

## 5 Au(110)

Ähnlich wie die Stufenkanten von Ag(110) werden bei Temperaturen ab etwa 420 K auch solche von Au(110) in Orthogonal- und Diagonal-Scans ausgefranst abgebildet [19]. Es stellt sich die Frage, ob auch in diesem Fall ein bedeutender Einfluss der STM-Spitze vorliegt oder nicht. Im Gegensatz zum unrekonstruierten Ag(110) [Abb. 2.1a] ist Au(110) (wie auch Pt(110))  $(1 \times 2)$ -MR-rekonstruiert [Abb. 2.1b]. Wegen der verglichen mit Ag(110) größeren Stufenkanten-Facette ist ein Austausch-Prozess eher unwahrscheinlicher, da hier mindestens drei Atome bewegt werden müssen, undenkbar ist er jedoch nicht. Betrachtet man nun nicht die Stufenkanten selbst, sondern die vorhandenen Reihen der Terrassen als „Ad-Reihen“, d. h. als periodische Abfolge eindimensionaler Terrassen, dann ist die Oberfläche mit Stufenkanten geradezu übersät. Es ist also ohne weiteres denkbar, dass die STM-Spitze hier Atome wie bei Ag(110) mitbewegen kann.

Da jede zweite Atomreihe fehlt, sind die Gräben zwischen den dichtgepackten Reihen beim Gold und Platin deutlich tiefer als beim Silber. Somit ist vorwiegend 1D-Diffusion zu erwarten. Für Adsorbate auf Pt(110) ist solche Diffusion untersucht und ein Spitzeneinfluss bei typischen Tunnelwiderständen über  $100 \text{ M}\Omega$  ausgeschlossen worden [27]. Bei Untersuchungen auf Au(110) wurde ebenfalls kein Einfluss gefunden [22]<sup>1</sup>. In anderen Arbeiten wird dies bei der Analyse ebenfalls kommentarlos angenommen [25]<sup>1</sup>. Auch die STM-Untersuchungen der vorliegenden Arbeit zeigen für Orthogonal- und Diagonal-Scans *keinen* entscheidenden Einfluss auf die Oberfläche. Nur intrinsische Kinks sind somit für die beobachteten Fransen verantwortlich. Auch für Parallel-Scans gibt es bisher keine deutlichen Anzeichen, dass Atome aus den Stufenkanten gezogen werden, allerdings sollten hierzu weitere Experimente durchgeführt werden<sup>2</sup>. Im Hinblick auf die Ergebnisse beim Silber ist es überraschend, dass es keinen

---

<sup>1</sup>keine Parallel-Scans!

<sup>2</sup>Mit (sehr viel) Glück findet man dann eine ähnlich gute Stelle mit Stapelfehler wie beim Silber.

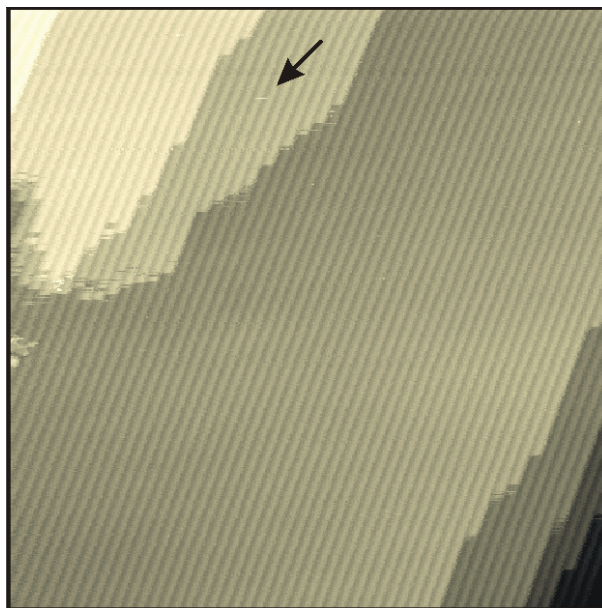


Abb. 5.1:  $45 \cdot 45 \text{ nm}^2$  STM-Bild von Au(110), bei  $(320 \pm 5) \text{ K}$ ,  $U_T = -826 \text{ mV}$ ,  $I_T = 5 \text{ nA}$ ; aus [154].

Hinweis auf einen Spitzeneinfluss gibt. Ein besseres Verständnis für diese Stabilität wird das nachfolgende Kapitel, in dem die Ir(110)-Oberfläche untersucht wird, bringen.

## 5.1 Typische Strukturmerkmale

Die Au(110)-Probe wurde im UHV durch wiederholtes Sputtern mit Neon und anschließendem Ausheilen bei 700 K präpariert und bei Temperaturen zwischen 300 K und 650 K mit dem STM untersucht. Ein typisches (nahe) Raumtemperatur-STM-Bild ist in Abb. 5.1 zu sehen. Wegen der  $(1 \times 2)$ -MR-Rekonstruktion haben die von links unten nach rechts oben verlaufenden dichtgepackten Reihen einen Abstand von  $2a_{\text{Au}} = 0,816 \text{ nm}$ . Die Kanten der Monostufen ( $h_{\text{Au}} = \frac{1}{\sqrt{8}}a_{\text{Au}} = 0,144 \text{ nm}$ ) werden glatt abgebildet, lediglich an den intrinsischen Kinks sind kurze Fransen vorhanden. Gelegentlich werden kurze, erhöhte Scan-Abschnitte abgebildet (siehe Pfeil).

Aus Hochtemperatur-STM-Untersuchungen [19] ist bekannt, dass die Stufenkanten ab etwa 420 K mobil werden. Ab etwa 550 K bilden sich – kontrovers diskutierte – fjordartige Strukturen (im Folgenden kurz als Fjorde bezeichnet)<sup>3</sup> [z. B. Abb. 5.2c], die MR bleibt jedoch

<sup>3</sup>Das Wort „Fjord“ soll zunächst einmal den optischen Eindruck in den STM-Bildern wiedergeben.

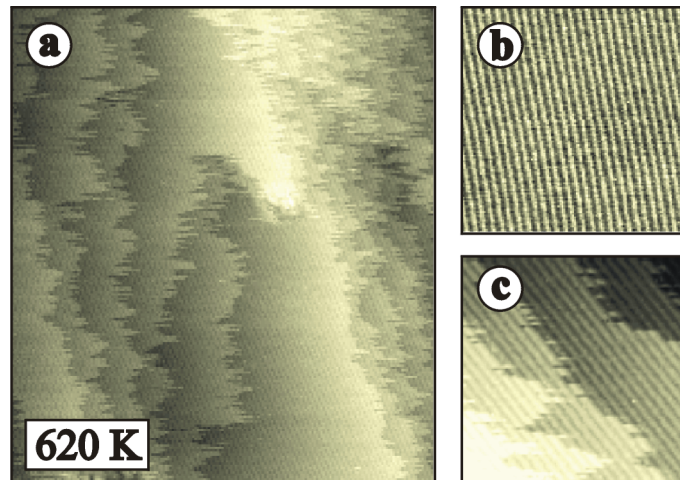


Abb. 5.2: a:  $63 \cdot 70 \text{ nm}^2$  Hochtemperatur-STM-Bild von Au(110)-(1  $\times$  2), b: hochaufgelöstes Bild der (1  $\times$  2)-MR-Struktur innerhalb einer ausgedehnten Terrasse, beide bei  $(620 \pm 30) \text{ K}$ ,  $U_T = -826 \text{ mV}$ ,  $I_T = 3 \text{ nA}$ ; c: fjordartige Stufenkante bei  $(550 \pm 30) \text{ K}$ ,  $U_T = -826 \text{ mV}$ ,  $I_T = 5 \text{ nA}$ ; a, b aus [154], c aus [19].

(selbst bis zu Temperaturen von 620 K) erhalten [siehe z. B. Abb. 5.2a, b]. Bei Temperaturen um 700 K findet ein Phasenübergang statt, die Oberfläche raut auf.

## 5.2 Die Stabilität von Stufenkanten

Durch Untersuchung von verschieden orientierten Stufenkanten konnte mit der vorliegenden Arbeit gezeigt werden, dass mit zunehmender Fehlneigung zur  $[1\bar{1}0]$ -Richtung die Stufenkanten immer stärker ausgefranst abgebildet werden.  $[1\bar{1}0]$ -Stufenkanten sind (wie bei Ag(110) [34, 155]) besonders stabil, und dies selbst bei diagonal gescannten Bildern und bei Temperaturen bis 500 K [Abb. 5.3a, (A)]. Alle anders orientierten Kanten sind fransig bzw. zeigen

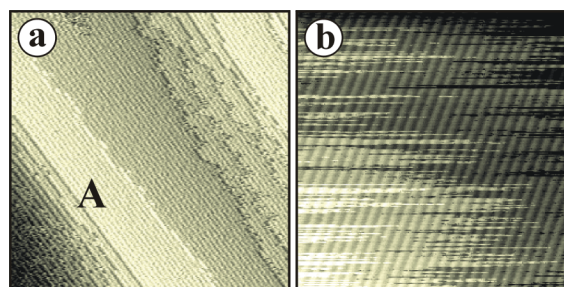


Abb. 5.3: Hochtemperatur-STM-Bilder von Au(110) mit Monostufen und Terrassen; a:  $48 \cdot 48 \text{ nm}^2$ ,  $(500 \pm 30) \text{ K}$ ,  $U_T = -826 \text{ mV}$ ,  $I_T = 5,0 \text{ nA}$ ; b:  $21 \cdot 21 \text{ nm}^2$ ,  $(650 \pm 30) \text{ K}$ ,  $U_T = -826 \text{ mV}$ ,  $I_T = 3,0 \text{ nA}$ ; aus [154].

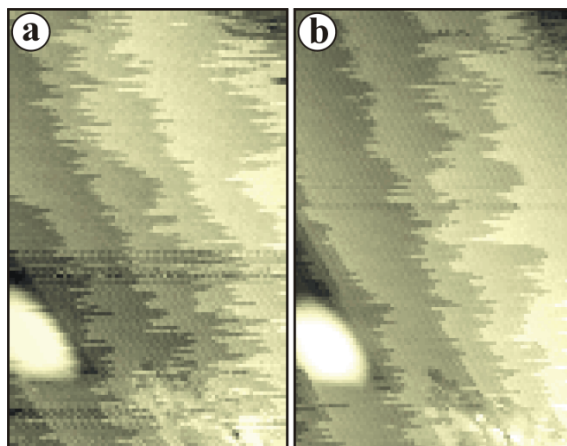


Abb. 5.4:  $35 \cdot 45 \text{ nm}^2$  Hochtemperatur-STM-Bilder desselben Oberflächenbereiches von Au(110) bei  $(500 \pm 30) \text{ K}$ , aufgenommen innerhalb eines Zeitintervalls von 1 min;  $U_T = -826 \text{ mV}$ ,  $I_T = 5,0 \text{ nA}$ ; aus [154].

(schon bei 500 K) Fjorde. Das Fehlen von Fransen an der  $[1\bar{1}0]$ -Stufenkante ist ein deutliches Zeichen für einen vernachlässigbaren Spitzeneinfluss (auch beim Aufräumen der um  $10^\circ$  bis  $20^\circ$  dagegen fehlgeneigten Stufenkanten<sup>4</sup>). Nichtsdestotrotz werden die Fransen durch Diffusion intrinsischer Kinks verursacht [33].

Die beiden nacheinander innerhalb 1 min an derselben Stelle aufgenommenen Bilder der Abb. 5.4 zeigen den starken Massentransport bei 500 K. Verglichen damit ist die Stabilität der  $[1\bar{1}0]$ -Stufenkanten bemerkenswert. Die Diffusion über die dichtgepackten Reihen hinweg ist offenbar sehr erschwert, entlang der Reihen jedoch leicht möglich (mittels *Leapfrog-Mechanismus* (engl.; Bocksprung) [156]). Bei noch höheren Temperaturen (650 K) geht die Fjord-Struktur in eine reine Fransen-Struktur über [Abb. 5.3b].

### 5.2.1 Erhöhung der zeitlichen Auflösung durch Parallel-Scans

Von einigen Autoren (Rost und Frenken [35]) wird bezweifelt, dass die thermodynamisch stabile Stufenkanten-Konfiguration Fjorde aufweist (egal ob diese sich zeitlich ändern oder nicht). Es wird vielmehr angenommen, dass die Stufenkante zu jedem Zeitpunkt *kompakt* ist, und die Fjorde (analog zu Fransen) nur durch zu langsames Abrastern zu Stande kommen. Die hohe Mobilität [Abb. 5.4] lässt diesen Schluss in der Tat zu. Um die zeitliche Auflösung zu verbessern, wurde die Oberfläche in Ref. [35] parallel zu den dichtgepackten Reihen gescannt.

<sup>4</sup>Notwendigerweise sind alle Kanten dieses Bildes bei denselben Tunnelbedingungen ( $U_T$ ,  $I_T$ , Spitzenform und -zusammensetzung, sowie Temperatur) aufgenommen.

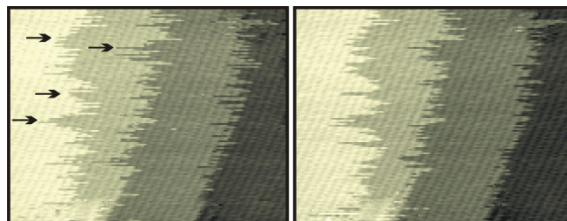


Abb. 5.5: Ausschnitte von STM-Bildern ( $160 \cdot 125$  Datenpunkte von  $256 \cdot 256$ ) der Au(111)-Oberfläche bei  $(460 \pm 20)$  K; sie zeigen Vor- (links) bzw. Rück-Scan (rechts);  $U_T = 688$  mV,  $I_T = 0,2$  nA, Scan-Geschwindigkeit:  $2330$  Datenpunkte  $s^{-1}$ .

Dieses Vorgehen ist ganz analog zu dem für Ag(110) in [34]. Die Stufenkante wird nun kompakt abgebildet, ein Spitzeneinfluss aber ausgeschlossen. Wegen der hohen Mobilität entlang der Reihen sollte es der STM-Spitze aber gerade in dieser Richtung besonders leicht fallen, Atome mitzubewegen, was somit zu Streifen führt. Verliert die Spitze die Atome erst beim Wechsel zur nächsten Reihe (und nicht mehrfach zwischendurch), sollte die Stufenkante sogar glatt erscheinen, d. h. im Gegensatz zum Silber kein charakteristisches Höhenprofil aufweisen. In Ermangelung geeigneter Positionsmarken auf der Au(111) ist es bisher aber nicht gelungen, dies eindeutig zu klären.<sup>5</sup> Damit können Parallel-Scans aber (bisher) auch nicht für eine Entscheidung herangezogen werden, ob Fjorde echte Struktur oder nur ein Mess-Artefakt darstellen.

### 5.2.2 Erhöhung der zeitlichen Auflösung durch Hin- und Rück-Scans

Eine andere Möglichkeit, die zeitliche Auflösung zu verbessern, besteht darin, Hin- und Rück-Scan einer Messung auszuwerten. Dies wurde für die vorliegende Arbeit für eine Temperatur von 460 K durchgeführt und ist in Abb. 5.5 dargestellt [157]. In jeder Scan-Zeile erreicht die Spitze dieselbe Position schon nach wenigen Millisekunden (statt Sekunden oder Minuten bei aufeinanderfolgenden Bildern). Da die Fjorde (siehe Pfeile) in beiden Bildern in nahezu identischer Weise zu sehen sind, muss in jedem einzelnen Scan die Position nahezu identisch sein. Da zwischen dem Scannen der entsprechenden Bildpunkte höchstens 100 ms vergehen, müssen die Strukturen auf dieser Zeitskala stabil sein (die kleineren Strukturen sind es allerdings nicht).

<sup>5</sup>Der Stapelfehler auf Ag(110) in Abb. 4.8 ist ein wahrer Glücksfall!

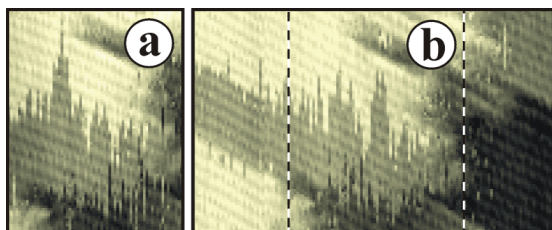


Abb. 5.6: Aufeinanderfolgende STM-Bilder von Au(110); der Bereich von (a) ist in (b) durch gestrichelte Linien markiert; Tunnelparameter wie bei Abb. 5.5, schnelle Scan-Richtung ist vertikal.

### 5.2.3 Mehrfachbeobachtung eines Fjords

Gegen ein Mess-Artefakt spricht auch der tiefe Fjord in Abb. 5.6a, der einen Bereich nahe einer [001]-Stufe abgrenzt. Die Annahme eines ständig kompakten Stufenprofils wie in [35] führt zu folgendem Szenario: Anfänglich ist die obere Terrasse gänzlich bis zur rechten Seite gefüllt<sup>6</sup>. Die Terrasse verbreitert sich und schrumpft während des Scannens, wie durch die Stufenrauigkeit gegeben. Beim großen Fjord angelangt ist der Bereich rechts davon notwendigerweise komplett geleert. Abb. 5.6b wurde etwa 3 min später aufgenommen und schließt denselben Bereich der Oberfläche ein (gestrichelte Linien). Die obere Terrasse reicht noch immer bis ganz nach rechts und zeigt ähnliche Merkmale wie Abb. 5.6a mit einer nahezu gleichen Anzahl von Datenpunkten für die von der Terrasse bedeckte Fläche. Der große und darüber hinaus sehr koordinierte Massenfluss, der nötig ist, um die Terrasse zunächst zu entleeren und anschließend im selben Maße wieder aufzufüllen, lässt starke Zweifel an der Annahme permanent kompakter Stufenkanten aufkommen. Es liegt hingegen nahe, die Beobachtung durch einen tatsächlichen kurzzeitig vorhandenen Fjord zu erklären.

Für beide Erklärungsansätze (Fjorde sind real bzw. Mess-Artefakte) gibt es also gewichtige Argumente und eine eindeutige Entscheidung für eines der beiden Modelle (und damit, ob in [19] ein Phasenübergang beobachtet wurde, oder nicht) kann derzeit nicht getroffen werden.

<sup>6</sup>Die langsame Scan-Richtung ist in Abb. 5.6 von rechts nach links!