung des Neigungswinkels der Facetten wird mit den Werten der Lage der Reflexmaxima eine Ewaldkonstruktion durchgeführt. (Abb.6.7.b). Nach Tempern auf 350 K wird der Reflex rund, eine Facettenaufspaltung ist dann nicht mehr zu erkennen.

Die bei den Substrattemperaturen von 135 K und 185 K gemessene Energieabhängigkeit des Reflexprofils ist in Abb. 6.8 aufgetragen. Die Skalierung der Intensität ist von Kurve zu Kurve unterschiedlich. Wichtig ist die Form der Profile und das Verhältnis zwischen Intensität des Zentralreflexes relativ zu der in der Reflexschulter. Wie die 2d-Scans gezeigt haben sind die Reflexe bei beiden Substrattemperaturen kreissymmetrisch. Die Profile zeigen mit der Änderung der Phase eine rasche Abnahme der Zentralreflexintensität und das Auftreten einer breiten Reflexschulter. Bei 185 K ist der Zentralreflex bei der unscharfen Spannung nahezu verschwunden, bei 135 K ist noch ein kleiner Anteil zu sehen.

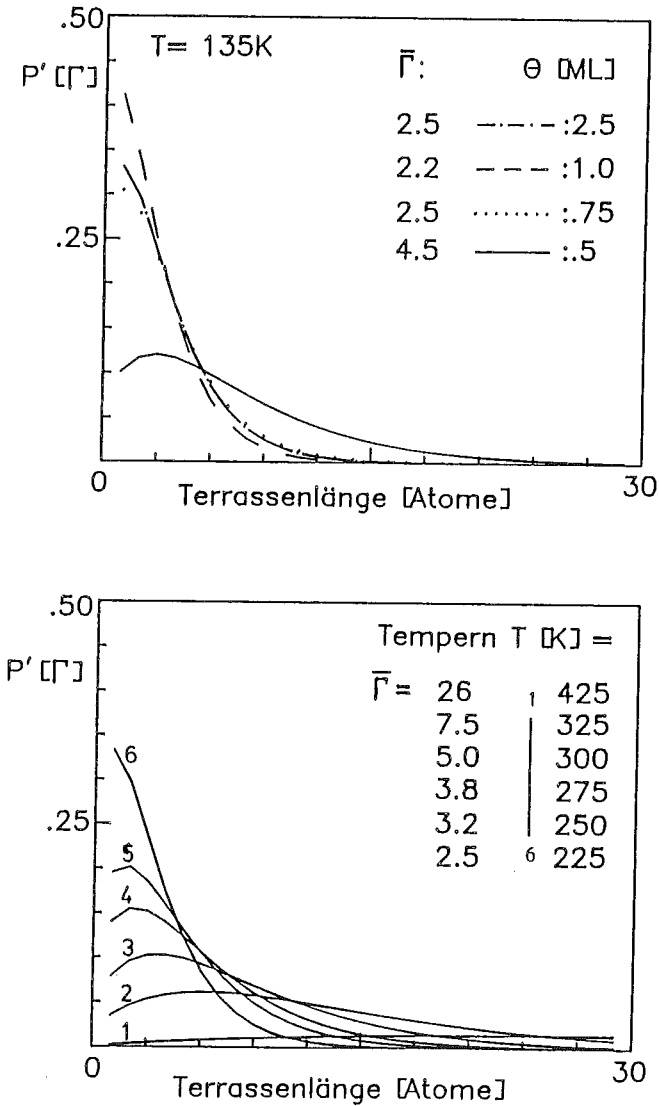


Abb.6.9.: Terrassenbreitenverteilung  $P(\Gamma)$  und mittlere Terrassenbreite  $\bar{\Gamma}$  nach Aufdampfen von 0.5, 0.75, 1.0, und 2.5ML Cu bei 135 K (Bild oben) sowie nach Tempern der 2.5ML Schicht. (Bild unten).

## 6.2. Auswertung und Diskussion

Wie die Messdaten, insbesondere die bei hohen Temperaturen, zeigen, treten nicht mehr allein kreissymmetrische Reflexe auf. D.h. die Autokorrelationsfkt. ist nicht mehr isotrop. Um daraus qualitative und quantitative Aussagen zu ziehen ist eine 2-dim. Auswertung der Reflexprofile erforderlich. 2-dim. Auswerteverfahren sind aber weit weniger entwickelt wie die vorhandenen 1-dim. Verfahren. Aus diesem Grund wird ein Teil der Messungen, die mit den kreissymmetrischen Reflexprofilen, 1-dim. ausgewertet, während bei den anderen eine zumindest qualitative 2d.Auswertung versucht wird.

Zunächst zu den bedeckungsabhängigen Messungen. Für jede dieser Messungen wurde die Terrassenbreitenwahrscheinlichkeit bestimmt. Dazu wurden zunächst die Messkurven 2d-integriert. Eine Trennung von Zentralreflex und Reflexschulter ist in allen Fällen gut möglich. In die Berechnung der Terrassenverteilung geht außerdem die Höhe des Untergrundes entscheidend ein. Zum gemessenen Untergrund trägt auch der inelastische Anteil bei, so daß der echte strukturbedingte Untergrund kleiner ist und somit ein Teil des gemessenen Untergrundes subtrahiert werden muß. Der Weg, der hier beschritten wurde bestand darin, daß die Autokorrelationsfunktion  $\varphi(r)$  gefittet wurde./40,41/ In  $\varphi(0)$  steckt der Anteil des konstanten Untergrundes. Der inelastische Anteil hat also einen zu hohen Wert von  $\varphi(0)$  zur Folge, d.h es muß ein bestimmter Anteil abgezogen werden. Geht man von einer geometrischen Terrassenverteilung aus, so weiß man, daß sich das Reflexprofil aus einer Summe von Lorentzkurven und einer Delta-Funktion zusammensetzt. Die Fouriertransformierte einer Lorentzkurve ist aber eine Exponentialfkt. und somit besteht eine logarithmische Darstellung der Autokorrelationsfunktion näherungsweise aus einzelnen Geradenstücken. So kann man aus  $\varphi(n)$  für kleine  $n$  auf  $\varphi(0)$  extrapolieren. Von diesen Daten ausgehend wurden dann  $P(\Gamma)$ ,  $P'(\Gamma)$  und die

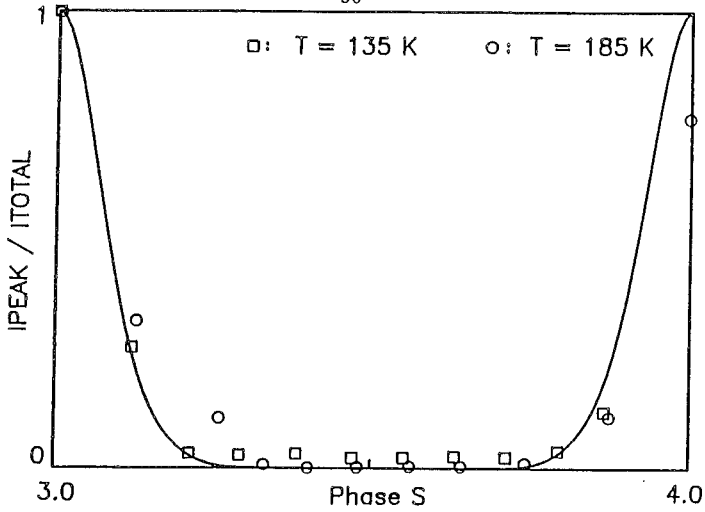


Abb.6.10.: Phasenabhängigkeit von  $I_{00}/I_{Total}$  der Messungen von Abb.6.8. (2.5ML Cu bei 135 K und 185 K). Die eingezeichnete Kurve ist berechnet unter der Annahme, daß die Atome in der Schicht bleiben auf der sie auftreffen .

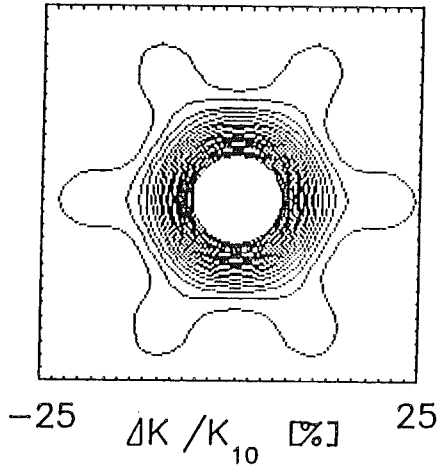


Abb.6.11.: Beugungsbild eines Dreiecks mit 10 Atomen Kantenlänge. Es zeigt eine sternförmige Struktur.



mittlere Terrassenbreite  $\bar{l}$  berechnet (Abb.6.9). Man erkennt , daß mit steigender Bedeckung die Anzahl der Atome in den kleinen Terrassen zunimmt. Die mittlere Terrassenbreite von 2.5 Atomen zeigt ,daß die Schicht schon nach 2.5 ML lateral sehr rauh geworden ist . Das umgekehrte Verhalten ist beim Tempern zu beobachten. Die Terrassenverteilung der auf 425 K getemperten Fläche unterscheidet sich nur noch kaum von der vollständig ausgeheilten Oberfläche.

Die Messungen bei veränderter Substrattemperatur und konstanter Bedeckung zeigen zwei Merkmale. Zum einen die Änderung der Symmetrie des Untergrundes ,bzw. im Fuß des Reflexes, sowie das Auftreten von großen Facetten bei den höheren Aufdampftemperaturen. Obwohl beide Effekte gleichzeitig beobachtet wurden, ist es nicht eindeutig, daß sie zusammengehören. Beide Effekte werden daher im folgenden getrennt diskutiert.

Zunächst zu den Ergebnissen bei den tiefen Substrattemperaturen von 135 K und 185 K. Aus der Energieabhängigkeit der Reflexprofile (Abb. 6.8) läßt sich die vertikale Rauhigkeit bestimmen. In Abb. 6.10 ist das Verhältnis der Intensität des Zentralreflexes zur Summe aus Zentralreflex und Schulter in Abhängigkeit von der Phase aufgetragen. Das schnelle Verschwinden des Zentralreflexes zeigt, daß die Oberfläche bei beiden Substrattemperaturen und der Bedeckung von 2.5 ML rauh ist. Die durchgezogene Kurve ist berechnet für eine Aufdampfmenge von 2.5 ML unter der Annahme, daß die Atome statistisch auf die Oberfläche auftreffen und keine laterale Diffusion vorhanden ist. Die Atome bleiben also an ihren Auftreffplätzen liegen. Dieses Modell liefert eine exponentielle Abnahme der Zentralreflexintensität bei der halbzahligen Phase.

Als nächstes wird die sechszählige Symmetrie im Untergrund bzw. im Fuß des Reflexes behandelt. Wie aus den vorliegenden Messdaten zu entnehmen ist zeigen alle nicht kreissymmetrischen Reflexprofile eine sternförmige Struktur. Die Ausläufer des Sterns liegen in Richtung der Normalreflexe, die Profile sind somit in dieser Richtung am breitesten. Ebenfalls ist zu erkennen, daß man in der näheren Umgebung des Reflexzentrums, d.h. für kleine  $|\vec{k}_{||}|$ , eine kreisrunde Form hat. In die Form eines Reflexes geht zum einen die Verteilung der Inseln sowie deren Form und Größe ein. Um einen Überblick über den Einfluß der Inselnform auf die Profilform zu bekommen, wurde das Beugungsbild verschiedener Inselnformen berechnet. Abb. 6.11 zeigt das Beugungsbild eines Dreiecks (10 Atome Kantenlänge) bei halbzahlgiger Phase. In der Berechnung wird neben dem Dreieck auch eine Unterlage berücksichtigt. Allerdings ist in Abb. 6.11 die Delta-Funktion vom Substrat bei  $k_{||} = 0$  weggelassen. Alle Atome sitzen auf Gitterplätzen (fcc-Gitter, (111) Fläche) und nur alle vollständig verdeckten Atome tragen nicht zur Streuung bei. Kantenatome besitzen die gleiche Streuamplitude wie alle anderen Atome. Das Beugungsbild zeigt die typische sternförmige Struktur im Außenbereich, während der Reflex im inneren rund ist. Es läßt sich übrigens allgemein zeigen, daß alle n-zähligen Streuanordnungen mit  $n > 2$  in der Mitte einen kreisrunden Reflex liefern. Dazu wird die Intensität in der Mitte nach kleinen  $\vec{k}_{||}$  entwickelt und man erhält

$$I = N^2 - N \sum_m (k_x^2 x_m^2 + k_y^2 y_m^2)$$

$N$  ist die Anzahl der Streuer und  $x_m, y_m$  sind die Abstände der Streuer vom Schwerpunkt der Anordnung.  $\sum_m x_m = \sum_m y_m = 0$

Für n-zählig symmetrische Anordnungen mit  $n > 2$  gilt

$$\sum_m x_m^2 = \sum_m y_m^2, \text{ woraus folgt } I = N^2 - N k^2 \sum_m x_m^2$$

Die Reflex ist somit kreissymmetrisch.

Die oben gezeigten simulierten Beugungsbilder zeigen die gewünschte sternförmige Struktur, aber der Einfluß der Inselverteilung ist nicht berücksichtigt. Daher wird im folgenden ein weiteres Modell betrachtet. In diesem von Spadacini und Tommei behandelten 2d-Modell wird die Rauigkeit der Oberfläche durch einen Markov-Prozess beschrieben /42/. Dieser soll sowohl in der x-y-Ebene, wie auch in der z-Richtung stationär sein. (d.h.  $P_2(m_2, L_2 | m_1, L_1) = P_2(m, L)$ ,  $m = m_2 - m_1$ ,  $L = L_2 - L_1$ ), die Paarkorrelation  $P_2$  hängt nur vom Abstand ab.  $P_2$  ist die Wahrscheinlichkeit einen Streuer bei  $m_2, L_2$  zu finden, wenn einer bei  $m_1, L_1$  ist.) Das bedeutet, daß in diesem Modell die Rauhtiefe mit der Größe des Bereichs ständig wächst. Die Berechnung der Intensität  $I(\vec{k}_H, k_z)$  für ein hexagonales Gitter liefert:

$$I(\vec{k}_H, k_z) = ((1 - R^3)^2 - R^2(1 - R)^2 (3 + 2(\cos u + \cos v + \cos(u-v)))) * \\ ((1 - 2R\cos u + R^2) * (1 - 2R\cos v + R^2) * (1 - 2R\cos(u-v) + R^2))^{-1}$$

$$R = R(k_z) = \sum_m Q(m|0) \exp(i m k_z d) \quad (3.1)$$

$$\vec{k}_H = u \vec{b}_1 + v \vec{b}_2 \quad \vec{b}_1, \vec{b}_2 \text{ Einheitsvektoren } \approx 120^\circ$$

$Q(m|0)$  ist die Paarkorrelation  $P_2$  zwischen zwei nächsten Nachbaratomen. Das Reflexprofil wird also bei gegebener Phase nur durch den Parameter  $R$  beschrieben. Abb. 6.12 zeigt ein nach (3.1) für die Werte  $R = .82$  und  $R = .613$  berechnetes Beugungsbild. Für  $R = .82$  ist es ebenfalls in der Mitte rund und nach außen hin sternförmig. Für  $R = .613$  tritt erst am Rand des Bildes eine Abweichung von der Kreisform auf. Ein Vergleich mit gemessenen Reflexprofilen wurde über einen Vergleich der Profilform in Richtung der Normalreflexe, d.h. (10)-Richtung, und in der (11)-Richtung vorgenommen. Dazu wurde zunächst der Parameter  $R(k_z)$  durch Fitten des Profils in Normalreflexrichtung bestimmt und mit diesem Wert das Profil in (11)-Richtung berechnet. Um den

$R = .613$

- 60 -

$R = .82$

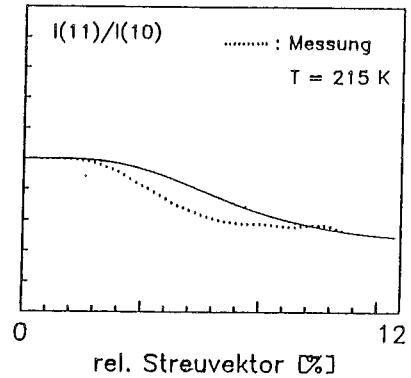
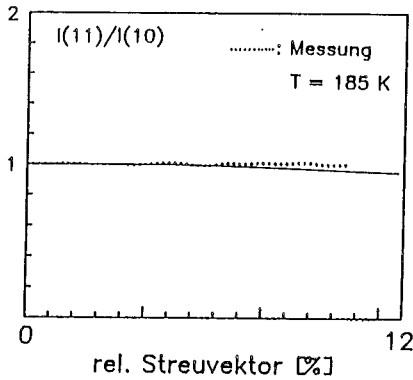
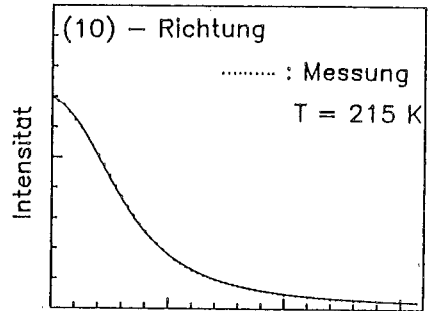
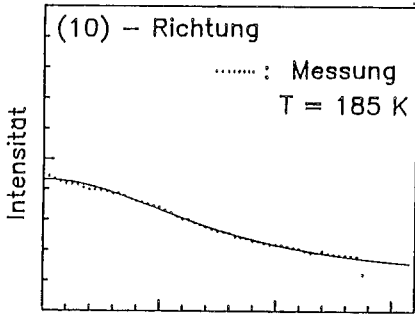
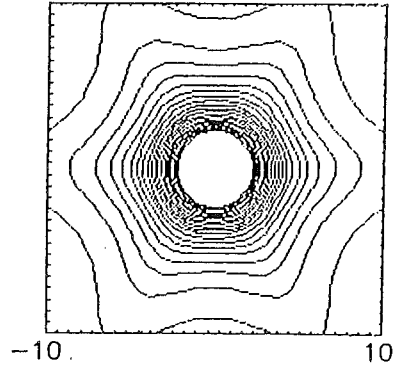
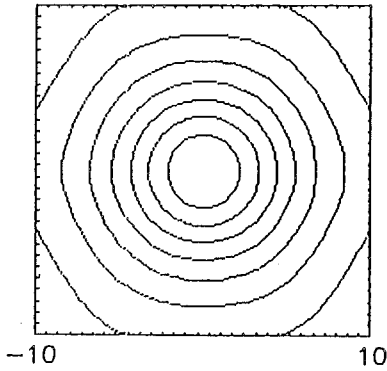


Abb.6.12.: (00)-Reflexform ,berechnet nach einem 2d-Markov-Modell für ein hexagonales Gitter. Die Kurven sind gefittet an zwei Messungen bei  $T = 185$  K und  $T = 215$  K. In Normalreflexrichtung((10)) zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Die gemessenen Reflexprofile zeigen aber eine größere Richtungsabhängigkeit.

Einfluß der Instrumentenfunktion zu berücksichtigen, wurde nicht direkt mit Gl. (3.1) gefittet, sondern diese vorher mit einer gaussförmigen Instrumentenfunktion von  $.8\% \text{ HwB}$  gefaltet. Diese Anpassung ist in Abb. 6.12 für die beiden Substrattemperaturen 185 K und 215 K dargestellt. Es zeigt sich, daß sich die Profilform in (10)-Richtung gut fitten läßt. Die Unsymmetrie, also das Abweichen von der Kreisform, ist aber bei den gemessenen Profilen (215 K) ein wenig größer als bei den berechneten. Die Übereinstimmung bei den höheren Substrattemperaturen ist weniger gut. Wahrscheinlich ist das auf den Einfluß der Facettenreflexe in der Reflexmitte zurückzuführen. Das Modell weicht in einigen Details von den gemessenen Daten ab, stimmt aber in wichtigen Punkten mit den Messdaten überein. So wird die sechszählige sternförmige Struktur beschrieben, es ist kein Zentralreflex mehr da und das beobachtete Reflexprofil wird annähernd wiedergegeben. Bedenkt man, daß im Modell nur ein freier Parameter steckt, so ist die Vergleich der Messdaten mit diesem Modell sicherlich sinnvoll, solange keine verfeinerten Verfahren zur Verfügung stehen. Für den Fall, daß man nur Einfachstufen mit der Wahrscheinlichkeit  $\frac{\xi}{2}$  zuläßt, gilt für die Gegenphasebedingung  $\xi = (1-R)/2$ . D.h. für  $R = 0.82$  (Messung bei 215 K) ist  $\xi = .09$  und für  $R = .613$  (Messung bei 185 K) ist  $\xi = 0.19$ .  $\xi$  ist die Wahrscheinlichkeit, daß zwischen zwei nächsten Nachbaratomen eine Stufe auftritt. Bei 185 K ist diese Wahrscheinlichkeit also doppelt so hoch wie bei 215 K.

Bislang wurde davon ausgegangen, daß die gemessenen Reflexprofile allein durch kohärente Überlagerung zustande gekommen sind. Eine inkohärente Überlagerung verschiedener Oberflächenbereiche ist aber auch möglich. Also gibt es z.Bsp. in einem Teilbereich vorwiegend Stufen in einer Richtung so bekommt man 2-zählige Reflexe von diesem Bereich. Hat man makroskopisch keine bestimmte Vorzugsrichtung auf dem

Temp. [K]	$\theta$ [ML]	Facetten- Winkel [°]   Richtung
245	2.5	1.0   $11\bar{2}$
270	2.5	0.9   $01\bar{1}$
300	5.0	0.9   $01\bar{1}$
325	2.5	0.5   $\bar{1}2\bar{1}$

Tabelle 6.1.: Neigungswinkel und Richtung der beobachteten Facetten.

Kristall ,so findet man auf Grund der Symmetrie des Substrats auch solche Stufenfolgen in anderen Kristallrichtungen . Die inkohärente Überlagerung liefert dann wieder Reflexe mit der Symmetrie des Substrats. Im inneren sind die Reflexe dann wieder rund und ihre Form im Außenbereich hängt von der speziellen Struktur in den Teilbereichen ab.

Nun zum Aufspaltungsverhalten in der Reflexmitte (Abb. 6.5,Abb. 6.6). Aus der Energieabhängigkeit läßt sich der Neigungswinkel der Facetten berechnen. Es zeigt sich ,daß dieser mit steigender Aufdampf Temperatur kleiner wird (Tabelle 6.1). Nachträgliches Tempern verkleinert ihn ebenfalls. Auffallend ist aber ,daß keine Dreizähligkeit in der Aufspaltung zu beobachten ist. D.h. bestimmte Facettenrichtungen sind bevorzugt.Das kann aber nur durch eine Anisotropie des Substrats hervorgerufen werden. Z.B. eine mittlere Neigung der Oberfläche gegen die (111)-Fläche oder eine anisotrope Verteilung von Defekten (Versetzungen) an der Oberfläche. Gerade bei den erhöhten Substrattemperaturen ist die heterogene Keimbildung bevorzugt , so daß dann an diesen Defekten das Wachstum beginnt. Damit läßt sich das beobachtete Verhalten beschreiben. Dazu geht man davon aus ,daß die Defekte in senkrechter Richtung (das entspricht hier der Sägerichtung des Kristalls) dichter liegen als in der Horizontalen.Solange die Inseln nicht zusammenlaufen, sind alle Facetten gleichberechtigt.Wachsen die Inseln in vertikaler Richtung zusammen, so fallen die Facetten in dieser Richtung weg. Das wird in den Beugungsbildern beobachtet. Zusätzlich ist eine Bevorzugung von Facetten in  $(11\bar{2})$  und  $(\bar{1}2\bar{1})$  Richtung zu erkennen. Da die Oberfläche im Mittel nicht geneigt ist , müssen in den Gegenrichtungen aber auch Facetten vorhanden sein . Daß diese nicht zu sehen sind kann vielleicht daran liegen , daß sie steiler sind und deren Intensität geringer ist als die der flachen Facetten.

Ein bislang noch nicht diskutierter Punkt ist das Fehlen von Oszillationen der Normalreflexintensität während des Aufdampfens, wie z.B. bei der Si-Epitaxie. Oszillationen sind auf Cu(100) mit He-Beugung /43/ und auf Cu(111) mit der Augerspektroskopie beobachtet worden/44/. Bei den hier durchgeführten Messungen sind hingegen keine gemessen worden. Für das Auftreten von Oszillationen braucht man ein Aufwachsen der Atome auf Gitterplätzen und einen Schichtaustausch während des Aufdampfens. D.h. auftreffende Atome sollten bevorzugt in tieferliegende noch nicht ganz gefüllte Schichten wechseln. Ist dieser Austausch behindert oder tritt sogar der entgegengesetzte Effekt auf (z.B. Bildung von 3d-Inseln, Bsp. Pb/Cu(111)) so ist nur eine monotone Abnahme der Intensität zu beobachten. Ein solcher Schichtaustausch kann z.B. dadurch verhindert werden, daß die Stufenkanten Potentialbarrieren für die Diffusion des Atoms darstellen. Diese Potentialbarriere hängt dann sicherlich von der Struktur der Stufe ab. (z.B. mittlerer Abstand der Kantenatome) und somit von der Orientierung der Oberfläche. Zu diesem Unterschied kommt noch eine unterschiedliche Diffusionslänge hinzu, womit das unterschiedliche Verhalten von Cu(100) und Cu(111)-Flächen erklärbar wäre. Namba /44/ hat auf Cu(111)-Flächen Oszillationen in der Profilform des Cu-Augerpeaks (61eV) bei 470 K gefunden. Die LEED-Daten zeigen aber bei solch hohen Temperaturen eine nahezu vollständig ausgeheilte Oberfläche. Möglicherweise spielt es eine Rolle, daß dort als Substrat ein dünner Cu-Film auf einem NaCl-Kristall benutzt wurde.

Das Fehlen von Oszillationen in unserem Experiment besagt, daß hier die Kanten der Terrassen eine unüberwindliche Schwelle für die Diffusion des Atoms darstellen. In allen anderen Experimenten (Si/Si(111) /12/, Si/Si(100) /46/, Cu/Cu(100) /43/) wurde diese Schwelle nicht gefunden. Auch bei Feldionmikroskopie - Beobachtungen der Oberflächendiffusion (W(110), W(211)) wurde eine Reflektion an der Kante gefunden./47/.



## 7. Schluß

Hochauflösendes Spa-LEED erlaubt eine sehr genaue Oberflächenstrukturbestimmung. An den hier untersuchten drei epitaktischen Systemen (Cu/Cu(111), Pb/Cu(111), Ag/Al(111)) wurden Vorgänge untersucht, die von dieser hohen Auflösung Gebrauch machen und sich mit einem normalen LEED-System, wenn überhaupt, nur schwer untersuchen lassen. Die erweiterte Strukturinformation liefert ein qualitativ und quantitativ besseres Verständnis des im allg. recht komplizierten Epitaxievorganges.

Blei wächst auf Cu(111) anfangs mit einer Gitterkonstante auf, die je nach Aufdampftemperatur 0.3 - 0.8 % größer ist als der normale Bleivolumenabstand. Die Zuhilfenahme von Doppelbeugungsreflexen erlaubt eine Genauigkeit der Gitterkonstantenbestimmung von  $\pm 0.1\%$ . Bei einer Bedeckung von einer Monolage komprimiert diese Schicht. Die Kompression geht linear mit der Bedeckung, bis ein Endwert von 3.2% (gegenüber dem Bleivolumenabstand) erreicht wird. Diese Kompression war bislang als Übergang in eine kommensurable (4x4)-Überstruktur bekannt. Dazu ist aber nur eine Kompression von 2.65% erforderlich. Das zeigt, daß die Periodizität des Substrats wenig Einfluß auf die Gitterkonstante in der Pb-Schicht hat. Die Pb-Schicht schwimmt sozusagen auf der Unterlage, nur die Orientierung wird durch das Substrat vorgegeben. Die Kompression wird über eine hohe Bindungsenergie zur Unterlage erklärt. Mit der Kompression verbunden ist eine Zunahme des Schmelzpunktes um mehr als 200 K. Der Schmelzpunkt der komprimierten Schicht liegt oberhalb von 800 K. (Volumenblei hat einen Schmelzpunkt von 601 K). Für Bedeckungen oberhalb einer Monolage wächst Blei bei Substrattemperaturen von  $\geq 300$  K in 3d-Inseln (Stranski-Krastanov - Wachstum) auf. Bei Kühlen auf 200 K erhält man eine Schicht für Schicht Wachstum.

Ag/Al(111) zeigt ebenfalls eine Kompression der ersten Schicht. Im Gegensatz zum Pb wächst es bei  $\Theta < 1\text{ML}$  pseudomorph auf, hat also die Gitterkonstante von Al und ist somit von Beginn an um 0.9% komprimiert. Wenn die Schicht geschlossen ist, findet eine weitere Kompression statt, um bis zu 5.4%. Die Kompression wird dadurch erklärt, daß die Gitterkonstante der freien 2d-Schicht kleiner ist als entsprechende Volumengitterkonstante. Der Grund dafür liegt in der unterschiedlichen elektronischen Bindung in der Schicht. Die relativ zum Volumen erhöhte Elektronendichte zwischen den Atomen in der Schicht führt zu einer stärkeren Bindung und somit einem geringeren Abstand.

Bei Cu/Cu(111) wurde im untersuchten Bereich kein Schicht-auf-Schichtwachstum beobachtet. Die Ergebnisse deuten darauf hin, daß ein Schichtaustausch z.B. über eine Behinderung des Stufenkantenübergangs verhindert ist. Die gemessenen Reflexprofile sind nicht kreis-symmetrisch und machen im Prinzip eine 2d-Auswertung erforderlich, die aber noch nicht verfügbar ist. Ein Teil der Reflexprofile läßt sich mit einem 2d-Markovprozess-Modell beschreiben. Im Vergleich zu Silizium ist der Einfluß von Kristalldefekten auf das Wachstum bedeutend, da fehlerfreie Cu-Kristalle nicht verfügbar waren. Sowohl die Präparation der Oberfläche, als auch die Qualität des Volumenmaterials ist weit weniger entwickelt wie bei Silizium.

Wie die vorliegenden Messungen zeigen lassen sich Wachstumsprozesse im Monolagenbereich mit Hilfe der hochauflösenden Elektronenbeugung (SPA-LEED) in vielen Details untersuchen, Details, die bisher mit anderen Verfahren nicht zugänglich waren.

Abkürzungsverzeichnis

a	: Gitterkonstante
A	: Streuamplitude
$b_1, b_2$	: Einheitsvektoren des reziproken Gitters
cps	: counts per second
d	: Länge im realen Raum
$f_i$	: atomarer Streufaktor
F	: Strukturfaktor
G	: Gitterfaktor
$I(k)$	: Intensität
$k_0$	: Wellenvektor der einfallenden Welle
$k_1$	: Wellenvektor der auslaufenden Welle
$k_{10}$	: Abstand (00) - (10)-Reflex im reziproken Raum
k	: Impulsübertrag parallel zur Oberfläche
LEED	: low energy electron diffraction
m	: Elektronenmasse
M	: Atommasse
N	: Anzahl der Streuer
$p_n$	: $\theta_n - \theta_{n+1}$
$P(\Gamma)$	: Terrassenbreitenverteilung
$r, r'$	: Ortsvektoren
RHwB	: relative Halbwertsbreite
S	: Streuvektor
SPA	: spot profile analysis
$T_M$	: Schmelztemperatur
$\varphi(r)$	: Autokorrelationsfunktion
$\rho(r)$	: Dichtefunktion
$\mu$	: chemisches Potential
$\lambda$	: Wellenlänge des Elektrons
$\theta$	: Bedeckung
$\theta_D$	: Debyetemperatur
$\Gamma$	: Terrassenbreite
$\bar{\Gamma}$	: mittlere Terrassenbreite

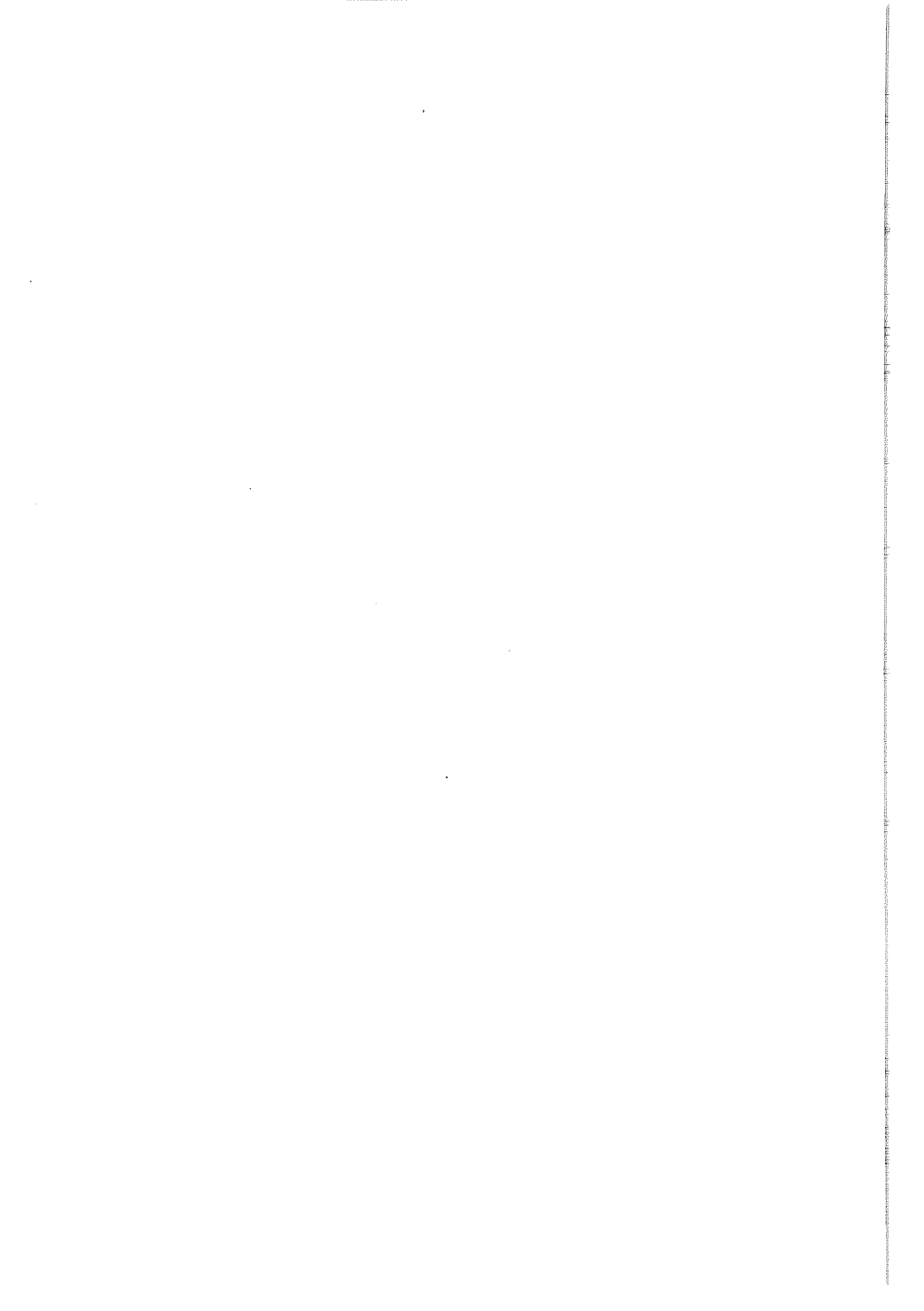
Literaturverzeichnis

- / 1/ M. Henzler: Defects in Surface Structure:  
Informations with LEED,  
in Festkörperprobleme XIX (1974)
- M. Henzler: Measurements of Surface Defects by LEED,  
Appl. Phys. A 34, 205 - 214 (1984)
- / 2/ E.Bauer, Applic. of Surf. Sci. 11/12 (1982) 479-494
- / 3/ J.P.Biberian, G.A.Somorjai, J.Vac.Sci.Technol.16(6),  
Nov/Dec 1979, 2073
- / 4/ K.J.Rawlings,M.J.Gibson,P.J.Dobson,  
J.Phys.D: Appl.Phys., Vol 11, 1978 ,2059
- / 5/ J.Henrion, G.E.Rhead, Surf. Sci. 29 (1972) ,20 - 36
- / 6/ M.G.Barthes, G.E.Rhead, Surf.Sci.80 ,1979, 421
- / 7/ C.Ocal, E.Martinez, S.Ferrer, Surf. Sci. 116 (1983),  
571 - 581
- / 8/ L.J.Clarke, "Surface Crystallography",  
John Wiley & Sons,1985
- / 9/ J.M. Cowley, " Diffraction Physics ",  
North Holland, 1981
- /10/ H.Busch, M.Henzler, Surf. Sci. 167(1986) 534
- /11/ C.S.Lent, P.I.Cohen, Surf. Sci. 139(1984) 121
- /12/ M.Horn , Diplomarbeit Universität Hannover (1985)

- /13/ J.Villain, in: Ordering in Two Dimensions, Ed. S.K. Sinha (North-Holland, Amsterdam, 1980), 123
- /14/ P. Bak, Rep.Prog.Phys., Vol.45, 1982, 587
- /15/ E.Bauer, Z. Krist. 110 (1958) 372,395
- /16/ J.A. Venables, G.D.T. Stiller, M.Hanbücken, Rep.Prog.Phys. Vol 47, 1984, 399-459
- /17/ R.J.Muirhead, J.G.Dash, J.Krim, Phys.Rev.B, Vol 29 No 9 1984, 5074 - 5080
- /18/ S.Stoyanov, Surf. Sci. 172 (1986) 198 - 210
- /19/ U.A.Scheithauer, Promotion Universität Hannover (1986)
- /20/ U.Scheithauer, G.Meyer, M.Henzler, Surf. Sci.
- /21/ H.Waschull, "Präparative Metallographie", VEB Deutscher Verlag der Grundstoffindustrie, (1983)
- /22/ K.D. Gronwald, Promotion Universität Hannover (1981)
- /23/ J.S.Ahearn, Jr., J.P.Monaghan, Jr., J.W.Mitchell, Rev.of Sci.Instr., Vol 41 Nr 12, (1970) , 1853
- /24/ Horn , FHI Berlin ,persönl. Mitteilung
- /25/ P.J. Dobson , B.J. Regan , J. of Phys. E (1976) Vol.9 , 694

- /26/ F.T. Gittes, M. Schick, Phys.Rev.B, (1984)  
Vol 30 No 1 ,209
- /27/ K. Kern, R. David, R. Palmer, G. Comsa ,  
Phys. Rev. Letters Vol.56 ,No 26 , 2823
- /28/ K. Gürtler, K. Jacobi, Surf. Science 134 (1983) 309-328
- /29/ K. Jacobi ,FHI Berlin ,persönliche Mitteilung
- /30/ F.A.Lindemann, Phys.Z.14, 609 (1910)
- /31/ J.M.Kosterlitz ,D.J.Thouless, "Two-dimensional Physics"  
in Progress in Low Temperature Physics ,Vol VIIB,  
North-Holland Publishing Company, 1978
- /32/ J.M.Kosterlitz,D.J.Thouless ,J.Phys.C:Solid State Phys.,  
Vol 6, 1973, 1181
- /33/ D. R. Nelson, B.I. Halperin, Phys. Rev. B, (1979)  
Vol 19, No 5 , 2457
- /34/ Landau - Lifshitz, " Theorie der Elastizität " ,  
Akademie-Verlag Berlin
- /35/ B. Frick, K. Jacobi, Surf. Sci. 178 (1986) 907
- /36/ P. Akhter , J.A. Venables, Surf. Sci. 102 (1981) L41
- /37/ E. Wimmer, Surf. Sci. 134 (1983) L487
- /38/ I.P. Batra, J.Vac.Sci.Tech. A3(3) (1985) 1603
- /39/ I.P. Batra, S.Ciraci, G.P. Srivastava, Phys. Rev. B,  
(1986) Vol 34 No 12 8246

- /40/ J.Wollschläger , Diplomarbeit Universität Hannover
- /41/ P.Marienhoff , Promotion in Arbeit
- /42/ R. Spadacini, G.E. Tommei, Surf. Sci. 133  
(1983) 216 - 232
- /43/ L.J. Gomez, S. Bourgeal, J. Ibanez, M. Salmeron,  
Phys. Rev. B , (1985) Vol 31 No 4 2551
- /44/ Y. Namba, R.W. Vook, S.S. Chao, Surf. Sci. 109 ,  
1981 320 - 330
- /45/ C.Argile, G.E. Rhead ,Thin Solid Films 87  
(1982) 265-272
- /46/ U. Gotter, Diplomarbeit Universität Hannover (1987)
- /47/ G. Ehrlich , Proc.IX IVC-V ICSS, Madrid (1983)





## Danksagung

Herrn Prof. Dr. M. Henzler danke ich für die Ermöglichung dieser Arbeit sowie für die zahlreichen Ratschläge und Diskussionen, die mir eine große Hilfe waren.

Weiterhin danke ich den Mitgliedern des Institutes, die mich durch Anregungen und Diskussionen unterstützt haben und im besonderen Herrn Dr.U.A. Scheithauer , Herrn cand. phys. Krause und Herrn Dr. M. Michailov sowie Herrn Dipl.Phys. B. Frick und Herrn Dr. K. Jacobi für die angenehme Zusammenarbeit.

Den Mitarbeitern der mechanischen und elektronischen Werkstatt sei für Ihre Bemühungen um die Lösung der technischen Probleme gedankt.



## Lebenslauf

Gerhard Meyer

24.04.56      Geboren in Minden/Westfalen

1962 - 67      Besuch der Grundschule in Petershagen

1967 - 74      Besuch des städtischen Gymnasiums  
in Petershagen

Juni 1974      Abitur

Okt. 74 -      Studium der Physik an der  
- Juni 81      Universität Hannover

Juni 1981      Diplomhauptprüfung

1981 - 82      Grundwehrdienst

seit            Wissenschaftlicher Mitarbeiter  
01.01.83      am Institut für Festkörperphysik der  
Universität Hannover

