

8 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden die fcc(110)-Oberflächen (engl. face centred cubic) von Silber, Gold und Iridium, sowie die (001)-Oberfläche von Silicium mittels Rastertunnelmikroskopie (engl. scanning tunneling microscope, STM) bei verschiedenen Proben temperaturen untersucht.

Ag(110): Die Stufenkanten werden auf dieser Oberfläche, abhängig von der Scan-Richtung, „fransig“ abgebildet [Abb. 4.2]. Für Scans orthogonal und diagonal zu den dichtgepackten Atomreihen sind die *Fransen* (engl. fringes) auf die – verglichen mit der Rastergeschwindigkeit – schnelle Kinkdiffusion zurückzuführen. Die Kinks sind allerdings nur zum Teil intrinsisch und werden vielfach erst durch den Messprozess (selbst bei mildesten Tunnelbedingungen) erzeugt, indem die Spitze Atome aus der Stufenkante zieht (allerdings nur einen Atomabstand weit) [Abb. 4.5 und 4.6]. Diese Atome lagern sich dann zu größeren, mäandernden Strukturen zusammen. Die vorliegende Arbeit zeigt, dass die – einige Atomradien von der Probe entfernte – Spitze ein Atom gegen die Bindungen seiner nächsten Nachbarn mittels eines energetisch günstigen Atom-Austausch-Mechanismus aus einer Stufenkante herausziehen kann. Die dabei induzierte – und auch theoretisch vorhergesagte – Hantel-Konfiguration (engl. dumbbell), bei der sich zwei Atome gegenseitig auf hcp-Plätzen (engl. hexagonal close packed) stabilisieren, konnte hier erstmals mit dem STM abgebildet werden. Zerfällt diese Konfiguration schon während des Scannens, ergeben sich kompliziertere Scan-Profile. Unterstützt wird die Interpretation der Stufenkanten-Resultate durch Messdaten für Terrassenplätze [Abb. 4.4]. Auch diese zeigen, dass Atome auf der durch die STM-Elektronik gegebenen Zeitskala auf hcp-Plätzen stabilisiert werden können. Mittels dieses Mechanismus stehen Stufenkanten auf fcc(110)-Oberflächen als großes Atom-Reservoir für kontrollierte Manipulationsexperimente zur Verfügung.

Wird die Oberfläche parallel zu den dichtgepackten Reihen abgerastert, so werden auch hier Stufenkanten „fransig“ abgebildet [Abb. 4.8b]. Wie die vorliegende Arbeit zeigt, haben diese „Fransen“ jedoch eine andere Ursache als bei Orthogonal-Scans und wurden daher zur Unterscheidung *Streifen* (engl. stripes) genannt. Durch die attraktive Wechselwirkung der STM-Spitze werden Atome aus den Stufenkanten herausgezogen und folgen der Spitze einige Nanometer weit. Zwischenzeitlich reißen sich die Atome gelegentlich los und springen kurze Zeit später wieder unter die Spitze, was zu einem charakteristischen Scan-Profil führt [Abb. 4.8b, Line-Scan]. Die Diffusion der Atome wird durch die attraktive Wechselwirkung der Spitze um Größenordnungen herabgesetzt. In Anbetracht der Fähigkeit der Spitze, Atome anzuziehen und „einzufangen“ ist es sogar denkbar, dass die STM-Spitze als künstlicher „Nukleationskeim“ für die kontrollierte Kondensation diffundierender Atome oder Moleküle eingesetzt werden kann, um definierte Anordnungen von Nanostrukturen zu erzeugen.

Au(110): Für die (1×2) -Missing-Row (MR) rekonstruierte Au(110)-Oberfläche konnte in der vorliegenden Arbeit gezeigt werden, dass $[1\bar{1}0]$ -orientierte Stufenkanten auch unter dem Einfluss einer scannenden STM-Spitze selbst bei Temperaturen von 500 K stabil sind [Abb. 5.3]. Bei Stufenkanten mit anderer Orientierung tritt jedoch Kinkdiffusion auf. Die oberhalb dieser Temperatur mit dem STM zu beobachtenden fjordartigen Strukturen wurden eingehender untersucht [Abb. 5.2c, 5.5 und 5.6]. Eine eindeutige Entscheidung der Diskussion, ob es sich dabei um eine reale Struktur oder aber ein Mess-Artefakt handelt, konnte zwar nicht eindeutig getroffen werden, die Beobachtungen sprechen aber dennoch eher gegen ein Artefakt.

Ir(110): Die Ir(110)-Oberfläche wurde im Temperaturbereich von 300 K bis 890 K untersucht und die Resultate mit den teilweise widersprüchlichen Literatur-Angaben verglichen. Bei Raumtemperatur weist die Oberfläche $\{331\}$ -Facetten auf [Abb. 6.1]. Mit zunehmender Temperatur (520 K) wird sie flacher und geht zunächst in eine $(1 \times 3)/(1 \times 1)$ -Struktur über [Abb. 6.2]. Zusätzlich können Quantenpunktstrukturen beobachtet werden [Abb. 6.4 und 6.5]. Bei noch höheren Temperaturen (890 K) erhält man schließlich eine (1×2) -MR-Struktur, was auch durch LEED-Beobachtung bestätigt wird [Abb. 6.3]. Damit kann die Vielzahl von sich scheinbar widersprechenden Literaturangaben für die bei Raumtemperatur thermodynamisch stabile Struktur erklärt werden. Offensichtlich wurden in den älteren Arbeiten gequenchte

Strukturen untersucht. In der Tat kann selbst die bei 890 K beobachtete (1×2) -MR gequencht und dann bei Raumtemperatur abgebildet werden.

Die von den niedrig-indizierten Oberflächen (d. h. (111) , (001) und (110)) von Gold, Platin und Iridium aus der Literatur bekannte Tendenz zur Verdichtung zeigt zusammen mit theoretischen Untersuchungen, dass die unrekonstruierten Oberflächen unter starker Zugverspannung stehen. Nach diesen Untersuchungen ist die Oberflächenspannung für Ir (110) - (1×2) bei Raumtemperatur höher als bei der entsprechenden Platin-Oberfläche, ja sogar höher als bei der unrekonstruierten Oberfläche. Es scheint daher plausibel anzunehmen, dass der Spannungsabbau durch die Ausbildung der $\{331\}$ -Facetten geschieht, die formal auch als gestufte $\{111\}$ -Facetten aufgefasst werden können. Spannungsabbau der Oberfläche ist hierbei ohne starke Komprimierung des Volumenmaterials möglich. Analoges gilt für die $\{113\}$ -Seitenflächen der beobachteten Quantenpunktstrukturen. Da die thermische Ausdehnung der Oberfläche auf Grund fehlender Bindungspartner größer ist als die des Volumenmaterials, nimmt die Oberflächenspannung mit zunehmender Temperatur ab und erlaubt schließlich die Ausbildung der (1×2) -MR-Rekonstruktion wie bei Gold und Platin.

Obwohl die Atomanordnung der obersten Reihen einer (1×2) -MR-Oberfläche mit den Stufenkanten von Ag (110) vergleichbar ist, konnte weder auf der gequenchten Ir (110) noch auf Au (110) eine Beeinflussung durch die STM-Spitze nachgewiesen werden, was offenbar auf die starke Bindung der Atome in den (111) -Facetten zurückzuführen ist. Die unrekonstruierte Ag (110) -Oberfläche ist hingegen an der Grenze zur Instabilität, so dass schon der relativ kleine Einfluss der STM-Spitze (lokal) zu einer Umordnung der Atome führt.

Si(001): Für Si (001) - (2×1) wurden verschiedene aus der Literatur bekannte nass-chemische Präparationsverfahren (Ishizaka-Shiraki-Verfahren [Abb. 7.1], SPM-Verfahren [Abb. 7.2]) miteinander und mit dem bei wissenschaftlichen Untersuchungen etablierten Standardverfahren [Abb. 7.6] verglichen. Die nass-chemischen Verfahren erlauben deutlich niedrigere Präparationstemperaturen als das Standardverfahren, was wegen der verringerten Diffusion von beispielsweise Dotierstoffen insbesondere für technologische Anwendungen bedeutsam ist. Mit der vorliegenden Arbeit wurden erstmals derartig präparierte Proben in situ, d. h. unter Ultrahochvakuum-Bedingungen mit dem STM untersucht. Es zeigt sich, dass die nass-chemischen Verfahren zwar niedrige Präparationstemperaturen erlauben, die Konzentration von intrinsi-

schen Defekten, insbesondere Dimer-Leerstellen, jedoch deutlich höher ist als beim Standardverfahren.

Die Ergebnisse zeigen, dass STM-Untersuchungen bei höheren Temperaturen einen wichtigen Beitrag zur Aufklärung von Oberflächenstrukturen und Wechselwirkungen zwischen STM-Spitze und Probe liefern können. Interessante Anwendungen des STMs werden in Zukunft daher die Untersuchung chemischer Prozesse an Oberflächen sowie die definierte Erzeugung von Nanostrukturen bei Temperaturen oberhalb Raumtemperatur sein, wobei auch hier besonderes Augenmerk auf die Wechselwirkung zwischen Spitze und Probe gerichtet sein muss.