

## 6 Ir(110)

Für ein besseres Verständnis der Iridium-(110)-Rekonstruktionen [Kapitel 2.1] ist es hilfreich, sich zunächst die allgemeinen Tendenzen der anderen niedrig-indizierten Oberflächen vor Augen zu führen.

### 6.1 Weitere Rekonstruktionen der 5d Metalle

Neben den in Kapitel 2.1 beschriebenen Rekonstruktionen der (110)-Oberflächen von Gold, Platin (beide  $(1 \times 2)$ -MR) und Iridium (unrekonstruiert,  $(1 \times 2)$ -MR,  $(1 \times 3)/(1 \times 1)$ , {331}-Facetten) treten auch auf ihren anderen niedrig-indizierten Oberflächen Rekonstruktionen auf, so die quasi-hexagonalen Anordnungen bei Au, Pt und Ir(001). Die jeweiligen Überstrukturen sind leicht gewellt und ähneln ansonsten einer {111}-Fläche. Ihre Ausbildung wird in theoretischen Arbeiten einer großen Zugverspannung der unrekonstruierten Oberfläche zugeschrieben [158] und folgt auch aus Untersuchungen zur Phononendispersionsrelation an der Ir(001)-Oberfläche mittels HREELS<sup>1</sup> in Kombination mit gitterdynamischen Rechnungen [159].

#### 6.1.1 Die (001)-Flächen

Die einfachste der drei Rekonstruktionen liegt bei Ir(001) vor. Oberhalb einer Temperatur von etwa 850 K wandelt sich die  $(1 \times 1)$ -Struktur in eine  $(1 \times 5)$  um, die in zwei Domänen vorliegt, und dann mindestens im Temperaturbereich von 55 K bis 2100 K stabil ist [160]. Für diese Struktur wurden verschiedene Modelle diskutiert [161] und mit LEED-Intensitätsanalysen schließlich die quasi-hexagonale „Two-Bridge“-Struktur etabliert [162, 163]. Jeweils sechs Atomreihen der obersten liegen hierbei über fünf Reihen der darunter liegenden Schicht.

---

<sup>1</sup>engl. high-resolution electron-energy-loss spectroscopy

Die Oberflächendichte nimmt auf diese Weise um 20 % zu. Die Korrugation dieses Systems ist auch in der AG-Rieder von Bodo Burg [57] mit He- und Ne-Streuung, sowie dem STM untersucht und die maximale Amplitude zu etwa 0,04 nm bestimmt worden.

Die Rekonstruktionen von Au(001) und Pt(001) sind ähnlich, aber komplizierter und nicht mehr kommensurabel mit dem Volumengitter. Aus LEED-Untersuchungen [164] folgt, dass bei Pt(001) das quasi-hexagonale Gitter der obersten Lage gegenüber den darunter liegenden Schichten um  $0,7^\circ$  gedreht ist, weshalb vier verschiedene Domänen möglich sind. Wie bei der Ir(001)-(1 × 5) erhöht sich auch hier die Oberflächendichte um etwa 20 %. Bei Temperaturen von 77 K kann die Struktur mit dem STM in die weniger dichte Volumen-{111} umgewandelt werden. Das Überschussmaterial bildet dann unregelmäßige Gold-Cluster, die allerdings innerhalb weniger Minuten zerfallen, wobei sich wieder die quasi-hexagonale Phase ausbildet [165]. Für Au(001) wird von unterschiedlich großen Einheitszellen berichtet (bis zu einer Größe von  $c(26 \times 68)$ ) [161, 166]. STM-Untersuchungen zeigen aber die große Ähnlichkeit mit der quasi-hexagonalen (1 × 5)-Struktur von Ir(001) [167]. Auch hier erhöht sich die Oberflächendichte um etwa 20 %.

Analog zu den (110)-Flächen rekonstruieren nur die (001)-Flächen der 5d fcc-Metalle Ir, Pt und Au, während die reinen (001)-Oberflächen der 4d fcc-Metalle Rh, Pd und Ag keine Rekonstruktion zeigen. Theoretische Untersuchungen stimmen damit überein [158].

### 6.1.2 Die (111)-Flächen

Erstaunlicherweise sind sogar die (111)-Flächen von Au und Pt [168–172] verdichtet. Während die Au(111) spontan in die wohlbekannte Fischgräten-Überstruktur (engl. herringbone superstructure) rekonstruiert [168, 173], bei der für je 23 Atomreihen des Volumens eine Extra-Reihe in der Oberflächenlage vorhanden ist, kann die Rekonstruktion bei Pt(111) durch eine Temperaturerhöhung oberhalb 1330 K (Röntgenbeugung [171]) oder durch Erhöhung des chemischen Potentials mit Platin-Dampf hinunter bis zu 400 K [172] induziert werden. Oberhalb  $0,65 T_M$  (mit dem jeweiligen Schmelzpunkt  $T_M$ ) findet man mit Röntgenbeugung für Au(111) [174–176] und Pt(111) [175–177] eine isotrope Verdichtung der Oberfläche. Bei Ir(111) hingegen scheint die ideale Kristallebene die stabile Geometrie zu sein [178]. Die scheinbar

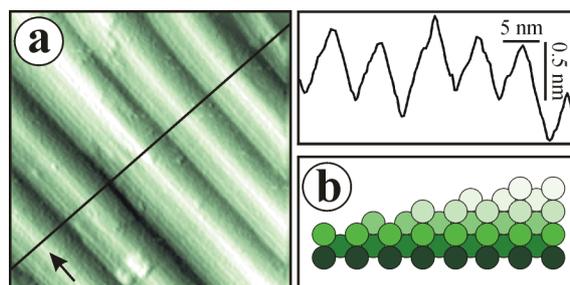


Abb. 6.1: a:  $28 \cdot 28 \text{ nm}^2$  STM-Bild von Ir(110) bei  $(300 \pm 5) \text{ K}$ ; es zeigt die  $\{331\}$ -facettierte Oberfläche mit parallel zur  $[1\bar{1}0]$ -Richtung verlaufenden Graten (siehe Pfeil); der zugehörige Line-Scan verläuft entlang der durchgezogenen Linie;  $U_T = 526 \text{ mV}$ ,  $I_T = 5 \text{ nA}$ ; b: Kugelmodell einer  $\{331\}$ -Facette im Querschnitt; aus [154].

im Widerspruch zur Verdichtungstendenz stehende  $(1 \times 2)$ -MR der  $(110)$ -Flächen, bei der ja sogar jede zweite Reihe fehlt, [64] ist durch die Ausbildung von  $\{111\}$ -Nanofacetten erklärbar. Die hier in theoretischen Untersuchungen gefundene effektive Abstoßung benachbarter dichtgepackter Reihen ist jedoch überraschend, da in allen anderen Fällen stets eine Verdichtung, d. h. starke *attraktive* Wechselwirkungen eine Rolle spielen. Ein kurzer Überblick über wichtige Eigenschaften der Proben findet sich in Tabelle 9.1.

## 6.2 STM-Resultate

Die Ir(110)-Probe wurde im UHV durch wiederholtes Sputtern mit Neon und anschließendem Ausheilen bei  $1150 \text{ K}$  präpariert. Ir(110) wurde bei Temperaturen zwischen  $300 \text{ K}$  und  $1000 \text{ K}$  mit dem STM untersucht, wobei verschiedene Strukturen stabilisiert werden, die teilweise auch gequenchet werden können.

### 6.2.1 Ir(110) bei Raumtemperatur

In der vorliegenden Untersuchung konnten in Übereinstimmung mit früheren Arbeiten [45–47] bei  $300 \text{ K}$   $\{331\}$ -Facetten nachgewiesen werden. Die Oberfläche ist durch  $0,5 \text{ nm}$  bis  $1,5 \text{ nm}$  hohe Grate charakterisiert, die in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung mehrere  $100 \text{ nm}$  lang sind. Das STM-Bild in Abb. 6.1a zeigt einzelne Grate, sowie  $\{331\}$ -Facetten, deren dichtgepackte Reihen erkennbar sind (vergleiche Kugelmodell in Abb. 6.1b). Deutlich sind auch die gelegentlich auf den Facetten auftretenden Monostufen der  $\{331\}$ -Flächen zu sehen.

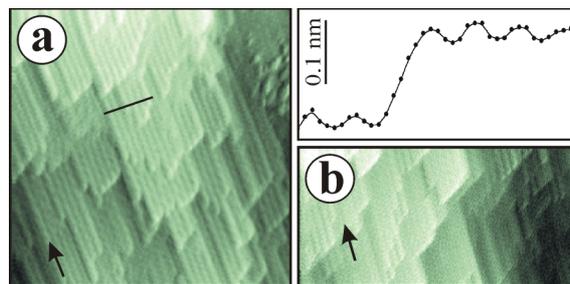


Abb. 6.2: a, b: STM-Bilder der Ir(110)-Oberfläche, aufgenommen bei  $(520 \pm 20)$  K; die Richtung der dichtgepackten Atomreihen ist durch Pfeile markiert: a:  $44 \cdot 44$  nm<sup>2</sup>, zeigt kleine (110)-Terrassen, die überwiegend  $(1 \times 3)$ -MR-rekonstruiert sind; der Line-Scan verläuft entlang der durchgezogenen schwarzen Linie; b:  $44 \cdot 22$  nm<sup>2</sup>, zeigt zusätzlich kleine, unrekonstruierte Gebiete;  $U_T = 526$  mV,  $I_T = 2$  nA; aus [154].

### 6.2.2 Ir(110) bei 520 K

Wie die vorliegenden Messungen zeigen, wird die Oberflächenmorphologie bei höheren Temperaturen flacher. Bei 520 K beobachtet man kleine (110)-Terrassen, die hauptsächlich  $(1 \times 3)$ -rekonstruiert sind [Abb. 6.2a]. Zusätzlich gibt es einen kleinen Anteil unrekonstruierter  $(1 \times 1)$ -Bereiche [Abb. 6.2b]. Die experimentell bestimmte Rauigkeit (*Korrugation*) für die  $(1 \times 3)$ -Struktur beträgt  $\approx 0,04$  nm (siehe Line-Scan in Abb. 6.2) und ist damit deutlich kleiner als die  $\approx 0,14$  nm, die für die in der Literatur favorisierte  $(1 \times 3)$ -MR-Struktur mit voll ausgebildeten  $\{111\}$ -Nanofacetten [Abb. 2.1c] zu erwarten wären [8]. Unsere Messungen deuten daher auf eine flachere Konfiguration. Das MR-Modell aus Abb. 2.1d mit zwei benachbarten Atomreihen, die nur durch eine fehlende getrennt sind, stellt eine mögliche Anordnung dar, die darüber hinaus Strukturelemente der bei Raumtemperatur vorliegenden  $\{331\}$ -Facetten und der  $(1 \times 2)$ -MR-Rekonstruktion bei noch höheren Temperaturen (siehe im Folgenden) vereint. Einerseits kann diese Struktur als die kleinstmögliche  $\{331\}$ -Facette aufgefasst werden, andererseits als eine Abfolge von  $(1 \times 2)$ -MR- und  $(1 \times 1)$ -Einheiten.

### 6.2.3 Ir(110) bei 890 K

Wird die Temperatur auf 890 K erhöht, können ausgedehnte (110)-Terrassen beobachtet werden [Abb. 6.3a]. Hochauflösende Aufnahmen wie in Abb. 6.3b zeigen, dass die Oberfläche nun  $(1 \times 2)$ -MR-rekonstruiert ist. Dieses überraschende Ergebnis wird durch in situ LEED-

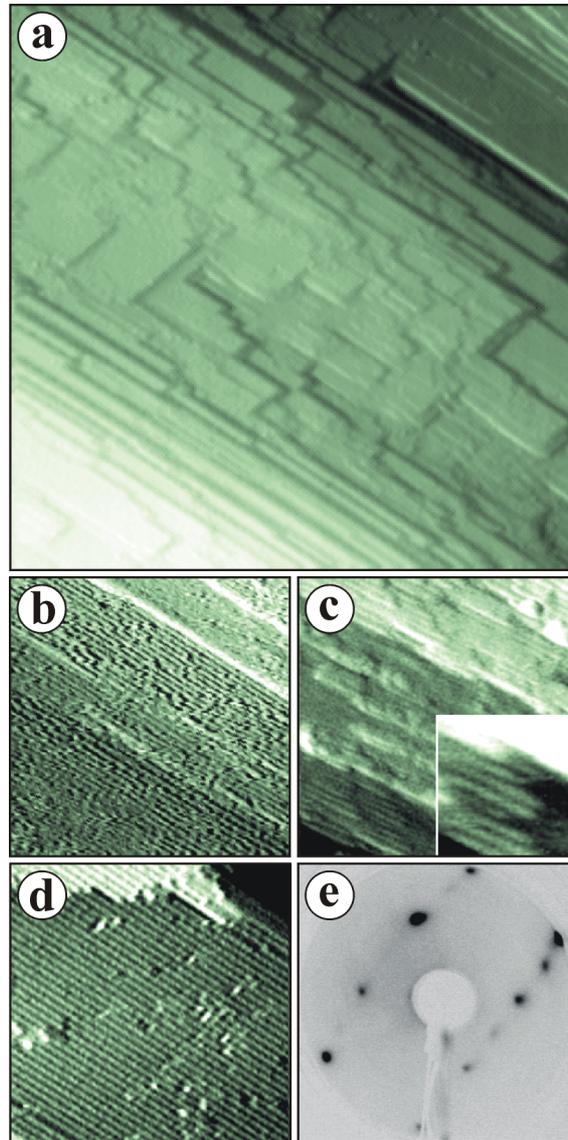


Abb. 6.3: STM-Bilder von Ir(110): a:  $90 \cdot 90 \text{ nm}^2$ , aufgenommen bei  $(890 \pm 50) \text{ K}$ , zeigt ausgedehnte (110)-Terrassen;  $U_T = -499 \text{ mV}$ ,  $I_T = 4 \text{ nA}$ . b: hochauflösendes Bild bei derselben Temperatur, die  $(1 \times 2)$ -MR-Rekonstruktion der Terrassen ist erkennbar;  $U_T = -526 \text{ mV}$ ,  $I_T = 3 \text{ nA}$ . c:  $40 \cdot 40 \text{ nm}^2$ ,  $(790 \pm 40) \text{ K}$ ;  $U_T = 526 \text{ mV}$ ,  $I_T = 5 \text{ nA}$ . d:  $28 \cdot 28 \text{ nm}^2$ ;  $U_T = -68 \text{ mV}$ ,  $I_T = 3,2 \text{ nA}$  und e: LEED-Bild der gequenchten  $(1 \times 2)$ -MR-Struktur (beide unterhalb  $400 \text{ K}$ ); a und c: aus [154].

Untersuchungen bestätigt. An Stelle der bei Raumtemperatur gewöhnlich streifigen LEED-Spots [45] beobachtet man deutliche, klar getrennte  $(1 \times 2)$ -Spots.<sup>2</sup> Durch rasches Abkühlen der Probe unterhalb von 400 K kann die  $(1 \times 2)$ -MR-Konfiguration in hoher Qualität stabilisiert (gequencht) werden. Die zugehörigen STM- und LEED-Bilder sind in Abb. 6.3d und e zu sehen. Die halbzahligen Spots sind ebenso gut zu erkennen, wie die 0,8 nm Periodizität. Beides bestätigt die  $(1 \times 2)$ -MR-Rekonstruktion bei 890 K. Abb. 6.3c zeigt die Probe nach langer Thermalisation bei 790 K. Bei dieser etwas niedrigeren Temperatur bilden sich nur kleine  $(1 \times 2)$ -MR-Domänen aus (siehe Ausschnitt).

## 6.2.4 Quantenpunktstrukturen

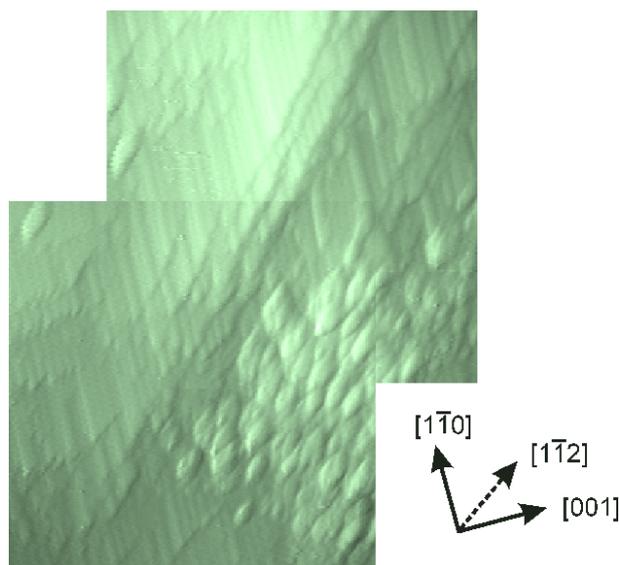


Abb. 6.4: Kontrastverstärkte STM-Bilder der Ir(110)-Oberfläche, aufgenommen bei  $(520 \pm 20)$  K; jedes Teilbild hat eine Kantenlänge von etwa 45 nm; links oben MR-rekonstruierter Bereich, rechts unten und links oben rhombisch geformte Inseln;  $U_T = -526$  mV,  $I_T = 3$  nA; aus [154].

Neben den bereits bekannten  $(1 \times 3)/(1 \times 1)$ -Bereichen (Abb. 6.4 links oben) kündigt sich durch die Ausbildung von weitgehend einheitlichen Quantenpunktstrukturen, die sowohl in  $[001]$ - als auch in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung nur etwa 3 nm ausgedehnt sind, der Übergang zur facet-

<sup>2</sup>In situ Beobachtung der LEED-Reflexe mit dem freien Auge liefert bei der 890 K heißen Probe unabhängig von der Strahlenergie scharfe  $(1 \times 2)$ -Reflexe. Wegen der starken Hintergrundstrahlung der glühenden Probe sind diese Bilder hier aber nicht gezeigt.

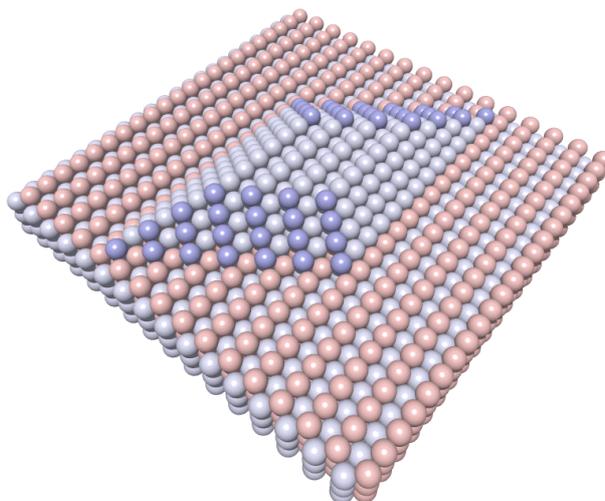


Abb. 6.5: Mögliches (idealisiertes) Kugelmodell der Ir(110)-Quantenpunktstruktur, bestehend aus den Facetten  $(11\bar{1})$  (links),  $(111)$  (rechts), sowie  $(131)$  (vorne) und  $(13\bar{1})$  (hinten); die  $\{113\}$ -Facetten kann man sich schichtweise aus den  $(111)$ - bzw.  $(11\bar{1})$ -Ebenen aufgebaut vorstellen.

tierten  $\{331\}$ -Konfiguration an (Abb. 6.4 rechts unten). Sie haben typische Höhen um 0,5 nm und besitzen alle eine rhombische Grundfläche sowie Seitenflächen vergleichbarer Neigung [Abb. 6.4]. Die genauen Details der Atomkonfiguration bleiben jedoch mangels atomarer Auflösung verborgen. Die Kanten der Grundfläche verlaufen parallel zur  $[1\bar{1}0]$ - sowie  $[1\bar{1}2]$ -Richtung. Letztere Orientierung wird auch an Stufenkanten bei einer Fülle verschiedener Bilder (siehe z. B. Abb. 6.2 und Abb. 6.4 links oben) beobachtet, so dass starke thermische Drift ausgeschlossen werden kann. Für die beiden verschiedenen Arten von Seitenflächen der Quantenpunktstrukturen erhält man Messwerte für die Winkel von  $\approx 35^\circ$  bzw.  $\approx 30^\circ$ .<sup>3</sup> Die  $[1\bar{1}2]$ -Richtung ist in der Tat ausgezeichnet, da sie sowohl die Schnittgerade von  $(\bar{1}11)$  mit  $(110)$  als auch von  $(131)$  mit  $(110)$ , also von niedrig-indizierten Flächen, ist. Da die  $(\bar{1}11)$ - senkrecht auf der  $(110)$ -Ebene steht (Winkel  $90^\circ$ ), die  $(131)$ -Ebene mit dieser jedoch einen Winkel von  $31,5^\circ$  bildet, ist die Annahme plausibel, dass die entsprechenden Seitenflächen  $(131)$ - bzw.  $(13\bar{1})$ -Facetten sind. Wegen der endlichen Auflösung der STM-Spitze kann jedoch auch eine senkrecht aus der Oberfläche ragende  $\{111\}$ -Facette experimentell nicht gänzlich ausgeschlossen werden (auch wenn sie eher unwahrscheinlich zu sein scheint).

Die beiden anderen Flächen der Quantenpunktstrukturen stimmen gut mit  $(111)$  und  $(11\bar{1})$ ,

<sup>3</sup>Es sei hier angemerkt, dass die gemessenen Werte eine Streuung von etwa  $\pm 5^\circ$  aufweisen.

wie sie bei der Missing-Row-Struktur auftreten, überein. Der mögliche Aufbau der Quantenpunktstrukturen ist in [Abb. 6.5] dargestellt.

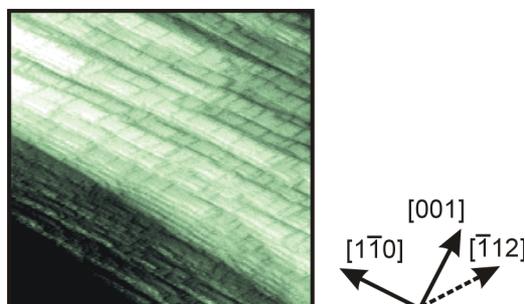


Abb. 6.6: Kontrastverstärktes STM-Bild der Ir(110)-Oberfläche; das Bild ist übersät mit Stufenkanten entlang der zusätzlichen Vorzugsrichtung  $[\bar{1}12]$ ; aus [154].

Aus Symmetriegründen sollten neben Strukturen mit  $[1\bar{1}2]$ -Orientierung auch solche mit  $[\bar{1}12]$  auftreten. Interessanterweise überwiegt aber die  $[1\bar{1}2]$  deutlich. Die  $[\bar{1}12]$ -Orientierung tritt nur gelegentlich, dann aber lokal gehäuft auf [Abb. 6.6]. Eine mögliche Erklärung für diese Asymmetrie könnte der (lokal unterschiedliche) Fehlschnitt der Probe sein.

### 6.3 Diskussion

Die mit zunehmender Temperatur auftretende Strukturänderung der Ir(110)-Oberfläche ist überraschend. Während Au(110) und Pt(110) im selben Temperaturbereich aufräumen [155], ändert sich Ir(110) von einer facettierten, also rauen Struktur zu einer rekonstruierten, flachen. Die bei erhöhten Temperaturen auftretenden rekonstruierten Phasen, d. h.  $(1 \times 3)/(1 \times 1)$ - und  $(1 \times 2)$ -MR, sind auch schon in früheren Raumtemperatur-Studien gefunden und jeweils als Gleichgewichtskonfiguration interpretiert worden [3, 36, 37, 40–42, 95]. Die Resultate der vorliegenden Arbeit zeigen jedoch, dass bei diesen Studien offensichtlich eingefrorene Oberflächenkonfigurationen untersucht worden sind. Insbesondere das Quenching-Experiment aus Abb. 6.3 unterstreicht diese Interpretation. Wird die Probe allerdings langsam abgekühlt (im Zeitraum von etwa 1 h), so ist die strukturelle Umwandlung reversibel, es bildet sich bei Raumtemperatur wieder eine  $\{331\}$ -facettierte Oberfläche aus. Die  $(1 \times 3)$ -MR-Phase bei erhöhter Temperatur wurde auch in Untersuchungen mittels Ionen-Streuung gefunden [43]. Der angegebene Temperaturbereich für diese Rekonstruktion ist mit 540 K bis 850 K in sehr guter

Übereinstimmung mit den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit. Um Verunreinigungen, die die Ladungsdichte der Oberfläche beeinflussen können, als Ursache der Rekonstruktionen auszuschließen, wurden AES-Messungen durchgeführt. In Übereinstimmung mit früheren Studien [45–47] waren die Verunreinigungen bei Raumtemperatur unterhalb der Nachweisgrenze des Detektors und blieben es auch während des Heizens.

Es stellt sich nun die Frage, wie man dieses, verglichen mit Au(110) und Pt(110) merkwürdige Verhalten von Ir(110) erklären kann. Wie bereits diskutiert, zeigen die niedrig-indizierten Oberflächen, insbesondere die (111) und (001), eine starke Tendenz zur Verdichtung. Die (001) bildet eine hexagonale, d. h. {111}-artige, Konfiguration. Atome der (111)-Oberfläche sind bereits hexagonal angeordnet und sollten eigentlich die energetisch günstigen fcc-Plätze einnehmen. Daher ist anzunehmen, dass die Reduktion von Zugspannung die treibende Kraft für die Verdichtung der Oberfläche ist. Dies wird durch theoretische Untersuchungen bestätigt [169, 170]. Verglichen mit einer Volumen-{111}-Ebene ist die Au(111)-Fischgräten-Überstruktur um 4,3 % verdichtet<sup>4</sup>. Im Falle der (001)-Oberflächen ist die Situation komplizierter. Wegen der Änderung von einer quadratischen zu einer hexagonalen Geometrie ist der Abbau von Oberflächenspannung nicht der einzige relevante Parameter [179]. Interessanterweise ist die Atom-Dichte der hexagonalen (1 × 5)-Überstruktur (z. B. von Ir(001)) ebenfalls um etwa 4 % gegenüber einer Volumen-{111} erhöht<sup>5</sup>. Die benachbarten Rekonstruktionen (1 × 4) und (1 × 6) mit fünf bzw. sieben Atomreihen auf vier bzw. sechs (001)-Gittereinheiten werden experimentell nicht beobachtet; die Atom-Dichte wäre hier um 8 % bzw. 1 % erhöht.

Bei der offeneren (110)-Oberfläche würde das Einfügen einer zusätzlichen Reihe zwischen je zwei dichtgepackten Reihen einer Verdichtung von 20 % entsprechen<sup>6</sup>. Offensichtlich würde hier die Verspannung bei der Ausbildung einer kontinuierlichen, welligen, {111}-artigen Lage zu hoch werden. Die Oberfläche verdichtet sich daher durch die Ausbildung lokaler {111}-Nanofacetten der (1 × 2)-MR-Struktur. Der senkrechte Abstand der obersten Lage ist im Falle von Au(110) und Pt(110) um etwa 20 % reduziert, die Atomreihen der zweiten Lage sind, wie

---

<sup>4</sup>Selbst für den Halbleiter Silicium findet man eine Verdichtung der (111)-Oberfläche um 4,1 %, was zur bekannten (7 × 7)-Überstruktur führt [104]. Diese Struktur geht erst bei 1100 K in eine (1 × 1) über [6, 17]. Theoretische Berechnungen zeigen für Al(111) und Al(110) ebenfalls eine solche Tendenz, die zu einer Verdichtung um etwa 4 % führen würde [52].

<sup>5</sup>Hier ist tatsächlich die {111} und nicht die {001} gemeint!

<sup>6</sup>wieder bezüglich der Volumen-{111}

in Abb. 2.1b skizziert, seitlich etwas verschoben [180]. In der Tat ist der Abbau von Oberflächenspannung bei Ab-Initio-Rechnungen von Pt(110)-(1 × 2) als treibende Kraft identifiziert worden [181], für Ir(110) jedoch nicht. Nach Filippetti und Fiorentini [182] ist die Oberflächenspannung für Iridium bei der (1 × 2)-MR-Rekonstruktion sogar höher als bei der unrekonstruierten Oberfläche.

Um die Restrukturierung von Ir(110) zu erklären, scheint es plausibel zu sein, für die oberhalb von 800 K beobachtete (1 × 2)-MR-Rekonstruktion – analog zu Pt(110) – eine Stabilisierung durch den Abbau von Oberflächenspannung anzunehmen. Bekanntermaßen sinken die Gleichgewichtsabstände der Atome mit abnehmender Temperatur. Da die Schwingungsamplituden der Oberflächenatome wegen fehlender Bindungspartner größer sind, ist die thermische Ausdehnung der Oberfläche (verglichen mit dem Volumen) erhöht [55, 56].<sup>7</sup> Konsequenterweise zieht sich die Oberfläche beim Abkühlen tendenziell schneller zusammen als das Volumen, es bauen sich Spannungen auf. Die aus LEED-Intensitätsanalysen erhaltene Paarung der Reihen in der zweiten Lage (vergleiche Pfeile in Abb. 2.1b) verringert sich somit graduell, bis schließlich genug Platz ist, die fehlende Reihe wieder eingefügt werden kann und die Oberfläche dekonstruiert. Da die dekonstruierte Oberfläche natürlich immer noch verspannt ist, bildet sich eine gestufte Konfiguration, die den Spannungsabbau ermöglicht. Die bevorzugte Ausbildung von {331}-Facetten ist somit ein natürlicher Kompromiss zwischen Dekonstruktion und Spannungsabbau. Es sei hier angemerkt, dass diese Interpretation von früheren, bei Raumtemperatur durchgeführten LEED-Intensitätsanalysen [3] mutmaßlich gequenchter Ir(110)-(1 × 2) unterstützt wird. Gemäß dieser Studie ist die horizontale Verschiebung der Atome in der zweiten Lage (Pfeile in Abb. 2.1b) für Ir(110) nur halb so groß wie für Au(110) oder Pt(110) [180], was somit das Wiederauffüllen der fehlenden Reihen erleichtert. (1 × n)-MR-Strukturen höherer Ordnung, wie sie in theoretischen Studien diskutiert werden [80, 182], scheinen energetisch unvorteilhaft zu sein, da der Spannungsabbau bei größeren {111}-Facetten durch das Volumenmaterial behindert ist [Abb. 6.7]. Ein auf der Oberflächenspannung basierender Mechanismus erklärt auch das unterschiedliche Rekonstruktionsverhalten, das zum einen mit *Feld-Ionen-Mikroskopie* (FIM), zum anderen auf ausgedehnten, flachen Terrassen, beobachtet wurde. Die FIM-Studien zeigen bei etwa 500 K eindeutig die Ausbildung einer (1 × 2)-MR-

---

<sup>7</sup>Die Abweichung vom harmonischen Oszillator-Potential wird bei größerer Auslenkung immer wichtiger.

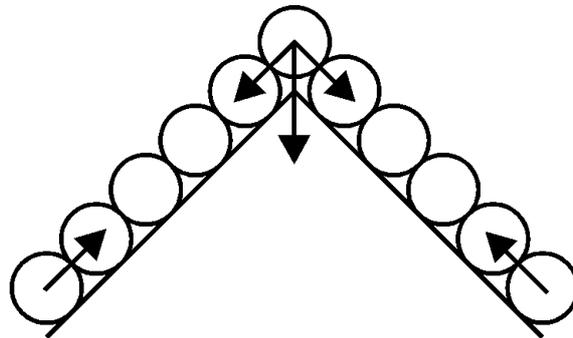


Abb. 6.7: Schematische Schnitt-Darstellung größerer Facetten; bei Verdichtung der Seitenflächen müsste auch das Volumenmaterial verdichtet werden.

Rekonstruktion auf (110)-Nanofacetten der Feld-Emitter-Spitze [152, 183, 184]. Da sich die (winzige) (110)-Facette an der FIM-Spitze leicht ausdehnen kann, wird die  $(1 \times 2)$ -MR durch den oben beschriebenen Mechanismus schon bei niedrigeren Temperaturen stabilisiert. Auch für die {113}-Facetten der bei 520 K beobachteten Quantenpunktstrukturen ist ein ähnlicher Spannungsabbau möglich, insbesondere da man sie sich wie {331}-Facetten schichtweise aus {111}-Ebenen aufgebaut vorstellen kann.

Mit der Hochtemperatur-STM-Untersuchung ist somit gezeigt, dass die Ir(110)-Oberfläche sich mit zunehmender Temperatur von ihrer {331}-Facetten-Struktur (bei 300 K) zu einer flachen  $(1 \times 2)$ -MR (bei etwa 800 K) wandelt. Die Strukturumwandlung kann in konsistenter Weise mit einem auf der Temperaturabhängigkeit der Oberflächenspannung basierenden Mechanismus erklärt werden. Eine Vielzahl scheinbar widersprüchlicher Experimente zur Gleichgewichtskonfiguration von Ir(110) und anderer 5d Metalle werden damit verständlich.

Wie für Au(110) ist auch bei der Ir(110)-MR nicht die (110)-Fläche die stabile, es bilden sich vielmehr stabile {111}-Facetten aus. Obwohl die Flächen also scheinbar mit „Stufenkanten“ übersät sind, gelingt es der Spitze daher nicht (im Gegensatz zu Ag(110)-Stufenkanten) Atome aus dieser stabilen Konfiguration herauszuziehen.

