

**Spin-Bahn-Kopplung in
niedrigdimensionalen Strukturen auf
Oberflächen – Wachstum
und elektronischer Transport**

VON DER FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK UND PHYSIK
DER GOTTFRIED WILHELM LEIBNIZ UNIVERSITÄT HANNOVER
ZUR ERLANGUNG DES GRADES
Doktor der Naturwissenschaften
DR. RER. NAT.
GENEHMIGTE DISSERTATION

VON

M. Sc. Daniel Lükermann
GEBOREN AM 20.03.1983 IN DETMOLD

2013

Referent: apl. Prof. Dr. Christoph Tegenkamp
Korreferent: Prof. Dr. Michael Horn-von Hoegen
Korreferent: Prof. Dr. Rolf Haug

Tag der Promotion: 04.02.2013

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt, alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht und diese Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt habe. Die Arbeit wurde ebenso wenig als Master-, Diplom- oder ähnliche Prüfungsarbeit verwendet.

Hannover, 14. März 2013

Daniel Lükermann

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit werden niedrigdimensionale metallische Systeme mit Leitfähigkeits-, Magneto-leitfähigkeits sowie spin- und winkelaufgelöster Photoelektronenspektroskopie-Messungen (SARPES) charakterisiert. Dabei werden zum einen Bleiketten auf Si(557) und zum anderen Bismutfilme auf Si(111) und Si(557) untersucht. In all diesen Systemen findet man eine starke Spin-Bahn Kopplung und damit verbundene Rashba-Aufspaltung der Oberflächenbänder, so-dass eine Spin-Polarisation der Ladungsträger auch an der Fermi-Kante resultiert. Die Frage ist nun, welche Einflüsse diese Spinpolarisation auf die Transporteigenschaften und Streuung der Ladungsträger hat. Ganz entscheidend ist hier die Zeitinversionssymmetrie (TR-Symmetrie), die in Rashba-aufgespaltenen Systemen zunächst einmal erhalten sein muss. Dies verhindert die Streuung zwischen Zuständen mit entgegengesetztem Wellenvektor und Spinorientierung ($\vec{k}, \uparrow \rightarrow -\vec{k}, \downarrow$), den sogenannten Kramers Paaren. Dennoch gibt es die Möglichkeit, dass ein La-dungsträger durch Mehrfachstreuung in den entgegengesetzten Zustand gelangt, hier jedoch mit anderen destruktiv überlagert wird, was sich in Magnetotransportmessungen durch sogenannte Schwache Anti-Lokalisierung äußert. Wie sich zeigt, wird die Rückstreuunterdrückung zwischen Kramers Paaren aufgehoben, indem magnetische Atome (Fe, Co und Tb) auf die Oberfläche von Bi(111) aufgebracht werden. Hier wird lokal die TR-Symmetrie gebrochen, da die Ladungsträger an dem zufällig orientierten magnetischen Moment streuen und so ihre Spinrichtung ändern und in den entgegengesetzten Zustand streuen. Die Spinorientierung vor dem Stoß ist damit nicht mehr entscheidend, wodurch in Rückwärtsrichtung konstruktive Interferenz stattfinden kann, welches sich in Magnetoleitfähigkeitsmessungen in sogenannter Schwacher Lokalisierung äußert.

Im Fall der Pb-Kettenstrukturen auf Si(557), die einen, durch Fermi-Nesting erzeugten, 1D-2D-Phasenübergang in der Leitfähigkeit bei 1.31 ML Pb bei 78 K zeigen, wurde in dieser Arbeit mit SARPES eine sehr große Rashba-Aufspaltung senkrecht zu den Ketten, mit einem Rashba-Parameter von $\alpha_{\text{RB}} = 1.9 \text{ eV\AA}$ gefunden, der nur vom Bi/Ag(111)-System übertroffen wird. Der Grund für die starke Aufspaltung, die sogar den maximal möglichen Wert mit $\Delta k_0 = g/2$ (g entspricht dem reziproken Gittervektor der Stufenperiodizität) für dieses System annimmt, liegt in der starken Interaktion der Pb-Ketten. Sie führt zu einer Coulomb-Abstoßung zweier Ladungsdichtewellen, wodurch die Gesamtenergie minimiert wird. Die Beobachtungen lassen sich mit dem Modell einer linearen Spindichtewelle beschreiben, die einer antiferromagnetischen Ordnung der Spins auf benachbarten Terrassen der Oberfläche entspricht. Hierfür muss man allerdings Streuung/Fermi-Nesting zwischen Kramers Paaren annehmen. Sie verlieren ihre inhä-rente Orthogonalität durch die Elektron-Elektron Wechselwirkung. Somit ist für die Streuung der Ladungsträger, im *genesteten* Fall, entlang der Pb-Ketten kein Spin-Umklapp mehr mög-lich und die Magnetotransportmessungen an Pb/Si(557) können erklärt werden. Bedeckungsab-hängig fand man hier eine Reduktion der Spin-Bahn Streurrate um zwei Größenordnungen im Bedeckungsbereich um 1.3 ML.

Beim Wachstum von Bi auf Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Mix-Phase auf Si(557) konnten erstmals gestufte Bi-Filme erzeugt werden. Sie zeichnen sich durch eine Stufenbreite von 7.1 Å und einer Stufenhöhe von 3.27 Å aus und entsprechen vizinalen Bi(110)-Filmen mit einer Stufenorientierung senkrecht zur rhomboedrischen (221)-Fläche. Leitfähigkeitsmessungen zeigten eine Anisotropie, mit 50% höherer Leitfähigkeit entlang der Terrassen als senkrecht zu den Stufen. Temperaturabhängige Leitfähigkeitsmessungen zeigen deutlich einen metallischen Verlauf entlang der Stufen und aktivierten Transport senkrecht dazu. Darüber hinaus zeigten Magnetotransportmessungen eine höhere Mobilität der Elektronen und Löcher des Oberflächenzustände in \parallel -Richtung im Vergleich zur \perp -Richtung. Jedoch ist dies einzig auf die strukturellen Eigenschaften der Stufen zurückzuführen, denn die Ladungsträgerkonzentration der Elektronen und Löcher ist nach Halleffekt-Messungen isotrop auf der Oberfläche verteilt. Somit konnten keine Anzeichen für topologisch geschützte Kantenzustände gefunden werden, wie es nach SARPES-Messungen für gestufte Bi(114)-Oberflächen bekannt ist.

Schlagwörter

Magnetotransport, Quantendrähte, Pb/Si(557), Fermi-Nesting, Rashba-Effekt, Spin-Bahn Kopplung, Bismutfilme, spinpolarisierter elektronischer Transport

Abstract

In this thesis low dimensional metallic systems will be investigated by means of dc-conductivity, magneto conductivity and spin- and angle resolved photo-electron emission spectroscopy (SARPES). These systems are lead-wires on Si(557) and thin films of bismuth on Si(111). Both systems obey a strong spin-orbit coupling connected with a large Rashba-splitting of surface states, resulting in spin-polarized charge carriers in the vicinity of the Fermi-level. Here the question arises, how does this spin-polarization act on the transport and scattering properties of the charge carriers within such systems. Very important in this context is the time-reversal symmetry (TR-symmetry), which has to be conserved in Rashba-split systems. TR-symmetry prevents the carriers from being backscattered in states having opposite k-vector and spin-orientation ($\vec{k}, \uparrow \rightarrow -\vec{k}, \downarrow$), which are usually called kramer's pairs. Though, by multi-scattering events the carriers may reach the opposite state, interfering destructively with other carriers, that have been walked on the time-reversed path, so that Weak Anti-Localization is observed in magneto transport of clean Bi-films. As it turns out, the suppression of backscattering is lifted by the incorporation of magnetic atoms (Fe, Co and Tb) on the surface of Bi(111). This is a result of breaking of TR-symmetry locally. Meaning, that randomly oriented magnetic moments scatter the electrons in such a way, that their spin-direction is also changed so that they may end up in the opposite Kramer's state by a single scattering event. But now there is no information left about the spin-state of the carrier prior to the scattering event and consequently all carriers being backscattered can interfere constructively. Showing up in magneto transport measurements as so called Weak Localization.

In the case of Pb-wires on Si(557), which show a 1D-2D phase transition in dc-conductivity, due to Fermi-nesting at a coverage of 1.31 ML at 78 K, a giant Rashba-splitting was shown in this thesis by SARPES-measurements. The splitting was observed in the direction perpendicular to the steps of the surface and a Rashba-parameter of $\alpha_{\text{RB}} = 1.9 \text{ eV\AA}$ was found. This extremely high value is up to now exceeded by the Bi/Ag(111)-system, only. Moreover it possesses the highest value possible in this system, with a k-splitting of $\Delta k_0 = g/2$, g being the reciprocal vector of the step periodicity. The reason for that is the strong interaction between adjacent Pb-wires and a coulomb repulsion of two charge density waves, minimizing the total energy. The observations are also compatible with the model of a linear spin-density wave, which corresponds to an anti-ferromagnetic order of spins of adjacent terraces of the surface. For this model one has to assume a scattering/Fermi-nesting takes place between Kramer's pairs. This is in agreement with TR-symmetry if one takes into account the strong electron-electron interaction in this quasi one-dimensional system. Thereby the Kramer's pairs lose their inherent orthogonal character. In this Fermi-nested case scattering occurs only along the metallic states in the chain direction. SARPES shows that these are spin-polarized, so there is no possibility for changing the spin-orientation, as there is only a single one. With this finding one can understand the ma-

gneto transport data obtained for Pb/Si(557) as a function of Pb-coverage. Here the spin-orbit scattering rate decreases by two orders of magnitude within a small coverage window around the nesting condition regime of 1.3 ML.

By growing thin Bi on Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -mix-phase on Si(557), for the first time, stepped Bi-films could be obtained. They are characterized by a terrace width of 7.1 Å and a step height of 3.27 Å and correspond to vicinal Bi(110)-films with a step-orientation normal to the (221) rhombohedral plane. Conductivity measurements reveal an anisotropy with 50% larger values along the terraces compared to that perpendicular to the steps. While a metallic temperature dependence is found for the \parallel -direction, only activated transport is found in \perp -direction. Furthermore magneto transport measurements show a significantly higher mobility of electrons and holes in the surface states in \parallel -direction compared to the \perp -direction. But as it turns out the anisotropy found in dc measurements is only related to structural properties and scattering at the steps, because Hall-effect measurements point towards isotropically distributed densities of electron- and hole-like states on the surface. So there is no direct hint towards topologically protected edge-states on this surface, as they have been found for the Bi(114) surface.

keywords

magneto transport, quantum wires, Pb/Si(557), Fermi-nesting, Rashba-effect, spin-orbit coupling, bismuth thin films, spin-polarized electronic transport

Inhaltsverzeichnis

Kurzzusammenfassung	v
Abstract	vii
1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen	5
2.1. Elektronenbeugung an Oberflächen	5
2.1.1. Kinematische Streutheorie	7
2.1.2. G(S)-Analyse	8
2.1.3. H(S)-Analyse	9
2.1.4. Reciprocal Space Mapping - Heringplot	10
2.2. Theorie des elektronischen Transports	11
2.2.1. Drude-Theorie des elektronischen Transports	11
2.2.2. Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit in Metallen - Bloch-Grüneisen-Gesetz	13
2.2.3. Klassischer Magnetotransport	14
2.2.4. Schwache (Anti-)Lokalisierung	16
2.2.5. Leitfähigkeitsmessung mittels Zweipunkt und Vierpunktmessung	20
2.2.6. Van der Pauw Methode	22
2.3. Fermi-Nesting und Peierls-Instabilität	24
2.4. Der Rashba-Effekt	25
2.5. Topologische Isolatoren - Unterdrückte Rückstreuung	27
2.6. Si(111) und Si(557)	29
2.7. Blei – Eigenschaften – Der 1D-2D-Phasenübergang	32
2.8. Bismut – Eigenschaften	37
2.8.1. Eigenschaften des Bi-Volumens	37
2.8.2. Wachstum dünner Bismutschichten auf Silizium	40
2.8.3. Elektronische Eigenschaften dünner Bismutschichten - Dominanz des Oberflächenzustandes	42
3. Experimenteller Aufbau	45
3.1. Vakuumapparatur	45
3.1.1. Probenhalter	47
3.1.2. Silizium Proben – Präparation sauberer Oberflächen	48
3.1.3. Metallverdampfer	50

3.1.4.	SPA-LEED	52
3.2.	Leitfähigkeitsmessung	53
3.2.1.	2-Punkt-Messung	54
3.2.2.	4-Punkt-Messung	54
3.2.3.	Stromsymmetrisierte 8-Pkt-Messung	56
3.3.	Spin- und Winkel-aufgelöste Photoelektronenspektroskopie	57
4.	Untersuchung von ultradünnen Bleischichten und Bleimonolagen auf Si(557)	61
4.1.	Epitaktisches Wachstum von Pb auf Si(557)	61
4.1.1.	Stressrelaxation an Stufenkanten	61
4.1.2.	Der Einfluss von klassischem und Quanten-Size-Effekt	65
4.2.	Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit – Pb-Schichten und Monolagen	67
4.3.	Einfluss von Facettierung der Oberfläche auf die Transporteigenschaften	69
4.4.	Magnetotransporteigenschaften von Pb/Si(557)	73
4.4.1.	Multilagen	73
4.4.2.	Monolagen	74
4.5.	SARPES an Pb/Si(557)– Rashba-Effekt und SDW	78
4.6.	XPS an Pb/Si(557)	85
4.7.	Diskussion der Ergebnisse zu Pb auf Si(557)	89
5.	Untersuchung von ultradünnen Bismutschichten auf Si(111)	93
5.1.	Epitaktisches Wachstum von Bismutschichten auf Si(111)	93
5.1.1.	G(S)/H(S)-Analyse dünner Bi-Filme	99
5.1.2.	Leitwertoszillationen beim Bi-Filmwachstum – Schichtdickeneichung	99
5.2.	Temperaturabhängigkeit des Leitwerts dünner Bi-Filme	101
5.3.	Magnetotransporteigenschaften von ultradünnen Bismutschichten	104
5.3.1.	Klassisches Magnetotransportverhalten und WAL-Beitrag	104
5.3.2.	Ursprung des klassischen und WAL-Beitrags – Unterdrückte Rückstreuung	109
5.4.	Defektinduzierte Änderung der Transporteigenschaften von Bismut-Dünnschichten	112
5.4.1.	Leitwertsänderung bei Adsorption von Bi, Fe und Co	113
5.4.2.	Einfluss der Bi, Fe und Co Adsorption auf Magneto- und Hall-Widerstand	115
5.4.3.	Einfluss der Bi, Fe und Co Adsorption auf den WAL-Beitrag	119
5.4.4.	Adsorptionsplätze von Bi, Fe und Co - DFT-Rechnungen	122
5.4.5.	Adsorption von Terbium auf Bi(111)-Filmen - starke Oberflächendiffusion bei tiefen Temperaturen	123
5.4.5.1.	Nukleation von Tb auf der Oberfläche – Simulation	126
5.4.5.2.	Magnetotransportmessungen an Tb auf Bi-Filmen	130
5.5.	Diskussion der Ergebnisse zu Bi(111)-Filmen auf Si(111)	132
6.	Gestufte Bi(110)-Filme auf Si(557)	135
6.1.	Struktur der Bi-Benetzungsschichten auf Si(557)	136
6.2.	Wachstum gestufter Bi(110)-Filme auf Alpha-, Beta- und Mix-Phase Bi/Si(557)	139
6.3.	Leitfähigkeitseigenschaften gestufter Bi(110)-Filme	145
6.4.	Magnetotransporteigenschaften gestufter Bi(110)-Filme	149
6.5.	Diskussion der Ergebnisse zu gestuften Bi(110)-Filmen auf Si(557)	151

7. Zusammenfassung und Ausblick	153
A. Anhang	159
A.1. Winkelberechnung im rhomboedrigen Kristallsystem	159
A.2. Auslöschung von Bragg-Reflexen im rhomboedrigen Bi-Kristallsystem	160
Abbildungsverzeichnis	161
Symbolverzeichnis	165
Literaturverzeichnis	167
Lebenslauf	181
Publikationsliste	183
Danksagung	185

Einleitung

Das Verständnis der Vorgänge in niedrigdimensionalen elektronischen Systemen ist fundamental für die Entwicklung neuer Konzepte zukünftiger elektronischer oder sogar spintronischer Bauelemente. So schlugen *Datta und Das* [1] bereits 1990 einen Transistor vor, der die Spin-Eigenschaften der Elektronen nutzt und manipuliert. 2007 wurde der Quanten-Spin-Hall-Effekt in HgTe nachgewiesen [2], wodurch die Propagation spinpolarisierter Ströme ermöglicht wird. Darüber hinaus bietet die Einschränkung in ein und zwei Dimensionen die Möglichkeit, eine Vielzahl neuer physikalischer Effekte zu untersuchen. Im Unterschied zur makroskopischen Physik spielt die Wechselwirkung der Teilchen in niedrigen Dimensionen eine viel stärkere Rolle, sodass man von korrelierten Elektronensystemen spricht. Kollektive Anregungen dieses Systems führen dann in 1D zu einer Entkopplung von Spin- und Ladung (spin-charge separation) [3]. Dies ist äquivalent zur Existenz von Quasi-Teilchen, dem sogenannten Holon und Spinon, welche sich mit unterschiedlicher Gruppengeschwindigkeit in der Kette fortbewegen. Diese von *Tomonaga* und *Luttinger* vorhergesagte Elektronenflüssigkeit unterscheidet sich also deutlich von der üblichen Fermi-Flüssigkeit [4, 5]. Experimentell konnte die Luttinger-Flüssigkeit für sogenannte Bechgaard-Salze wie $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ [6], Carbon-Nanotubes [7] 1999, sowie für 1D-Kettensysteme aus Au auf Ge(001) von *Blumenstein et al.* [8] erst kürzlich nachgewiesen werden. Der Vorteil von Untersuchungen an der Oberfläche liegt darin, dass man einerseits die strukturellen Eigenschaften des Systems einfach zugänglich bestimmen kann und andererseits diese Eigenschaften durch äußere Einflüsse manipulieren kann. So nutzt man beispielsweise für die Erzeugung anisotroper, im besten Fall eindimensionaler metallischer Ketten-Systeme, den Effekt der Selbstorganisation auf Oberflächen. Durch die Aufbringung geringster Atommengen auf z.B. Halbleiteroberflächen, bilden sich unter adäquaten Bedingungen Atomketten aus. Beispiele sind auf planaren Substraten: In auf Si(111) [9], Au auf Ge(001) [10], sowie Pt auf Ge(001) [11]. Auf vizinalen, das heißt gestuften Substraten, erschließt sich leichter die Bildung anisotroper Strukturen mit 1D-Charakter, so z.B. bei Au auf Si(557) oder Si(553) [12, 13] und Pb auf Si(557) [14].

Bei eindimensionalen oder quasi-eindimensionalen elektronischen Systemen, ergeben sich bestimmte Einschränkungen. So ist eine metallische 1D-Kette bei endlicher Temperatur immer instabil gegenüber einer Gitterdeformation, beispielsweise einer Dimerbildung, einhergehend mit der Ausbildung einer Bandlücke. Dieser zuerst von *Peierls* beschriebene Effekt führt also zu halbleitendem Charakter der Kette [15, 16, 17]. Erst durch die Einbettung einer solchen Kette in eine 3D-Umgebung und der damit verbundenen zusätzlichen Wechselwirkung kann der Peierls-Effekt unterdrückt werden. Dennoch wurde er schon häufig für verschiedene Kettensysteme nachgewiesen. Dazu zählen organische 3D-Materialien wie das oben erwähnte $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ oder Übergangsmetallverbindungen wie TaS_3 , NbSe_3 , die durch eine ausgezeichnete Bindungsrichtung einen ausgeprägten 1D-Charakter und einen Metall-Isolator Übergang bei endlicher Tempera-

tur aufweisen [15]. Auch für Metalldrähte auf Halbleiteroberflächen konnte der Nachweis eines Peierls-Übergangs erbracht werden. Beispiele hierfür sind: YSi₂-Drähte auf Silizium [18], In auf Si(111) [19], Pb auf Ge(111) [20] und Pb auf Si(557) [21].

Neben diesen elektronischen Instabilitäten von 1D-Ketten sind auch die Präparation einer langreichweitigen Ordnung, über mesoskopische Längenskalen, sowie die Kontaktierung der Drahtstrukturen an makroskopische Messkontakte, problematische Fragestellungen, die die Beobachtung der erwarteten Phänomene verhindern können. Daher wird das epitaktische Wachstum und die Realisierung langreichweitiger Strukturen ein zentraler Punkt dieser Arbeit sein.

Das Kettensystem Pb/Si(557) ist ein quasi-1D-System, das bedeutet, dass die 1D-Ketten auf der Oberfläche miteinander wechselwirken und zunächst zweidimensionalen Charakter haben, wie die Beobachtung kreisartige Fermiflächen mit ARPES belegt. Es ist aber gleichzeitig die starke Interaktion dieser Ketten miteinander, die zu Fermi-Nesting, verbunden mit einem Peierls-Übergang senkrecht zu den Ketten führt und diese somit elektronisch voneinander entkoppelt – also eindimensional macht [21]. Unterhalb einer kritischen Temperatur $T_c=78$ K führt dies zu eindimensionaler metallischer Leitfähigkeit entlang der Ketten und isolierendem Charakter in senkrechter Richtung. Oberhalb von T_c ist die thermische Energie größer als die Energielücke, welche durch den Peierls-Übergang verursacht wird. Folglich relaxiert das System in den 2D-Zustand. Die Leitfähigkeit verhält sich nun in beiden Richtungen halbleitend [14]. Dieser 1D-2D-Phasenübergang bildet die Grundlage für die weiteren Untersuchungen an diesem System in meiner Doktorarbeit

Für Pb mit seiner hohen Kernladungszahl von $Z=82$ erwartet man eine starke Spin-Bahn-Wechselwirkung, auch und besonders in Monolagenschichten und Kettensystemen. Dies führt auf eine der zentralen Fragen, die in dieser Arbeit beantwortet werden sollen:

Wie beeinflusst die Spin-Bahn-Wechselwirkung den elektronischen Transport in den quasi-eindimensionalen Zuständen des Kettensystems? Und hat dieser eventuell Einfluss auf den 1D-2D-Phasenübergang? Welche Rolle spielen kollektive Phänomene in dem quasi-1D-System?

Zu diesem Zweck werden Magnetotransportmessungen durchgeführt. Der Effekt der Schwachen Lokalisierung, ein Interferenzeffekt zwischen zurück gestreuten Ladungsträgern, kann die für den Transport relevanten Streumechanismen offen legen. Auch solche, die mit der Spin-Bahn-Wechselwirkung verknüpft werden können und zu destruktiver Interferenz der Elektronenwellen in Rückwärtsrichtung, sogenannter Schwacher Anti-Lokalisierung, führen.

Spin- und Winkel-aufgelöste Photoelektronenspektroskopie-Messungen (SARPES) zeigen unmittelbar die Spinstruktur der Bänder dieses Systems. Im Zusammenhang mit starker Spin-Bahn-Wechselwirkung an Oberflächen spielt der Rashba-Effekt [22, 23] eine wichtige Rolle, da er zur Spinaufspaltung von Oberflächenzuständen führt und unter bestimmten Bedingungen spinpolarisierten Ladungstransport ermöglicht. Bei Rashba-aufgespaltenen Systemen lassen sich fundamentale Symmetrieprinzipien überprüfen. In Analogie zu den Topologischen Isolatoren[24] (TI), muss auf der Oberfläche solcher Systeme die Zeitinversionssymmetrie (engl. Time Reversal Symmetry, TRS) existieren. Sie verhindert eine Rückstreuung zwischen entgegengesetzt spinpolarisierten Zuständen, den so genannten Kramers Paaren. Dieses Phänomen ist unmittelbar mit einer zweiten zentralen Fragestellung dieser Arbeit verbunden:

Wie ist der elektronische Transport durch die TR-Symmetrie bestimmt und wie kann man diese beeinflussen?

Um diese Mechanismen besser zu verstehen, widmet sich ein zweiter Teil der Arbeit mit der Untersuchung von 2-D Elektronengasen, nämlich der Oberfläche dünner Bismut-Filme (Bi). Bi an sich hat bemerkenswerte Eigenschaften. Als Halbmetall hat es überlappende Leitungs- und Valenzbänder, die an Hochsymmetriepunkten des reziproken Raumes Elektronen- und Lochtaschen bilden [25]. Beide Ladungsträgerarten tragen also zum elektronischen Transport bei. Zudem ist ihre Fermi-Wellenlänge im Bereich von 30 nm sehr groß. Auch Bi weist durch den Rashba-Effekt eine starke Spin-Bahn Aufspaltung seiner Bänder auf [26, 27], sodass es für spintronische Anwendungen in Frage kommt. Besondere Aufmerksamkeit erfährt Bi derzeit als Bestandteil von Topologischen Isolatoren in Bi_2Se_3 oder Bi_2Te_3 . Und auch bestimmte Flächen des Bi können topologische Zustände hervorbringen, wie Arbeiten von *Wells et al.* an Bi(114)-Oberflächen belegen [28]. Hier wurden eindimensionale topologisch geschützte Zustände entdeckt. Von solchen Zuständen erwartet man, den Quanten-Spin-Hall-Effekt zu zeigen, der unter anderem an HgTe beobachtet wurde[2].

Durch Quanten-Size Effekte wird das Volumen dünner Bi Filme halbleitend, wohingegen die Zustandsdichte der Oberflächenzustände sehr groß ist und metallische Eigenschaften aufweist [29, 30]. Somit ermöglicht dieses System, in eleganter Weise, die Untersuchung von Effekten an der Oberfläche durch Leitfähigkeitsmessungen. Da Multilagenfilme untersucht werden, umgeht man einige der oben genannten Problematiken im Zusammenhang mit der Stabilität des Untersuchungsobjekts. Neben der Information welche Streumechanismen eine Rolle spielen, ist der Magnetotransport in Kombination mit Hall-Effekt-Messungen in der Lage, Ladungsträgerbeweglichkeiten und Ladungsdichten zu bestimmen und liefert so zusätzliche Informationen über die Eigenschaften des Systems. Wie schon erwähnt, zeichnet sich Bi(111) durch eine sehr große Rashba-Aufspaltung seiner elektronischen und lochartigen Oberflächenzustände aus [27, 26], sodass man mit Magnetotransport den Einfluss der Spinpolarisation der Bänder auf die Streuung der Ladungsträger in 2D untersuchen kann. Durch gezielte Einbringung geringster Mengen an Adsorbaten mit magnetischen und nicht-magnetischen Eigenschaften wird versucht, die Streuung der Ladungsträger zu beeinflussen, um damit Rückschlüsse auf die zu Grunde liegenden Symmetrien ziehen zu können.

Die vorliegende Dissertation ist folgendermaßen strukturiert. Zu Beginn, in Kap. 2 werden die theoretischen Grundlagen und Modellvorstellungen entwickelt, die für das Verständnis und die Analyse der Messdaten erforderlich sind. Im darauf folgenden Abschnitt 3 wird auf die experimentellen Besonderheiten und verwendeten Messmethoden eingegangen. Kap. 4 zeigt dann die Messergebnisse am Pb/Si(557) Kettensystem und setzt Transport und Magnetotransportmessungen mit SARPES-Messungen in Verbindung. Darauf folgen dann Experimente an dünnen Bi(111)-Schichten auf Si(111) in Kap. 5. Eine Art Kreisschluss bilden die Untersuchungen an gestuften Bi(110)-Filmen, gewachsen auf Si(557), welche in Kap. 6 behandelt werden. In der anschließenden Zusammenfassung werden die Ergebnisse der verschiedenen Materialsysteme im Hinblick auf die eingangs erwähnte Fragestellung miteinander in Beziehung gesetzt und Gemeinsamkeiten bzw. Unterschiede herausgestellt. Der Ausblick behandelt noch offene Fragestellungen und zukünftig mögliche Forschungsansätze. Ein Symbolverzeichnis am Ende der Arbeit erleichtert das Nachschlagen häufig verwendeter Abkürzungen und Symbole.

Teile dieser Arbeit wurden bereits in wissenschaftlichen Aufsätzen veröffentlicht, die am Ende der Arbeit in der Publikationsliste aufgeführt sind.

Theoretische Grundlagen

2.1 Elektronenbeugung an Oberflächen

Zur Charakterisierung der atomaren Struktur und Fernordnung von Oberflächen sind langsame Elektronen aus zweierlei Hinsicht gut geeignet. Einerseits liegt ihre Eindringtiefe im Festkörper, bei typischen Energien $E = 20 - 200$ eV, im Bereich weniger Angström [31] und ist damit sehr oberflächensensitiv. Zum anderen liegt die de-Broglie Wellenlänge der Elektronen bei diesen Energien nach der Formel:

$$\lambda[\text{\AA}] = \sqrt{\frac{150,4}{E[\text{eV}]}} \quad (2.1)$$

ebenfalls im Angström-Bereich [32] und damit in der Größenordnung typischer Gitterabstände in Festkörpern. Folglich sind langsame Elektronen gut für Beugungsexperimente an Oberflächen geeignet. Erstmals wurde dies experimentell bereits 1927 von *Davisson* und *Germer* gezeigt [33]. Sie untersuchten einen Nickelkristall mit Elektronenstrahlen. Dies mündete letztlich in der Entwicklung der *Low Energy Electron Diffraction* Methode (Abk. LEED).

Grundlegend für LEED ist die Interferenz von an einer atomaren Oberfläche reflektierten Elektronenwellen. Dabei muss die Laue-Bedingung $\vec{k}_i - \vec{k}_f = \vec{G}$ erfüllt sein, die nichts anderes besagt, als dass der Unterschied zwischen Wellenvektoren der ein- und auslaufenden Elektronenwellen einem reziproken Gittervektor entsprechen muss. Dabei kann man die Wellenvektoren in Anteile $\vec{k}_{||}$ und \vec{k}_{\perp} parallel und senkrecht zur Oberfläche zerlegen. Eine Oberfläche kann jedoch nur in lateraler Richtung periodische Strukturen aufweisen, senkrecht dazu ist eine Wiederholung nicht möglich, sodass auch nur parallel zur Oberfläche reziproke Gittervektoren \vec{G} definiert werden können. Die Laue-Bedingung modifiziert sich folglich zu:

$$\vec{k}_{i,||} - \vec{k}_{f,||} = \vec{G} \quad (2.2)$$

Betrachtet man, wie in Abbildung 2.1 a) schematisch gezeigt, die Interferenz zweier Strahlen an einer atomaren Stufe mit Stufenhöhe d so kann man leicht einsehen, dass konstruktive Interferenz für den spekularen oder (00)-Reflex genau dann entsteht, wenn für die Bragg-Beziehung:

$$S \cdot \lambda_{el} = 2d \cos(\vartheta) \quad (2.3)$$

S ganzzahlig ist. Halbzahlige Werte resultieren dementsprechend in destruktiver Interferenz [32]. Dabei ist ϑ der Einfallswinkel des Elektronenstrahls relativ zur Flächennormalen. Die Größe S wird auch Streuphase genannt. Setzt man Gl. 2.1 in Gl. 2.3 ein und formt zu S um, so erkennt

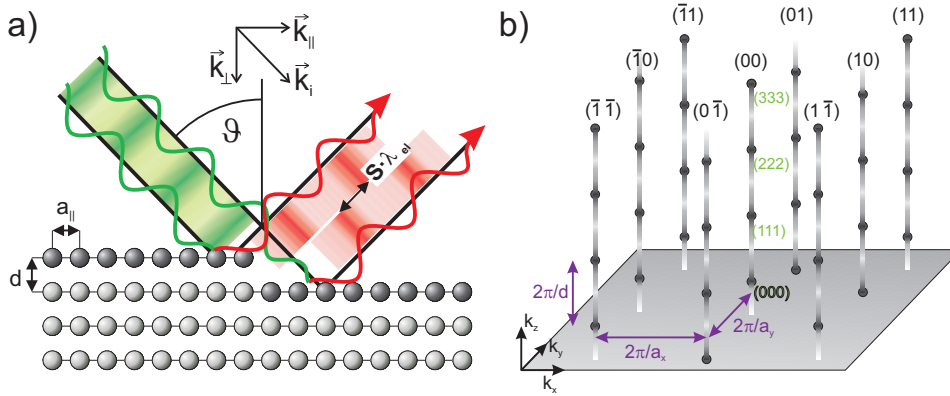


Abbildung 2.1.: a) Beugung eines Elektronenstrahls an einer mono-atomaren Stufe. Der Gangunterschied der beiden, an unterer und oberer Terrasse, reflektierten Wellen beträgt $S \cdot \lambda_{el}$. b) Beugungsstangen senkrecht zur Oberfläche an den zweidimensionalen Bragg-Punkten. Entlang der k_z -Richtung variiert die Intensität entsprechend der Streuphase.

man die wurzelförmige Abhängigkeit von S von der Elektronenenergie E :

$$S = 2d[\text{\AA}] \cos(\vartheta) \sqrt{\frac{E[\text{eV}]}{150,4}} \quad (2.4)$$

Üblicherweise werden Elektronenenergien mit ganzzahligen S als In-Phase-Bedingung, die mit halbzahligen S als Gegen-Phase-Bedingung bezeichnet. Der bereits oben erwähnte Impuls (Einheit: \AA^{-1}) senkrecht zur Oberfläche kann auch in Abhängigkeit der Elektronenenergie angegeben werden:

$$k_\perp = 2\pi \cos(\vartheta) \sqrt{\frac{E[\text{eV}]}{150,4}}. \quad (2.5)$$

Sodass die Streuphase auch wie folgt ausgedrückt werden kann:

$$S = \frac{k_\perp d}{\pi}. \quad (2.6)$$

Die Tatsache, dass senkrecht zur Oberfläche keine Periodizität vorhanden ist, modifiziert die, z.B. bei der Röntgenbeugung bekannte, dreidimensionale Beugungsbedingung mit scharfen Beugungsmaxima an den Bragg-Punkten des reziproken Gitters derart, dass nun für die Elektronenbeugung an der Oberfläche Beugungsstangen entstehen (siehe Abb. 2.1 b). Das bedeutet in erster Näherung, dass für jede beliebige Energie an den zweidimensionalen Bragg-Positionen Intensitätsmaxima beobachtet werden können. Die Ewaldkugel schneidet, bei hinreichend großem Kugelradius, in jedem Fall die Stange an einer bestimmten Stelle (siehe folgendes Kapitel, Abbildung 3.6), anders als bei der Röntgenbeugung, bei der die Kugel einen Punkt schneiden muss. Näher betrachtet variiert natürlich die Intensität der Beugungsstangen abhängig von der Energie bzw. Streuphase der Elektronen und damit entlang der k_\perp -Richtung, sodass nur für die In-Phase Bedingungen scharfe und intensive Beugungsreflexe beobachtet werden.

2.1.1. Kinematische Streutheorie

Möchte man quantitative Aussagen über die Intensitätsverteilung eines Beugungsbildes machen, so bedient man sich üblicherweise der kinetischen Streutheorie, die Mehrfachstreuungen der gebeugten Elektronen an Atomrümpfen vernachlässigt, sondern die gestreute Amplitude als Summe über ebene Partialwellen auffasst, die von den einzelnen Streuzentren der Oberfläche an den Positionen $\vec{r}(n)$ ausgehen.

$$\Psi(\vec{K}, \vec{k}_i) = \sum_n f(n, \vec{K}, \vec{k}_i) e^{i\vec{K}\vec{r}(n)}, \quad \vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_f \quad (2.7)$$

$f(n, \vec{K}, \vec{k}_i)$ nennt man dabei den Strukturfaktor. Die Intensität berechnet sich wie üblich zu:

$$I(\vec{K}, \vec{k}_i) = |\Psi(\vec{K}, \vec{k}_i)|^2 = \sum_{n,m} f(n, \vec{K}, \vec{k}_i) f^*(m, \vec{K}, \vec{k}_i) e^{i\vec{K}(\vec{r}(n) - \vec{r}(m))}. \quad (2.8)$$

Für perfekt flache und glatte Oberflächen kann man annehmen, dass der Strukturfaktor für jeden Ort \vec{r}_n unverändert bleibt und man somit einen über alle Einheitszellen n gemittelten Strukturfaktor $f(\vec{K}, \vec{k}_i) = \bar{f}(n, \vec{K}, \vec{k}_i)$ verwenden kann. Lediglich an Defekten, wie etwa Stufenkanten, ist die periodische Koordination gestört und somit auch der Strukturfaktor geändert. Da aber die Elektronen nur geringfügig in den Festkörper eindringen können, ist auch in lateraler Richtung ab Abständen größer als etwa 5 Å kein Einfluss solcher Defekte auf f zu erwarten[32]. Unter diesen Voraussetzungen lässt sich Gleichung 2.8 auch als Produkt zweier Größen schreiben:

$$I(\vec{K}, \vec{k}_i) = F(\vec{K}, \vec{k}_i) \cdot G(\vec{K}) \quad (2.9)$$

Dem Formfaktor $F = |f(\vec{K}, \vec{k}_i)|^2$, der im Wesentlichen die integrale Intensität der Beugungsreflexe bestimmt, sowie dem Gitterfaktor G , der die Eigenschaften des reziproken Gitters der Oberfläche widerspiegelt und maßgeblich die Intensitätsverteilung der Beugungsreflexe beeinflusst.

$$G(\vec{K}) = \frac{1}{2\pi} \left| \sum_n e^{i\vec{K}\vec{r}(n)} \right|^2 = \frac{1}{2\pi} \left| \sum_n e^{i(n\vec{a}_x \cdot \vec{K}_{\parallel} + h(n)\vec{d}_z \cdot \vec{K}_{\perp})} \right|^2 \quad (2.10)$$

In dieser Darstellung wurde der Ortsvektor in einen periodischen Teil parallel zur Oberfläche mit Gitterkonstante a_x und einen Anteil senkrecht zur Oberfläche aufgeteilt, wobei $h(n)$ die Höhenfunktion und d_z die Stufenhöhe ist: $\vec{r}(n) = n\vec{a}_x + h(n)\vec{d}_z$. Eine defektfreie Oberfläche mit langreichweitiger Ordnung resultiert in scharfen Beugungsreflexen an den Bragg-Positionen. Jede Abweichung davon führt allerdings zu einer Redistribution der Intensität und zur Ausbildung eines diffusen Untergrundes im LEED-Muster[34]. Die Gesamtintensität eines Beugungsreflexes muss erhalten bleiben, unabhängig von der Morphologie der Oberfläche, sodass bei Integration über die gesamte Brillouin-Zone (BZ) gilt:

$$\int_{\text{BZ}} G_{i,j}(\vec{K}) dK_{\parallel} = 1 \quad .$$

Aufgrund dieser Überlegungen ist es wünschenswert, nicht nur wie beim konventionellen LEED die Struktur des Beugungsbildes zu messen, sondern auch die Möglichkeit zu haben, die Intensitätsverteilung der einzelnen Reflexe zu untersuchen. An dieser Stelle kommt nun das *Spot Profile Analysis LEED* (Abk. SPA-LEED) ins Spiel. Der gerätespezifische Aufbau und die Funk-

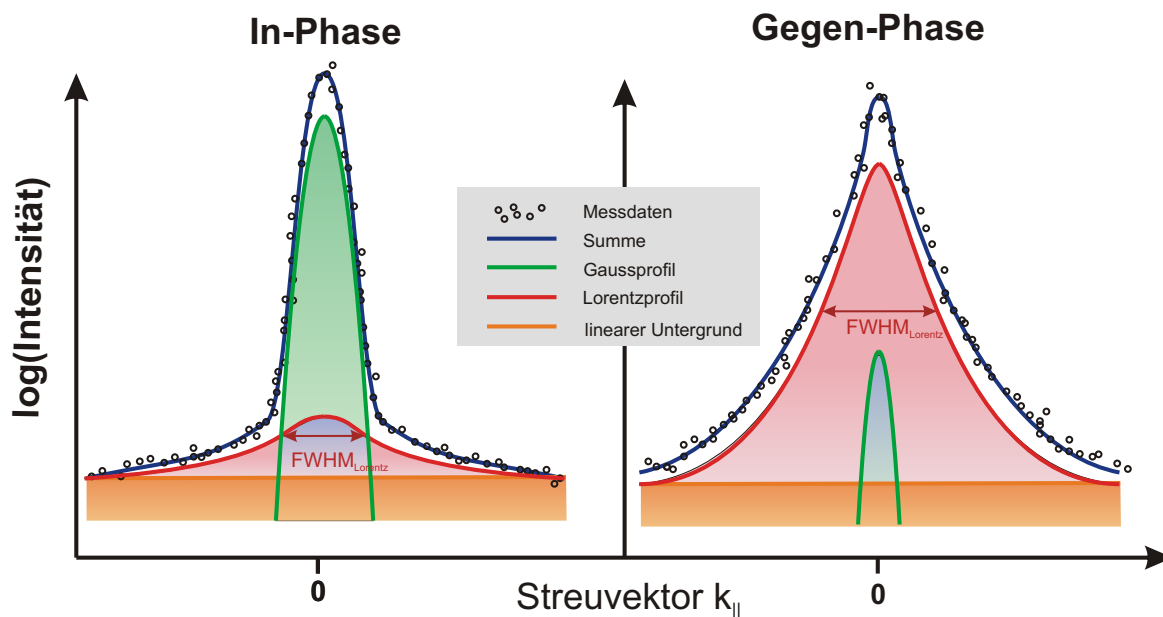


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung des Linienprofils des spekularen Beugungsreflexes. Die Gesamtintensität kann als Summe aus einer Gauss-Kurve für den Bragg-Reflex und einem Lorentz-Profil für die diffuse Schulter beschrieben werden. Deutlich erkennbar ist der Unterschied zwischen In- und Gegenphase.

tionsweise dieses Instrumentes wird in Kapitel 3 erläutert. Hier soll nun aber auf die wichtigsten Analysemethoden von atomar geordneten Oberflächen mit dem SPA-LEED eingegangen werden, die abgesehen von der geometrischen Anordnung zusätzliche Informationen über die untersuchte Oberfläche liefern können.

2.1.2. G(S)-Analyse

Eine wesentliche Stärke der SPA-LEED Methode ist es beispielsweise den Gitterfaktor G aus der Intensitätsverteilung eines Beugungsreflexes ableiten zu können. Nach [32] gilt nämlich unter der Annahme, dass der Formfaktor nicht merklich vom Impulsübertrag \vec{K} abhängt:

$$\frac{I_{i,j}(\vec{K}, \vec{k}_i)}{\int_{BZ} I_{i,j}(\vec{K}_{||}) dK_{||}} \cong \frac{F \cdot G}{\overline{F}_{ij} \int_{BZ} G(\vec{K}) dK_{||}} \cong G(\vec{K}) \quad (2.11)$$

Sehr wohl hängt aber der Gitterfaktor G von K_{\perp} und damit nach Gleichung 2.5 und 2.6 auch implizit von der Streuphase S ab. Dies macht man sich in der G(S)-Analyse zu Nutze, mit der man die Rauigkeit einer Oberfläche charakterisieren kann. Dabei misst man bei diversen Energien bzw. Streuphasen das Linienprofil des (00)-Reflexes und passt die Kurven mit einem Gauss-Profil für den Peak und einem Lorentz-Profil für die diffuse Schulter an (siehe Abb. 2.2). Für ganzzahlige S steckt die gesamte Intensität im Gauß-Peak, während für halbzahlige S nur diffuse Streuung auftritt. Damit lässt sich für den (00)-Reflex, also $\vec{K}_{||} = 0$, G näherungsweise schreiben als:

$$G(\vec{K}_{||} = 0, S) \approx \frac{I_{\text{Gauss}}}{I_{\text{Gauss}} + I_{\text{Lorentz}}}. \quad (2.12)$$

Sodass der Wert von G idealerweise zwischen 0 und 1 oszilliert. Für ein 2-Niveau System, also einer planaren Oberflächen mit Inseln einer einzigen Stufenhöhe, bei dem die jeweils sichtbaren Anteile der nullten und ersten Lage mit p_0 und p_1 bezeichnet werden, wobei $p_0 + p_1 = 1$ gilt, kann man $G(S)$ mit der folgenden Funktion beschreiben:

$$G(S) = p_0^2 + p_1^2 + 2p_0p_1 \cos(2\pi S). \quad (2.13)$$

In der Nähe einer In-Phase Bedingung kann dies mit einem Gauss-artigen Verlauf angenähert werden kann[35]:

$$G(S) \approx \exp(-\Delta^2(2\pi\delta S)^2) \quad (2.14)$$

δS gibt die Abweichung zum nächsten ganzzahligen S an und Δ ist als die Rautiefe der Oberfläche definiert, die man nach Auftragung von G gegen S leicht bestimmen kann.

2.1.3. H(S)-Analyse

In ähnlicher Weise wie bei der $G(S)$ -Analyse geht man auch in der sogenannten $H(S)$ -Analyse vor. Hier bestimmt man allerdings nicht die Rauigkeit, sondern die mittlere Terrassen- oder Inselbreite von der, auf der Oberfläche vorhandenen, Struktur. Die Information über die mittlere Strukturbreite Γ , also darüber wie groß perfekt geordnete Bereiche auf der Oberfläche sind, stecken im diffus gestreuten Anteil eines Beugungsreflexes. Lateral sehr weit ausgedehnte, defektfreie Bereiche führen zu scharfen Beugungsreflexen. Sind solche Bereiche aber klein, kommt es nur teilweise zu konstruktiver Interferenz und der Anteil diffus gestreuter Elektronen nimmt zu, sodass ein Peak mit breiter diffuser Schulter entsteht. Demnach gibt das Verhalten der Halbwertsbreite der diffusen Schulter, in Abhängigkeit von der Streuphase, genaue Auskunft über die Frage nach der Stufen- oder Inselbreite. Für eine geometrische Verteilung der Stufenbreiten kann man wie bereits bei der $G(S)$ -Analyse die Linienprofile des (00)-Beugungsreflexes mittels Gauss- und Lorentz-Funktion beschreiben (siehe Abb. 2.2). Die Halbwertsbreite H der Lorentz-Funktion

$$\Phi = \frac{1}{2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + \vec{K}_{\parallel}^2}, \quad \kappa = \frac{2\pi}{\Gamma}$$

oszilliert nun als Funktion der Streuphase [36, 32]:

$$H(S) = \frac{4(1 - \cos(2\pi S))}{\Gamma} . \quad (2.15)$$

Misst man H in kleinen Schritten über einige Streuphasen hinweg, so lässt sich durch Anpassung des Parameters Γ der Verlauf der Messpunkte mit Gleichung 2.15 oft gut beschreiben. Qualitativ lässt sich Γ in einer Gegen-Phase bestimmen, da S halbzahlig ist, gilt hier:

$$H\left(S = n + \frac{1}{2}\right) = \frac{4}{\Gamma} , n \in \mathbb{N}. \quad (2.16)$$

Sowohl bei der $H(S)$ - als auch bei der $G(S)$ -Analyse prüft man leicht, ob die Streuphaseneichung und damit die angenommene Stufenhöhe der untersuchten Oberfläche, korrekt ist. Hierfür müssen die Oszillationen beider Kurven mit der Streuphasenskala übereinstimmen.

2.1.4. Reciprocal Space Mapping - Heringplot

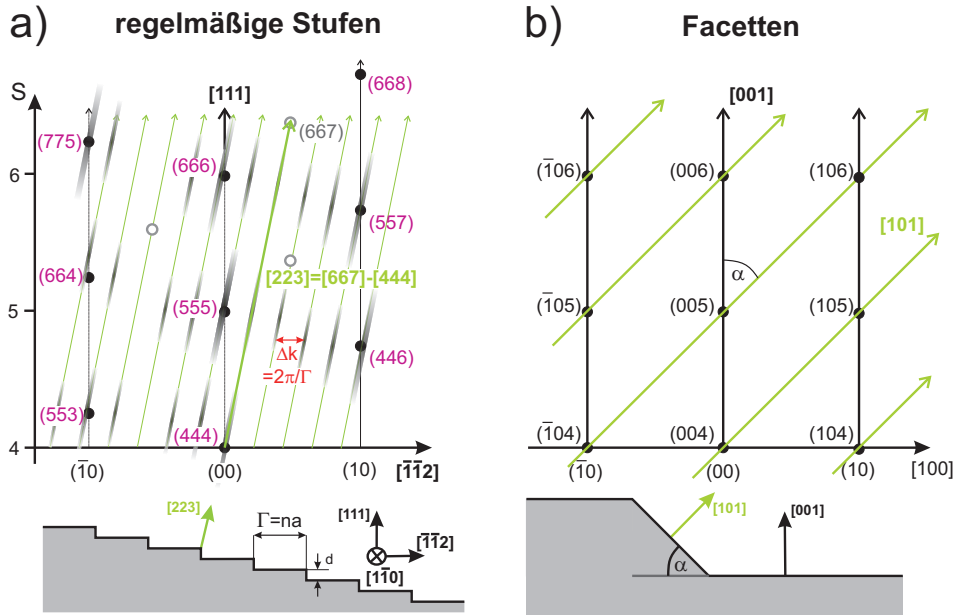


Abbildung 2.3.: Schematische Darstellung eines $k_{||}$ - k_{\perp} -Plot (Heringplots), der die Beugungsstangen der Oberfläche sichtbar macht. Die Intensität ist gegen den parallelen und senkrechten Impuls aufgetragen. Gezeigt sind zwei Situationen: a) eine regelmäßig gestufte Oberfläche zeigt gegen die Terrassennormale (hier $[111]$ -Richtung von Silizium) um den Winkel α verkippte Stangen. Deren Abstand in $k_{||}$ definiert die Terrassenbreite Γ . b) Eine facettierte Oberfläche zeigt Beugungsstangen normal zu jeder Facettenfläche. Die Stangen schneiden sich in In-Phase Bedingungen mit dem Facettenwinkel α .

Unter einem Reciprocal Space Mapping (RSM) oder Heringplot versteht man die Darstellung eines Intensitätsplots des reziproken Raumes als Funktion von $\vec{k}_{||}$ und \vec{k}_{\perp} , mit dem man die Beugungsstangen der Oberfläche sichtbar machen kann. Dazu misst man Linienprofile in einer bestimmten Richtung parallel zur Oberfläche für verschiedene Energien, bzw. Streuphasen oder $|\vec{k}_{\perp}|$. Idealerweise schneiden diese Linienprofile durch Beugungsreflexe. Trägt man die Linienprofile als Intensitätsplot in zweidimensionaler Darstellung gegen $\vec{k}_{||}$ und \vec{k}_{\perp} auf, so ergibt sich ein Bild ähnlich zu Abb. 2.3. Von besonderer Wichtigkeit ist diese Methode bei der Charakterisierung gestufter Oberflächen. Betrachten wir zunächst eine periodische Stufenanordnung wie in Abb. 2.3 a) gezeigt. Terrassen mit einer Breite Γ , die dem Vielfachen der zu Grunde liegenden Gitterperiodizität entspricht, sind von Stufen einer Höhe d getrennt. Durch die Stufenperiodizität ergeben sich zunächst im Beugungsbild zusätzliche Reflexe zwischen den Hauptmaxima in einem Abstand $\Delta k = \frac{2\pi}{\Gamma}$. Die zugehörigen Beugungsstangen sind gegenüber den Stangen die von den Terrassen ausgehen um einen Winkel verkippt. Dieser Winkel entspricht genau dem Neigungswinkel α der gestuften Oberfläche. Seine Messung erlaubt es dann bei Kenntnis der Terrassenrichtung \vec{n}_1 (hier $[111]$ -Richtung) mittels einfacher Vektorrechnung auf die Orientierung

\vec{n}_2 der Stufen zu schließen:

$$\alpha = \arccos \left(\frac{\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2}{|\vec{n}_1| |\vec{n}_2|} \right) .$$

Darüber hinaus hat man die Möglichkeit die Indizierung der Fläche mittels Vektoraddition zu bestimmen. Hierfür muss man die dreidimensionalen Bragg-Punkte indizieren und den Schnittpunkt einer Beugungsstange mit zwei Bragg-Punkten finden. In der Abb. 2.3 a) ist dies in grün gezeigt, hier gilt: $[667]-[444]=[223]$. Es handelt sich also um eine (223)-Fläche mit einer Terrassenbreite $\Gamma = 4\frac{2}{3}a_{Si}$.

Ist die Oberfläche facettiert, weist also in Teilbereichen verschiedene Orientierungen auf, so entspringen jeder dieser Flächen eigene Beugungsstangen, die allerdings um den Facettenwinkel α gegeneinander geneigt sind. Bei In-Phase Bedingungen schneiden sich die Stangen jeweils, dies ermöglicht übrigens die sehr exakte Bestimmung der In-Phase Energie [37] für die gegebene Oberfläche. Ähnlich wie zuvor lassen sich, einmal über den Winkel sowie über die Subtraktion der Bragg-Punkte, die Orientierungen der Facetten bestimmen.

2.2 Theorie des elektronischen Transports

In diesem Kapitel werden die wesentlichen theoretischen Modelle und Formalismen vorgestellt die für das Verständnis des elektrischen Transport und im Besonderen des Magnetotransport in metallischen Dünnschichten und Nanostrukturen wichtig sind.

2.2.1. Drude-Theorie des elektronischen Transports

Zur Beschreibung der elektrischen Transportphänomene in Metallen bediente sich *Drude* bei der kinetischen Gastheorie und nahm an, dass die Leitungselektronen ein Gas aus wechselwirkungsfreien Teilchen darstellen. Anders als bei idealen Gasen jedoch musste es einen Hintergrund von unbeweglichen, positiv geladenen Teilchen geben, um die Ladungsneutralität zu gewährleisten. Die grundlegenden Annahmen des Modells sind die folgenden [38, Kap. 1]:

1. Die Elektronen wechselwirken nicht untereinander und auch nicht mit den positiv geladenen Atomrümpfen. Lediglich Stöße mit den Atomrümpfen können die ansonsten geradlinige Bahn der Elektronen stören (Vgl. Abb. 2.4a) oben). Unter der Wirkung äußerer elektrischer und magnetischer Felder sind die Bewegungen der Elektronen durch die Newtonsche Mechanik determiniert.
2. Ein Stoß passiert instantan und ändert die Bewegungsrichtung des Elektrons
3. Nach einer mittleren Stoßzeit τ kommt es zum Stoßprozess. Das bedeutet, dass es in einem infinitesimalen Zeitraum dt mit der Wahrscheinlichkeit dt/τ zu einem Stoß kommt. Während der Zeit τ kann sich das Elektron ansonsten frei im Kristall bewegen.
4. Das thermodynamische Gleichgewicht wird nur über Stöße erreicht. Dabei ist die Richtung eines Elektrons direkt nach dem Stoß unabhängig von der Geschwindigkeit und Richtung vor dem Stoß und nur von der thermischen Geschwindigkeit am Ort des Stoßes beeinflusst.

Das Ohmsche Gesetz in seiner allgemeinen Form stellt die Proportionalität zwischen angelegtem Feld \vec{E} und der resultierenden Stromdichte \vec{j} dar:

$$\vec{E} = \rho \vec{j}. \quad (2.17)$$

ρ bezeichnet man als den *spezifischen Widerstand*, er ist unabhängig von äußeren Größen und damit eine reine Materialkonstante. Dies unterscheidet ihn vom *Widerstand* R . Betrachtet man einen Leiter der Länge L und Querschnittsfläche A , so ist $R = \rho \frac{L}{A}$. Er ist also von den Abmessungen des Leiters bestimmt. Die Stromdichte ergibt sich aus der Betrachtung, dass jedes Elektron die Ladung $-e$ trägt und eine Geschwindigkeit \vec{v} hat, und somit in einem Zeitintervall dt eine Ladung $dq = -nevAdt$ durch eine Fläche A hindurch tritt. Also ist:

$$\vec{j} = \frac{1}{A} \frac{dq}{dt} \vec{e}_v = -ne\vec{v}.$$

Die mittlere Geschwindigkeit ist durch die Aufnahme der elektrischen Energie nach der Zeit τ , die auch als Relaxationszeit bezeichnet wird, gegeben durch: $\vec{v}_m = -e\vec{E}\tau/m$ (m : Elektronenmasse).

$$\Rightarrow \vec{j} = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) \vec{E}$$

Hieraus folgt mit Gleichung 2.17 unmittelbar die Drude-Formel für die Leitfähigkeit:

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \quad (2.18)$$

In dieser Formel tritt nicht m , sondern m^* , auf, also die effektive Masse des Ladungsträgers. Dieses ist formal nicht in der Drude-Theorie enthalten, da hier freie Elektronen ohne Wechselwirkung mit dem Kernpotential u.ä. angenommen werden.

Semiklassisches Modell des elektronischen Transports – Sommerfeld-Theorie

In der Erweiterung der klassischen Theorie mit Hilfe der Quantenmechanik und dem Bändermodell des Festkörpers zeigt sich jedoch, dass auch für nicht freie Elektronen, die das periodische Potential der Kerne fühlen eine Beschreibung durch die Drude-Formel möglich ist. Dabei ist die effektive Masse proportional zum Inversen der Bandkrümmung: $m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$ [39, Kap. 8]. Auch kann die effektive Masse das entgegengesetzte Vorzeichen annehmen und so den Transport positiv geladener Teilchen, den Löchern, beschreiben. Die Drude-Theorie kann dies nicht von sich aus beschreiben, da hier nur negativ geladene Teilchen den elektrischen Strom tragen. Allgemein ist aber die effektive Masse ein Tensor, der von der kristallographischen Richtung abhängt und in seinen Komponenten die folgende Form annimmt:

$$[\mathbf{M}^{-1}(\vec{k})]_{ij} = \pm \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j},$$

sodass auch die Leitfähigkeit eine Tensorgröße ist:

$$\sigma = e^2 \tau(E_F) \int_0^{k_F} \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \mathbf{M}^{-1}(\vec{k}). \quad (2.19)$$

Hierbei ist $\tau(E_F)$ die Relaxationszeit von Ladungsträgern an der Fermikante. Nur im Spezialfall $[\mathbf{M}^{-1}(\vec{k})]_{ij} = (1/m^*)\delta_{ij}$ geht diese Gleichung wieder in die Drudesche Form über:

$$\sigma_{ij} = \frac{ne^2\tau}{m^*}, \quad (2.20)$$

und ist somit unabhängig von \vec{k} also der kristallographischen Richtung [38, Kap. 13].

Man erkennt, dass die wesentliche energetische Skala in Gleichung 2.19 die Fermi-Energie E_F und mit ihr verbunden der Fermi-Wellenvektor k_F , ist. Durch die Beschreibung der Zustandsdichte der Elektronen mit Hilfe der Fermi-Dirac-Verteilung¹ sieht man leicht ein, dass für die elektronische Leitung im Metall lediglich die Elektronen in der Nähe der Fermi-Energie beitragen können, da nur in einem Bereich der Größenordnung $k_B T$ um E_F eine Umverteilung der Besetzung von Zuständen statt findet.

2.2.2. Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit in Metallen - Bloch-Grüneisen-Gesetz

Für den Widerstand eines metallischen Leiters sind Stoßprozesse der Elektronen verantwortlich. Dabei unterscheidet man zwischen Stößen an Defekten sowie Phononen. Da beide Prozesse unabhängig sind, kann man auch die Stoßrate als Summe zweier Teilstoßraten schreiben:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_i}$$

Mit τ_0 der mittleren elastischen Streuzeit an Defekten und τ_i der mittleren inelastischen Streuzeit an Gitterschwingungen. Aus Gl. 2.18 ergibt sich damit für den spezifischen Widerstand:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \rho_0 + \rho_i = \frac{m}{ne^2\tau_0} + \frac{m}{ne^2\tau_i(T)},$$

welches auch als *Matthiesensche Regel* bekannt ist. Nur der Elektron-Phonon Anteil ist von der Temperatur abhängig, für $T=0$ bleibt nur der Restwiderstand ρ_0 erhalten, da hier alle Phononen ausgefroren sind. Bei hohen Temperaturen ist allerdings die Elektron-Phonon-Streuung wesentlich für den Widerstandsverlauf, die mittlere freie Weglänge ℓ wird von der Phononendichte n_{Ph} sowie dem Streuquerschnitt σ_{st} bestimmt: $\ell^{-1} = n_{Ph}\sigma_{st}$. Der Streuquerschnitt ist frequenzabhängig, da aber bei hohen Temperaturen sehr viele Phononen mit der Debye-Frequenz angeregt sind streuen die Elektronen überwiegend an diesen und σ_{st} ist somit in etwa konstant. Die Phononendichte steigt proportional zur Temperatur an, sodass:

$$\rho \propto \ell^{-1} \propto n_{Ph} \propto T, \quad T > \Theta_{Debye}$$

Für tiefe Temperaturen nimmt die Dichte der Phononen ab und der Streuquerschnitt σ_{st} wird mit der mittleren Phononenfrequenz kleiner. Darüber hinaus kann ein Phonon bei tiefen Tem-

¹Das Pauli-Prinzip verlangt für Fermionen, wie es Elektronen sind, die statistische Beschreibung mit Hilfe der Fermi-Dirac-Verteilung f_{FD} , anstatt der klassischen Boltzmann-Verteilung f_B . Sie sind jeweils gegeben durch:

$$f_B(E) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{-E/k_B T}, \quad f_{FD}(E) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E-E_F}{k_B T}\right] + 1}.$$

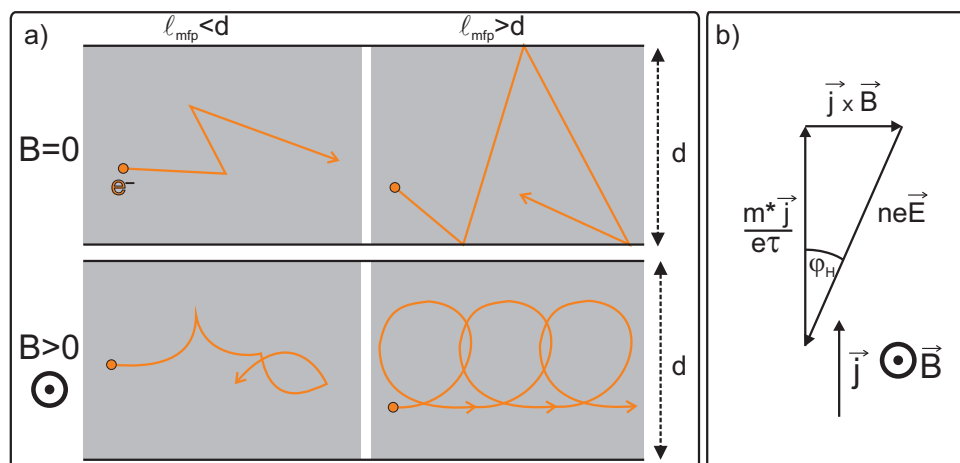


Abbildung 2.4.: Klassischer Magnetotransport: a) Die Ladungsträger, die sich ohne B-Feld zwischen Kollisionen geradlinig bewegen, werden auf Spiralbahnen gezwungen. Ihr Weg durch den Festkörper ist damit länger. Unterschieden sind die Fälle mit kurzer und langer freier Weglänge, die auch unterschiedliche Magnetowiderstandsverhalten zeigen können (Details siehe Text). b) Vektordiagramm der durch E- und B-Feld vorhandenen Kräfte. Dabei ist m^* die effektive Masse, \vec{j} die Stromdichte und τ die Relaxationszeit. Nach [41, Kap. 1].

peraturen vergleichsweise weniger Impuls an das Elektron übertragen, sodass in der Summe die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit stärker als nur proportional zu T verläuft. Das *Bloch-Grüneisen Gesetz* beschreibt den Verlauf von ρ_i wie folgt:

$$\rho_i(T) = A \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{T/\Theta_D} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \quad (2.21)$$

Für tiefe Temperaturen ergibt die Lösung des Integrals einen Verlauf $\rho_i \propto \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5$, sowie für hohe Temperaturen $\rho_i \propto \frac{T}{\Theta_D}$, entsprechend der Erwartung nach obiger Diskussion. [40, Kap. 9]

2.2.3. Klassischer Magnetotransport

Wie im vorigen Kapitel beschrieben, ist für den Widerstand oder die Leitfähigkeit eines Festkörpers die Streuung der Ladungsträger verantwortlich. Dies kann zum einen an intrinsischen Defekten, zum anderen - und im Besonderen wichtig bei dünnen Schichten oder Drähten - durch Streuung an der Oberfläche passieren. Unter dem Einfluss eines Magnetfeldes verspüren die Ladungsträger die Lorentzkraft $\vec{F}_L = e \cdot \vec{v} \times \vec{B}$, die sie auf eine Kreisbahn, bzw., wenn noch ein elektrisches Feld in Längsrichtung wirkt, auf eine Spiralbahn senkrecht zur \vec{B} -Feldrichtung zwingt (Abb. 2.4 a) unten). Die Umlauffrequenz oder *Zyklotronfrequenz* ist dann:

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}.$$

Das in Abbildung 2.4 b) gezeigte Vektordiagramm veranschaulicht das Kräftegleichgewicht bei Anwesenheit eines B-Feldes senkrecht zur Stromrichtung. Zur Kompensation der Lorentzkraft baut sich die Hall-Spannung auf. Es lässt sich ein sogenannter Hallwinkel φ_H definieren. Für ihn

gilt, mit der Beweglichkeit μ der Ladungsträger:

$$\tan(\varphi_H) = \frac{eB\tau}{m^*} = \mu B = \omega_c \tau.$$

Diese dimensionslose Größe gibt an, wie viele Kreisbewegungen ein Teilchen ausführt, bevor es an der nächsten Störstelle gestreut wird [38, Kap 1].

Klassisch gesprochen verlängert sich der Weg, den die Ladungsträger im Leiter zurück zu legen haben. Unweigerlich passieren sie dann auch mehr Defekte und werden häufiger gestreut. Dies führt zu einer Erhöhung des Widerstandes bzw. Reduktion der Leitfähigkeit mit steigendem magnetischen Feld. Dabei ergibt sich eine quadratische Abhängigkeit der Leitfähigkeit und ein linearer Zusammenhang des spezifische Hallwiderstand mit dem angelegten Magnetfeld [41, Kap.1]:

$$\sigma(B) = \frac{\sigma_0}{1 + (\mu B)^2}, \quad \rho_{\text{Hall}} = -\frac{B}{ne} \quad (2.22)$$

In einer Situation, in der die freie Weglänge eines Materials sehr groß ist und somit in der dünnen Schicht (Dicke d) die freie Weglänge ℓ_{mfp} von d bestimmt wird ($\ell_{\text{mfp}} \approx d$), kann aber genau der gegenteilige Effekt auftreten (Abb. 2.4 a) unten rechts). Durch die Verbiegung der Trajektorien werden die Ladungsträger im Inneren der Schicht festgehalten und kommen seltener an die Oberfläche, an der Streuung statt finden könnte. Dadurch wird der Widerstand mit steigendem Magnetfeld kleiner. Dieser Effekt konnte erstmals in Mikrometer dünnen Natriumdrähten nachgewiesen und erklärt werden [42]. Jedoch sind die Beweglichkeiten der Ladungsträger in den hier untersuchten Dünnschichten zu klein, als dass man einen solchen Effekt messen könnte.

Die Gleichungen 2.22 sind von sehr einfacher Gestalt. Komplizierter wird die Situation allerdings, wenn man es mit mehr als einem Ladungsträgertyp zu tun hat, also Elektronen und Löcher zum Ladungstransport beitragen. Wie wir im späteren Kapitel 2.8 sehen werden, trifft dies genau für den Oberflächenzustand von Bismut zu. Die Leitfähigkeit ergibt sich mit den Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher μ_n und μ_p und deren Ladungsträgerdichte n und p zu: $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$. Beschreibt man die Ebene senkrecht zum angelegten Magnetfeld B in der sich \vec{E} und \vec{j} befinden als komplexe Ebene, so kann man für den spezifischen Widerstand in Abhängigkeit des Magnetfeldes, mit der Abkürzung $\gamma_{+/-} = \mu_{p/n} B$, eine Formel aufstellen [41]:

$$\rho(B) = \frac{B}{ne} \frac{[\gamma_- + c\gamma_+ + \gamma_- \gamma_+ (\gamma_+ + c\gamma_-)] - i[\gamma_-^2 - c\gamma_+^2 + (1-c)\gamma_-^2 \gamma_+^2]}{(\gamma_- + c\gamma_+)^2 + (1-c)^2 \gamma_-^2 \gamma_+^2}. \quad (2.23)$$

Der Realteil von ρ entspricht dem spezifischen Magnetowiderstand, der Imaginärteil dem spezifischen Hall-Widerstand. Trivialerweise gilt der Zusammenhang: $\frac{\rho(B)}{\rho_0} = \frac{R(B)}{R(0)} = \frac{G(0)}{G(B)}$. Nach Umformung und längerer Rechnung ergibt sich schließlich ein Ausdruck für den magnetfeldabhängigen Leitwert:

$$G(B) = G(0) \frac{1 + (1-c)^2 \frac{\mu_n^2 \mu_p^2}{(\mu_n + c\mu_p)^2} B^2}{1 + \mu_n \mu_p \frac{\mu_p + c\mu_n}{\mu_n + c\mu_p} B^2}, \quad c = \frac{p}{n} \quad (2.24)$$

sowie für den spezifischen Hall-Widerstand [41]:

$$\rho_{\text{Hall}}(B) = -\frac{B}{ne} \frac{\mu_n^2 - c\mu_p^2 + (1-c)\mu_n^2 \mu_p^2 B^2}{(\mu_n + c\mu_p)^2 + (1-c)^2 \mu_n^2 \mu_p^2 B^2}. \quad (2.25)$$

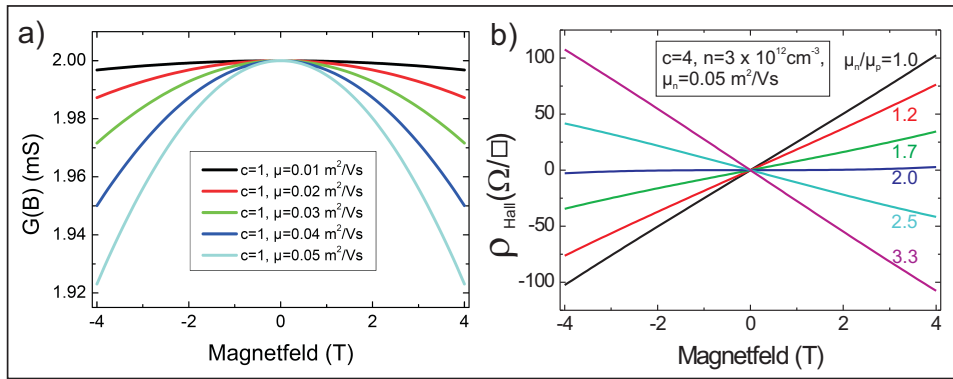


Abbildung 2.5.: Graphische Darstellung der Gleichungen 2.24 in a) und 2.25 in b). In a) wird bei konstantem $c=p/n$ und $\mu_n/\mu_p = 1$ der Wert von μ_n verändert. Die Amplitude der Parabel nimmt ab. In b) ändert sich die Steigung in Abhängigkeit von μ_n/μ_p . Für $c = \mu_n^2/\mu_p^2$ wird der Halleffekt kompensiert und verschwindet.

Weiterhin erkennt man in Gleichung 2.24 den quadratischen Charakter der klassischen Magnetoleitfähigkeit, allerdings hängt die Größe des Effekts entscheidend von den Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher ab. Abbildung 2.5 a) zeigt das Verhalten von $G(B)$ unter Variation der Beweglichkeitswerte. Deutlich erkennt man, dass die Amplitude der Parabel abnimmt, sobald μ_n und μ_p kleiner werden.

Etwas komplexer ist das Verhalten des Hall-Widerstandes. Bei Anwesenheit nur eines Ladungsträgertyps kann man anhand der Steigung von $\rho_H(B)$ die Art des Ladungsträgers bestimmen. Eine positive Steigung würde von Löchern, eine negative von Elektronen erzeugt. Kommen beide gleichzeitig vor, geht das nicht mehr so einfach, da für die Steigung der Kurve jetzt, neben der Konzentration auch die Beweglichkeit, jeweils der Löcher und Elektronen, mit eingeht. Nimmt man für Gl. 2.25 an, dass $\mu_n B \ll 1$ und $\mu_p B \ll 1$ und setzt die Ableitung gleich 0, so kommt man auf die Gleichung: $\frac{d\rho}{dB} = 0 \Leftrightarrow c = \frac{\mu_n^2}{\mu_p^2}$. Eine Steigung größer (kleiner) als Null bedeutet also, dass c größer (kleiner) als μ_n^2/μ_p^2 ist. Sind beide gleich groß so ist der Leiter kompensiert und der Halleffekt verschwindet. Dieses Verhalten ist auch sehr schön in Abb. 2.5 b) zu sehen. Bei festem $c=4$ wird μ_n/μ_p von 1 - 3,3 variiert. Beginnend bei positiver und endend bei negativer Steigung verschwindet der Halleffekt genau bei $\frac{\mu_n}{\mu_p} = 2.0 = \sqrt{c}$.

2.2.4. Schwache (Anti-)Lokalisierung

Neben der klassischen Beschreibung der Leitfähigkeit durch die Drude-Theorie (Vgl. Kap. 2.2.1), können auch quantenmechanische Phänomene eine Rolle spielen. Da Elektronen im Festkörper als Wellen beschrieben werden können, ist es nur zwangsläufig, dass die Leitungselektronen auch Interferenzeffekten unterworfen sind. In ungeordneten Systemen kommt es häufig zu Streuung an Störstellen, die letztlich auch den elektrischen Widerstand erzeugen. Die Leitungselektronen diffundieren durch die Schicht von einem Streuzentrum zum nächsten. Die Wahrscheinlichkeit ein Elektron zu einer Zeit t an einem Ort \vec{r} zu finden ist: $P(\vec{r}, t) = 1/(4\pi Dt) \cdot \exp(-r^2/(4Dt))$ [43], wobei D die Diffusionskonstante ist. Am Ausgangspunkt ($r=0$) findet man es nach klassischer Beschreibung also in $1/(4\pi Dt)$ aller Fälle. Ein möglicher dieser Diffusionswege ist in Abbildung 2.6a) gezeigt. Das Teilchen kehrt nach n Streuprozessen wieder zum Ursprung zurück. Jedoch

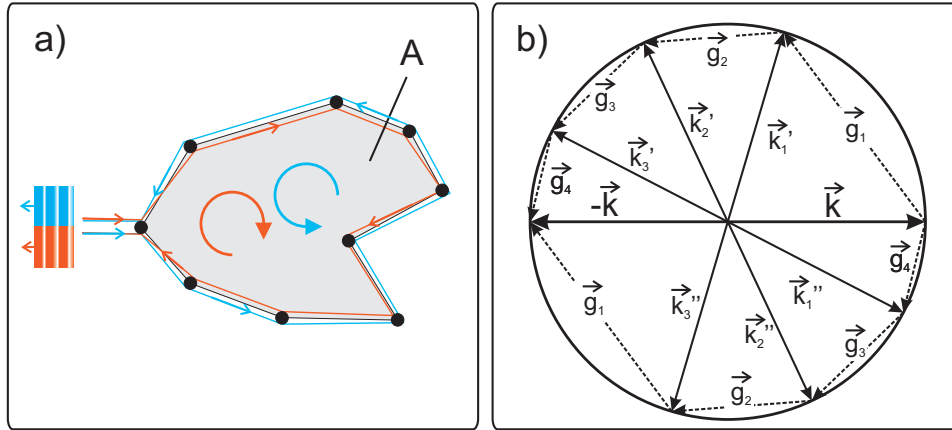


Abbildung 2.6.: Schwache Lokalisierung in zweidimensionalen ungeordneten Systemen. Die Interferenz der beiden Streupfade in Rückwärtsrichtung ergibt eine Erhöhung des elektrischen Widerstandes. a) Situation im Realraum, b) im reziproken Raum (nach [43]).

erlaubt die Zeitumkehrinvarianz einem anderen Teilchen bzw. einer anderen Welle, genau den umgekehrten Weg zu durchlaufen. Abbildung 2.6b) zeigt die gleiche Situation im reziproken Raum. Der Impuls \vec{k} wird über n Streuprozesse, jeweils nach der *elastischen Streuzeit* τ_0 mit Impulsüberträgen $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$, zu $-\vec{k}$ umgekehrt. Alternativ kann der Prozess von \vec{k} zu $-\vec{k}$ über die Folge $\vec{g}_n, \dots, \vec{g}_1$ ablaufen. Da die Streuprozesse als elastisch betrachtet werden, befinden sich alle Zwischenzustände bei der gleichen Energie und so sammeln beide Wellen auf ihrem Weg die gleiche Phasenverschiebung $\Delta\varphi = Et/\hbar, (t = n\tau_0)$ an. Genau in Rückstreurichtung, und nur in dieser, überlagern sich beide Wellen kohärent. Somit erhöht sich durch diesen Interferenzeffekt die Wahrscheinlichkeit das Teilchen bei $r=0$ aufzufinden auf den doppelten Wert $1/(2\pi Dt)$. Das Elektron ist also an seinem Ort *lokalisiert*, wodurch folglich auch der elektrische Widerstand erhöht ist. Dieser Effekt der Elektronenwelleninterferenz durch zufällig angeordnete Streuzentren nennt man *Schwache Lokalisierung* (engl. *Weak Localization*, Abk. WL). Nach einer Zeit τ_i geht die Phasenkohärenz verloren, es findet *inelastische Streuung* statt, sodass auch die Interferenz nur innerhalb der Zeitskalen $\tau_0 < t < \tau_i$ stattfinden kann. Der Lokalisierungseffekt ist also besonders gut zu beobachten, wenn die inelastische Streuzeit τ_i groß ist. Dabei ist die Rückstreuung nicht exakt auf 180° festgelegt. Es kann auch in einem kleinen Raumwinkelelement darum herum, also für einen Endzustand mit $-\vec{k} + \vec{q}$ zu konstruktiver Interferenz kommen. Die relative Phasendifferenz der beiden Wellen ergibt sich dann aber für diesen Endzustand zu $\Delta\varphi = nDq^2\tau_0$ nimmt also quadratisch mit q zu, wodurch der Beitrag solcher Zustände zur kohärenten Rückstreuung exponentiell ($\propto \exp(-Dq^2t)$) mit der Zeit abnimmt und schnell an Gewicht verliert [43].

Anderson et al. zeigten 1979 [44], dass die Temperaturabhängigkeit der Schwachen Lokalisierung folgende Form annimmt:

$$G = \frac{ne^2\tau_0}{m} - \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln\left(\frac{\tau_i}{\tau_0}\right).$$

Dabei steckt die Temperaturabhängigkeit implizit in τ_i , die im Wesentlichen von der Streuung mit Phononen beeinflusst wird. Somit folgt für eine Temperaturabhängigkeit der Form $\tau_i \propto T^{-P}$

eine logarithmische Abhängigkeit des Korrekturterms von T:

$$\Delta G = PG_{00} \cdot \ln(T), \quad G_{00} = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar}.$$

Diese wurden auch früh experimentell überprüft [45, 46, 47], jedoch war unklar ob der logarithmische Temperaturverlauf eventuell auch durch andere Prozesse wie der Coulomb-Wechselwirkung bei der Elektron-Elektron-Wechselwirkung geschuldet ist [48]. Nach dieser Theorie sollte sich aufgrund der unvollständigen Abschirmung der Ladung durch die übrigen Elektronen ebenfalls eine logarithmische Temperaturabhängigkeit einstellen:

$$\Delta G(T) = -G_{00}(1 - F)\ln(T)$$

Mit F, dem sogenannten Finkelstein Parameter, der typischerweise Werte $0 < F < 1$ annimmt [43]. Erst mit der Untersuchung der Magnetotransportverhaltens konnte diese Frage geklärt werden, da diese im Wesentlichen auf die Schwache Lokalisierung sensitiv ist. Die Phasenkohärenz der beiden Wellen kann nämlich von einem äußeren Magnetfeld \vec{B} gestört werden. So erhalten die Partialwellen eine Phasenverschiebung während ihres Weges der proportional zum magnetischen Fluss $\Phi = \vec{B} \cdot \vec{A}$ durch die den Diffusionspfad umschließende Fläche A ist. Da der Umlaufsinn aber nicht gleich ist, ist das Vorzeichen von $\Delta\varphi$ entgegengesetzt, sodass der gesamte Phasenunterschied nach einer Umrundung $\Delta\varphi = \frac{2e\Phi}{\hbar}$ ist. Die Wellen können also für große Φ nicht mehr interferieren, sodass die Lokalisierung durch das äußere Magnetfeld wieder aufgehoben wird. Der Widerstand sinkt also mit steigendem B-Feld.

Diese Überlegungen führen zu korrekten Ergebnissen, solange man davon ausgehen kann, dass der Spin der Elektronen erhalten bleibt. In Systemen die eine starke *Spin-Bahn-Wechselwirkung* (engl. spin-orbit interaction, Abk.: SOI) zeigen, ist dies nicht mehr der Fall. Es ergeben sich drastische Änderungen. Betrachten wir nochmals das Interferenzexperiment. Diesmal aber unter der Voraussetzung, dass sich die Spinausrichtung aufgrund der SOI bei einer Streuung ebenfalls ändert. Nach der Rückkehr zum Ausgangspunkt weisen jetzt die Spins der beiden zuvor interferierenden Elektronen in die entgegengesetzte Richtung, da die Spinwellenfunktion von Spin-1/2 Teilchen eine 4π -Invarianz aufweisen [43, 49]². Somit kommt es anstatt der konstruktiven zur destruktiven Interferenz, verursacht durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ursprung verringert sich gegenüber dem klassischen Wert um die Hälfte auf $P = 1/(8\pi Dt)$. Der elektrische Widerstand verringert sich demnach, bezogen auf den Drude-Leitwert. Weil das Elektron es vermeidet an seinem Ursprungsort zu bleiben, bezeichnet man dieses Phänomen als *Schwache Anti-Lokalisierung* (engl. *Weak Anti-Localization*, WAL). Erstmals experimentell nachgewiesen wurde die WAL bei der Untersuchung von dünnen Magnesiumfilmen und deren Magnetowiderstandsverhalten nach Adsorption kleinster Mengen Gold, welches als schweres Element eine große Spin-Bahn-Wechselwirkung zeigt. Bei tiefen Temperaturen zeigte sich eine Umkehrung der Magnetowiderstandskurve von negativ zu positiv [51], die in überzeugender Weise der theoretischen Erwartung von *Hikami et al.* entsprach [52]. Mit

²Im Formalismus der *Berry-Phase* kann dieser Sachverhalt auch so angesehen werden, dass beim Durchlaufen der beiden zeitinversen Wege die Spinwellenfunktionen Ψ_s eine Berry-Phase von

$$\varphi = -i \int_0^T \left\langle \Psi_s[k(t)] \left| \frac{d}{dt} \Psi_s[k(t)] \right. \right\rangle dt = \pi$$

ansammeln. [50]

dem gleichen Argument von oben, nach dem der magnetische Fluss eine zusätzliche Phase einführt, ist die destruktive Interferenz nicht mehr vollständig und es kommt zu einer Aufhebung der Anti-Lokalisierung, also einer Erhöhung des Widerstandes.

Auch magnetische Verunreinigungen können zu einer quantenmechanischen Korrektur des Widerstandes führen. Die magnetischen Momente der Verunreinigung wechselwirken mit den Spins der Elektronen und führen zu einer vermehrten Änderung der Spinorientierung während des Streuprozesses. Da die Streuung richtungsabhängig ist zerstört sie die Phasenkohärenz und hat somit einen ähnlichen Einfluss wie die inelastische Streuung, sodass nach einer Zeit τ_s keine kohärente Überlagerung mehr möglich ist.

All die vorgestellten Prozesse liefern entsprechenden Streuzeiten, sodass die gesamte Streuzeit nach der *Matthiesen-Regel* sich zu folgendem Ausdruck ergibt:

$$1/\tau = 1/\tau_0 + 1/\tau_i + 1/\tau_{so} + 1/\tau_s.$$

Verbunden mit den charakteristischen Zeiten, sind auch Magnetfelder, bei denen der entsprechende Beitrag kompensiert wird.

$$B_n = \frac{\hbar}{4eD\tau_n}, \quad n = 0, i, so, s$$

$D = \frac{v_F^2 \tau_0}{dim}$ ist die Diffusionskonstante in einem System der Dimension "dim", die in den hier vorgestellten Experimenten gleich 2 ist. Auch im Fall des quasi-eindimensionalen Pb/Si(557) trifft dies zu, da der 1D Charakter durch eine zweidimensionale Wechselwirkung zu Stande kommt.³ Unter Vernachlässigung der magnetischen Streuzeit erhält man nach *Hikami* [52] die Abhängigkeit des Leitwerts vom äußeren Magnetfeld B in der Form:

$$\Delta G(B) = G(B) - G(0) = -G_{00} \left[f\left(\frac{B_1}{B}\right) - \frac{3}{2}f\left(\frac{B_2}{B}\right) + \frac{1}{2}f\left(\frac{B_3}{B}\right) \right] \quad (2.26)$$

$$\text{mit } f\left(\frac{B_i}{B}\right) = \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{B_i}{B}\right) - \ln\left(\frac{B_i}{B}\right), \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.27)$$

Die Funktion $\Psi(x)$ ist die Digammafunktion und definiert als die Ableitung vom Logarithmus der Gammafunktion $\Psi(x) := \frac{d}{dx} \ln(\Gamma(x)) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$. Weiter sind die in Gleichung 2.26 angegebenen Felder B_i , ($i=1, 2, 3$) wie folgt definiert:

$$B_1 = B_0 + B_{so} + B_s = \frac{\hbar}{2ev_F^2} \cdot (\tau_0^{-2} + (\tau_0\tau_{so})^{-1}) \quad (2.28)$$

$$B_2 = \frac{4}{3}B_{so} + \frac{2}{3}B_s + B_i = \frac{\hbar}{2ev_F^2} \cdot \left(\frac{4}{3}(\tau_0\tau_{so})^{-1} + (\tau_0\tau_i)^{-1}\right) \quad (2.29)$$

$$B_3 = 2B_s + B_i = \frac{\hbar}{2ev_F^2} \cdot (\tau_0\tau_i)^{-1} \quad (2.30)$$

Somit resultiert aus dem Zusammenspiel der drei Zeitskalen τ_0 , τ_i und τ_{so} ein bestimmter Verlauf von $G(B)$. In Abb 2.7 ist dies beispielhaft für zwei Fälle dargestellt. In a) und b) ist die Spin-Bahn Streuzeit zu vernachlässigen, sodass für $G(B)$ für fast alle τ_i ein positives $G(B)$, also

³Für die Diffusionskonstante wurden bei den hier untersuchten Materialien Pb und Bi die folgenden Werte der Fermi-Geschwindigkeit zu Grunde gelegt: $v_{F,Pb} = 1.8 \cdot 10^6 \frac{m}{s}$ [53], $v_{F,Bi} = 2.5 \cdot 10^6 \frac{m}{s}$ [25]

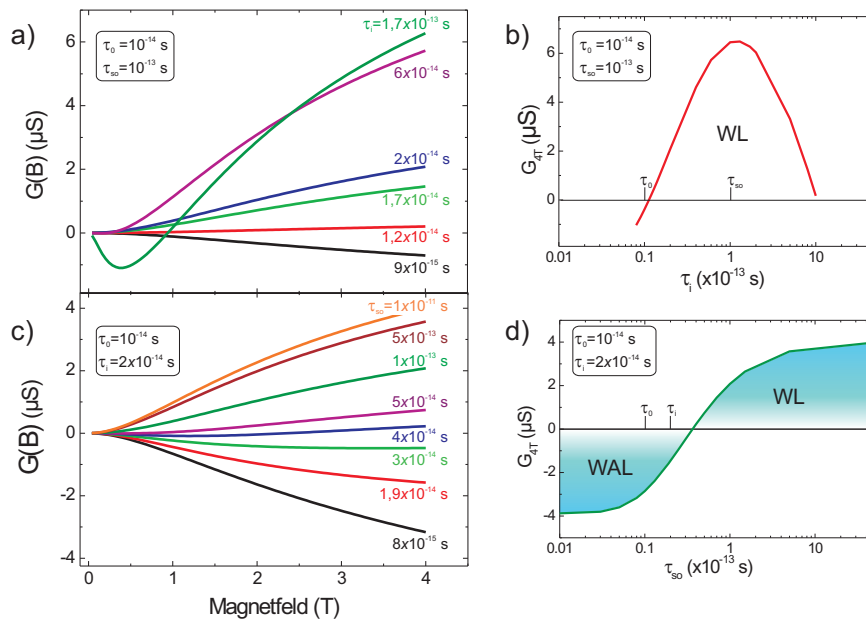


Abbildung 2.7.: Graphische Darstellung von Gleichung 2.26 für die Leitwertkorrektur durch Schwache Lokalisierung. Das magnetfeldabhängige ΔG unter Variation von τ_i ist in a) gezeigt, den Einfluss von τ_{so} erkennt man in c). Auf der rechten Seite ist zur Verdeutlichung die Leitwertsänderung bei +4 T gegen die jeweilige Streuzeit (b): τ_i , d): τ_{so}) aufgetragen.

WL, resultiert. Erst wenn $\tau_i \approx \tau_{so}$, zeigt sich eine negativer Magnetoleitwert und eine Abnahme von ΔG_{4T} in b), also eine Tendenz hin zu WAL.

In Abb. 2.7 c) erkennt man bei konstantem τ_0 und τ_i , dass es für kleine τ_{so} zu WAL und für große τ_{so} zu WL kommt. Dies stimmt sehr gut mit dem obigen Argument überein, dass bei starker Spin-Bahn-Kopplung (τ_{so} klein) durch die 4π -Invarianz der Spinwellenfunktion in Rückwärtsrichtung destruktive Interferenz vorherrscht, während für schwache Kopplung konstruktive Interferenz und somit Lokalisierung dominant ist.

2.2.5. Leitfähigkeitsmessung mittels Zweipunkt und Vierpunktmessung

Bei der Messung der Leitfähigkeit dünner Schichten verwendet man im einfachsten Fall zwei Kontakte. Wie in Abbildung 2.8 a) dargestellt, dienen beide Elektroden, sowohl als Strom-, als auch als Spannungskontakt. Da der Widerstand der Zuleitungen und des Kontakts einen Spannungsabfall verursachen, wird dieser unweigerlich die Messung des Schichtwiderstandes beeinflussen. In der Vierpunkt-Messgeometrie verwendet man je zwei Kontaktpaare. Eines um den Strom in die Schicht einzuprägen, das andere um den Potentialunterschied zu messen (Abb. 2.8 b)). In dieser Anordnung fließt nun kein Strom mehr durch die Potentialkontakte, sodass deren Widerstand die Messung nicht beeinflusst. Prinzipiell können sich die Spitzen in beliebigem Abstand zueinander befinden, jedoch vereinfachen sich die Gleichungen erheblich, wenn sie kollinear, mit festem Spitzenabstand s , angeordnet sind.

Der Widerstand eines homogenen elektrischen Leiters ist gegeben durch $R = \frac{\rho \ell}{A} = \frac{\rho \ell}{bd}$ mit dem spezifischen Materialwiderstand ρ , der Querschnittsfläche, Länge, Breite und Dicke - A , l , b , d - des Leiters. Dabei definiert man die Größe $\rho_s = \frac{\rho}{d}$ als den Schichtwiderstand (teilweise auch mit

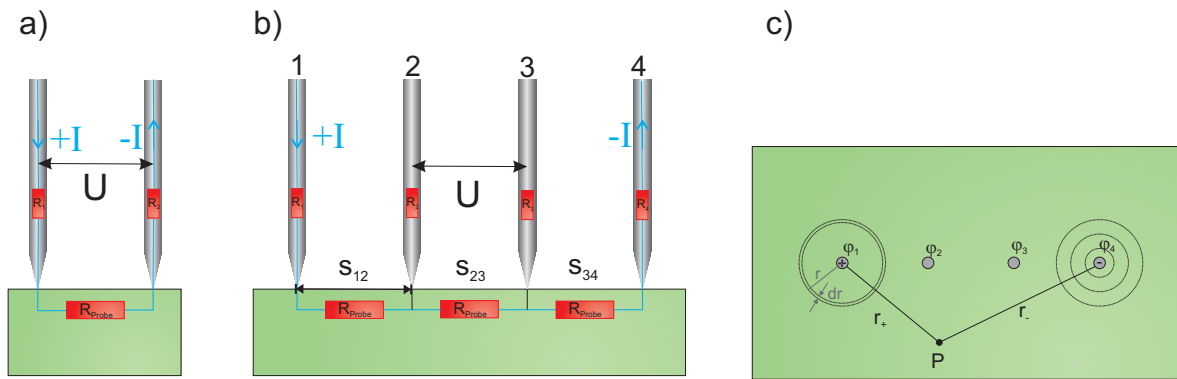


Abbildung 2.8.: a) 2-Punkt-Messanordnung. b) 4-Punkt-Messanordnung mit äquidistantem Probenabstand s . (Nach [54]) c) Potentialverteilung eines Dipols bei der 4-Punkt-Methode. (Nach [55])

R_s gekennzeichnet). Die Einheit des Schichtwiderstandes ist Ω , um ihn von einem konventionellen Widerstand zu unterscheiden weist man ihm die Einheit Ω/\square zu. Um den zu messenden Widerstand einer 2-dimensionalen, unendlich weit ausgedehnten, leitenden Schicht⁴ mit der 4-Spitzen Messmethode zu bestimmen, startet man mit der Abb. 2.8 c): Durch den Strom zwischen Kontakt 1 und 4 ergibt sich ein Gradient des elektrostatischen Potentials φ , abhängig von der Position auf der Probe. In einem infinitesimalen Kreissegment um den positiven Kontakt 1 ist der Widerstand durch $dR = \frac{\rho_s dr}{2\pi r}$ gegeben. Daraus ergibt sich die Änderung des elektrostatischen Potentials φ über dieses Element als

$$-d\varphi = \frac{\rho_s}{2\pi r} I dr \quad (2.31)$$

$$\Rightarrow \int_{\varphi_0}^{\varphi_+} d\varphi = \frac{\rho_s I}{2\pi} \int_{r_0}^{r_+} \frac{dr}{r} \quad (2.32)$$

Sodass sich φ_+ und analog dazu auch φ_- , die durch den positiven und negativen Stromkontakt erzeugten Potentiale, ergeben:

$$\varphi_+ = \varphi_0 - \frac{\rho_s I}{2\pi} \ln\left(\frac{r_+}{r_0}\right), \quad \varphi_- = -\varphi_0 + \frac{\rho_s I}{2\pi} \ln\left(\frac{r_-}{r_0}\right) \quad (2.33)$$

Die Summe der Potentiale, die von positiver und negativer Elektrode ausgehen, ergibt das Potential in einem beliebigen Punkt P der Fläche:

$$\varphi_P = \frac{\rho_s I}{2\pi} \ln\left(\frac{r_-}{r_+}\right) \quad (2.34)$$

Die messbare Spannung zwischen zwei Kontakten an den Stellen P und Q ist daher einfach

$$U_{PQ} = \varphi_P - \varphi_Q = \rho_s \frac{I}{2\pi} \left[\ln\left(\frac{r_{P,-}}{r_{P,+}}\right) - \ln\left(\frac{r_{Q,-}}{r_{Q,+}}\right) \right] \quad (2.35)$$

⁴Hierbei nimmt man an, dass die Schichtdicke d viel kleiner als der Spitzenabstand s ist ($d \ll s$), sowie, dass s viel größer als der Spitzenradius r_0 ist ($r_0 \ll s$). Damit ist garantiert, dass man die Spitzen als Punktquellen des elektrischen Feldes ansehen kann und die Poisson-Gleichung $\nabla(\sigma(\vec{r})\nabla\Phi(r)) = 0$ analytisch lösbar ist.

Im Fall kollinear angeordneter Messspitzen wie in Abb. 2.8 c) vereinfacht sich dieser Ausdruck nach Division durch den Strom I zu [56]:

$$R_{2D}^{4pkt} = \frac{U_{23}}{I} = \frac{\rho_s}{2\pi} \left[\ln\left(\frac{s_{23} + s_{34}}{s_{12}}\right) + \ln\left(\frac{s_{12} + s_{23}}{s_{34}}\right) \right] \quad (2.36)$$

Wenn auch noch alle Abstände $s_{ij} = s$ sind, nimmt die Formel für den Schichtwiderstand diese einfache Form an [57]:

$$R_{2D}^{4pkt} = \rho_s \frac{\ln(2)}{\pi} \Leftrightarrow \rho_s = \frac{U}{I} \frac{\pi}{\ln(2)} \quad (2.37)$$

Hier sollte man beachten, dass in diesem Fall der gemessene Widerstand unabhängig vom Spitzenabstand s ist. Dies widerspricht der intuitiven Erfahrung, nach der der Widerstand mit dem Spitzenabstand steigen sollte. Das liegt aber an der Eigenschaft des zweidimensionalen Raumes. Durch die Vergrößerung des Spitzenabstandes steigt einerseits der Widerstand, andererseits kann der eingepreßte Strom sich weiter in der Ebene ausbreiten, es entstehen neue Leitungspfade. Diese zwei Effekte kompensieren sich gerade so exakt, dass im Resultat keine Abhängigkeit von s besteht und nur ein Geometriefaktor $\frac{\ln(2)}{\pi}$ übrig bleibt [54]. Für dreidimensionale Schichten, die also noch eine Ausdehnung in z -Richtung aufweisen, ergibt sich mit einer analogen Herleitung der folgende Zusammenhang [54]:

$$R_{3D}^{4pkt} = \frac{\rho}{2\pi s} \Leftrightarrow \varrho = \frac{U}{I} 2\pi s. \quad (2.38)$$

Da sich der Strom jetzt auch in das Material ausbreitet, wird der Anstieg von R mit dem Spitzenabstand durch die zusätzlichen Strompfade überkompensiert und der 4-Punkt Widerstand nimmt proportional zu $1/s$ ab.

Gleichungen 2.37 und 2.38 sind nur gültig für in der Ebene unendlich ausgedehnte Schichten. Hat die Probe Begrenzungen, so können diese den Potentialverlauf stören und die Messung von R so beeinflussen. Mit der Methode der Spiegelladungen lassen sich diese Korrekturen aber berechnen [57]. Mit einem Korrekturfaktor C , der von den Abmessungen der Probe (a , b) und dem Spitzenabstand s abhängt, gilt für ρ_s :

$$\rho_s = \frac{U}{I} \cdot C \left(\frac{a}{b}, \frac{b}{s} \right) \quad (2.39)$$

C ist für unendlich ausgedehnte Schichten gleich dem Faktor $\pi/\ln(2) \approx 4,53$ und kleiner für endliche Abmessungen.

2.2.6. Van der Pauw Methode

Eine allgemeinere Variante der 4-Punkt Messung ist die *Van der Pauw Methode*. Mit ihr kann man, für beliebig geformte, homogen leitfähige Schichten, den Widerstand bestimmen. Die Voraussetzungen dafür sind: Die vier Messkontakte liegen am Rand der Probe und sind punktförmig. Die Schicht ist überall gleich dick und geschlossen, das heißt sie besitzt keinerlei Löcher in ihrem Inneren. Ausgangspunkt ist Abbildung 2.9 a), bei dem eine in der oberen Halbebene unendlich ausgedehnte 2-dimensionale Schicht mit vier Kontakten A, B, C und D am Rand kontaktiert ist. Die Kontakte A und B werden zunächst als Stromkontakte verwendet. Dann kann man mit

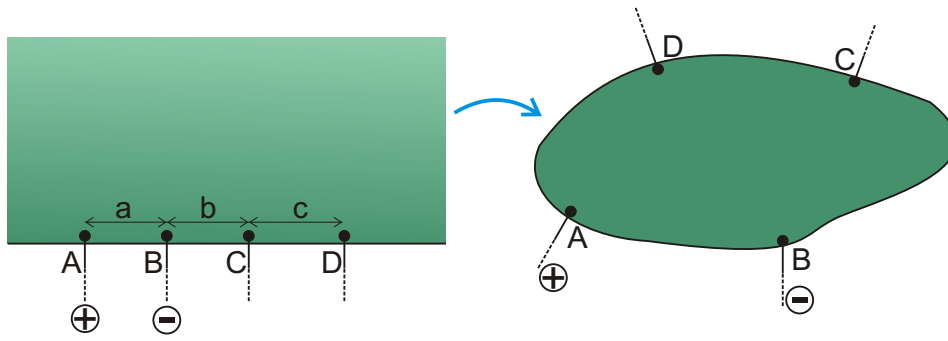


Abbildung 2.9.: Schematische Darstellung der Van der Pauw Messung. a) Die vier Punktkontakte am Rand einer in der oberen Halbebene liegenden Schicht. b) Die dazu äquivalente Situation einer beliebig geformten Probe mit Kontakten auf ihrem Rand.

Gleichung 2.35 zeigen, dass:

$$U_{CD} = \varphi_D - \varphi_C = \frac{\rho_s I}{\pi} \ln \left(\frac{(a+b)(b+c)}{b(a+b+c)} \right)$$

Damit folgt sofort für $R_{AB,CD}$ und $R_{BC,DA}$, also dem 4-Punkt Widerstand mit kommutierten Kontakten:

$$\Rightarrow R_{AB,CD} = \frac{\rho_s}{\pi} \ln \left(\frac{(a+b)(b+c)}{b(a+b+c)} \right), \quad R_{BC,DA} = \frac{\rho_s}{\pi} \ln \left(\frac{(a+b)(b+c)}{ca} \right)$$

Mit der Identität $b(a+b+c) + ca = (a+b)(c+b)$ kann man eine Relation zwischen beiden Gleichungen herstellen [58]:

$$\exp\left(-\frac{\pi R_{AB,CD}}{\rho_s}\right) + \exp\left(-\frac{\pi R_{BC,DA}}{\rho_s}\right) = 1. \quad (2.40)$$

Diese Gleichung ist von generellem Charakter und durch Anwendung komplexer Funktionentheorie und konformer Abbildung zeigte *Van der Pauw*, dass obige Gleichung auch für beliebig geformte Proben gilt (entsprechend Abb. 2.9 b). Durch Messung der beiden Widerstände ist es also für beliebige Kontaktnordnungen und Probenformen möglich auf den Schichtwiderstand ρ_s zu schließen. Praktischerweise schreibt man diese Gleichung um, und findet Lösungen für ρ_s :

$$\rho_s = \frac{\pi}{\ln(2)} \frac{R_{AB,CD} + R_{BC,DA}}{2} \cdot f \left(\frac{R_{AB,CD}}{R_{BC,DA}} \right) \quad (2.41)$$

Wobei die Funktion f die Asymmetrie der beiden Widerstandswerte berücksichtigt und Werte zwischen 0 und 1 liefert (1 für den total symmetrischen Fall und kleine Werte für sehr asymmetrische Kontaktnordnungen).

Van der Pauw schlug in seinem Aufsatz von 1958 auch besonders gut geeignete Probengeometrien vor, um den Widerstand sowie die Hall-Spannung effektiv messen zu können. Dabei ist die Kleeblatt-ähnliche Form, wie sie auch bei den hiesigen Proben (siehe Abbildung 3.3) verwendet wird, vorteilhaft. Dadurch konzentriert man den zu messenden Bereich auf die Mitte der Probe

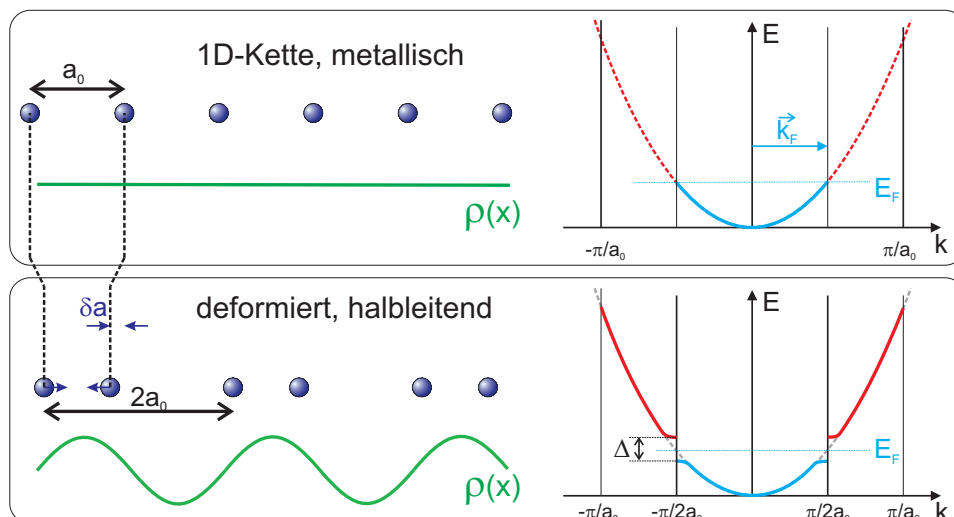


Abbildung 2.10.: Der Peierls-Übergang: Die atomare 1D-Kette weist eine parabolische Dispersion auf, wenn jedes Atom ein Elektron zur Leitung freigibt. Das Band ist halb gefüllt. Durch eine Gitterdeformation rückt der Rand der BZ auf den halben Wert. Es bildet sich eine Energielücke, die den Energieaufwand für die Deformation übertrifft und so der halbleitende Zustand energetisch günstiger ist. Verbunden mit der Gitterdeformation ist auch eine elektronische Umsortierung, es bildet sich eine Ladungsdichtewelle. Nach [17, S. 1130].

und die Kontakte werden effektiv kleiner und entsprechen besser der Voraussetzung eines Punktkontaktes. Weiter liefert diese Anordnung auch einen gut messbaren Halleffekt im Vergleich zu anderen Geometrien.

2.3 Fermi-Nesting und Peierls-Instabilität

Aus physikalischer und technologischer Sicht ist die Untersuchung metallischer atomarer Ketten von großem Interesse. Wie Peierls aber argumentierte ist eine eindimensionale metallische Kette bei $T=0$ K immer instabil gegen eine Gitterdeformation und der Bildung eines halbleitenden Zustandes. Wie Abbildung 2.10 zeigt, kann eine Anordnung von Atomen in einer Kette durch Dimerbildung eine $2a_0$ -Überstruktur bilden. Die Bandstruktur der nicht deformierten Kette weist bei Annahme freier Elektronen und einer Abgabe von einem Elektron pro Atom ins Leitungsband, parabolische Bänder auf, die bis zur Hälfte gefüllt, also metallisch sind. Nach der Deformation verschiebt sich nun der Brillouin-Zonenrand (BZ) auf den halben Wert $\frac{\pi}{2a_0}$, sodass nun $2k_F = \frac{2\pi}{(2a_0)} = \frac{\pi}{a_0}$ gilt – das Band ist voll gefüllt. Elektronen am Rand der neu gebildeten BZ können nun vom reziproken Gittervektor $\frac{\pi}{a_0}$ auf den gegenüberliegenden Rand zurück geklappt werden. Es bildet sich eine stehende Welle mit eben diesem Wellenvektor aus. Dadurch verbiegen sich die Bänder derart, dass eine Bandlücke Δ am Zonenrand entsteht, die in der Größenordnung typischerweise einige 10 meV beträgt und das System halbleitend macht. Bei $T=0$ überwiegt der Energiegewinn durch die Herabsetzung der Energie der Zustände knapp unterhalb der Fermi-Kante, gegenüber dem Energieaufwand, der nötig ist, um die Atome aus ihrer ursprünglichen Lage auszulocken. Bei steigender Temperatur allerdings wird diese Ener-

giebilanz zu Gunsten der Gitterverzerrung verschoben, sodass bei einer kritischen Temperatur T_c die halbleitende Konfiguration nicht mehr stabil ist und das System in einen metallischen Zustand wie in Abb. 2.10 oben relaxiert [17]. Mit der Gitterdeformation geht auch eine elektronische Umsortierung einher. Die Ladungsdichte variiert jetzt ebenso periodisch mit dem Ort. Es bildet sich eine *Ladungsdichtewelle* (engl.: *Charge Density Wave*, CDW).

Eng verbunden mit der Peierls-Instabilität ist das *Fermi-Nesting*. Betrachtet man die Bandstruktur einer Oberfläche, so können z.B. mehrere Bänder die Fermi-Fläche durchstoßen und im einfachsten isotropen Fall Fermi-Kreise mit Radius k_F bilden. Wenn zusätzlich durch die Periodizität der Oberfläche reziproke Gittervektoren \vec{g} gefunden werden können, die die Relation erfüllen:

$$|\vec{g}| = 2k_F, \quad (2.42)$$

so kommt es in dieser Richtung zu Umklappprozessen und der Bildung einer Bandlücke. Im Fall von Fermi-Kreisen kann diese Beziehung aber immer nur für genau zwei gegenüberliegende Punkte gelten, sodass sich die Bandlücke global überhaupt nicht bemerkbar macht. Ist die Fermi-Fläche jedoch anisotrop und die Kreise an den Seiten abgeflacht, kann es Bereiche aus parallel zueinander verlaufenden Linien geben. Für alle Zustände die darin enthalten sind wird dann Gleichung 2.42 erfüllt und es kommt zum vollständigen Fermi-Nesting.

In den Kapiteln 2.7 und 4.5 wird die experimentelle Realisierung des Fermi-Nesting am Pb/-Si(557) System noch tiefer gehend erläutert.

2.4 Der Rashba-Effekt

Im Festkörper bewegen sich die Ladungsträger nach bestimmten Symmetrien. So ist die Energie eines Elektrons unabhängig davon ob es in Vorwärts- oder Rückwärtsrichtung läuft. Dieses Argument der *Rauminversionssymmetrie* wird durch die Gleichung:

$E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \uparrow)$ ausgedrückt. Der Pfeil symbolisiert dabei die Spinausrichtung relativ zu einer vorgegebenen Quantisierungsrichtung. Demnach kann der Spin des Elektrons nach oben oder unten weisen. Ebenso gilt üblicherweise auch die *Zeit inversionssymmetrie* (engl.: *Time Reversal Symmetry*, TRS), die besagt, dass ein Teilchen mit *Spin-up* die gleiche Energie besitzt wie ein entgegengesetzt laufendes Teilchen mit *Spin-down*: $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$ ⁵. Daraus folgt aber sofort, dass Zustände mit entgegengesetztem Spin energetisch entartet sind: $E(\vec{k}, \uparrow) = E(\vec{k}, \downarrow)$. Wenn eine der beiden Symmetrien aufgehoben ist, so kann es zu einer Spinaufspaltung der Zustände kommen. Die Rauminversionssymmetrie ist in Kristallen ohne Inversionszentrum verletzt, so z.B. bei der Zinkblende Struktur, bei der dieser Effekt bereits 1955 von *Dresselhaus* untersucht wurde [60].

Bei zentrosymmetrischen Kristallen ist die Inversionssymmetrie an der Oberfläche gebrochen. In diesem Fall spricht man vom *Rashba-Bychkov Effekt* oder kurz *Rashba-Effekt* [22, 61]. Die Terminierung des Volumens durch die Oberfläche führt zur Ausbildung eines Potentialgradienten senkrecht zur Oberfläche, der auf die Elektronen in den Bändern wirkt. Im ruhenden Bezugssystem der Elektronen transformiert sich dieses elektrische Feld in ein effektives Magnetfeld. Der Zeeman-Effekt separiert die Bänder mit unterschiedlicher Spinorientierung energetisch vonein-

⁵Zustände die durch die Zeitinversionssymmetrie miteinander verknüpft sind werden Kramers Paare genannt [59, Kap. 6], siehe dazu auch Kap. 2.5

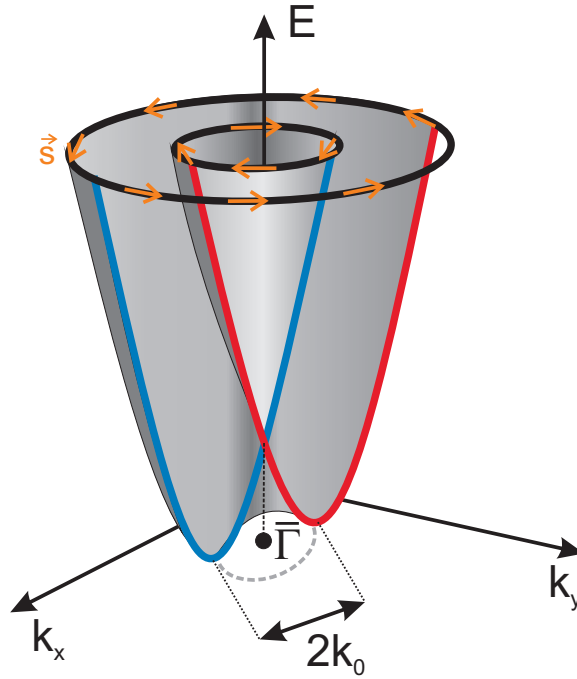


Abbildung 2.11.: Verschiebung der Elektronenparabeln der spinpolarisierten Bänder durch den Rashba-Effekt um $\pm k_0$, symmetrisch um $\bar{\Gamma}$. Dadurch entsteht ein Rotationsparaboloid. (Nach [23])

ander. Dieser Aufspaltungseffekt ist umso stärker, je schneller sich das Elektron bewegt, während die Aufspaltung für Teilchen ohne Impuls (also am Γ -Punkt) verschwindet [62]. Das magnetische Feld ist nach der Lorentz-Transformation des Feldes E_z gegeben durch $B = (v_{||}/c^2)E_z$, hiermit ergeben sich Magnetfelder in der Größenordnung von $2 - 20 \times 10^{-7} T$. Die Zeeman-Aufspaltung berechnet sich damit zu etwa $10^{-8} - 10^{-4} \text{ meV}$, wobei experimentell Werte zwischen 0,1 und 10 meV gefunden werden. Die Diskrepanz kann jedoch auf die Wechselwirkung der Wellenfunktionen mit dem elektrischen Feld der Kerne zurückgeführt werden [59, Kap. 6]. Durch die Wechselwirkung mit den Kernen ist die Spin-Bahn Aufspaltung damit auch von der Kernmassenzahl Z abhängig und umso stärker, je größer Z ist.

Der Hamilton-Operator unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung schreibt sich folgendermaßen:

$$H = H_0 + H_{\text{RB}}, \quad H_0 = E_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2, \quad H_{\text{RB}} = -\frac{\hbar^2}{4m^*c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (2.43)$$

Wobei E_0 das Energieminimum der Energieparabel, m^* die effektive Elektronenmasse, $\vec{\nabla}V$ der Potentialgradient an der Oberfläche und $\vec{\sigma}$ ein Vektor mit Pauli-Matrizen in seinen Komponenten ist [62, 63]. Die Lösung der Eigenwertgleichung liefert nun zwei Werte für die Energie, abhängig vom sogenannten *Rashba-Parameter* α_{RB} :

$$E_{\pm}(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \pm \alpha_{\text{RB}} |\vec{k}|, \quad \alpha_{\text{RB}} = \frac{\hbar^2 k_0}{m^*} \quad (2.44)$$

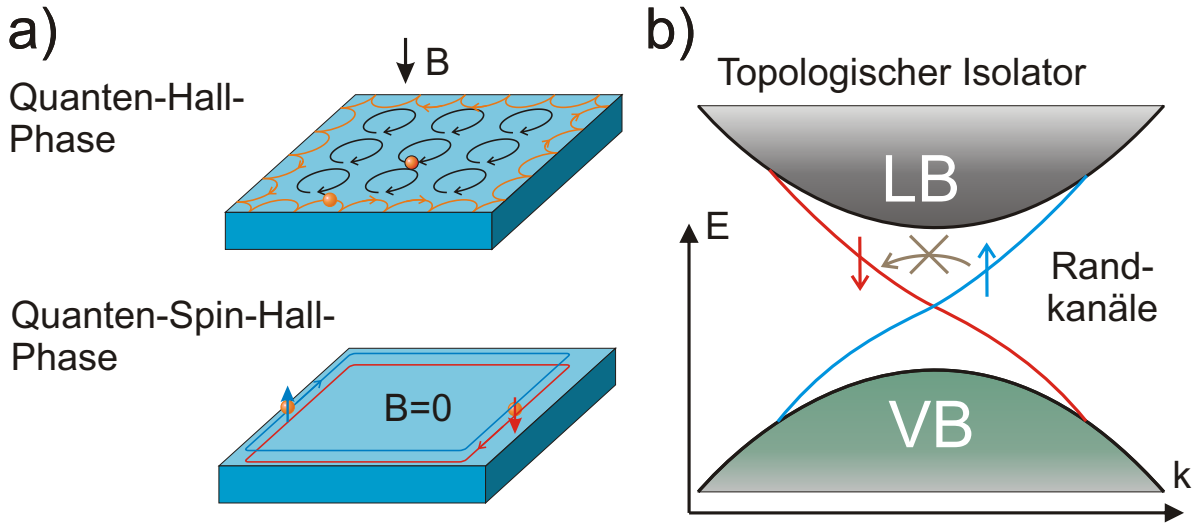


Abbildung 2.12.: a) Vergleich zwischen QHE- und QSHE-Phase. Im ersten Fall bilden sich mit Magnetfeld Randkanäle aus, bei der QSHE erzeugt die Spin-Bahn-Wechselwirkung spinpolarisierte Randkanäle. b) Schematische Darstellung der Bandstruktur eines TI mit ungerader Anzahl Kreuzungspunkte der Randzustände (hier 1).

und die Wellenfunktion:

$$|\vec{k}, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i(\varphi \pm \pi/2)}, 1), \quad \varphi = \arctan k_y/k_x \quad (2.45)$$

Diese beiden Zustände weisen also eine Aufspaltung ihrer Energiewerte, abhängig vom Betrag des Impulses auf, sodass die Energieparabeln entlang der k -Achse um den Betrag k_0 , jeweils in entgegengesetzte Richtungen verschoben werden. Für ein zweidimensionales elektronisches System, wie etwa der eines Oberflächenzustandes passiert diese Verschiebung isotrop in alle $k_{||}$ -Richtungen, sodass letztlich ein Rotationsparaboloid entsteht wie er in Abb. 2.11 zu sehen ist. Am Γ -Punkt bleibt die Entartung wie oben gefordert erhalten, für alle anderen k -Werte aber nicht. Bei konstanter Bindungsenergie betrachtet, erkennt man also zwei konzentrische Kreise um Γ , anstatt einem im spinentarteten Fall. Die beiden Kreise weisen eine entgegengesetzte Rotation der Spinausrichtung auf (orange farbene Pfeile in der Abbildung).

Effekte die durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung induziert werden, wie der Rashba-Effekt, werden uns bei der Diskussion der Ergebnisse noch in vielerlei Hinsicht beschäftigen. So zeigen sowohl Monolagen Pb auf Si(557), als auch Bi-Filme auf Si(111) eine starke Rashba-Aufspaltung. Dies wirkt sich bei beiden Materialien auf die Magnetotransporteigenschaften aus (Kap.4, 5) und im Fall von Pb/Si(557) kann mit Hilfe von Photoelektronenspektroskopie die Aufspaltung direkt nachgewiesen werden (Vgl. Kap. 4.5).

2.5 Topologische Isolatoren - Unterdrückte Rückstreuung

Topologische Isolatoren (TI) sind Materialien, dessen Volumen isolierend ist, während auf seiner Oberfläche, bzw. in 2D an seinen Rändern, metallische Zustände existieren. Diese Zustände

sind spinaufgespalten. TI bestehen oft, aber nicht ausschließlich, aus Verbindungen mit Bismut, so z.B.: Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , HgTe , etc.

Eine Quanten-Spin-Hall-Effekt-Phase (QSHE) ist die einfachste Realisierung eines 2D-TI. Sie ist in Abb. 2.12 a) zum Vergleich mit einer Quanten-Halleffekt-Phase (QHE) gezeigt. Beim Quanten-Halleffekt bewegt sich ein Elektron in einem magnetischen Feld kreisförmig mit dem Larmor-Radius und befindet sich energetisch auf Landau-Niveaus. Der Umlaufsinn wird durch die Richtung des Magnetfeldes bestimmt. Die Hall-Leitfähigkeit dieser Phase wird gegeben durch die Anzahl an propagierenden Moden/Anzahl der Landau-Niveaus n , welches eine ganze Zahl ist und als topologische Konstante bezeichnet wird. Nur am Rand können die Ladungsträger durch Streuung und Reflexion an der Oberfläche propagieren [64]. Im Zentrum werden die Ladungsträger durch das starke Magnetfeld auf Kreisbahnen gezwungen und bilden so einen isolierenden Zustand.

In der QSHE-Phase bewegen sich Elektronen mit unterschiedlichem Spin in entgegengesetztem Umlaufsinn. Auch ohne Magnetfeld befinden sich beide spinpolarisierten Randkanäle in einem Quanten-Hall-Regime. Zur Bildung des QSHE und eines TI ist die Anwesenheit starker Spin-Bahn Aufspaltung eine wesentliche Notwendigkeit. Diese bricht die TR-Symmetrie nicht, lässt die Elektronen mit ausgezeichnetem Spin aber ein effektives Magnetfeld spüren, welches sie in den topologischen Zustand versetzt [24, 65]. Der Begriff Topologie bezieht sich auf die Eigenschaften der Bandstruktur solcher Materialien. Wie die Abbildung b) zeigt, verbinden die Randkanäle jeweils das Leitungs- und Valenzband des Isolators miteinander und kreuzen sich am sogenannten Dirac-Punkt. Anders als bei Graphen existiert bei TI aber eine ungerade Zahl an solchen Punkten und die Zustände sind wie oben erwähnt spinpolarisiert.

Eine Eigenschaft der Randkanäle ist von besonderer Wichtigkeit für die Diskussion der später vorgestellten Versuchsergebnisse, die in gewissem Umfang mit TI in Relation gesetzt werden. Durch die TR-Symmetrie miteinander verbundene Zustände, mit Energie $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$, sind orthogonal zueinander und werden als Kramers Paar bezeichnet. Diese Eigenschaft kann man mit der folgenden Überlegung einsehen: Seien $|\Psi\rangle$ und $|\Phi\rangle$ die Wellenfunktionen eines solchen Zustandspaares und T der Zeitumkehroperator, sodass

$$|\Psi\rangle = T |\Phi\rangle.$$

Mit der Eigenschaft für Fermionen, dass für T gilt: $T^2 = -1$, erhält man unter der Annahme eines Zeitumkehr invarianten Hamiltonoperators ($H = TH$) die folgende Beziehung: [66, 67, 68]

$$\langle \Psi | H | \Phi \rangle = \langle \Phi | H | \Psi \rangle^* = \langle T \Phi | TH | \Psi \rangle = \langle \Psi | HT | \Phi \rangle = \langle \Psi | HT^2 | \Phi \rangle = - \langle \Psi | H | \Phi \rangle = 0.$$

Der Überlapp beider Wellenfunktionen verschwindet also. Das bedeutet aber, dass die Rückstreuung ($(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (-\vec{k}, \downarrow)$), also Streuung mit Streuwinkel 180° , aufgrund der Zeitumkehrinvarianz verboten ist. Aus diesem Grund sind die metallischen Randkanäle von TI besonders gute Leiter und gegenüber Störungen und Defekten sehr robust. Man sagt, sie sind topologisch geschützt [69]. In gewisser Hinsicht ist die Oberfläche von Bismutfilmen sehr ähnlich zu denen von TI, hier gibt es ebenso spinpolarisierte Oberflächenbänder, die aber vom Rashba-Effekt hervorgerufen werden. Nur unter bestimmten Bedingungen wird die Unterdrückung der Rückstreuung in TI aufgehoben. Wie in Kapitel 5.4 besprochen wird, kann die Einbringung magnetischer Störstellen die TR-Symmetrie lokal brechen und die Rückstreuung in TI erhöhen. In diesem Kapitel wird auch ein Vergleich mit den an Bi-Filmen erhaltenen Daten durchgeführt.

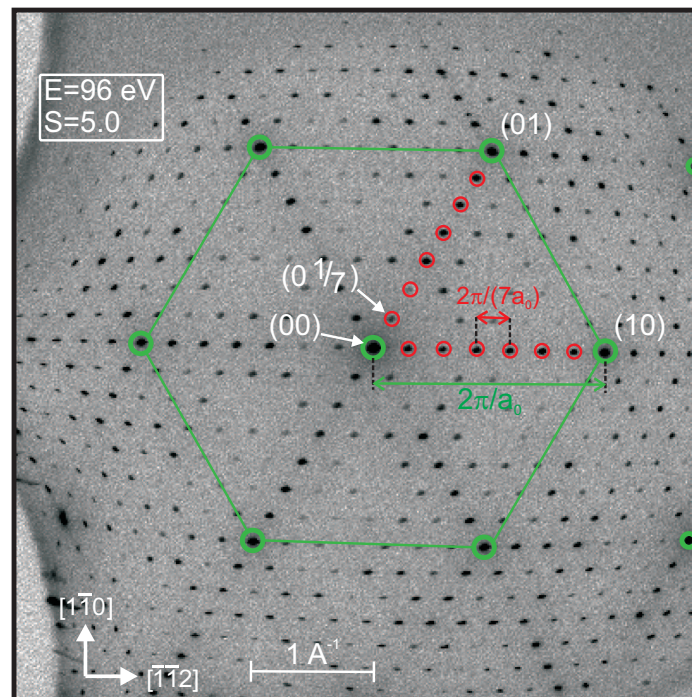


Abbildung 2.13.: LEED-Muster einer atomar reinen Si(111)-Fläche nach wiederholtem Heizen auf 1100 °C. Neben der 1×1 -Zelle (grün) erkennt man zwischen den Hauptreflexen in jeder Richtung sechs Beugungsreflexe (rot-orange), die von der 7×7 -Überstruktur herrühren. ($E=96 \text{ eV}$, $S=5.0$)

Wie in Kapitel 4.5 diskutiert werden wird, ist die Rückstreuung zwischen Kramers Paaren auch bei Anwesenheit starker Elektron-Elektron-Wechselwirkung möglich. Hier ist die Annahme eines unter Zeitinversion invarianten Hamiltonoperators nicht mehr ohne weiteres gültig und Kramers Paare demnach nicht mehr orthogonal. So werden SARPEs-Messungen an Pb-Ketten auf Si(557) mit Hilfe von linear polarisierten Spindichtewellen erklärt, die eine solche Rückstreuung erfordern.

2.6 Si(111) und Si(557)

Zur Präparation der hier untersuchten metallischen Nanostrukturen wurde als Substrat einerseits Si(111), andererseits die davon abgeleitete Fläche Si(557) verwendet. Da Silizium in der Diamantstruktur kristallisiert weist die $[111]$ -Fläche die dichteste Kugelpackung mit einer hexagonalen Symmetrie auf. Die Si-Gitterkonstante beträgt $a_{\text{Si, Volumen}} = 5.43 \text{ \AA}$. Jedoch kommt es aufgrund der Terminierung des Volumenkristalls an der Oberfläche zur Bildung von freien Bindungen, sogenannten *dangling bonds*. Diese müssen in einen energetisch günstigeren Zustand relaxieren, sodass es zur Umstrukturierung der oberflächennahen Schichten und damit zur Bildung von Überstrukturen kommt. Die dabei zu bevorzugende, weil energetisch stabilste, ist die 7×7 -Rekonstruktion mit 49 Atomen in der 2D-Einheitszelle. Das *DAS-Modell* [70] (*Dimer Adatom Stacking-Fault Model*) ist weitgehend akzeptiert als Strukturmodell für die 7×7 Rekonstruktion. Die rhomboedrische Einheitszelle besteht aus zwei Hälften, in einer der beiden sind

die oberen zwei Atomlagen wie im Volumen, in der anderen Hälfte jedoch in Wurzitstruktur angeordnet[71]. Entlang der Domänenwände bilden sich jeweils drei Dimere aus (9 pro Einheitszelle). Zur weiteren Reduzierung der Anzahl an *dangling bonds* sitzen an bestimmten Stellen Adatome (12 pro Einheitszelle) zentrisch über je drei Siliziumatomen der obersten Lage.

Obwohl diese Konfiguration energetisch günstig ist, lässt sie sich nicht einfach erzeugen. Von überaus großer Bedeutung ist die atomare Reinheit der Oberfläche, die keinerlei Fremdatome duldet. Daher kann sie nur unter Ultrahochvakuum-Bedingungen erzeugt werden. Nach dem Überschreiten einer Aktivierungsenergie, etwa durch die Erwärmung des Materials auf $T > 1000^\circ \text{C}$ sind die Si-Atome so mobil, dass sie in die entsprechenden Plätze rutschen können.

Abbildung 2.13 zeigt das Beugungsbild einer atomar reinen Si(111)-Fläche, nach der in Kap. 3.1.2 beschriebenen Präparation. Es hat sich eine 7×7 -Überstruktur ausgebildet. In grün erkennt man die 1×1 -Einheitszelle des Silizium mit Vektoren der Länge $k = \frac{2\pi}{a_{\text{Si}}} = 1,89 \text{ \AA}^{-1}$, dies entspricht 100% *Surface Brillouin Zone* (% SBZ oder kurz % BZ). Entsprechend einem Silizium-Reihenabstand $a_{\text{Si}} = 3,325 \text{ \AA}$, dieser ergibt sich aus der Siliziumgitterkonstante der (111)-Oberfläche von $a'_{\text{Si}} = 3,84 \text{ \AA}$ mittels $a_{\text{Si}} = \cos(30^\circ) \cdot a'_{\text{Si}}$. In rot-orange sind beispielhaft die Positionen der von der 7×7 -Rekonstruktion stammenden Reflexe markiert. Sie haben dementsprechend einen Abstand von 14.3% BZ zueinander. Die Si(111)-Fläche ist isotrop, das heißt in allen drei Hauptkristallrichtungen (äquivalent zu $[1\bar{1}0]$ -Richtung) gleich.

Si(557) ist eine vizinale Si(111) Fläche und damit anisotrop. Man erhält sie, indem man den Kristall relativ zur $[111]$ um $9,45^\circ$ in Richtung $[\bar{1}\bar{1}2]$ einschneidet. Dabei würde man erwarten, dass die so entstandene Oberfläche eine homogene Stufenfolge mit entsprechenden Stufenhöhen und -breiten aufweist ($5\frac{2}{3} a_{\text{Si}}$ breite Terrassen mit einatomiger Stufenhöhe)⁶. Jedoch konnte gezeigt werden, dass dies nicht der Fall ist. Vielmehr besteht die Fläche aus $9 a_{\text{Si}}$ breiten Si(111) Terrassen, getrennt durch $2\frac{2}{3} a_{\text{Si}}$ Dreifachstufen [72] (siehe Abb.2.14 a)). Diese sind so schmal, dass sie auch als eine Facette aufgefasst werden können, die dann eine $[112]$ -Ausrichtung hat, wobei *Henzler et al.* auf der atomar sauberen Si(557) Fläche (113)-Facetten identifizieren konnten [74]. Jedoch besteht kein Zweifel an der inhomogenen Stufung, sodass senkrecht zu den Stufen eine Überstruktur mit der 17-fachen Länge des Silizium-Reihenabstandes $17a_{\text{Si}} = 5,7 \text{ nm}$ vorhanden ist. Obwohl eine solche Oberfläche *per se*, gegenüber einer homogenen Stufung, energetisch benachteiligt ist, kommt sie durch die Ausbildung der 7×7 -Überstruktur auf den (111)-Terrassen dennoch zu Stande und wird durch sie stabilisiert. Der dadurch bedingte Energiegewinn ist größer, als der Verlust durch die ungünstige Stufung.

Abbildung 2.15 a) zeigt das entsprechende Elektronenbeugungsbild einer Si(557)-Oberfläche. Zunächst erkennt man Ähnlichkeiten zum Si(111)-Muster (Vgl. Abb. 2.13). Zum einen ist dies die 1×1 -Zelle (grün), sowie die 7×7 Überstruktur zwischen den Hauptreflexen (rot-orange). Letztere entstammen den Si(111)-Terrassen, auf denen sich die bereits von der planaren Fläche bekannte Rekonstruktion bildet. Im Vergleich zur (111)-Fläche sind nun alle Spots in $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung, d. h. senkrecht zu den Stufen, verbreitert. Dies liegt daran, dass die Bereiche auf der Oberfläche, in denen die Elektronenwellen kohärent miteinander wechselwirken können durch die Terrassenbreite beschränkt wird. Die endliche Kristallausdehnung senkrecht zu den Stufen verursacht demnach eine Verbreiterung der Beugungsreflexe in dieser Richtung. Entlang der Stufen ist der Kristall

⁶Die Gitterkonstante von Si(111) ist $a'_{\text{Si}} = 3,84 \text{ \AA}$. In $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung, also senkrecht zu den Stufen ergibt sich der Reihenabstand zu $a_{\text{Si}} = a'_{\text{Si}} \cos 30^\circ = 3,325 \text{ \AA}$. Der Netzebenenabstand in $[111]$ -Richtung also die Stufenhöhe beträgt: $d_{\text{Si},(111)} = 3,135 \text{ \AA}$.

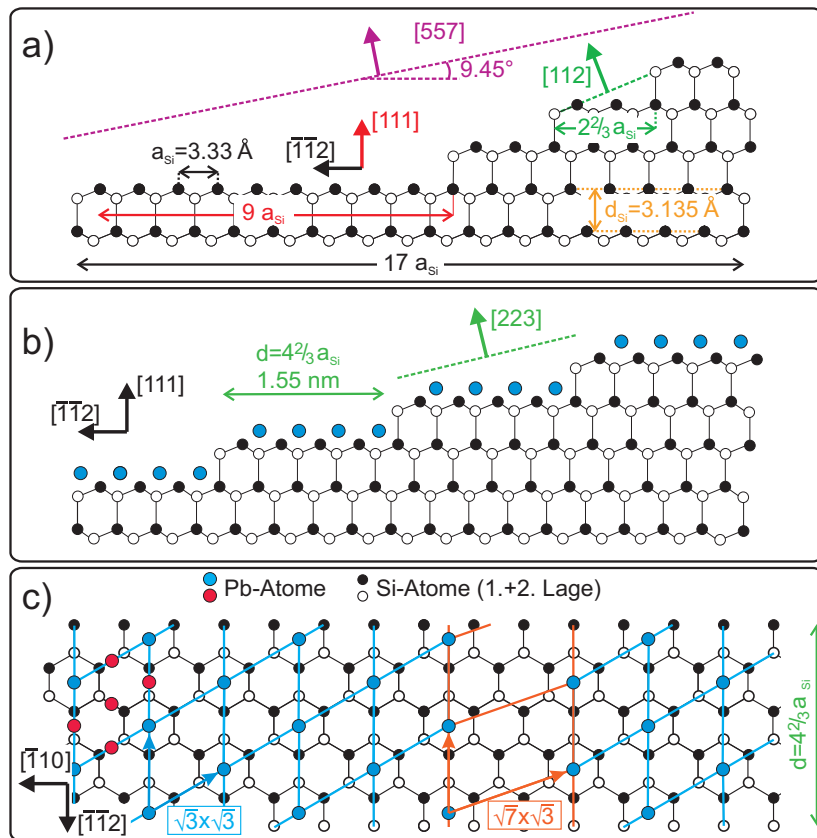


Abbildung 2.14.: a) Seitenansicht der Si(557) Struktur. $9a_{Si}$ breite (111) Terrassen sind durch dreifach Stufen getrennt, die gemeinsam eine (112) Facette bilden. Somit ergibt sich die $17a_{Si}$ -Periodizität senkrecht zu den Stufenkanten, also in $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung. Nach [72].

b) Nach Adsorption von 1.3 ML Pb ergibt sich eine homogene Stufung in [223]-Orientierung.

c) auf den Terrassen ordnet sich Pb in einer $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur an, pro $\sqrt{3}$ -Zelle hat man 4 Pb-Atome (in magenta nur exemplarisch gezeigt) pro 3 Silizium Atome. Bedeckungsabhängig existieren in bestimmten Abständen auch $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -Domänenwände. Nach [73].

auch weiterhin beinahe unendlich weit ausgedehnt, sodass die Reflexe in dieser Richtung ähnlich scharf sind wie im Fall der planaren Si(111)-Fläche. Weiter erkennt man noch die in magenta markierten Punkte in a). In äquidistantem Abstand von $1/17$ der Distanz zwischen zwei Hauptreflexen (z.B. (00) und (10)) findet man 16 dieser Punkte. Sie entsprechen also der 17-fachen Periodizität der Gitterkonstanten der Oberfläche, senkrecht zu den Stufen (siehe Abb. 2.14 a)). Ein Linienprofil zwischen zwei Hauptreflexen, angedeutet durch die magentafarbene Linie in 2.15 a) ist in 2.15 b) gezeigt. Hier kann man die äquidistante Anordnung der Stufenreflexe (auch als *steptrain* bezeichnet) an den schwarzen Pfeilen leicht ausmachen. Zusätzlich erkennt man in dem Linienprofil noch weitere kleinere Maxima (durch graue Pfeile markiert), die von anderen Facetten der Oberfläche, etwa der (112) oder (113)-Facette stammen. Von ihrer Position aber passen sie nicht in den (557)-*steptrain* hinein und können so von diesen unterschieden werden.

Trägt man für viele Energien die Intensitäten der Linienprofile in einem k_{\perp} - k_{\parallel} -Plot auf, so

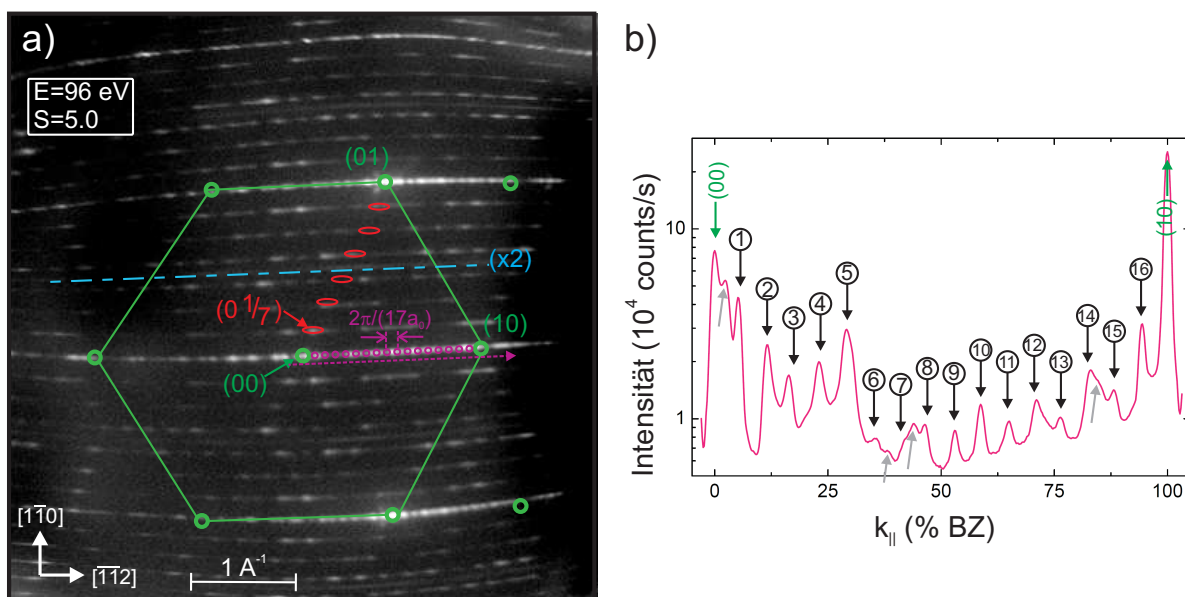


Abbildung 2.15.: a) LEED-Muster einer atomar reinen Si(557) Oberfläche nach mehrmaligem Heizen auf 1100 °C. Ähnlich wie bei Si(111) beobachtet man auch die 1×1 -Zelle, sowie die 7×7 -Überstruktur. Zusätzlich sind jetzt aber alle Reflexe in $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung verbreitert. Aufgrund der 17-fachen Periodizität der Fläche senkrecht zu den Stufen erhält man nun zwischen den Hauptreflexen 16 zusätzliche Reflexe im Abstand $\frac{1}{17} \cdot \frac{2\pi}{a_{\text{Si}}}$ (magenta). Dimerisationen an den Stufenkanten zeigen sich in $\times 2$ -Linien (hellblau). b) Ein Linienprofil entlang der gestrichelten magentafarbenen Linie in a) verdeutlicht die $17a_{\text{Si}}$ -Überstruktur. (E=96 eV, S=5.0)

ergeben sich die Bragg-Stangen der Oberfläche wie in Abb. 2.16 gezeigt. Neben den Stangen der $[557]$ -Orientierung existieren auch noch $[113]$ - und $[559]$ -Facetten (letztere entspricht beinahe der erwarteten $[112]$), die die Stangen der $[111]$ -Orientierung jeweils unter anderen Winkeln schneiden.

Ein weiteres Merkmal des Beugungsbildes sind die linienartigen Intensitäten (hellblau gestrichelt) genau in der Mitte zwischen den Linien, welche durch die Hauptreflexe definiert sind. Dabei handelt es sich um eine 2×1 Überstruktur (also einer Periodenlänge von $2a'_{\text{Si}} = 7.68 \text{ \AA}$), die durch eine Dimerisation von Si-Atomen an den Stufenkanten hervorgerufen wird. Da die Stufenkanten untereinander nicht korreliert sind, sind diese Reflexe in k_{\perp} -Richtung stark verbreitert und erscheinen als Linie.

Wie in nachfolgenden Kapiteln gezeigt werden wird, kann man dieses anisotrope Substrat für das selbstorganisierte Wachstum metallischer Quantendrahtsysteme wie z.B. Pb/Si(557) nutzen (siehe Kap. 2.7 und 4).

2.7 Blei – Eigenschaften – Der 1D-2D-Phasenübergang

Ein Teil der Arbeit befasst sich mit der Untersuchung von Blei-Nanodrähten und Dünnschichten auf gestuftem (vizinalem) Silizium (111), genauer Si(557). Dabei von besonderem Interesse,

und eine lineare Abnahme der kritischen Temperatur T_c und der supraleitenden Energielücke Δ vom Inversen der Schichtdicke gefunden [80].

Interessant ist nun die Einschränkung des Pb/Si-Systems in einer lateralen Richtung durch die Präparation der Schichten auf dem gestuften Si(557)-Substrat. Wie gezeigt wurde, führt die Adsorption von Pb auf Si(557) mit anschließendem Heizen auf 640 K, zur Umstrukturierung der in Abb. 2.14 a) gezeigten Stufen, derart, dass nun eine homogene Stufenfolge vorhanden ist. Abb. 2.14 b) zeigt die Situation für eine physikalische Monolage Pb. Die Pb-Atome sitzen auf $4\frac{2}{3} a_{Si}$ breiten Terrassen, getrennt von einatomigen Stufen. Dies entspricht einer (223)-Orientierung, die makroskopisch der (557), durch anders orientierte große Facetten, angeglichen wird [14, 81, 82]. Auf den Terrassen der (223)-Stufen ordnen sich die Pb-Atome in einer $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur an (Abb. 2.14 c). Wie in Magenta nur exemplarisch gezeigt ist, befinden sich vier Pb-Atome, jedoch nur drei Si-Atome (schwarz, gefüllte Kreise) der obersten Lage in einer $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Einheitszelle. Daher spricht man bei dieser Bedeckung einer physikalischen Monolage auch von $4/3=1.33$ Monolagen bezogen auf die oberste Siliziumlage.

Die Bereiche perfekt angeordneter $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Einheiten - sogenannte Domänen - sind von Domänenwänden, bestehend aus $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -Einheiten (orangefarbene Linien in c), getrennt. In den Domänenwänden beträgt die Dichte sechs Pb-Atome auf $\sqrt{21}$ Silizium-Atome, sodass die Bedeckung also mit $\theta=1.20$ angegeben werden kann.

Durch die hohe Mobilität der Pb-Atome auf der Oberfläche versucht das System immer diese Dichteunterschiede auszugleichen. Fügt man nun geringste Mengen Pb hinzu oder entfernt es hypothetisch von der Oberfläche, so werden die Domänenwände sich entsprechend so verschieben, dass im Mittel ihr Abstand überall gleich ist. Weniger Blei führt zu größeren, mehr Blei zu kleineren Abständen. Dies geht so lange weiter, bis die Fläche maximal dicht mit $\sqrt{3}$ -Einheiten bedeckt ist und der Abstand der Domänenwände unendlich groß wird. Diese *Devil's Staircase* resultiert in einer Abfolge aus n $\sqrt{3}$ - und m $\sqrt{7}$ -Einheiten und werden lineare Phasen (n,m) genannt, denen man exakte Bedeckungswerte zuweisen kann. Für θ gilt: $\theta = \frac{n \cdot 1.33 + m \cdot 1.20}{n+m}$. So entspricht die in Abb.2.14 c) gezeigte Struktur einer (5,1)-Phase mit einer Bedeckung $\theta = 1/6 \cdot (5 \cdot 1.33 + 1 \cdot 1.20) \text{ ML} = 1.308 \text{ ML}$. Die (4,1) hätte eine Bedeckung von 1.304 ML. Durch Messung der Wandabstände kann man θ so überaus exakt bestimmen. Wie *Yakes et. al* zeigten, bietet hierfür die Elektronenbeugung mit Hilfe des SPA-LEED eine hervorragende Möglichkeit. Durch die von den Domänenwänden definierte Periodizität ergibt sich eine Aufspaltung der $\sqrt{3}$ -Beugungsreflexe, die sich in einem großen Bedeckungsbereich um 1.3 ML herum, antiproportional zur Periodenlänge verhält. Somit beobachtet man für Pb/Si(111) dreieckig aufgespaltene Reflexe (entsprechend den 3 äquivalenten [110]-Richtungen der $\sqrt{3}$ -Struktur [83]).

Auf der anisotropen Pb/Si(557)-Fläche werden zwei dieser Aufspaltungen unterdrückt, sodass sich nur entlang der Terrassen die perfekte Ordnung der linearen Phase ausbildet und so auch im SPA-LEED die $\sqrt{3}$ -Reflexe entsprechend entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung aufgespalten sind [82]. Abb. 2.17 zeigt das Beugungsbild der 1.31 ML Pb/Si(557)-Phase. Die *steptain*-Reflexe der Si(557) sind durch vier Reflexe im Abstand von 21.4% SBZ ersetzt. Die Fläche besteht wie oben gesagt, aus (223)-Facetten mit einer Stufenbreite von $4\frac{2}{3} a_{Si}$. Die $\sqrt{3}$ -Reflexe zeigen eine Aufspaltung von 10% SBZ und ermöglichen eine genaue Bedeckungskalibrierung im Prozentbereich einer Monolage.

Obgleich eine Vielzahl an möglichen Bedeckungen und auch Stufenstrukturen für Pb/Si(557) existieren, nimmt die in Abb. 2.14 b) und c) gezeigte Struktur mit der physikalischen Monolage

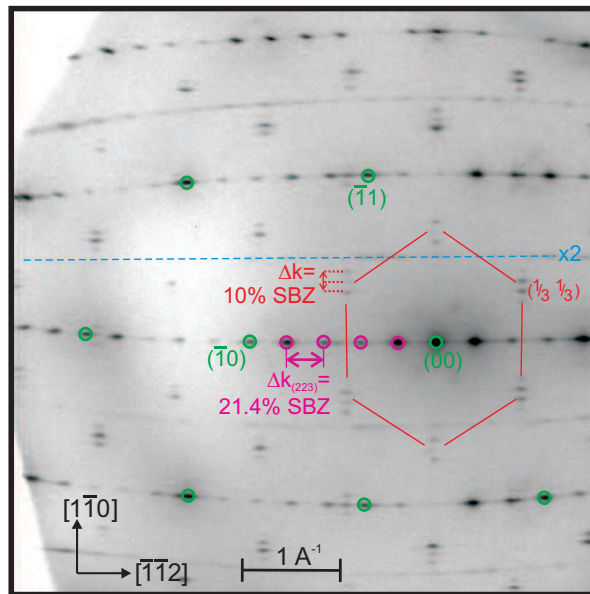


Abbildung 2.17.: SPA-LEED Bild der 1.31 ML oder (5,1)-Phase. Zwischen dem (00) und $(\bar{1}0)$ sind nun 4 statt 16 Spots mit Abstand $1/((4\frac{2}{3}))=21.4\%$ SBZ. Dies entspricht einer (223)-Facette. Die $\sqrt{3}$ -Reflexe sind durch die Domänenperiodizität aufgespalten, $\Delta k=10\%$ SBZ. ($E=137$ eV, $S=6.0$)

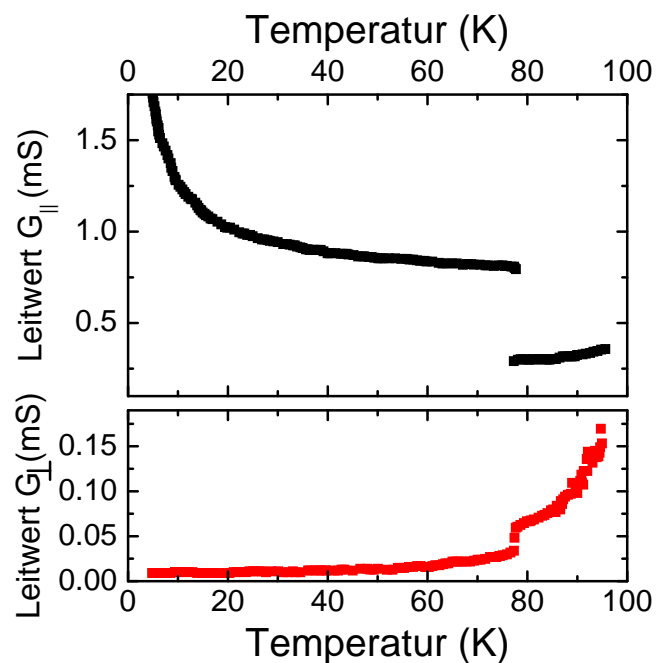


Abbildung 2.18.: Der 1D-2D Phasenübergang in der Leitfähigkeit von 1.31 ML Pb/Si(557). Unterhalb von 78 K ist das System nur entlang der Ketten leitfähig, darüber in beiden Richtungen [14].

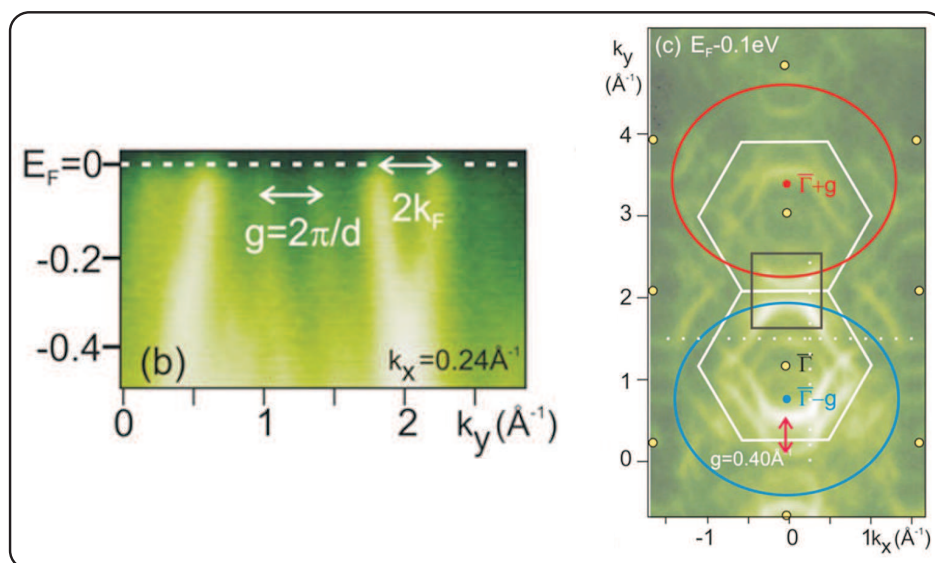


Abbildung 2.19.: Die Bandstruktur von 1.3 ML Pb/Si(557) gemessen mit ARPES [21]. **Links)** Dispersion in \vec{k}_\perp . Die parabolischen Bänder sind derart gefüllt, dass $g=2k_F$ gilt. **Rechts)** Zustandsdichtedarstellung 100 meV unterhalb der Fermi-Energie. Deformierte Kreise mit Abflachungen an den Seiten, verschoben um den reziproken Vektor $g = \frac{2\pi}{d}$, ermöglichen perfektes Fermi-Nesting und verursachen den isolierenden Zustand senkrecht zu den Pb-Ketten.

oder auch 1.31 Monolagen eine besondere Position ein und zeigt ganz spezielle Eigenschaften. In temperaturabhängigen Leitfähigkeitsmessungen in der hiesigen Arbeitsgruppe konnte ein 1D-2D Phasenübergang bei 78 K beobachtet werden [14, 81]. Unterhalb dieser Temperatur findet man metallische Leitung, also eine Abnahme der Leitfähigkeit mit steigender Temperatur, ausschließlich entlang der Pb-Nanodrähte auf den Terrassen, während man senkrecht dazu einen isolierenden Zustand hat. Erhöht man die Temperatur so wird bei $T=78$ K ein Leitfähigkeitssprung in beiden Messrichtungen beobachtet. Die parallele Leitfähigkeit fällt ab, während sie in Senkrechtichtung um Größenordnungen ansteigt, sodass sich beide in etwa auf gleichem Niveau befinden. Oberhalb der Sprungtemperatur⁷ ist das System also im Wesentlichen zweidimensional leitend. (siehe Abb. 2.18)

Zunächst ist das eindimensionale Verhalten unterhalb von 78 K aus naiver Sicht zu erwarten, da man ja schließlich Bleiketten auf den Terrassen hat, während die Stufenkanten nicht bedeckt sind und so benachbarte Drähte elektrisch isoliert sein sollten. Bei genauer Betrachtung ist das Problem allerdings deutlich komplexer.

ARPES-Untersuchungen an diesem System zeigten recht bald, dass aus elektronischer Sicht trotz der Stufen das System grundsätzlich zweidimensionale Eigenschaften aufweist [84, 21]. So besteht die Fermi-Fläche des Pb/Si(557), mit der oben erwähnten (223)-Stufenstruktur und einer Pb-Bedeckung um eine physikalische Monolage, in erster Linie aus kreisartigen Strukturen, die lediglich an den Seiten etwas abgeflacht sind (siehe Abb. 2.19 rechts). Der Einfluss der

⁷Nicht zu verwechseln mit der Sprungtemperatur bei Supraleitern.

regelmäßigen Stufung zeigt sich in Replica-Strukturen, also durch jeweils um einen Gittervektor

$$g = \frac{2\pi}{d}, \quad (\text{mit } d = 4\frac{2}{3}a_{\text{Si}}, \text{ dem Stufenabstand})$$

verschobene Kreise gleicher Größe in Richtung senkrecht zu den Stufen ($[\bar{1}\bar{1}2]$, auch als k_{\perp} bezeichnet). Die Pb-Phase mit $\theta = 1.31$ ML zeichnet sich nun noch zusätzlich dadurch aus, eine ganz bestimmte Füllung der Bänder, also eine spezielle Lage des Fermi-Niveaus zu haben. Und zwar genau so, dass der Fermi-Wellenvektor k_F halb so groß ist wie der Gittervektor g , um den die Parabeln in k_{\perp} verschoben sind (vgl. Abb. 2.19 links): $2k_F = g = \frac{2\pi}{d}$. Dies entspricht genau der Bedingung 2.42 für Fermi-Nesting. Die Elektronen am Rand der Brillouin-Zone werden also um den, durch die Stufenperiodizität definierten, reziproken Gittervektor zurück geklappt. Als Resultat dieser stehenden Elektronenwelle bildet sich eine Energielücke aus, die das System senkrecht zu den Stufen isolierend macht. Nach dem einfachen Modell des Peierls-Übergangs geht die elektronische Änderung auch mit einer strukturellen Änderung einher (siehe Kap. 2.3). Mit Hilfe von SPA-LEED Untersuchungen wurde auch dieser strukturelle Phasenübergang bei der Sprungtemperatur beobachtet und eine abrupte Änderung der Stufenausrichtung von der $[2\ 2\ 3]$ bei tiefen Temperaturen auf eine $[17\ 17\ 25]$ -Ausrichtung für $T > 78$ K identifiziert [85]. Durch die thermische Energie wird die halbleitende $[223]$ -Anordnung instabil und das System geht für höhere Temperaturen in die metallische zweidimensional leitende Phase über. Zur Diskussion der strukturellen Eigenschaften der Phasenübergangsbedeckung wird auf das spätere Kapitel 4.3 verwiesen.

2.8 Bismut – Eigenschaften

Seit vielen Jahren ist Bismut ein gut untersuchtes Element und hat auf Grund seiner Vielzahl interessanter Eigenschaften die Aufmerksamkeit vieler Wissenschaftler beansprucht. Es existieren eine Reihe herausragender Abhandlungen über die strukturellen und elektronischen Eigenschaften von Bismut [86, 87, 88, 89]. Dabei hervor zu heben ist jedoch der Übersichtsartikel von Hofmann [25]. Dieser bietet einen weiten Überblick über die wichtigsten niedrig indizierten Kristallflächen von Bismut, deren Eigenschaften und den Stand der wissenschaftlichen Erkenntnis. Im Wesentlichen werde ich mich im Folgenden an dieser Veröffentlichung orientieren und die Aspekte, die für die vorliegende Arbeit von besonderem Interesse sind heraus stellen.

2.8.1. Eigenschaften des Bi-Volumens

Als Element der fünften Hauptgruppe mit Ordnungszahl 83 zählt Bismut ähnlich wie Blei zu den Schwermetallen. Aufgrund seiner energetisch überlappenden Leitungs- und Valenzbandes an unterschiedlichen Symmetriepunkten des reziproken Raumes nimmt Bismut halbmetallische Eigenschaften an und besitzt, bedingt durch entgegengesetzte Bandkrümmungen, sowohl Elektronen als auch Löcher, die den elektronischen Transport gewährleisten. Auch wegen seiner überaus großen Fermi-Wellenlänge von 120 \AA , die Einflüsse der Oberflächenbeschaffenheit vermindert, konnten erstmals, in den 60er Jahren des letzten Jahrhunderts, Quanten Size Effekte an Bismutschichten untersucht und nachgewiesen werden [86, 90]. Dabei fand man, abhängig von der Bismutschichtdicke, Oszillationen des Gleichstromwiderstandes, sowie des Hall- und Magnetowiderstandes. Diese sind auf die Diskretisierung in z-Richtung und die damit verbundene

Änderung der Zustandsdichte am Fermi-Niveau, abhängig von der Schichtdicke, zurück zu führen.

Kristallographisch ordnet man Bismut den rhomboedrischen Kristallen zu, es weist nach dem Strukturbericht eine sogenannte A7 Struktur auf [91], welche in Hermann-Mauguin Notation einer $R\bar{3}m$ Raumgruppe entspricht. Also einem Kristall mit dreizähliger Drehinversionsachse, sowie einer Spiegelebene [40, Kap 3.3],[92, Kap. 1.1]. Diese Symmetrie ist der kubischen sehr ähnlich, mit dem Unterschied, dass entlang der trigonalen Achse der Kristall gestreckt ist, und einige Atome damit nicht mehr in einer Ebene liegen und sich eine gekräuselte Bilagenstruktur (engl.: *puckered bilayer structure*) ergibt. Durch die Verzerrung entsteht aus der 6-zähligen hexagonalen Symmetrie (in der Ebene senkrecht zur trigonalen Achse) die oben erwähnte dreizählige. Abbildung 2.20 a) zeigt die Kristallstruktur von Bismut. Mit roten Vektoren ist die hexagonale

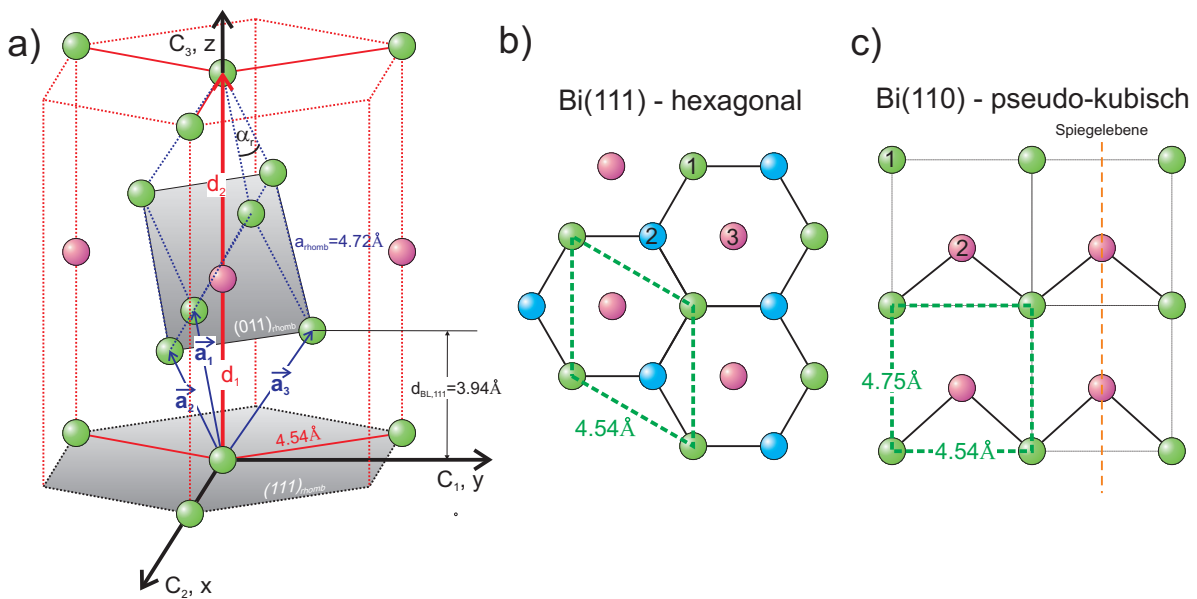


Abbildung 2.20.: a) Kristallstruktur von Bismut mit zwei unterschiedliche Basissystemen. Zum einen das hexagonale Gitter mit den in rot dargestellten Achsen. Zum anderen das rhomboedrische Kristallsystem mit zwei Atomen in der Basis (grün und violett), mit den Vektoren $\vec{a}_1 - \vec{a}_3$ (in dunkel blau), die einen Winkel von $\alpha_r = 57.35^\circ$ aufspannen. Zudem sind noch die Gitternetzebenen (111) und (011) in rhomboedrischer Basis grau schattiert dargestellt. b) Bi(111)-Fläche mit hexagonaler Symmetrie c) Bi(110)-Fläche mit pseudo-kubischer Anordnung der Atome. (Nach [25])

Basis gezeigt. Sie verbinden die Atome innerhalb einer $(100)_{\text{Hex}}$ -Ebene mit Abstand $a = 4.535 \text{ \AA}$, sowie entlang der c-Achse, zwei Atome mit Abstand $c = 11.814 \text{ \AA}$ (jeweils bei 78 K) [93]. Dies entspricht genau dem dreifachen des Bilagenabstandes von 3.94 \AA .

Die in der Literatur gebräuchlichere rhomboedrische Basis wird durch die Vektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 aufgespannt (Die Definition der Vektoren ist in Anhang A.1 zu finden). Sie bilden jeweils einen Winkel von $\alpha_r = 57.3^\circ$. Die Basis beinhaltet zwei Atome, eines am Koordinatenursprung (grün) und eines an der Position $(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3) \frac{d_1}{d_1 + d_2}$ (in violett), wobei das Längenverhältnis $\frac{d_1}{d_2} = 0.88$ beträgt und durch die Verzerrung entlang der c-Achse hervorgerufen wird. Auch in dieser Arbeit wird, wenn nicht ausdrücklich gekennzeichnet, die rhomboedrische Darstellung der

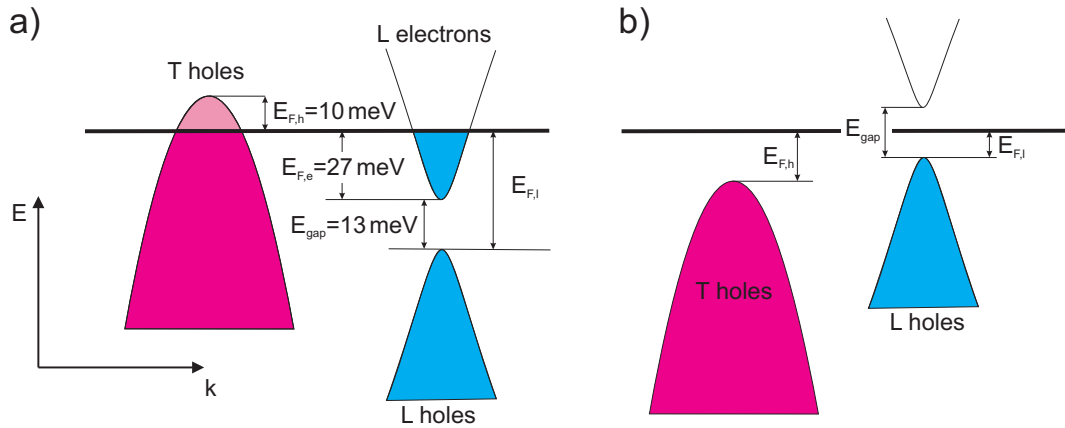


Abbildung 2.21.: Schematische Darstellung der Bismut-Bandstruktur. a) Für Volumen-Bismut mit überlappenden Valenz- und Leitungsband, die den halbmetallischen Charakter verursachen. Die angegebenen Größen $E_{F,e}$, $E_{F,l}$, $E_{F,h}$ und E_{gap} bezeichnen die Fermi-Energie der Elektronen am L Punkt, die Fermi-Energie der leichten Löcher bei L, sowie der schweren Löcher bei T und der Energielücke bei L (Nach [94]). b) Für Schichtdicken $\lesssim 30 \text{ nm}$ verschieben die Bänder relativ zueinander und eine fundamentale Bandlücke bei L in der Größenordnung von 10 meV öffnet sich – das Material ist halbleitend.

Ebenen verwendet. Für die später vorgestellten Messungen, sind die $(111)_{\text{rhom}}$ und $(110)_{\text{rhom}}$ Ebenen von besonderer Bedeutung und daher auch in Abb. 2.20b) und c) dargestellt. Die Bi(111) zeichnet sich durch eine hexagonale Symmetrie mit einer Gitterkonstanten von 4.54 \AA , also einem Reihenabstand von $\cos(30^\circ) \cdot 4.54 \text{ \AA} = 3.93 \text{ \AA}$ aus. Die Bi(110) ist rechteckig mit den zwei Gitterkonstanten 4.75 \AA und 4.54 \AA und wird deshalb als pseudo-kubisch bezeichnet. Die Atome der zweiten Lage befinden sich nicht in der Mitte der Einheitszelle, sondern sind leicht verschoben.

Die oben genannte Kristallverzerrung entlang der trigonalen Achse ist letztlich auch für den halbmetallischen Charakter verantwortlich. Dadurch beinhaltet die Einheitszelle zwei statt einem Atom mit jeweils 5 Valenzelektronen. In der unverzerrten kubischen Struktur würde man halb gefüllte Bänder, also metallisches Verhalten erwarten. 10 Elektronen pro Einheitszelle im verzerrten Fall liefert *per se* einen halbleitenden Zustand, mit komplett gefüllten Bändern. Jedoch ergibt das komplizierte Zusammenspiel aus Elektronenkonfiguration und Kristallsymmetrie, eine Überlappung von Valenz- und Leitungsband und folglich einen halbmetallischen Zustand [25, 94]. Diese Situation ist in Abb. 2.21 a) zu sehen. Das Valenz- und Leitungsband überlappen energetisch miteinander. Der Überlapp beträgt bei tiefen Temperaturen ($\approx 4 \text{ K}$) nur etwa 40 meV , wodurch auch extrem geringe Fermi-Energien von $E_{F,e} = 27.2 \text{ meV}$ und $E_{F,h} = 10.2 \text{ meV}$ resultiert. Für die Energielücke bei L gilt $E_{\text{gap}} = 13 \text{ meV}$ [94].

Es ergeben sich sehr kleine Elektronen- und Löchertaschen an hochsymmetrischen Punkten der Brillouin-Zone (siehe Abb. 2.22). Am T Punkt (auch Z Punkt [95] genannt) befindet sich die Löcher, an den L-Punkten sind Elektronentaschen zu finden. Deren Volumen relativ zum Brillouin-Zonenvolumen nur etwa 10^{-5} beträgt [94].

Für dünne Bismutschichten wurde schon früh ein Übergang vom halbmetallischen in einen halbleitenden Zustand, abhängig von der Schichtdicke, bei etwa $20\text{-}30 \text{ \AA}$, aufgrund von Quan-

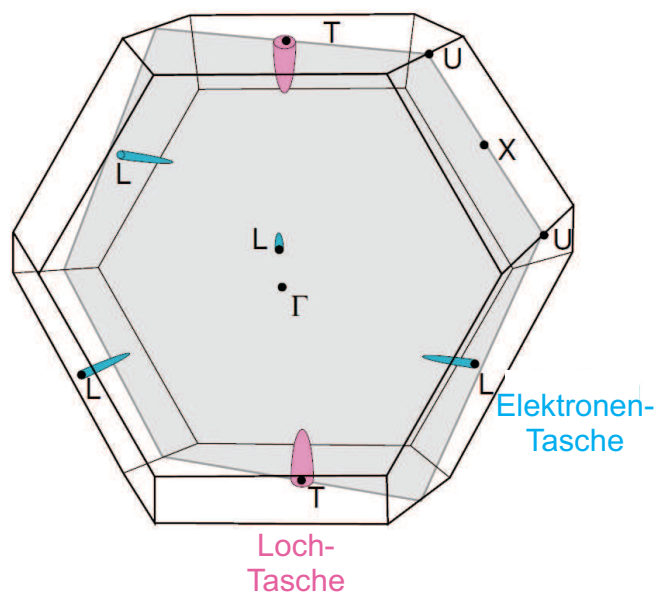


Abbildung 2.22.: Zu sehen sind die Elektronen- und Lochtaschen an den Hochsymmetriepunkten der rhomboedrischen Brillouin-Zone von Bismut. [25]

ten Size Effekten diskutiert und vorhergesagt [96, 97, 90]. Der Bandüberlapp würde für kleine Schichtdicken zu Gunsten einer Bandlücke aufgehoben. Dies ist vergleichbar mit dem *Teilchen im Kasten*-Problem, bei dem die Abstände der Energieniveaus abhängig von der Ausdehnung L des Kastens zueinander verschieben. Die Situation für dünne Bi-Filme ist in Abbildung 2.21 b) gezeigt. Die relative Verschiebung der Bänder öffnet eine direkte Bandlücke am L-Punkt. Lange Zeit konnte der vorhergesagte Halbmetall-Halbleiter-Übergang experimentell nicht nachgewiesen werden. Und wurde auch in jüngerer Vergangenheit kontrovers diskutiert [98, 99, 100]. Mittlerweile jedoch gibt es hinreichende Beispiele des experimentellen Nachweises [101, 102]. Wie im späteren noch diskutiert werden wird, ist dieser Effekt auch dafür verantwortlich, dass selbst in Bismut-Schichten von einigen zehn Bilagen die Leitfähigkeit des Oberflächenzustandes sehr gut messbar ist, da der Volumenbeitrag zur Leitfähigkeit auf Grund des halbleitenden Zustandes um Größenordnungen geringer ist als die des Oberflächenzustandes.

2.8.2. Wachstum dünner Bismutschichten auf Silizium

Das epitaktische Wachstum metallischer Filme auf atomar glatten Substraten verlangt eine passende Gitterkonstante des Filmmaterials im Vergleich zur Unterlage. Ist der Unterschied zu groß, so verhindert die entstehende Spannung ein monokristallines, epitaktisches Wachstum. Polykristalline Filme sind dann die Folge. Im Fall vom Wachstum von Bismut auf der (111)-Fläche von Silizium stellt aus diesem Grund zunächst ein Problem dar. Die Gitterkonstante von Silizium beträgt 3.84 \AA und ist damit stark abweichend von jeglichen Gitterabständen in niedrig indizierten Flächen von Bismut (Vgl. Abb. 2.20).

Aus diesem Grund muss die Fehlanpassung ausgeglichen werden. Dies geschieht auf Si(111) 7×7 durch einen zweistufigen Wachstumsprozess. Für die ersten Lagen beginnt das Wachstum in pseudo-kubischer (110)-Struktur. Dieses zeichnet sich durch zweidimensionales Wachstum aus, wodurch die einzelnen Kristallite sehr früh zusammen treffen, bevorzugt nach 4 Lagen⁸. Eine Minderheit der Kristallite weisen eine hexagonale (111)-Struktur auf [103]. Diese dienen als Saatkristalle für das spätere Wachstum. Ab der Schichtdicke von 4 ML findet eine sogenannte allotropische Phasentransformation, zu Gunsten der (111)-Struktur, statt. Sodass danach epitaktisches Wachstum in [111]-Richtung überwiegt [103, 104, 105, 106]. Die (111)-Saatkristalle sind dafür verantwortlich, dass der Bi(111)-Film in die Gitterperiodizität der 7×7 Rekonstruktion von Si(111) einrastet. Bemerkenswert ist dabei auch, dass die Gitterperiodizität nicht dem Volumenwert von Bismut entspricht sondern eine leichte Kompression zu beobachten ist. In SPA-LEED Messungen wurde entdeckt, dass der Beugungsreflex erster Ordnung von Bi(111) exakt mit dem $6/7$ Reflex der 7×7 -Rekonstruktion von Silizium übereinstimmt [105, 103, 106]. Daraus wurde gefolgert, dass 6 Einheitszellen der Bismutschicht mit dem 7-fachen der Silizium-Gitterkonstante übereinstimmen. Mit $7a_{\text{Si}} = 6a_{\text{Bi, film}}$ ergibt sich $a_{\text{Bi, film}} = 3.87 \text{ \AA}$, was gegenüber dem Volumenwert von $a_{\text{Bi}} = 3.94 \text{ \AA}$ lediglich einer Kompression um 1.8 % entspricht. Die resultierenden Bismutfilme in (111)-Orientierung zeichnen sich durch ihre atomar glatten Oberflächen aus und sind darüber hinaus einkristallin. Dies ist dem sehr stark zweidimensionalen Wachstum der Bi(110) Anfangsschicht, sowie den Bi(111) Saatkristallen zu verdanken.

Bruchteile der Bi(111) Kristallite weisen typischerweise aber eine beliebige Fehlorientierung, relativ zum Silizium-Substrat, auf. Sodass in Elektronenbeugungsexperimenten neben den hexagonalen (111)-Beugungsreflexen auch Beugungsringe beobachtet werden können [106, 104]. In Kapitel 5.1 werden die verschiedenen Phasen des Wachstums nochmals näher beleuchtet.

Mit der Perspektive einen qualitativ hochwertigen Bismutfilm zu produzieren ist es selbstverständlich von Interesse das Wachstum der fehlrotierten Kristallite zu vermeiden. Hierzu gibt es in der Literatur mehrere Ansätze, die verfolgt wurden. Ein möglicher Ansatz ist das Wachstum auf anderen Substraten als Si(111). Besonders hervor zu heben ist hier Barium-Fluorid (BaF_2), das sich gut für die Herstellung epitaktischer Bismutschichten eignet [107]. Eine Reduktion der Gitterfehlanpassung wurde mit Hilfe von Heteroepitaxie auf diesem Substrat erreicht, bei dem eine Bismutschicht zwischen zwei Lagen aus $\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x}$ eingebettet wurde und so sehr defektfreie Bi(111)-Filme realisiert werden konnten [108, 109]. Allerdings kommt BaF_2 aufgrund des hier verwendeten Versuchsaufbaus nicht in Frage, da für die Kontakte der Bismutschicht und der damit verbundenen Leitfähigkeitsmessung völlig neue Materialien, anstatt der sehr gut implementierten TiSi_2 -Kontakte (siehe Kapitel 3.1.2), gefunden werden müssten.

Darüber hinaus wurde Bismut auf Si(100) gewachsen [110]. Auch hier ergibt sich eine bevorzugte Wachstumsrichtung des Bismutfilms in (111)-Richtung bezogen auf das rhomboedrische Kristallsystem. Allerdings wurden hier zwei gegeneinander rotierte Bi(111)-Domänen gefunden, die auf die zwei Vorzugsrichtungen der Si(100)-Oberfläche zurückzuführen sind.

Der Einfluss von Grenzflächen auf das Bismutwachstum wurde ebenfalls untersucht. So berichten *Yaginuma et al.* [103] von der Epitaxie auf $\beta - \sqrt{3} \times \sqrt{3}$ Bi/Si(111), statt auf der 7×7 -Rekonstruktion. Sie zeigten, dass die geänderte Oberflächenenergie und damit verbundene Reduzierung der Verspannungen die allotropische Transformation von Bi(110) hin zu Bi(111) bis zu deutlich größeren Schichtdicken verhindert werden kann, und so Bi(110)-Film Wachstum so-

⁸Hier entspricht eine Bi(110)-Lage einer Flächendichte von 9.82×10^{14} Atomen/cm². Die Flächendichte einer Bilage (BL) für das Wachstum in Bi(111)-Richtung entspricht dagegen 1.14×10^{15} Atomen/cm².

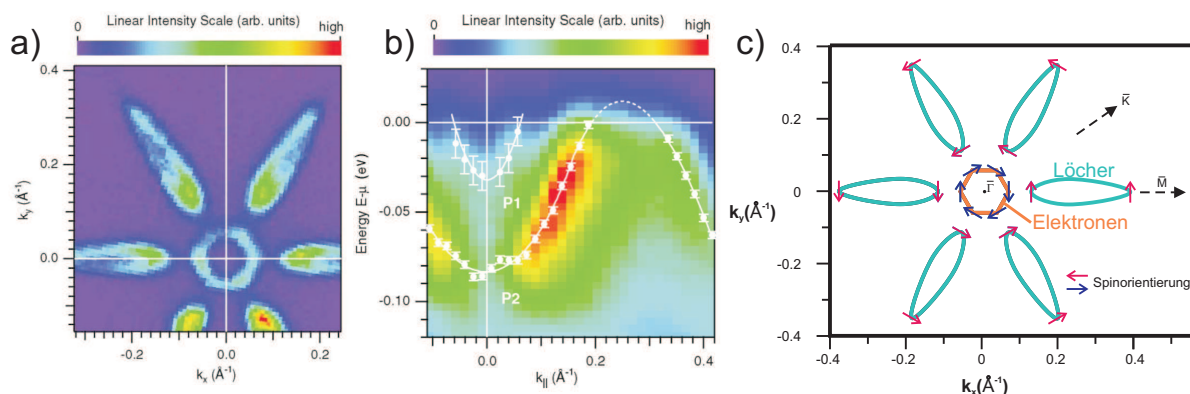


Abbildung 2.23.: Elektronische Bandstruktur von Bi(111). a) Fermi-Fläche von Bi(111) gemessen mit ARPES[111], zu sehen sind die elektronen- und lochartigen Taschen in der Nähe von $\bar{\Gamma}$. b) Dispersion der elektronischen Bänder entlang der $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ -Richtung [111]. Hier erkennt man unterschiedliche Bandkrümmungen, sodass man den Taschen in a) elektronen- bzw. lochartigen Charakter zuweisen kann. c) Schematische Darstellung der Fermi-Fläche in a), mit Pfeilen ist die Spinpolarisation der Bänder angedeutet (nach [112]).

gar bis 15-20 Lagen möglich ist. Allerdings führt die Anpassung der quasi-kubischen Symmetrie des Bi(110)-Kristallite auf die dreizählige $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ Bi/Si(111)-Unterlage zu effektiv 6 möglichen Kristallorientierungen. Somit erhielten die Autoren nur polykristalline Filme mit recht hoher Filmrauigkeit.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Bismutepitaxie auf verschiedenen Substraten bereits detailliert untersucht und zu weiten Teilen verstanden ist. In dieser Arbeit werden Bismutfilme auf Si(111) 7×7 (siehe Kapitel 5.1), sowie Si(557) (siehe Kapitel 6.2) hergestellt, um deren Leitfähigkeitseigenschaften zu untersuchen.

2.8.3. Elektronische Eigenschaften dünner Bismutschichten - Dominanz des Oberflächenzustandes

Zum Verständnis von Transporteigenschaften dünner Filme sind neben strukturellen Eigenschaften, wie die Kristallstruktur und Abweichungen davon, also Defekte, vor allem die elektronische Bandstruktur grundlegend und von großer Bedeutung. Diese ist für Bismut sehr gut untersucht. Am anschaulichsten stellt die winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie, wie in Kapitel 3.3 vorgestellt, die Bandstruktur dar. Ast und Höchst [111] sowie *Hirahara et al.* [113, 27] zeigten, dass die elektronische Bandstruktur von Bismut sehr kompliziert ist. Besonders eindrucksvoll ist dies an der Fermi-Fläche von Bi(111) (Abbildung 2.23 a) und c)) zu sehen. Man hat es nicht mit einfachen Fermi-Kreisen zu tun, sondern erkennt zum einen ein kreisartiges Element um $\bar{\Gamma}$ sowie 6 ovale Strukturen jeweils in $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ -Richtung angeordnet. Vergleicht man dies mit Abbildung 2.23 b), die die Dispersion der Bänder in dieser Richtung zeigt, so erkennt man mehrere Bänder, die jeweils unterschiedliche Krümmungen aufweisen. Beim Durchstoßen der Fermi-Energie haben sie entweder eine positive (elektronenartige) oder negative (lochartige) Krümmung. Somit handelt es sich bei der inneren Struktur um eine elektronenartige Tasche mit Hexagonalform, bei den äußeren um lochartige Taschen. Dies bedeutet, dass auch der Ober-

flächenzustand von Bi(111) , wie das Volumen-Bismut, aus Elektronen und Löchern besteht. Betont werden muss allerdings, dass im Vergleich zum Volumen die Situation genau entgegengesetzt ist. Wie in Kapitel 2.8.1 (Abbildung 2.22) gezeigt wurde, befinden sich im Volumen, beim zu $\bar{\Gamma}_{(111)}$ äquivalenten T-Punkt, Löcher statt Elektronen.

Die ungewöhnliche Textur der Fermi-Fläche des Oberflächenzustandes entsteht auf Grund der Rashba-Aufspaltung der elektronischen Bänder [113, 27, 26]. Wie im vorigen Kapitel 2.4 eingeführt wurde, ergibt das Zusammenspiel aus Spin-Bahn-Wechselwirkung und gebrochener Inversionssymmetrie an der Kristalloberfläche eine Verschiebung der Zustände, abhängig von ihrer Spinausrichtung, in $\pm k_{\parallel}$. Somit sind die Oberflächenzustände auch spinpolarisiert. In Abbildung 2.23 c) ist dies durch Pfeile symbolisiert. Zustände mit entgegengesetztem Wellenvektor \vec{k} weisen auch entgegengesetzte Spinorientierungen auf. Diese Eigenschaft wird in späteren Kapiteln, bei der Interpretation der Magnetotransportmessungen dünner Bismutfilme, von großer Bedeutung sein. So ist durch die Spinpolarisation eine Rückstreuung der Ladungsträger in 180°-Richtung (von +k nach -k) nicht möglich, sodass die sogenannte *Schwache (Anti-)Lokalisierung* vermindert ist und der klassische Magnetotransporteffekt dominant ist (siehe Kapitel 2.2.3 und 5.3).

Auch für andere niedrig indizierte Flächen von Bismut, wie etwa Bi(110) sowie Bi(100), konnte gezeigt werden, dass die starke Spin-Bahn-Wechselwirkung zu einer merklichen Rashba-Aufspaltung und Spinpolarisation führt [26, 114, 115, 116].

Die Tatsache, dass gleich mehrere Bänder die Fermi-Kante durchstoßen, führt dazu, dass der Oberflächenzustand von Bi(111) eine sehr hohe Leitfähigkeit im Vergleich zu Volumen-Bismut aufweist [29, 30, 117]. Aus den in Abbildung 2.23 b) gezeigten ARPES-Messungen lassen sich Zustandsdichten der Ladungsträger an der Fermi-Kante von $n = 5.5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $p = 1.1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ [111] bestimmen. Dies ist in guter Übereinstimmung mit $p \approx 8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, bestimmt für 30 nm dicke Bismutfilme mittels Magnetotransportmessungen von *Hoffman et al.* [98]. Damit liegen die Ladungsträgerdichten um Größenordnungen höher als dies im Volumen der Fall ist, für den Werte um $n_{\text{bulk}} = 2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ gefunden wurden. Dies entspricht bei Schichtdicken d unter 30 nm einer zweidimensionalen Ladungsträgerdichte von lediglich $n_{\text{bulk,2D}} = n_{\text{bulk}} \cdot d \approx 7.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Nimmt man zusätzlich noch an, dass das Filmvolumen durch den, in Kapitel 2.8.1 beschriebenen, Halbmetall-Halbleiter Übergang von Ladungsträgern entleert ist, erkennt man leicht die Dominanz des Oberflächenzustandes hinsichtlich des elektronischen Transports.

Die Ladungsträgermobilität von Volumen-Bismut beträgt bei 4,2 K $\mu_n = 4,2 \cdot 10^7 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ und $\mu_p = 1.2 \cdot 10^7 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ [118]. Diese reduziert sich nach *Hoffman* allerdings auf Werte um $10^3 - 10^4 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ für Schichtdicken zwischen 20 und 500 nm [98]. Damit ist die Beweglichkeit im Volumen dünner Bismutschichten höher als im Oberflächenzustand. Dies wird jedoch von der geringen Ladungsträgerkonzentration überkompensiert, sodass die Leitfähigkeit des Oberflächenzustandes gegenüber dem Volumen dominiert [27, 30, 117, 119, 120, 121]. Qualitativ entspricht die Situation der Abbildung 2.24. Die Oberfläche ist metallisch, die Leitfähigkeit des Volumens dagegen, ist um Größenordnungen geringer.

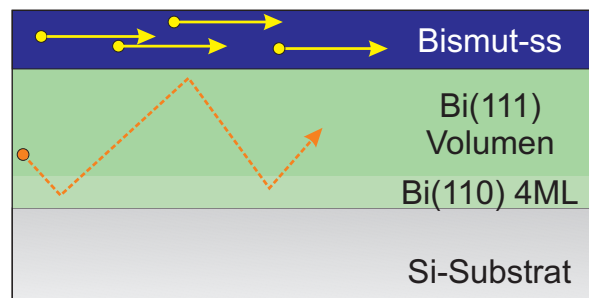


Abbildung 2.24.: Schematische Darstellung eines Bismutfilms im Querschnitt auf dem Silizium-Substrat. Das Volumen der Schicht zeichnet sich durch eine geringe Ladungsträgerdichte aus. Der Oberflächenzustand (surface state, ss) hat eine deutlich höhere Ladungsträgerdichte und ist leitfähiger als das Volumen

Experimenteller Aufbau

In diesem Kapitel werde ich den wesentlichen experimentellen Aufbau und Besonderheiten der verwendeten Messmethoden vorstellen

3.1 Vakuumapparatur

Grundlegend für hochpräzise Messungen an Oberflächen ist ein möglichst gutes Vakuum, mit Drücken kleiner als 10^{-10} mbar, dem so genannten Ultrahochvakuum (UHV). Damit wird der störende Einfluss von umgebenden Gasmolekülen auf ein Minimum reduziert. Um ein solches Vakuum erzeugen zu können, verwendet man Edelstahlkammern und verschiedene Vakuumpumpen. Im hier beschriebenen Versuchsaufbau handelt es sich dabei um eine Drehschieberpumpe für Vorvakuumdrücke von etwa $10^{-2} - 10^{-3}$ mbar, sowie einer Kombination aus Turbomolekularpumpe und Ionengerätterpumpe. Ein sogenanntes Ausheizen der Vakuumkammer, also ein Aufheizen der Kammerwände auf $150 - 200$ °C über viele Stunden, ermöglicht eine schnellere Desorption der durch Luftfeuchtigkeit entstandenen Kondensation an den Innenwänden und resultiert letztlich in Drücken kleiner 10^{-10} mbar.

Schematische Skizzen der hier verwendeten Vakuumapparatur sind in Abb 3.1 gezeigt. Sie enthält drei wichtige Ebenen: SPA-LEED- oder Charakterisierungsebene, Aufdampfebene sowie Magnetebene. Die Silizium-Probe befindet sich im Zentrum der Kammer auf dem Probenhalter, der mittels eines Z-Hubs längs der Kammerachse, von einer Ebene zur nächsten verfahren werden kann. Die Probe wird in die Charakterisierungsebene gebracht um die Oberflächenstruktur, -morphologie und -güte – entweder von der reinen Siliziumoberfläche oder der mit Metall bedampften Oberfläche – mit Hilfe von Eletkronenbeugung zu untersuchen. Ebenso wird die Probe in dieser Position mittels Heizen gereinigt, die Temperatur kann mit einem Infrarot-Pyrometer (Impac IGA 140) präzise überwacht werden. Falls erforderlich wird die Probe zum Bedampfen mit verschiedenen Metallen in die Verdampfersebene gebracht. Hier hat man die Möglichkeit bis zu acht verschiedene Verdampfer anzubringen, die radial um den Probenhalter angeordnet sind. Dies hat den Vorteil, dass die Verdampfungsrichtung sehr genau definiert ist und der Abstand vom Verdampfer zur Probe leicht zu bestimmen ist. Die in dieser Arbeit verwendeten Metalle sind: Blei, Bismut, Eisen, Cobalt und Terbium.

Sobald man eine gut präparierte und strukturell charakterisierte Oberfläche erzeugt hat, die man jetzt hinsichtlich ihrer Magnetleitfähigkeitseigenschaften untersuchen möchte, bringt man die Probe in die Magnetebene und stülpt den Magneten (Spectromag SM 4000, Oxford) mit dem dafür vorgesehen Loch über den rüsselartigen Teil der Kammer, in Abb. 3.1 auf der linken Seite zu erkennen. Der Magnet erzeugt mit Hilfe zweier stromdurchflossener, supraleitender Spulen bestehend aus einer Niob-Titan Legierung, deren Ebenen horizontal liegen, ein Magnetfeld von

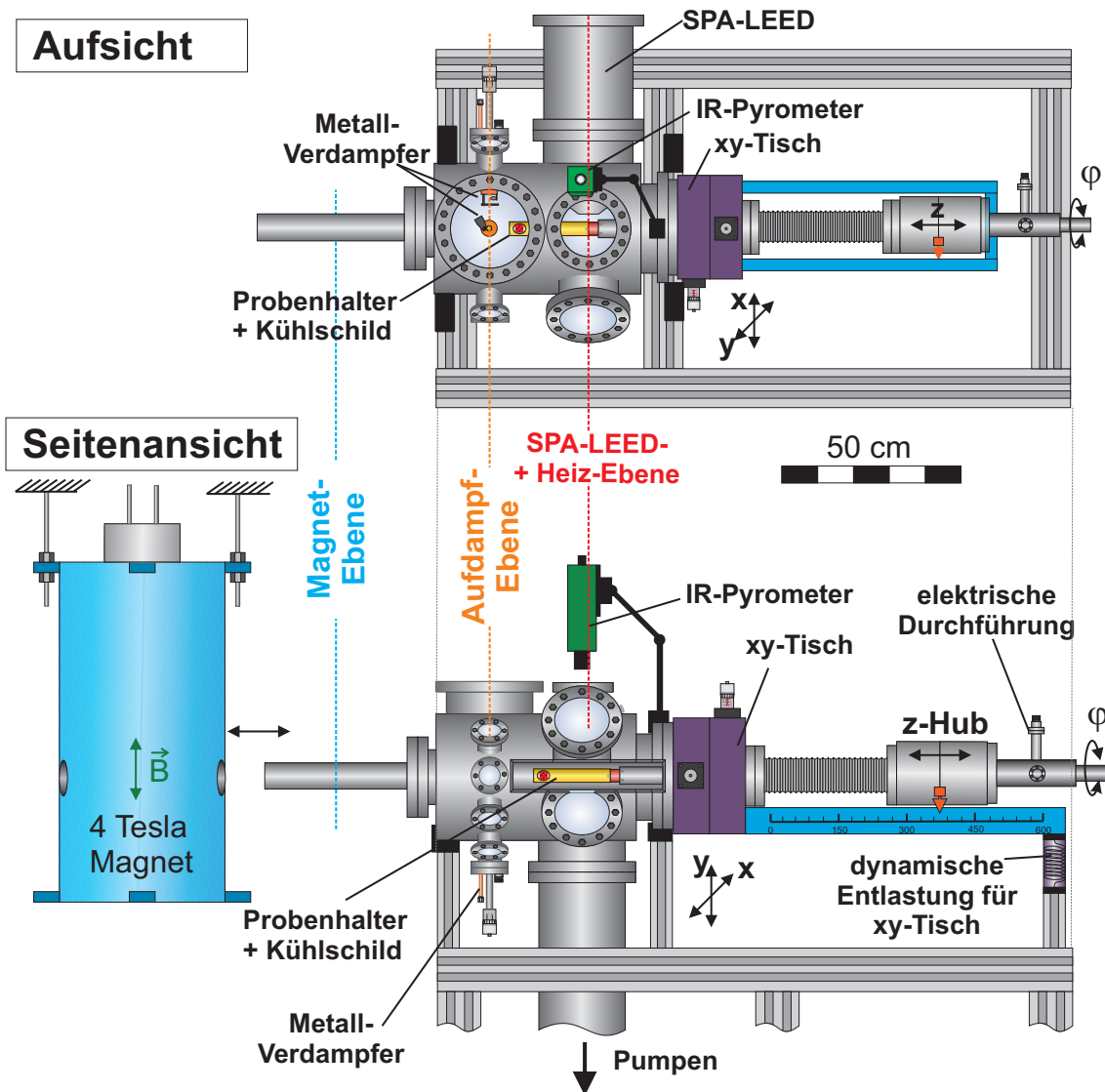


Abbildung 3.1.: Schemaskizze der Vakuumanlage mit drei Arbeitsebenen, der SPA-LEED-Ebene, Aufdampfebene sowie Magnetebene. Gezeigt ist die Aufsicht (oben) sowie eine Seitenansicht (unten).

bis zu vier Tesla. Die Richtung der Feldlinien im Inneren, also an der Probenposition ist somit vertikal. Konventionell wird ein Magnetfeld welches von oben nach unten gerichtet ist mit positivem Vorzeichen, eines das von unten nach oben gerichtet ist, mit negativem Vorzeichen belegt. Dies liegt daran, dass die Probe für die Messung in der Magnetposition aus apparativen Gründen in den unteren Halbkreis ausgerichtet sein muss. Die Feldlinienrichtung eines positiven Feldes weist somit auf die Probenoberfläche. Diese Konvention ist zunächst beliebig, da für die Magnetleitfähigkeit das Vorzeichen des Magnetfeldes typischerweise keine Rolle spielt. Lediglich für die Untersuchung des Hall-Effektes ist die Kenntnis der Magnetfeldrichtung von großem Interesse. Da man ansonsten falsche Schlüsse hinsichtlich der Ladungsträgerart in einer Metallnanostruktur ziehen könnte, die nicht notwendigerweise die gleiche sein muss wie im gleichen Volumen-Material. Details über die Messgeometrie werden in den Kapiteln 3.1.2 und 3.2 erläutert.

Neben dem z-Freiheitsgrad bietet der Manipulator noch die Möglichkeit der Rotation um beliebige Winkel um die Längsachse, sowie einer parallelen Verschiebung in x- und y-Richtung von ± 25 mm relativ zur Kammermitte. Am Ende des Manipulators, rechts in der Schemaskizze, gibt es eine elektrische Vakuumdurchführung um die acht Messkontakte für Leitfähigkeitsmessungen, sowie zwei Kontakte zur Probenheizung mittels Direktstrom-Heizen ins Vakuum zu führen. Ein Durchfluss-Kryostat ermöglicht die Kühlung der Probe mit flüssigem Stickstoff oder Helium (ℓN_2 , ℓHe). Die Temperatur wird über eine Siliziumdiode, die sich im Kryostaten befindet, gemessen und von einem *Lakeshore 331*-Messinstrument ausgelesen. Um möglichst geringe Temperaturen zu erreichen, wird ein Kühlschild bestehend aus Gold-beschichtetem Kupferrohr verwendet. Dieses Kühlschild, welches ebenfalls über den Kryostaten gekühlt wird, reflektiert die von außen kommende Wärmestrahlung und emittiert selbst, aufgrund seiner geringen Temperatur sehr wenig Infrarotstrahlung. Es hat eine Öffnung genau vor der Probe, sodass man überhaupt Zugang zur Probe bekommt und die Oberfläche untersuchen, sowie Metall aufdampfen kann. Sind für die Leitfähigkeitsmessung sehr tiefe Temperaturen von Nöten, lässt sich die Öffnung mit einer Blende verschließen. Somit erreicht man, laut Testmessungen mit einem an der Probe angebrachten Thermoelement, Temperaturen von etwa 10 K bei Kühlung mit ℓHe . Diese Minimaltemperatur ist in der Folge gemeint, wenn von Messungen bei $T = 4$ K oder ℓHe -Temperatur die Rede ist.

3.1.1. Probenhalter

Der Probenhalter befindet sich in der Mitte der Vakuumkammer, am Ende des Manipulatorarmes. Der Probenhalter muss mehrere Anforderungen gleichzeitig erfüllen. So muss er einen guten Wärmekontakt der Probe zum Kryostaten garantieren, um möglichst niedrige Proben Temperaturen realisieren zu können. Andererseits benötigt man eine elektrische Isolierung der Probe gegen den geerdeten Probenhalter, da die Probe mittels Gleichstrom geheizt werden soll. Die Realisierung dieser Vorgaben ist in Abbildung 3.2 zu sehen. Auf einem Kupfer Block, der thermisch an den Kryostaten gekoppelt ist, sind zwei Saphirplatten angebracht. Sie dienen der elektrischen Isolation und gleichzeitigen thermischen Ankopplung. Denn synthetischer Saphir, oder Al_2O_3 , zeichnet sich neben seiner isolierenden Eigenschaften auch durch eine besonders hohe Wärmeleitfähigkeit bei tiefen Temperaturen, von $200 \frac{\text{W}}{\text{cm}\cdot\text{K}}$, aus. Sie ist sogar noch größer als die von Kupfer ($100 \frac{\text{W}}{\text{cm}\cdot\text{K}}$) [39, S. 145].

Auf den Saphirplatten sind jeweils die aus Molybdän gefertigten Auflagebacken angebracht. Ihre

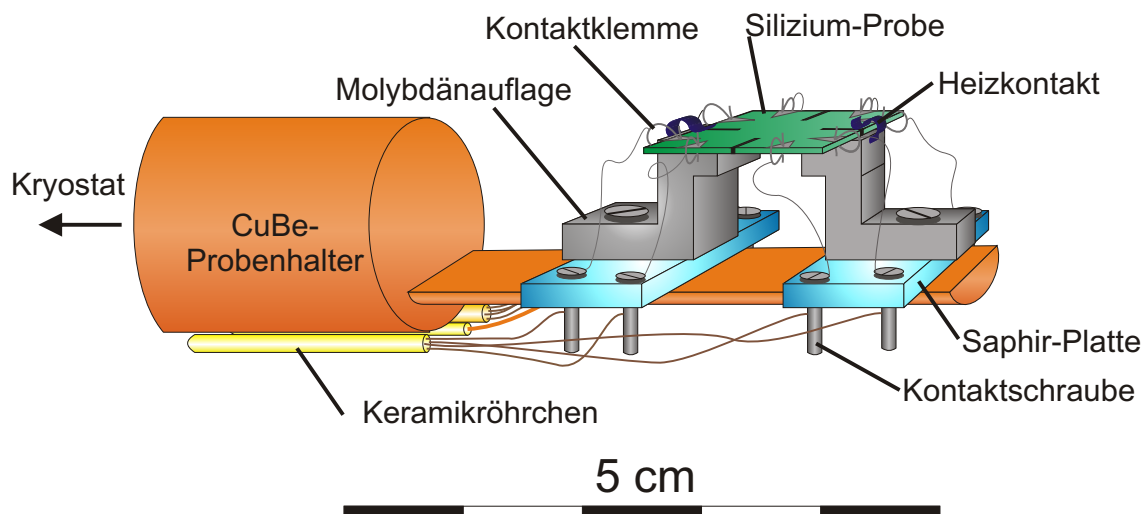


Abbildung 3.2.: Kupfer-Beryllium Probenhalter mit Saphirplatten und Probenauflagen aus Molybdän. In grün ist die Siliziumprobe dargestellt, die über die Heizkontakte mittels Direktstromheizen präpariert werden kann. Zusätzlich erkennt man die 8 Kontaktklammen aus Molybdändraht für die Leitfähigkeitsmessungen.

Oberseiten liegen in der gleichen Ebene, sodass die Silizium-Probe möglichst spannungsfrei mit den eingezeichneten Heizkontaktklammen darauf befestigt werden kann und ein guter elektrischer und Wärmekontakt besteht. Ein guter Kontakt ist einerseits wichtig um die Probe effektiv kühlen zu können, andererseits aber auch um während des Direktstromheizens eine homogene Temperaturverteilung über die gesamte Probe hinweg zu erhalten. Neben den zwei Heizkontakten zur Probenheizung erkennt man noch acht weitere Kontaktklammen aus 0,25 mm starkem Molybdändraht, die die Probe kontaktieren. Sie dienen später zur Messung der Leitfähigkeit. Details hierzu werden im Abschnitt 3.2 erläutert. Auch hierbei dienen die Saphir-Platten als Isolationsmedium. Der Probenhalter ist wie in Abschnitt 3.1 erwähnt von einem Kühltisch umgeben (hier nicht gezeigt).

3.1.2. Silizium Proben – Präparation sauberer Oberflächen

Die hier verwendeten Silizium Proben haben eine besondere Form, die der von *Van der Pauw* vorgeschlagenen Kleeblattform sehr ähnlich ist [58]. Aus einem Silizium-Wafer werden quadratische Stücke von 15×15 mm Größe herausgeschnitten. An den vier Kantenmitten werden diese Stücke dann nochmals drei mm tief eingeschnitten (siehe Abbildung 3.3). Dies geschieht durch Laserstrahlschneiden unter Schutzgasatmosphäre (Firma: Meko Laserstrahlmaterialbearbeitung, Sarstedt). Diese Geometrie hat zwei Vorteile, einerseits vermeidet man dadurch ein elektrisches Übersprechen zwischen benachbarten Kontakten, zum anderen verkleinert man den effektiven Messbereich auf das Zentrum der Probe. Für die exakte Bestimmung des spezifischen elektrischen Widerstandes einer Schicht benötigt man nach *Van der Pauw* Punktkontakte, die auf der Peripherie der Probe liegen[58]. Abweichungen davon, das heißt ausgedehnte Kontakte, die nicht genau am Rand liegen führen zu Messfehlern der Leitfähigkeit. Allerdings können diese

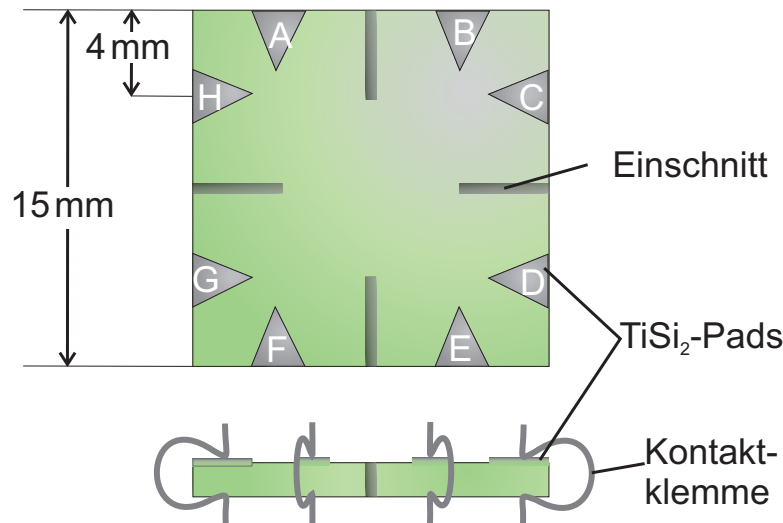


Abbildung 3.3.: (oben) Die Geometrie der verwendeten Siliziumproben ist an die Kleeblattstruktur angelehnt. Am Rand der Probe befinden sich die acht TiSi_2 -Kontakte. (unten) Seitenansicht mit Kontaktklemmen aus Molybdändraht.

störenden Einflüsse durch die Kleeblattanordnung minimiert werden (siehe auch Kap. 2.2.6).

Wie in der Abbildung zu sehen, befinden sich acht Kontakte (mit A-H nummeriert) auf der Probe. Diese bestehen aus Titandisilizid (TiSi_2). Sie werden durch eine Schattenmaskentechnik erzeugt. Bei Temperaturen um $700\text{ }^\circ\text{C}$ im Hochvakuum, mit Drücken kleiner als 10^{-7} mbar wird Titan auf die mit einer Maske aus Wolfram versehenen Probe aufgedampft. Durch chemische Reaktion bildet sich dabei an den nicht bedeckten Stellen der Probe TiSi_2 . Die entstandenen Kontakt-Felder sind mechanisch sehr stabil, da sie durch die Reaktion mit dem Silizium bis tief in den Wafer hinein verankert sind. Auch sind sie sehr temperaturstabil, sodass auch nach wiederholtem Heizen der Siliziumprobe auf über $1100\text{ }^\circ\text{C}$ keine Schädigung der Titankontakte feststellbar ist.

Um die Siliziumoberfläche atomar wohl definiert und sauber zu präparieren, muss man eine Reinigungsprozedur durchführen. Bevor die Probe in den Probenhalter und das Vakuum eingebaut wird, entfernt man groben Schmutz, wie Fette und eventuelle Schutzbeschichtungen. Sequentiell wird die Probe für jeweils 15 min in hochreinen Lösungsmitteln (Petroleumbenzin, Isopropanol und Aceton) in einem Ultraschallbad vorgereinigt. Danach erfolgt die Entfernung der natürlichen Oxidschicht in 1-prozentiger Flusssäure (HF) für 40 s, gefolgt von einer erneuten, definierten Oxidation in Wasserstoffperoxid (H_2O_2 , 30-prozentig) ebenfalls für 40 s. Dies hat den Vorteil, dass die Siliziumoberfläche gegen Verunreinigungen geschützt ist, gleichzeitig aber die Oxidschicht so dünn ist, dass sie bei der Titankontaktierung kein Hindernis darstellt. Anschließend werden, wie oben beschrieben, die Titankontakte auf die Probe aufgebracht. Nach nochmaliger Reinigung der Probe in Lösungsmitteln ist sie bereit für den Einbau in den Probenhalter.

Unmittelbar nach dem Ausheizen der Vakuumapparatur wird die Si-Probe durch Direktstromheizen auf eine Temperatur von etwa $500\text{ }^\circ\text{C}$ gebracht. Bei dieser Temperatur können noch vorhandene Verunreinigungen und Fremdstoffe langsam verdampfen. Ebenso wird die gesamte Probenumgebung, also Teile des Probenhalters mit erwärmt und so gereinigt. Während dieses sogenannten Ausgasschritts sollte nach einigen Stunden der Basisdruck der Vakuumkammer ($< 10^{-10}$ mbar) erreicht sein. Noch befindet sich die SiO_2 -Schicht auf der Probe und schützt das

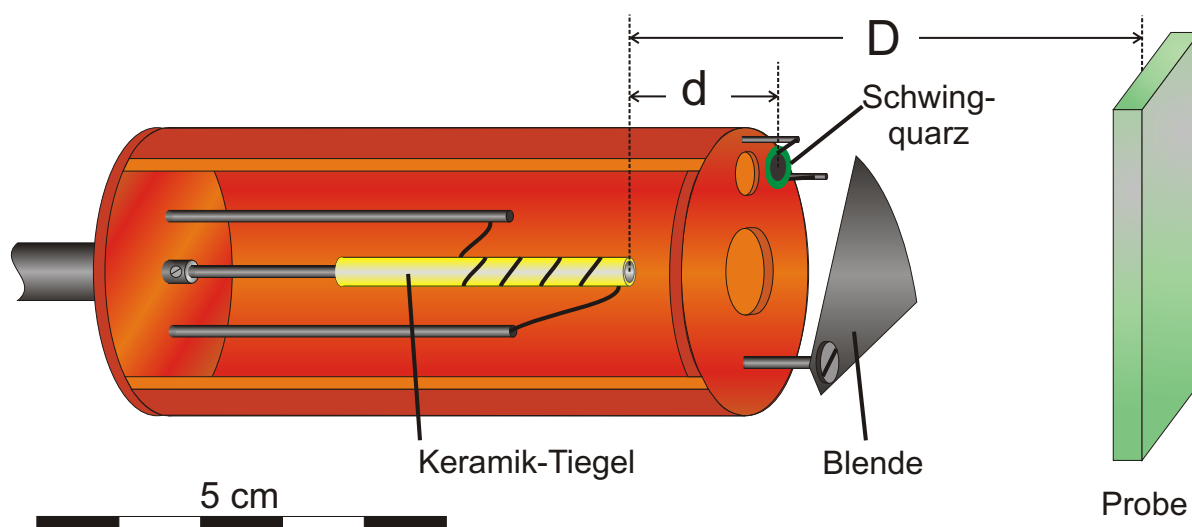


Abbildung 3.4.: Aufbau eines Metallverdampfers⁵ mit Keramiktiegel und Blende, sowie eines Schwingquarzes zur Massenwägung

darunter liegende Silizium. Sie beginnt erst bei 700-800 °C zu sublimieren. Sowohl bei Si(111) als auch Si(557)-Oberflächen möchte man die sehr gut definierte 7x7-Rekonstruktion erzeugen. Dafür muss man die Probe auf Temperaturen um 1100 °C heizen, jedoch benötigt man extrem saubere Umgebungsbedingungen während dieses Heizschrittes. Um sicher zu gehen, dass die Restgasentwicklung während des Heizens nicht zu groß ist, *trainiert* man die Probe bei 700-800 °C für einige Minuten und beobachtet den Druckanstieg. Sobald der Druck bei 800 °C stabil im 10^{-10} mbar Bereich bleibt ist das System ausreichend gut ausgegast. Von nun an dürfen keine Verunreinigungen wie etwa Kohlenstoff auf die Oberfläche gelangen, da das Oxid bereits entfernt wurde. Kohlenstoff würde beim Heizen der Probe mit dem Silizium reagieren und die Bildung der 7x7-Rekonstruktion und im Falle der Si(557)-Fläche die Ausbildung einer geordneten Stufenstruktur verhindern. Die folgenden mehrfachen Heizschritte (typisch 3-10x) zu Temperaturen um 1100 °C (sogenanntes *flashen*) ermöglicht die Sublimation der obersten Siliziumschichten. Zurück bleibt die saubere Siliziumoberfläche, die jedoch noch nicht besonders gut geordnet ist. Um dies zu gewährleisten heilt man die Oberfläche durch langsames Abkühlen der Probe von 900-600 °C über Minuten hinweg aus.

Um die Qualität der Oberfläche beurteilen zu können wird die Probe mit Hilfe von Elektronenbeugung charakterisiert, Details hierzu findet man in Kapitel 2.1. Die so präparierten Siliziumoberflächen werden in der Folge als Substrat für die Metalldeposition genutzt (siehe Kapitel 3.1.3).

3.1.3. Metallverdampfer

Grundlegendes Untersuchungsobjekt der vorliegenden Arbeit sind metallische Nanostrukturen wie atomare Ketten, sowie ultradünne Metallfilme auf einem Silizium-Substrat. Für die Erzeugung solcher Strukturen benötigt man sehr genau dosierbare Aufbringungsmethoden. Am besten eignet sich hierfür ein Metallverdampfer. Je nach Schmelztemperatur des aufzubringenden Metalls variiert auch deren Aufbau. Hauptsächlich werden hier aber die niedrigschmelzenden

Metalle Blei und Bismut verwendet ($T_{\text{Schmelz, Pb}} = 327 \text{ °C}$, $T_{\text{Schmelz, Bi}} = 271 \text{ °C}$), die sich schon bei etwa 400 °C durch einen Dampfdruck größer als 10^{-10} mbar auszeichnen[122], sodass die Heizleistung des Verdampfers nicht sonderlich hoch sein muss. Abbildung 3.4 zeigt einen typischen Metallverdampferaufbau, er besteht aus einer Kupferhülle, in der ein Keramiktiegel angebracht ist. Ein stromdurchflossener Draht erhitzt den Tiegel bis zur Verdampfungstemperatur des darin befindlichen Materials und ermöglicht so das kontrollierte Aufbringen des Metalls. Falls man höhere Temperaturen benötigt, etwa für Metalle mit höherem Schmelzpunkt, wie etwa Eisen oder Cobalt, so verwendet man einen Elektronenstoß-Verdampfer. Dabei erzeugt ein Filament durch Glühemission Elektronen, die dann durch eine Hochspannung vom Filament auf den Tiegel beschleunigt werden und somit den Tiegel erhitzen. In diesem Fall darf der Tiegel allerdings nicht aus isolierendem keramischem Material sein, sondern besteht zum Beispiel aus Tantal oder Molybdän, die erst bei viel höheren Temperaturen verdampfen würden. Wie Abbildung 3.4 weiter zeigt befindet sich am Ausgang eine drehbare Blende aus Tantalblech, die den Atomstrahl zur Silizium-Probe hin unterbrechen kann. Damit kann man Beginn und Ende der Bedampfung einstellen.

Zur Überwachung der Aufdampftrate dient ein Schwingquarz am Ausgang des Verdampfers. Dieser kann zu transversalen Scherschwingungen angeregt werden. Ein Schwingkreis regt den Quarz bei seiner Resonanzfrequenz an. Durch Bedampfen der Quarzoberfläche ändert sich dessen Masse, wodurch sich die Resonanzfrequenz verschiebt. Nach Sauerbrey ergibt sich die Frequenzänderung durch Massenbelegung zu

$$\Delta f = -\frac{C_f \cdot \Delta m}{F} \quad , \quad (3.1)$$

mit C_f , der materialspezifischen Schichtwägemempfindlichkeit, sowie Δm der Massenänderung durch Metallbedampfung und F der bedampften Fläche [123]. Die Schichtwägemempfindlichkeit hängt nur von quarzspezifischen Größen ab und ergibt sich aus der Dichte ρ_Q , der Dicke t_Q des Quarzes sowie der Resonanzfrequenz f_0 des Quarzes: $C_f = \frac{f_0}{t_Q \cdot \rho_Q}$ ¹. Ersetzt man noch $\Delta m = \rho_{\text{Metall}} \cdot t_{\text{Metall}} \cdot F$, wird Gleichung 3.1 zu:

$$\Delta f = -C_f \cdot \rho_{\text{Metall}} \cdot t_{\text{Metall}} \quad (3.2)$$

und ist damit unabhängig von der bedampften Fläche F .

All diese Größen beziehen sich nun aber auf die Messung der Schwingungsfrequenz an der Quarzposition, in einer Entfernung d vom Tiegel. Interessant ist allerdings die Massenänderung oder Schichtdickenänderung an der Probenposition, in einem Abstand D vom Verdampfer. Da der Tiegeldurchmesser nur etwa 2 mm beträgt, kann man in erster Näherung die Quelle als punktförmig ansehen, sodass die Flussdichte im Verdampferstrahl quadratisch mit dem Abstand abnimmt, sodass pro Flächeneinheit die Massenänderung an der Probenposition um den Faktor $G = \left(\frac{D}{d}\right)^2$ kleiner ist als an der Quarzposition. Somit erweitert sich Gleichung 3.2 zu

$$\Delta f = -C_f \cdot \rho_{\text{Metall}} \cdot t_{\text{Metall}} \cdot \left(\frac{D}{d}\right)^2 \quad (3.3)$$

¹Bei typischen Schwingquarzen mit $f_0 = 10 \text{ MHz}$, $\rho_Q = 2.65 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ und $t_Q \approx 0.2 \text{ mm}$, ergibt sich ein Wert von $C_f \approx 1.88 \cdot 10^4 \frac{\text{Hz} \cdot \text{m}^2}{\text{g}} = 3.13 \frac{\text{Hz} \cdot \text{Å}^2}{\text{u}}$, mit $u = 1.66 \cdot 10^{-24} \text{ g}$, der atomaren Masseneinheit.

Für Bismut ergibt sich beispielsweise bei einer Flächendichte in [111]-Richtung von $\rho_{2D, Bi} = 1.14 \cdot 10^{15} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2} \cdot 208,98 \frac{\text{u}}{\text{Atom}} = 23.82 \frac{\text{u}}{\text{\AA}^2}$ [30], eine Frequenzänderung pro aufgedampfter Lage von

$$\frac{\Delta f}{\text{Bi-Lage}} = -3.132 \frac{\text{Hz}\text{\AA}^2}{\text{u}} \cdot 23.82 \frac{\text{u}}{\text{\AA}^2} \cdot \left(\frac{D}{d}\right)^2 \approx -73 \text{ Hz} \cdot \left(\frac{D}{d}\right)^2.$$

Allerdings sieht man, dass Gleichung 3.3 viele Parameter enthält, die mit Fehlern behaftet sind, sodass die reine Berechnung der Frequenzänderung pro Monolage aufgedampften Metalls mit großen Fehlerbalken behaftet ist. Beim hier verwendeten Versuchsaufbau hat man jedoch den Vorteil die Schichtdicke mit Hilfe von Leitfähigkeitsoszillationen während des epitaktischen Wachstums der Metallschichten eichen zu können – im vorliegenden Fall für das Lage für Lage-Wachstum von Bismut auf Silizium (Details hierzu werden in Kapitel 5.1.2 erläutert). Bei einer solchen Eichmessung erhielt man ein Δf von 470 Hz pro aufgedampfter Bismutlage bei einem Abstandsverhältnis von $\left(\frac{D}{d}\right)^2 = 10.8$, sodass man an der Quarzposition, wo $d = D$ gilt, einen Wert von $\frac{\Delta f}{\text{Bismuth-Lage}} = 43.6 \text{ Hz}$ erhält. Dieser gemessene Wert weicht somit vom oben berechneten Wert um etwa 40 % ab. Ausgehend von der Eichung des Verdampfers für Bismut, lässt sich nun für andere Metalle, entsprechend ihrer Dichte, ein Δf pro Lage bestimmen und so genaue Kenntnis über die aufgedampfte Menge erlangen.

3.1.4. SPA-LEED

Wie die englische Bezeichnung bereits verrät handelt es sich bei der *Spot Profile Analysing LEED-Methode* (SPA-LEED) um eine Erweiterung des konventionellen LEED, mit der Möglichkeit das Profil der Beugungsreflexe zu vermessen und daraus Eigenschaften der untersuchten Oberfläche abzuleiten. Das SPA-LEED-Instrument wurde an der Universität Hannover im Institut für Festkörperphysik in der Arbeitsgruppe *Henzler* in den 1980er Jahren entwickelt [124, 125, 126] und mittlerweile von der Firma *Omicron* vertrieben. Eine schematische Skizze des SPA-LEED Instruments ist in Abb. 3.5 gezeigt. Wie auch beim konventionellen LEED beschleunigt eine Elektronenkanone mittels einer Anode thermisch in einem Filament² erzeugte Elektronen auf Energien zwischen 10 und 500 eV. Im Gegensatz zum LEED, bei dem die Detektion der an der Probe gebeugten Elektronen mit Hilfe eines Fluoreszenzschirms geschieht, verwendet ein SPA-LEED einen Punktdetektor³ – ein Channeltrondetektor hinter einer 300 μm Lochblende – der relativ zur Elektronenkanone azentrisch unter einem Winkel von 4° (bei der neuesten Generation) angeordnet ist. Auf dem Weg zur Probe und zurück zum Detektor durchlaufen die Elektronen die elektrostatische Ablenkeinheit, den sogenannten Oktupol. Hierbei handelt es sich um ein Paar von jeweils acht Elektrodenplatten, die konzentrisch um die Längsachse angeordnet sind. Zwei gegenüberliegende Platten wirken dabei als Plattenkondensator und lenken die Elektronen nach Anlegen einer Spannung auf eine parabelförmige Flugbahn. Das hintere Plattenpaar (z.B. H4 und H8) besitzt dabei die entgegengesetzte Polarität wie das vordere Plattenpaar (V4 und V8). Wie in Abb. 3.5 in rot dargestellt, erreicht so für eine feste Plattenspannung ein, unter einem bestimmten Winkel, gebeugtes Elektron den Channeltrondetektor. Durch sukzessive

²In älteren SPA-LEED Instrumenten wurden Wolfram-Filamente verwendet. Die neueste Generation besitzt allerdings LaB₆-Filamente, die aufgrund einer geringen Austrittsarbeit mit deutlich geringerem Strom, das bedeutet geringerer Temperatur, auskommen und so die thermische Verteilung der Elektronen deutlich schmaler ist.

³Der im Gerät angebrachte Fluoreszenzschirm dient einzig der richtigen Positionierung der Probe und wird als Kontrollinstrument benutzt.

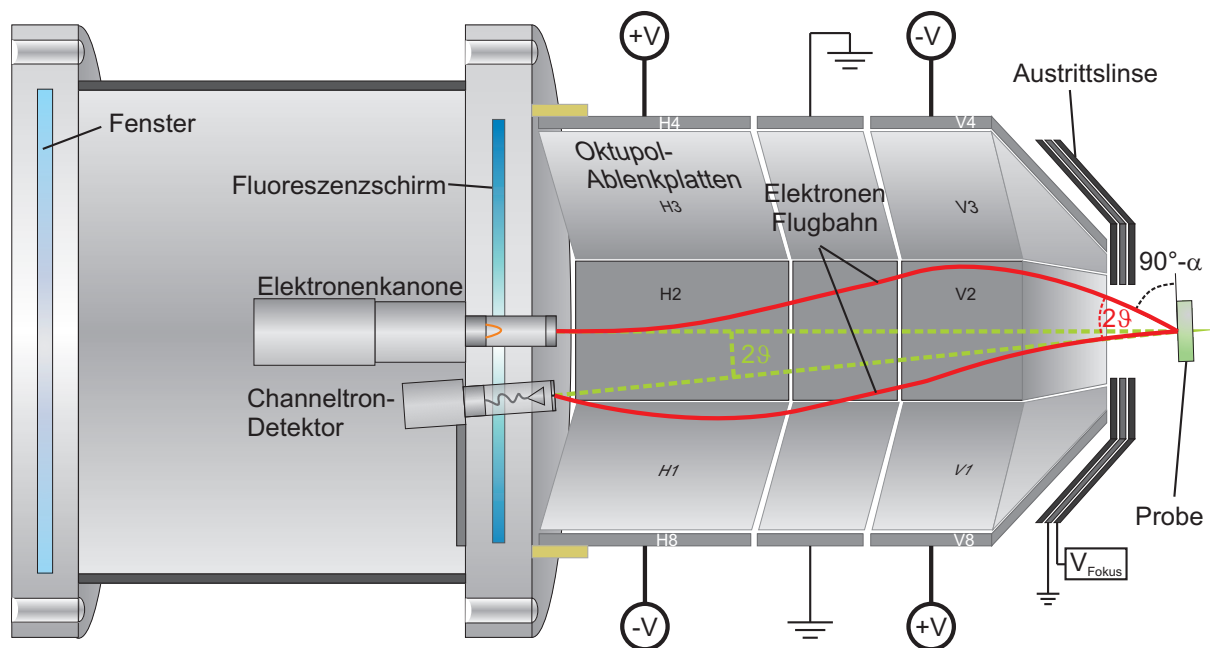


Abbildung 3.5.: Darstellung eines SPA-LEED Instruments mit Elektronenquelle, Oktupol-Ablenkeinheit und Channeltrondetektor.

Variation der Ablenkspannungen erreicht man damit ein Abrastern aller Beugungswinkel und bildet so den reziproken Raum der untersuchten Probe ab.

Durch die Geometrie der Ablenkeinheit und Detektoranordnung ist der Winkel zwischen einlaufendem und gebeugtem Elektron, welches den Detektor erreicht, konstant ($\angle(\vec{k}_i, \vec{k}_f) = 2\vartheta = \text{const}$). Bei der Rasterung der Ablenkspannung wird lediglich der Einfallswinkel um den Winkel α geändert. Dies führt zu einem modifizierten Scanbereich des SPA-LEED, da die Ewaldkugel um den Ursprung des reziproken Raumes abgerollt wird und die Einhüllende damit eine Kugeloberfläche mit in etwa dem doppelten Radius der einfachen Ewaldkugel beschreibt (entspricht Abb. 3.6 b). Zum Vergleich zeigt Abb. 3.6 a) die Situation beim konventionellen LEED, bei dem der Einfallswinkel konstant gehalten wird und der Ausfallswinkel der gebeugten Elektronen variiert wird, in dem man auf dem Fluoreszenzschirm an verschiedenen Positionen die Intensität misst. Dementsprechend ist beim SPA-LEED ein größerer Bereich des reziproken Raumes detektierbar, bzw. eine höhere Auflösung in einem festen Winkelement erreichbar.

Elektrostatische Linsen an der Elektronenkanone sowie am Ausgang des Instruments genau vor der Probe ermöglichen die Fokussierung des Elektronenstrahls und die Abbildung der Elektronen-Punktquelle auf den Detektor.

3.2 Leitfähigkeitsmessung

Wie in Kapitel 3.1.2 gezeigt, befinden sich auf der Silizium-Probe acht Kontakte, die für die makroskopischen Leitfähigkeitsmessungen verwendet werden können. Durch Auswahl bestimmter Kontakte ist eine Vielzahl an Messgeometrien realisierbar. Angefangen bei einfacher

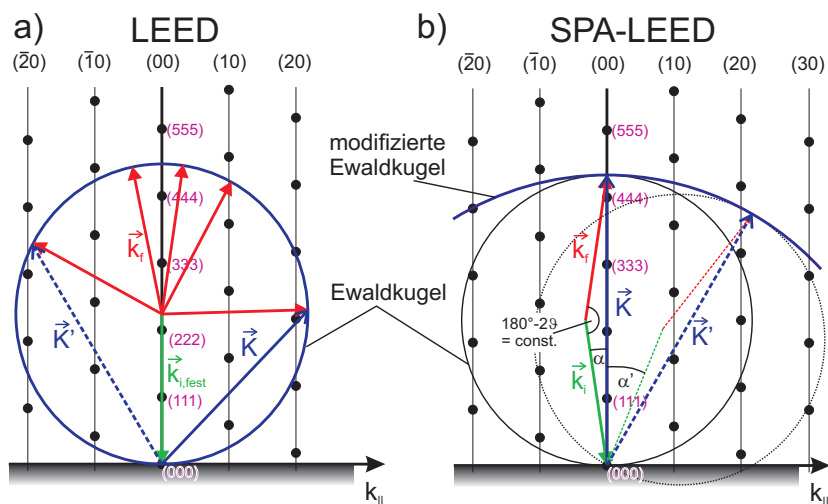


Abbildung 3.6.: Ewaldkonstruktion bei LEED und SPA-LEED im Vergleich. a) Bei LEED ist der Einfallswinkel konstant, die Ewaldkugel ergibt sich aus der unter verschiedenen Winkeln auf dem Beugungsschirm detektierten Elektronen. b) Bei SPA-LEED bleibt der Winkel zwischen k_i und k_f konstant (gegeben durch den Winkel 2ϑ zwischen Elektronenkanone und Detektor), jedoch wird der Einfallswinkel variiert. Die Einhüllende der um den Ursprung abrollenden Ewaldkugel hat damit annähernd den doppelten Radius der einfachen Ewaldkugel.

2-Punkt-Messung zwischen zwei beliebigen Paaren, über 4-Punkt-Messungen mit jeweils zwei Strom- und Spannungskontakten, bis hin zu 8-Punkt-Messungen, auch als stromsymmetrisierte Leitfähigkeitsmessung bezeichnet. Im folgenden werde ich auf die Besonderheiten sowie Vor- und Nachteile der jeweiligen Konfiguration eingehen. Die Ansteuerung der verschiedenen Kontakte erfolgt über eine Software, geschrieben in *LabView*. Diese spricht eine digitale IO-Karte an, die wiederum eine Schaltungselektronik mit darin befindlichen Relais steuert. Diese Relais geben dann die gewünschten Kontakte (A-H) für die Strom- und Spannungsausgänge der Elektronik frei. Eine hochgenaue Stromquelle (*Keithley 2400 Sourcemeter*) prägt den Messstrom ein, während ein präzises Multimeter (*Hewlett Packard HP3458A*) die Potentialdifferenz an den Spannungskontakten misst.

3.2.1. 2-Punkt-Messung

Bei der 2-Punkt-Messung nutzt man ein beliebiges Paar der acht Kontakte. Hierbei dienen beide jeweils als Strom- und Spannungskontakt. Dies hat wie in Kapitel 2.2.5 den Nachteil, dass die Kontaktwiderstände additiv in die Messung des Schichtwiderstandes mit eingehen. Aus diesem Grund wird diese Methode lediglich zu Testzwecken verwendet, genauer, um zu überprüfen ob alle Kontakte einwandfrei funktionieren.

3.2.2. 4-Punkt-Messung

Die 4-Punkt-Messmethode hat den großen Vorteil, dass die Potentialdifferenz stromfrei gemessen wird. Somit fällt über die Potentialkontakte keine zusätzliche Spannung ab, die die Messung der Leitfähigkeit verfälschen würde. Die 4-Punkt-Methode entledigt sich somit der Einflüsse durch

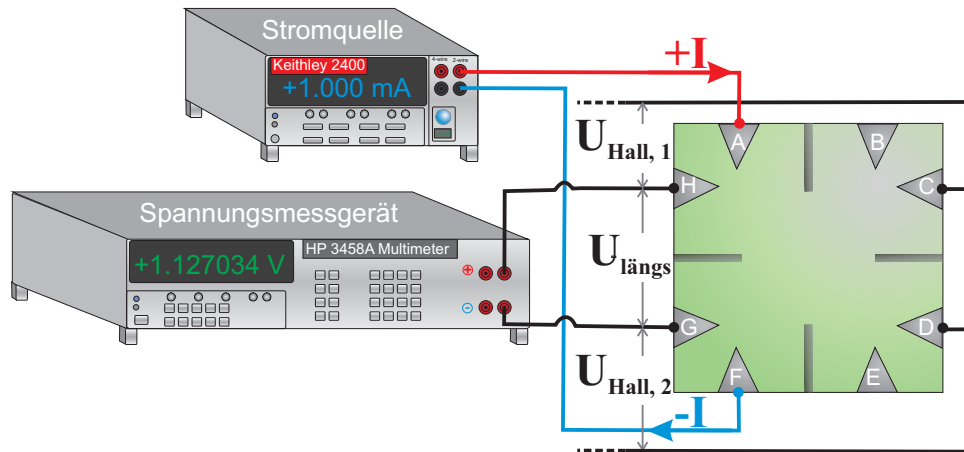


Abbildung 3.7.: Messgeometrie bei der 4-Punkt-Messung. Ein Strom I wird in die äußeren Kontakte (hier **A** und **F**) eingespeist, während an den Inneren Kontakten (hier **H** und **G**) die Potentialdifferenz gemessen wird. Die Hall-Spannung kann dann am Kontaktpaar **CH** und **DG** abgegriffen werden.

die Kontaktwiderstände, wie dies bei der 2-Punkt-Methode der Fall ist. Die Kontaktanordnung wie sie in Abb. 3.7 gezeigt ist, ermöglicht die Messung des Längswiderstandes in zwei Richtungen, horizontal und vertikal. Handelt es sich um eine gestufte Silizium-Oberfläche, die beispielsweise die Stufenkanten entlang der vertikalen ausgerichtet hat, so ist es möglich die Leitfähigkeit entlang der Stufen und senkrecht dazu zu vermessen. Dies ist der eigentliche Grund, warum die Probe mit acht anstatt vier Kontakten versehen ist. Möchte man den Leitwert entlang der Stufen messen, so wird der Strom z. B. über die Kontakte **A** und **F** eingepreßt, während die Spannungsdifferenz an den Kontakten **H** und **G** abgegriffen wird. Eine Messung senkrecht zu den Stufen könnte z.B. mit den Stromkontakten **C** und **H** und den Spannungskontakten **B** und **A** von statten gehen. Um die Hall-Spannung bei Anwesenheit eines Magnetfeldes zu messen, bleiben die Stromkontakte (**A** und **F**) unverändert, lediglich für die Spannungsmessung wird ein anderes Paar, welches senkrecht zur Stromrichtung angeordnet ist, verwendet. Dies können dann also **CH** bzw. **DG** sein.

Der Längswiderstand der Schicht ergibt sich aus den Messwerten dann einfach zu: $R = \frac{I}{U_{\text{längs}}}$. Um daraus aber die Leitfähigkeit berechnen zu können muss man noch berücksichtigen, dass der Abstand der Kontakte nicht äquidistant ist. Nach Gleichung 2.35 und den hier vorliegenden geometrischen Abständen zwischen Strom- und Spannungskontakten ergibt sich für die Leitfähigkeit:

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = -\frac{I}{2\pi} \left[\ln \left(\frac{9.3 \text{ mm}}{12.7 \text{ mm}} \right) - \ln \left(\frac{12.7 \text{ mm}}{9.3 \text{ mm}} \right) \right] \approx 2.7 \cdot \frac{\ln(2)}{\pi} \frac{I}{U_{\text{längs}}}.$$

Also ein Korrekturfaktor von 2.7, um den der Schichtleitwert zu klein gemessen wird. Auch bei Messungen in der Van der Pauw Messgeometrie ⁴ (Vgl. Kap. 2.2.6) ergeben sich typischerweise Schichtwiderstände, die etwa um einen Faktor 3 höher liegen. Dieser Faktor sollte immer mit einbezogen werden um den korrekten Wert zu bestimmen.

Ein Nachteil dieser 4-Punktanordnung ist, dass der Strom, bedingt durch die kleeblattförmige Probengeometrie mit Einschnitten, nicht symmetrisch durch die Schicht fließt. Dadurch erge-

⁴also z.B. die Messung der Widerstände $R_{AF,EB}$ und $R_{FE,BA}$, mit $R_{\text{vdP}} = \frac{R_{AF,EB} + R_{FE,BA}}{2}$

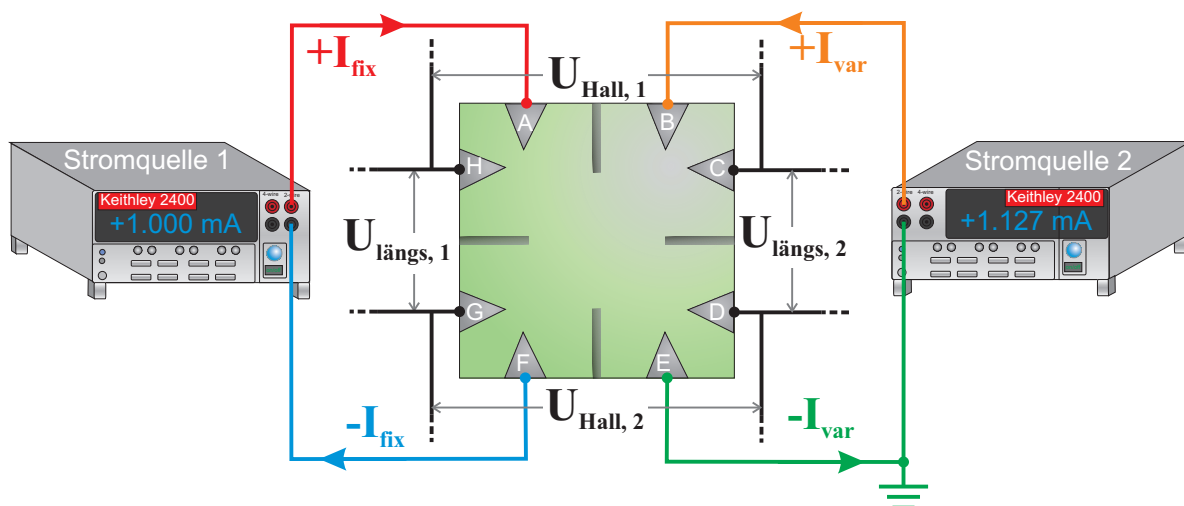


Abbildung 3.8.: Messanordnung bei der stromsymmetrisierten 8-Punkt-Messung. Ein fester und ein variabler Strom (I_{fix} und I_{var}) werden in die Probe eingespeist. I_{var} wird so lange variiert bis beide Querspannungen minimal sind. Durch Rotation aller Kontakte um 90° kann die Messung dann auch in senkrechter Richtung gemacht werden.

ben sich Schwierigkeiten bei der Messung der Hall-Spannung. Der Strom fließt nicht genau parallel zur Längsseite, sondern hat auch Anteile in Querrichtung, sodass zwischen den Hall-Spannungskontakten ein Spannungsabfall aufgrund des Schichtwiderstandes und des longitudinalen Magnetowiderstandes gemessen wird, diese ist additiv zur Hall-Spannung. Eine Mittelung der beiden messbaren Hall-Spannungen kann diesen Effekt minimieren, beseitigt ihn in den meisten Fällen aber nicht vollständig. Ein Vorteil der Messung mit nur vier Kontakten ist aber, dass sie auch noch funktioniert, wenn einzelne der acht Kontakte fehlerhaft sind. Es lassen sich damit zumindest charakterisierende Messungen machen.

Will man allerdings hochpräzise Messungen, sowohl des Längswiderstandes als auch des Hall-Widerstandes machen, so muss man sich einer etwas komplizierteren Messanordnung bedienen, die alle acht Kontakte benutzt.

3.2.3. Stromsymmetrisierte 8-Pkt-Messung

Das Ziel bei dieser Messanordnung ist es, einen möglichst symmetrischen Stromfluss durch die Probe zu erzeugen, sodass mögliche Querkomponenten des Stromes sich gegenseitig kompensieren und effektiv nur ein Strom entlang der Probe vorhanden ist. Dies wird Fehler bei der Messung der Hall-Spannung deutlich reduzieren. Wie in Abb. 3.8 gezeigt, benutzt man jetzt zwei anstatt einer Stromquelle. Die erste Stromquelle liefert einen konstanten Strom I_{fix} , der von Kontakt **A** zu **F** fließt. Die zweite Stromquelle speist einen Strom I_{var} von Kontakt **B** zu **E** ein. Dieser wird zu Beginn einer Messung (also z.B. bei konstanter Proben­temperatur und ohne Magnetfeld) so lange variiert, bis die Querspannungen $U_{\text{Hall},1}$ und $U_{\text{Hall},2}$ minimal sind oder im besten Fall, Null werden. Somit liegen die Hall-Spannungskontakte auf beiden Seiten der Probe auf gleichen Potential und es gibt keine Querkomponenten des Stromes, die zu einem Spannungsabfall führen und so die Hall-Messung stören. Der Strom fließt symmetrisch nur

entlang der Probe. Die so gefundenen Stromwerte bleiben dann in der Folge unverändert und eine Leitfähigkeitsmessung, etwa in Abhängigkeit des Magnetfeldes, kann gestartet werden. Der Leitwert bestimmt sich dann aus den Messwerten wie folgt:

$$G = \frac{I_{\text{fix}} + I_{\text{var}}}{\frac{1}{2}(U_{\text{längs},1} + U_{\text{längs},2})}$$

In der 8-Punkt-Messanordnung lassen sich die Kontaktabstände nicht mehr so einfach definieren. Durch das Zusammenspiel der beiden Stromquellen ergeben sich sozusagen effektive Kontaktabstände. Vergleicht man aber die aus 4-Punkt-Messung und 8-Punkt-Messung erhaltenen Messwerte des Leitwerts der gleichen Metallschicht, so liegen die der 8-Punktmessung typischerweise um einen Faktor 2-2,5 höher als bei der 4-Punkt-Messung. Und entspricht damit relativ gut den Werten, die man mit Hilfe der Van der Pauw Messgeometrie erhält. Somit liefert die 8-Punkt-Messung direkt den wahren Schichtleitwert.

Die 8-Punkt-Messung funktioniert immer dann besonders gut, wenn der Leitwert der zu untersuchenden Schicht hoch ist, d.h. in der Größenordnung 1 mS und darüber liegt, und die Schicht homogen über die gesamte Probe geschlossen ist. Bei der Untersuchung von Monolagen einer Metallschicht, bei dem die Leitfähigkeit typischerweise deutlich niedriger liegen und zusätzlich durch präparative Schwierigkeiten die Schicht nicht auf der gesamten Fläche vorhanden ist, scheidet in manchen Fällen schon die Symmetrisierung des Stroms zu Beginn der Messung. Ebenso kann es passieren, dass einer der acht Kontakte ausfällt, etwa durch Verrutschen einer Kontaktklemme oder ähnliches. Daraufhin ist es nicht mehr möglich die 8-Punkt-Messung zu verwenden und man muss auf die oben beschriebene 4-Punkt-Messung zurück greifen.

3.3 Spin- und Winkel-aufgelöste Photoelektronenspektroskopie

Die *Winkel-aufgelöste Photoelektronenspektroskopie* (engl.: *Angle Resolved Photo-electron Emission Spectroscopy*, ARPES) ermöglicht die gleichzeitige Messung der Bindungsenergie, sowie des Impulses von Photoelektronen, sodass die Dispersionskurven elektronischer Zustände von Festkörpern sichtbar gemacht werden können. Die Bindungsenergie ergibt sich aus der Anregungsenergie der Röntgenphotonen $E_{ph} = h\nu$, der kinetischen Energie des Photoelektrons E_k und der Austrittsarbeit Φ der emittierenden Oberfläche zu:

$$E_b = h\nu - E_k - \Phi$$

und wird typischerweise mittels eines Halbschalen-Kugelanalysators gemessen. Der Elektronenimpuls parallel zur Oberfläche ergibt sich aus der Messung des Austrittswinkels θ gemäß:

$$\vec{k}_{\parallel} = \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}} \sin \theta$$

Die dritte quantenmechanische Observable eines Photoelektrons ist sein Spin. Zur Messung dieses, wird ein Mottpolarimeter verwendet. Es nutzt den Effekt aus, dass bei hohen kinetischen Energien >25 keV die Streuung an schweren Kernen von der relativen Spinausrichtung abhängig ist [129]. Technisch wird dafür eine dünne Goldfolie verwendet. Elektronen mit *Spin-up* werden bevorzugt nach links gestreut, während *Spin-down* Elektronen mit höherer Wahrscheinlichkeit

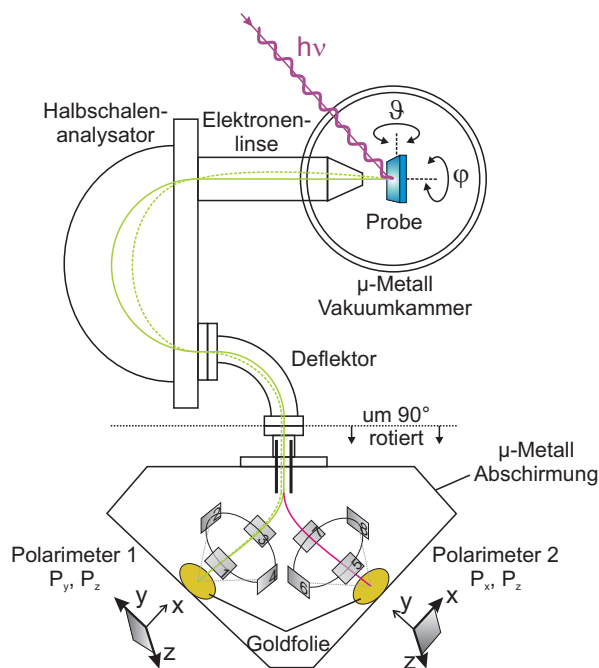


Abbildung 3.9.: Aufbau des SARPES-Spektrometers (COPHEE Experiment, SIS Beamline an der Swiss Light Source) mit Elektronenlinse, Kugelanalysator und 2 senkrecht zueinander orientierten Polarimetern für die Spinanalyse. Nach:[127, 128]

nach rechts, bezogen auf eine bestimmte geometrische Ebene, relativ zur Folienoberfläche, abgelenkt werden [62]. Die Spin-Asymmetrie A berechnet sich aus der Anzahl der nach links und rechts gestreuten Elektronen N_L und N_R :

$$A = \frac{N_L - N_R}{N_L + N_R}. \quad (3.4)$$

Der Erwartungswert des Spinoperators oder auch *Spinpolarisation* P genannt, ergibt sich aus der gemessenen Asymmetrie und der gerätespezifischen *Sherman-Funktion* S , die der Asymmetrie bei Messung mit einem vollständig polarisierten Elektronenstrahl entspricht [130], zu:

$$P = \frac{A}{S}.$$

Mit Hilfe der gemessenen Gesamtintensität $I_t = N_L + N_R$ bekommt man letztlich die spinaufgelösten Intensitätsspektren:

$$I_{up} = \frac{(1 + P)I_t}{2}, \quad I_{down} = \frac{(1 - P)I_t}{2}. \quad (3.5)$$

Ein einzelner Mott-Detektor kann jedoch nur die Polarisation entlang zwei Raumachsen bestimmen, die normalerweise mit Richtungen innerhalb der Oberfläche übereinstimmen. Möchte man Informationen über die dritte Polarisationsrichtung, senkrecht zur Oberfläche, bekommen, so braucht man eine Anordnung von zwei Polarimetern, die orthogonal zueinander angeordnet sind. Damit lässt sich dann spinaufgelöstes ARPES (Spin and Angle Resolved Photo-electron Emission Spectroscopy - SARPES) machen. Abbildung 3.9 zeigt den Aufbau wie er am *Complete*

Photoemission Experiment (COPHEE) der *SIS Beamline* an der *Swiss Light Source* realisiert wurde. Nach der Energie- und Winkelanalyse durch den Halbschalendetektor werden die Elektronen nochmals um 90° rotiert und in einem Chopper abwechselnd um $\pm 45^\circ$ in Richtung einer der beiden Mott-Polarimeter abgelenkt. Hier findet die Hochbeschleunigung auf 25 keV statt. Um die Goldtargets herum befinden sich jeweils 4 Detektoren zur Messung von jeweils zwei Anisotropien und Spinpolarisationen pro Polarimeter. Polarimeter 1 bestimmt P_y und P_z , während Polarimeter 2 P_x und P_z bestimmt. Somit hat man bei jeder Messung einen Satz aus 4 Messgrößen: I_t, P_x, P_y, P_z . Diese werden als Funktion der Bindungsenergie (Energy Distribution Curve - EDC) oder auch des Emissionswinkels ϑ (Momentum Distribution Curve - MDC) aufgenommen und mit Hilfe einer Zwei-Schritt Fitroutine [62, 63, 131] analysiert. Im ersten Schritt wird lediglich die spinintegrierte Intensität $I_t(E, \vec{k})$ mittels eines (linearen) Untergrundes $B(E, \vec{k})$ und für die Intensitätsmaxima bei bestimmten Punkten Gauss-, Lorentz- oder Voigt-Funktionen für die Anpassung verwendet, sodass:

$$I_t(E, \vec{k}) = \sum_{i=1}^n I^i(E, \vec{k}) + B(E, \vec{k}).$$

Erst im zweiten Schritt wird jedem Peak ein Polarisationsvektor mit einer Länge c_i und jeweils einem Azimuth- und Polarwinkel (θ_i, ϕ_i) in der Form:

$$\vec{P} = (P_x^i, P_y^i, P_z^i) = c_i(\cos \theta_i \cos \phi_i, \cos \theta_i \sin \phi_i, \sin \theta_i)$$

zugewiesen. Mithilfe von Gl. 3.5 wird dann eine Anpassung an die gemessene Polarisation durchgeführt, indem zunächst die Winkel θ_i und ϕ_i variiert werden und falls nötig auch die Länge c_i der Vektoren. Da für jeden Peak eines Spektrums somit 5 Fitparameter angepasst werden müssen (Position, Breite, 2 Winkel und die Länge des Polarisationsvektors) ist das Ergebnis nicht zwangsläufig eindeutig. Daher müssen vor dem Fit bestimmte physikalisch sinnvolle Annahmen für die zu bestimmenden Größen gemacht werden. Der beste Fit wird durch mehrmaliges Fitten mit unterschiedlichen Anfangswerten überprüft. Auf nähere Details dieser Methode wird in der Literatur eingegangen [62, 63, 131, 127].

Mit der SARPES-Methode wird hier das Pb-Kettensystem auf Si(557) untersucht. Wie Kapitel 4.5 zeigt, beobachtet man bei diesem System eine überaus große Rashba-Aufspaltung der Oberflächenbänder.

Untersuchung von ultradünnen Bleischichten und Bleimonolagen auf Si(557)

Bereits in Kapitel 2.7 wurde auf die Eigenschaften von Bleischichten auf Si(111) und Si(557) eingegangen. Am erstaunlichsten ist dabei wohl der 1D-2D Phasenübergang bei 78 K und einer Pb-Bedeckung von 1.31 ML. Der sowohl elektronischer als auch struktureller Natur ist und auf Fermi-Nesting zwischen benachbarten Pb-Ketten der (223)-Stufenanordnung zurück zu führen ist. Offene Fragestellungen bei diesem System ergeben sich in drei Richtungen. Zum einen ist bekannt, dass der Phasenübergang nur unter perfekten Bedingungen beobachtet wird [14]. Andere Gruppen konnten ihn bisher nicht nachweisen [132]. Doch es ist unklar inwiefern strukturelle Defekte und Imperfektionen der Oberfläche den Phasenübergang beeinflussen. Durch gezielte Manipulation der Facettenstruktur der Oberfläche und Variation der Defektdichte wird dieser Punkt in Kap. 4.3 beleuchtet. Ein zweites Feld betrifft das Filmwachstum, welches auf Si(111) daran krankt, dass durch die große Gitterfehlانpassung die ersten vier Lagen amorph aufwachsen [133]. Das Wachstum auf Si(557) soll zeigen, ob es möglich ist, den Stress zu vermindern und epitaktisches Wachstum von Beginn an zu ermöglichen (siehe Kap. 4.1). Quanten-Size-Effekte werden dabei eine wichtige Rolle spielen. Die grundlegendste Frage bezieht sich aber auf die Spinstruktur der Monolagenphase und inwiefern diese Einfluss auf die Streumechanismen in den Ketten und senkrecht dazu hat. Zu diesem Zweck werden in Kap. 4.4 Magnetotransportmessungen durchgeführt, mit deren Hilfe die charakteristischen Streuzeiten ermittelt werden können. Komplementiert werden diese Untersuchungen dann mit SARPES Messungen in Abschnitt 4.5, die die Spinstruktur des Pb-Kettensystems offen legen werden und die Magnetotransport Ergebnisse erklären, wie es in der abschließenden Diskussion in 4.7 vorgeführt wird.

Teile der hier vorgestellten Ergebnisse sind bereits in [134, 135, 136, 137] veröffentlicht worden.

4.1 Epitaktisches Wachstum von Pb auf Si(557)

4.1.1. Stressrelaxation an Stufenkanten

Das epitaktische Wachstum von Pb-Dünnschichten auf dem planaren Si(111)-Substrat wurde in der Vergangenheit detailliert untersucht und ist gut verstanden. Durch die Unterschiede der Gitterkonstanten beider Materialien von fast 10 % ergibt sich dabei allerdings eine Spannung beim Wachstum, dies führt zu amorphem Wachstum der ersten vier Pb-Lagen und baut so die

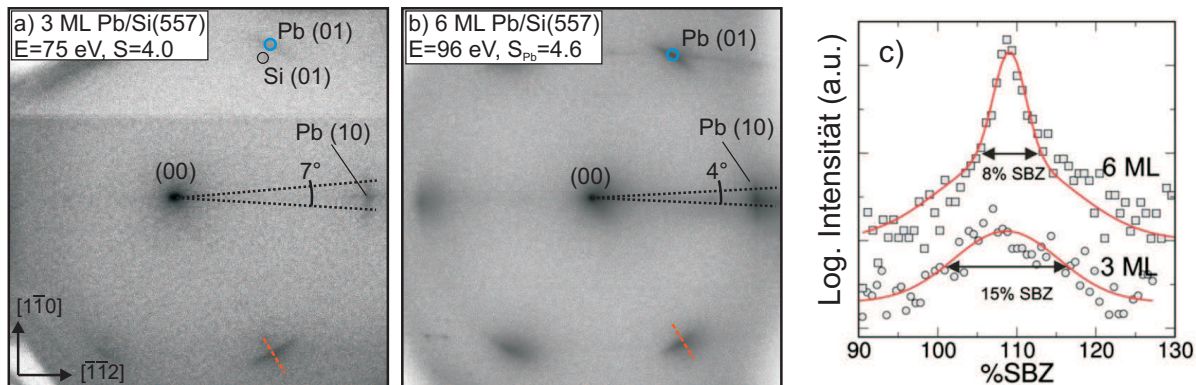


Abbildung 4.1.: a) und b) Beugungsbild eines 3 und 6 ML dicken Pb Filmes nach Adsorption auf Si(557), bei 80 K. Die hexagonal angeordneten Spots sind azimuthal verschmiert, woaus man eine Rotationsfehlordnung ableiten kann, sie ist beim dünneren 3 ML Film stärker ausgeprägt. Die gepunkteten Linien sollen das verdeutlichen. c) Linienprofile gemessen jeweils in radialer Richtung entsprechend den orange-farbenen Linien in a) und b) zeigen die Verbreiterung der LEED-Reflexe bedingt durch die endliche Ausdehnung der Pb-Kristalle.

Verspannung ab. Erst danach kann es zu einem epitaktischen Wachstums kommen [133]. In diesem Regime konnten Oszillationen, zum einen der Intensität des (00)-Beugungsreflexes in LEED, zum anderen der Leitfähigkeit gemessen werden, die dem generellen Leitfähigkeitsanstieg überlagert sind [75, 76]. Letztere wurden auf Effekte der Grenzflächenstreuung zurückgeführt, die auch als klassische Size Effekte bezeichnet werden. Nach der Theorie von Fuchs und Sondheimer [138, 139] kann die Reflexion der Elektronenwellen an der Grenzfläche mit einem Faktor für die spekulare Intensität beschrieben werden, der 1 für perfekte Spiegelung und 0 für komplett diffuse Streuung an der Grenzfläche ist. Dementsprechend würden perfekt glatte und geschlossene Metallschichten einen Wert nahe 1 liefern, während maximal ungeordnete, halb gefüllte Lagen, einen Wert nahe 0 liefern. Die Observation der Oszillationen bestätigt unter diesen Annahmen ein Lage-für-Lage Wachstum der Pb-Schichten mit Maxima für ganze (geschlossene) und Minima für halbe (maximal ungeordnete) Monolagen.

Durch die Fehlanpassung bedingt, weisen die Kristallite der epitaktischen Pb-Dünnschicht eine leichte Rotationsunordnung auf. Sie sind relativ zur Hauptsymmetrieachse von Si(111) um kleine Winkel verdreht, was sich in LEED-Messungen durch eine hexagonale Anordnung der Beugungsreflexe, gepaart mit ringförmigen Verbreiterungen dieser Reflexe, äußert.

Die Idee ist nun, bei einer solchen Heteroepitaxie, durch äußere Einflüsse den durch die Gitterfehlanpassung erzeugten Stress zu minimieren. Vielversprechend in dieser Hinsicht ist die Nutzung von verschiedenartigen Benetzungsschichten vor dem eigentlichen Pb-Schichtwachstum. Wie Jalochocki mit Au-6 × 6 [140, 141] und Miyata mit Pb-√3 × √3 [142] zeigten, ist ein epitaktisches Wachstum auf Si(111) auch ab der ersten Lage möglich. Ein komplementärer Ansatz ist die Nutzung von strukturellen Eigenschaften um die Spannung zu reduzieren. Dies wird in dieser Arbeit realisiert, indem Pb Schichten auf dem gestuften Si(557) bei Temperaturen unter 100 K aufgebracht werden. Abbildung 4.1 zeigt SPA-LEED Beugungsbilder einer 3 ML und 6 ML dicken Pb-Schicht nach der Aufbringung auf Si(557) bei 80 K Substrattemperatur. Schon nach 3 ML sind die Pb-Beugungsreflexe deutlich zu erkennen. Hexagonal angeordnet weisen die

Pb(111)-Reflexe allerdings in azimuthaler Richtung eine deutliche Verbreiterung auf, was ähnlich wie oben auf eine Rotationsfehlordnung der Pb-Kristalle relativ zum Siliziumsubstrat hindeutet. Die Analyse zeigt, dass die Verbreiterung des Reflexprofils bei 3 ML 7° und bei 6 ML nur noch 4° beträgt, sie also mit wachsender Schichtdicke geringer wird. Aus der Reflexbreite in radialer Richtung lässt sich eine Abschätzung der Pb-Korngröße machen. Wie die Abbildung zeigt, beträgt die Halbwertsbreite in Gegenphase-Bedingung ($S=4.6$) beim 6 ML Film, etwa $H = 8\% \text{ SBZ}_{\text{Si}}$. Nach Gl. 2.16 ergibt sich daraus eine Korngröße $\Gamma = 4/H = 4 \cdot a_{\text{Si}}/(8\% \cdot 2\pi) \approx 12a_{\text{Si}}$. Die Kristalle sind also größer als eine Stufenbreite der Si(557) und überwachen somit die Stufen der Unterlage.

Beim 3 ML Film sind noch schwach die Reflexe der Silizium 1×1 erkennbar, die bei größerer Schichtdicke d verschwinden. Die Pb-Filme wachsen also von Beginn an in geschlossenen Schichten auf dem gestuften Substrat und überwachen die Stufen, sodass der anisotrope Charakter der Oberfläche mit wachsender Pb-Bedeckung rasch abnimmt. Wie wir später sehen werden, trifft dies nicht für die Transporteigenschaften während des Schichtwachstums zu und die Anisotropie bleibt hier noch deutlich länger nachweisbar.

Bei konstanter Substrattemperatur von 70K und Pb-Verdampfungsrate von 0.1-1 ML/min

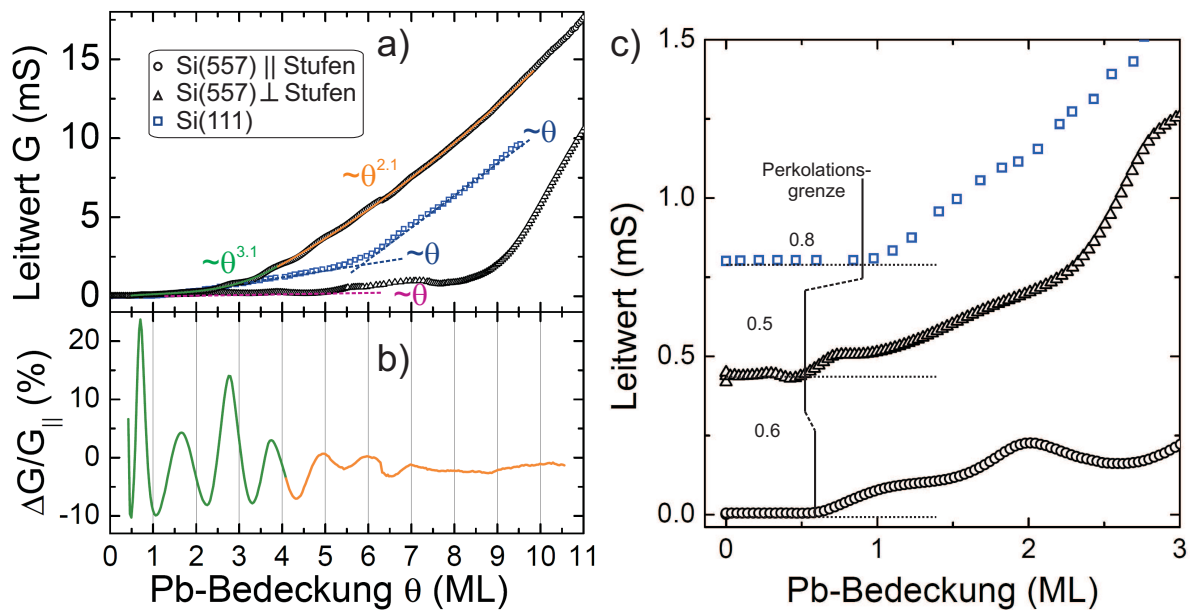


Abbildung 4.2.: a) Änderung des Leitwerts in Abhängigkeit der Pb-Bedeckung Θ bei einer Substrattemperatur von 70 K. a) Vergleich zwischen G_{\parallel} und G_{\perp} und Messungen aus [143] auf Pb/Si(111). b) Oszillationen von G_{\parallel} nach Abzug des θ^3 bzw. θ^2 -Verlaufs, normiert auf G_{\parallel} . Mehr als 7 Maxima sind erkennbar. Für kleine Θ weichen ihre Positionen von der Komplettierung einer Monolage nach unten ab. c) Detailansicht von a) für kleine Θ . Der initiale Anstieg von G nach Überschreiten der Perkolationsgrenze unterscheidet sich zwischen Si(557) und Si(111). Die Kurven wurden zur besseren Sichtbarkeit entlang der Ordinate verschoben.

wird die Leitfähigkeit in Abhängigkeit der Pb-Schichtdicke gemessen (Abb. 4.2 a). Dabei wurde Quarzwaage entsprechend der Vorgehensweise in Kap. 3.1.3 geeicht und das Lage-für-Lage Wachstum von Pb bei Schichtdicken >5 ML ausgenutzt. Nach Überschreiten der Perkolationsgrenze, bei der sich erste Leitungspfade ausbilden, steigt die Leitfähigkeit stetig an. Diese Grenze

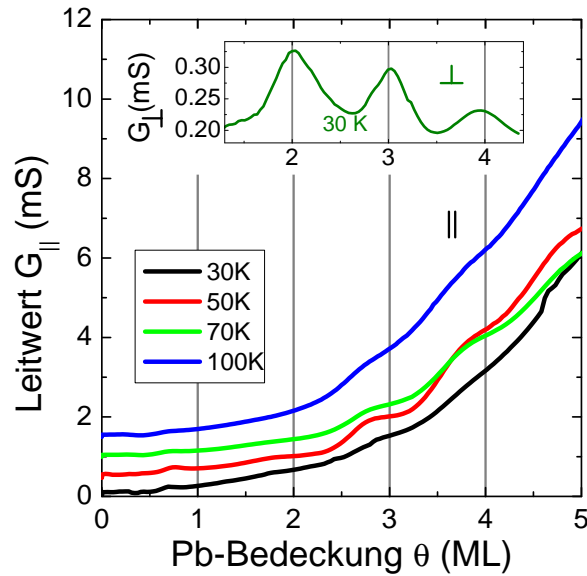


Abbildung 4.3.: Leitwertmessungen $G_{||}$ bei verschiedenen Substrattemperaturen zwischen 30 und 100K. Auch bei sehr tiefen Temperaturen lassen sich periodische Abweichungen vom allgemeinen Anstieg erkennen. Am ausgeprägtesten sind die Oszillationen bei 50 K und 70 K. Die Datensätze wurden zur besseren Unterscheidung vertikal verschoben. Im Bild oben ist für 30 K auch G_{\perp} gezeigt, bei dem die Oszillationen deutlich ausgebildet sind.

liegt theoretisch, für total zufällige Besetzung der Adsorptionsplätze, bei 0.5 ML. Genau diesen Wert kann man auch in den Messungen feststellen, sowohl parallel als auch senkrecht zu den Stufen (Abb. 4.2 c). Ein klares Indiz dafür, dass Pb bei dieser Temperatur und Bedeckung nur zweidimensional wächst (mit anisotropem Charakter wie weiter unten gezeigt wird), und sich keine zweite Lage oder dreidimensionale Inseln bilden. Bei den Messungen von Pfennigstorf [143] auf Si(111) wurde lediglich ein Wert von 0.7 ML ermittelt (zum Vergleich auch in 4.2 c) dargestellt). Wie Abbildung 4.2 a) zeigt, sind dem allgemeinen Leitfähigkeitsanstieg Oszillationen überlagert, wie dies auch für das Pb-Wachstum auf Si(111), dort allerdings erst für größere Schichtdicken, beobachtet wurde. Diese hängen mit dem Lage-für-Lage Wachstum bei tiefen Temperaturen sowie einem Zusammenspiel von rauigkeitsabhängiger Reflektivität der Oberfläche und Quanten-Size-Effekten zusammen, worauf weiter unten noch genauer eingegangen wird. Im Wesentlichen ist das Auftreten der Oszillationen unabhängig von der Pb-Flussrate sowie der Temperatur zwischen 10 und 100 K, wie Abbildung 4.3 zeigt.

Vernachlässigt man zunächst die Leitwertoszillationen, so sieht man Unterschiede zwischen den beiden untersuchten kristallographischen Richtungen – parallel und senkrecht zu den Stufen. $G_{||}$ zeigt in Abb. 4.2 unterhalb von 5 ML einen Anstieg in etwa proportional zu d^3 , darüber eine quadratische Abhängigkeit $\propto d^2$. G_{\perp} hingegen steigt lediglich linear mit der Schichtdicke an, sodass die Leitfähigkeit σ_{\perp} bis etwa 6 ML konstant bleibt. Sie verläuft deutlich unterhalb der Kurve für $G_{||}$, dies zeigt zunächst den anisotropen Charakter der gestuften Si(557) und dem darauf wachsenden Pb-Film. Die Stufen wirken als sehr effektive Streuzentren, wodurch der Widerstand senkrecht erhöht ist. Erst oberhalb von 7 ML steigt G_{\perp} ebenfalls quadratisch

an und verläuft somit parallel zu G_{\parallel} , obgleich deutlich unterhalb dieser. Die auf dieser Schichtdicke aufgewachsenen Pb-Lagen sind aus elektronischer Sicht isotrop, jedoch nicht der darunter liegenden Lagen, die weiterhin anisotrop bleiben und als Offset in den Leitwertmessungen auch bei dickeren Filmen sichtbar bleiben. Der elektronische Transport ist somit deutlich sensitiver auf strukturelle Anisotropien als die nur oberflächensensitive Elektronenbeugung, die schon für 3 ML dicke Filme praktisch isotrope Verhältnisse zeigt (vgl. Abb. 4.1).

Die Frage ist nun, wodurch die unterschiedlichen funktionellen Zusammenhänge von $G_{\parallel/\perp}$ mit der Schichtdicke erklärt werden können. Hierzu ist es zunächst zweckdienlich die mittleren freien Weglängen λ , die für die Leitwerte verantwortlich sind, abzuschätzen. Aus ARPES-Messungen geht eine gemittelte Fermi-Wellenlänge von etwa 10^6 m/s hervor [144]. Eigene Magnetotransportmessungen ergeben elastische Streuzeiten im Bereich $\tau_0 \approx 5 \times 10^{-15}$ s (siehe [134] und späteres Kapitel 4.4), sodass sich die freie Weglänge zu $\lambda = v_F \times \tau_0 \approx 5$ nm ergibt. Diese stimmt sehr gut mit der Pb-Korngröße eines 6 ML dicken Filmes überein, wie es aus SPA-LEED Messungen bestimmt wurde (s.o.) und bis zu einer Schichtdicke von 10 ML gilt $\lambda > d$. Somit kann man die Streuung der Ladungsträger auf die Korngrenzen und Oberflächen beschränkt betrachten. *Trivedi* [145] und später *Calecki* [146] untersuchten die Leitfähigkeit dünner Schichten unter dem Einfluss von Quanten-Size-Effekten und implementierten Oberflächenrauigkeiten durch, vom Ort auf der Oberfläche abhängige, Randbedingungen für die Lösung der Schrödinger-Gleichung. Dabei fanden sie für $\lambda > d$ einen exponentiellen Anstieg $\sigma \propto d^\alpha$, wobei die Konstante in etwa zu $\alpha = 2.1$ bestimmt wurde. Wie Abbildung 4.2 zeigt ist dies für $G_{\parallel} = \sigma_{\parallel} \times d \propto d^{3.1}$ unterhalb von 5 ML sehr gut erfüllt. Sobald die Schichtdicke in den Bereich der freien Weglänge kommt, spielt die Störstellenstreuung im Volumen eine größere Rolle und ein Übergang zu quadratischer Abhängigkeit des Leitwerts mit der Schichtdicke ist zu erwarten [145]. Damit lässt sich der Übergang zum quadratischen Verlauf für $\Theta > 5$ ML in G_{\parallel} und 7 ML in G_{\perp} verstehen.

Der nahezu lineare Anstieg von G_{\perp} für kleine Θ hingegen, könnte mit der Annahme $\lambda \ll d$ verstanden werden, jedoch ist diese Abschätzung hier nicht zulässig, da die Stufen nicht so effektiv die freie Weglänge senkrecht dazu reduzieren können. Potentiometrie Messungen an atomar gestufen Pb-Filmen und Monolagen zeigten den großen Einfluss der Stufen bei der Ausbildung des elektrischen Widerstandes [147] und eine zehnfach erhöhte Widerstand bei der Überquerung einer Stufe im Pb-Film. Dies zeigt die verminderte Transmissionswahrscheinlichkeit der Ladungsträger senkrecht zu einer Substratstufe. Abhängig von der Schichtdicke ändert sich nun diese Transmissionswahrscheinlichkeit und führt letztlich auch zum linearen Anstieg von G_{\perp} .

Vergleicht man die Leitwertsänderungen der Pb-Filme gewachsen auf Si(557) mit denen auf Si(111) so erkennt man, dass die auf Si(111) genau zwischen G_{\parallel} und G_{\perp} liegen. Wie oben beschrieben steigt der Leitwert der Pb/Si(111) Schicht zunächst aufgrund des amorphen Wachstums der ersten 4 Lagen lediglich linear an und ist dadurch G_{\parallel} für Pb/Si(557) unterlegen, bei dem das kristalline Wachstum von der ersten Lage an statt findet. Somit zeigen die Ergebnisse, dass es möglich ist, durch gezielte strukturelle Manipulation eine Stressrelaxation an den Stufenkanten zu erzielen und ein epitaktisches Wachstum von Pb-Filmen auf Silizium zu ermöglichen.

4.1.2. Der Einfluss von klassischem und Quanten-Size-Effekt

Kehren wir zur Betrachtung der dem allgemeinen Leitwertverlauf überlagerten Oszillationen zurück. Um sie besser sichtbar zu machen, wurde in Abb. 4.2 b) entsprechend der Diskussion im obigen Kapitel für $\Theta < 5$ ML eine Funktion $\propto d^3$ und für $\Theta > 5$ ML eine Funktion $\propto d^2$

von den Rohdaten abgezogen und durch den Wert von $G_{\parallel}(\theta)$ geteilt. Deutlich zu erkennen sind die Oszillationen von Beginn des Wachstums bis hin zu 8 ML. Dabei stimmen die Maxima von G_{\parallel} für $\Theta \leq 4$ ML systematisch nicht mit der Vervollständigung einer Pb-Lage überein, sondern treten immer etwas früher auf. Für größere Schichtdicken hingegen ist die Koinzidenz aber gegeben. Bei G_{\perp} zeigen sich ebenfalls Oszillationen, die von Beginn an besser mit der vollen Monolage übereinstimmen, wie in 4.2 c) und 4.4 a) zu sehen ist.

Die Oszillationen werden mit zunehmender Schichtdicke gedämpft, da der Pb-Film immer weniger perfekt Lage für Lage wächst und die globale Rauigkeit zunimmt. Darüber hinaus erkennt man noch eine Modulation der Amplitude mit einer Periode von 2. Das zweite und vierte Maximum scheint dabei leicht unterdrückt zu sein. Zudem schwankt auch die Breite der Maxima mit einer 2 ML-Periode, wie nochmal in Abb. 4.4 b) gezeigt ist.

All diese Beobachtungen führen zu dem Schluss, dass für die untersuchten Pb-Schichten sowohl

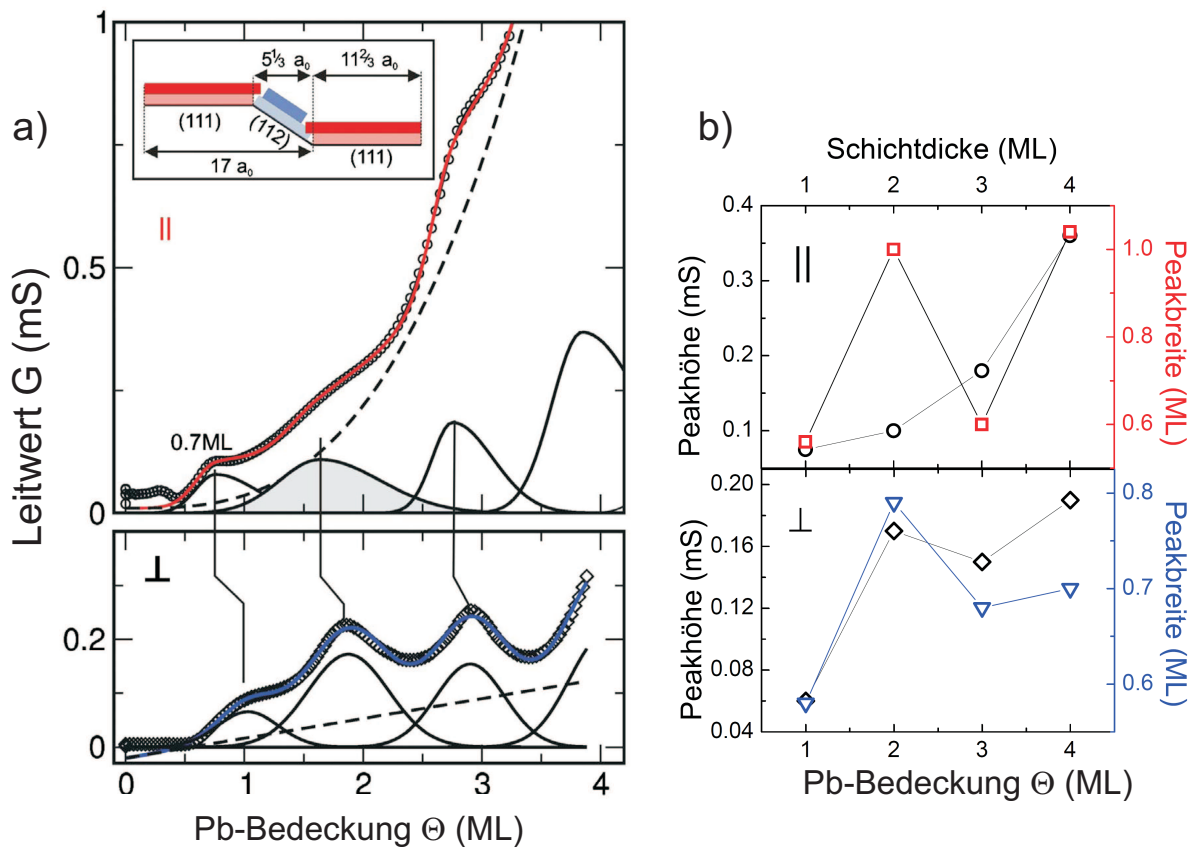


Abbildung 4.4.: Quanten Size Effekt in Pb-Filmen auf Si(557). a) Dem generellen Anstieg (Θ^3 für G_{\parallel} und $\propto \Theta$ für G_{\perp}) sind Maxima überlagert, die der Vervollständigung einer geschlossenen Lage in der jeweiligen Richtung und/oder der Erhöhung der Anzahl an Quantentopf-Zuständen entspricht. b) Variation der Peakhöhe und -breite mit der Anzahl an Pb-Lagen.

der Klassische als auch Quanten-Size-Effekt (CSE und QSE) eine Rolle spielen. Solange $\lambda > d$ ist und Grenzflächenstreuung wesentlich die Leitfähigkeit bestimmt, erklärt die oben genannte Fuchs-Sondheimer-Theorie raugkeitsabhängige Oszillationen im Leitwert. Für sehr kleine Schichtdicken, also für den Beginn des Pb-Wachstums, versagt diese Theorie und man muss die

interne Quantenstruktur in die Betrachtung einbeziehen. Für das Lage-für Lage Wachstum erwartet man bei jeder neuen geschlossenen Lage das Auftreten eines zusätzlichen Bandes bedingt durch die Beschränkung der Ladungsträger in z-Richtung, sowie eine Anpassung der bereits vorhandenen Subbänder. Damit einhergehend sind Änderungen in der Bandfüllung, wie alternierende Vorzeichen der Hallkonstanten in Abhängigkeit der Pb-Schichtdicke suggerieren [77]. Dementsprechend sollte der Leitwert unmittelbar nach Erreichen der Perkolation einer neuen Pb-Lage stark ansteigen und danach ein Plateau zeigen. Dies kann tatsächlich in den Messungen bestätigt werden, wie Abb. 4.2 c) und 4.4 a) für das erste Maximum von $G_{||}$ bei 0.7 ML zeigt. Die Tatsache, dass für $G_{||}$ die Maxima zunächst vor der vollen Lage auftreten, kann sowohl durch CSE als auch durch QSE nicht ausreichend erklärt werden. Hierfür müssen zusätzlich noch dynamische Effekte des Wachstumsmodus eine Rolle spielen. Der Wert 0.7 stimmt nämlich erstaunlich gut mit dem Anteil der Si(111)-Terrassen in der Einheitszelle der Si(557) überein, hierfür gilt: $(9 + 2\frac{2}{3})a_{Si}/17a_{Si} = 0.69$ (siehe Abbildung 2.14 a) und Inset in 4.4 a). Aus Untersuchungen an ausgeheilten Pb-Monolagen (genauer gesagt der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Phase) auf Si(557) weiß man, dass sich die Pb-Atome bevorzugt auf den Si(111)-Terrassen anordnen bevor sie die Stufenkanten dekorieren [82, 148]. Da man in diesem Fall eine sehr ähnliche Stufenstruktur hat, kann man davon ausgehen, dass auch beim Wachstum bei tiefen Temperaturen die Pb-Atome bevorzugt Adsorptionsplätze auf den Si(111) Terrassen aufsuchen und erst nach kompletter Füllung dieser auf den Stufen bleiben. Somit kann sich entlang der Stufenrichtung schon bei 0.7 ML eine voll gefüllte Lage ausbilden, während senkrecht dazu erst mit Vervollständigung der ersten Pb-Lage, also erst wenn die Stufen komplett bedeckt sind, ein Maximum im Leitwert beobachtet werden. Im weiteren Verlauf des Wachstums ist es nun verständlich, dass die Bevorzugung der Terrassen immer weiter abnimmt, und für $\theta \geq 5$ ML die Maxima von $\frac{\Delta G}{G_{||}}$ mit ganzen Monolagen übereinstimmen (siehe auch Abb. 4.2 b)). Schematisch ist der Wachstumsmodus in dem kleinen Bild links oben von 4.4 a) verdeutlicht. Nur entlang der Stufen hat man zunächst eine geschlossene Lage, bevor die Stufen überwachsen werden. Das gleiche passiert auch in der zweiten Lage, jedoch wird die Restriktion durch die Stufen mit wachsender Schichtdicke immer geringer und so auch die Phasendifferenz, wie in Abb. 4.4 gezeigt, kleiner.

4.2 Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit – Pb-Schichten und Monolagen

Wie wir im letzten Kapitel gesehen habe, weisen Pb-Filme abhängig von ihrer Dicke unterschiedliche Eigenschaften auf. Ein ähnliches Verhalten stellt man auch bei temperaturabhängigen Messungen fest. Dabei wurden nun aber ausgeheilte Schichten (Ausheilsschritt bei Multilagen bis etwa 200 K und Monolagen bis 640 K) untersucht, sodass strukturelle Änderungen während der Messung bei Temperaturen kleiner als der Ausheiltemperatur nicht zu erwarten sind. Abbildung 4.5 zeigt $G(T)$ -Messungen für Pb-Schichten unterschiedlicher Dicke. Ein 10 ML Film nimmt über den gesamten Temperaturbereich im Leitwert ab, ist also durch metallische Leitung charakterisiert. Auffällig sind dabei noch die leicht größeren Werte entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung (parallel zu Stufen). Auch bei dieser Schichtdicke zeigen sich in der Leitfähigkeit noch Einflüsse des gestuften Substrats, das über die Stufen hinweg zu erhöhter Ladungsträgerstreuung führt. Allerdings liegt der Unterschied lediglich im Bereich von nur etwa 5 %. Halbiert man die Schichtdicke auf nur noch 5 ML, so erkennt man in b), dass $G_{||}$ um das 6-fache, G_{\perp} sogar um

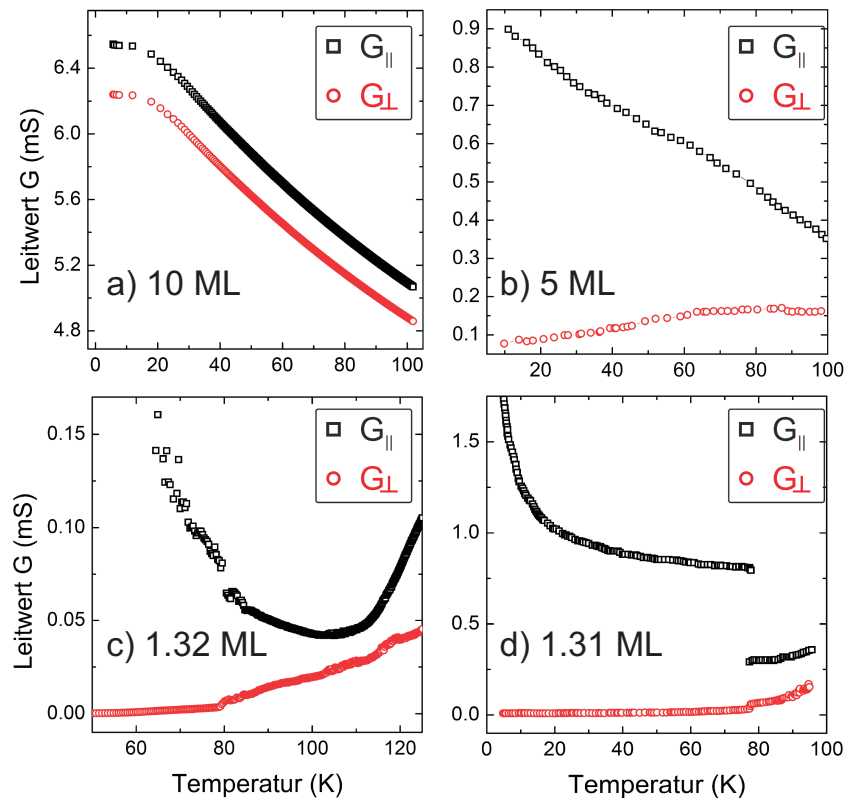


Abbildung 4.5.: Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit bei verschiedenen Pb-Bedeckungen (10, 5, 1.32 und 1.31 ML) (d) aus [14].

das 60-fache zurück gegangen ist. Hier ist also der anisotrope Charakter sehr deutlich ausgeprägt. Darüber hinaus ist auch das Temperaturverhalten in beiden Richtungen sehr unterschiedlich. Während G_{\parallel} weiterhin metallisch ist, zeichnet sich G_{\perp} nun durch eine ansteigende Leitfähigkeit mit der Temperatur, also aktivierten Transport, aus. Obwohl bei dieser Schichtdicke zumindest die Oberfläche des Films strukturell isotrop ist (Vgl. SPA-LEED Muster in Abb. 4.1 b), wirken die Stufen an der Pb/Si-Grenzfläche derart effektiv als Streuer, dass die Ladungsträger in senkrechter Richtung lokalisiert sind, während sie sich parallel zu den Stufen ungehindert bewegen können.

Die extreme Situation bildet schließlich die physikalische Monolage Pb wie sie in 4.5 c) und d) gezeigt ist und bereits in Kapitel 2.7 in Zusammenhang mit Abb. 2.18 behandelt wurde. Unterhalb einer kritischen Temperatur befindet sich das System in einem eindimensionalen Zustand, der durch perfektes Fermi-Nesting verursacht wird. Nur entlang der Pb-Ketten misst man endliche Leitwerte mit metallischem Charakter, während $G_{\perp} \approx 0$ ist. Genau an der Sprungtemperatur von 78 K geht das System in einen zweidimensionalen Zustand über, der in beiden Richtungen nun durch temperaturaktivierten Transport charakterisiert werden kann. Die Schärfe dieses Phasenübergangs in Leitfähigkeitsmessungen hängt empfindlich von der exakten Pb-Bedeckung (1.31 ML) und der damit verbundenen Bandfüllung, sowie einer perfekten Ausbildung der oben erwähnten (223)-Stufung auf mesoskopischer Skala ab. Schon bei einer Bedeckung leicht oberhalb der 1.31 ML ist der 1D-2D-Übergang zwar noch sichtbar aber schon deutlich weniger ausgeprägt, (siehe Abb. 4.5 c). Strukturelle Imperfektionen wie Facettierung der Oberfläche, Bildung

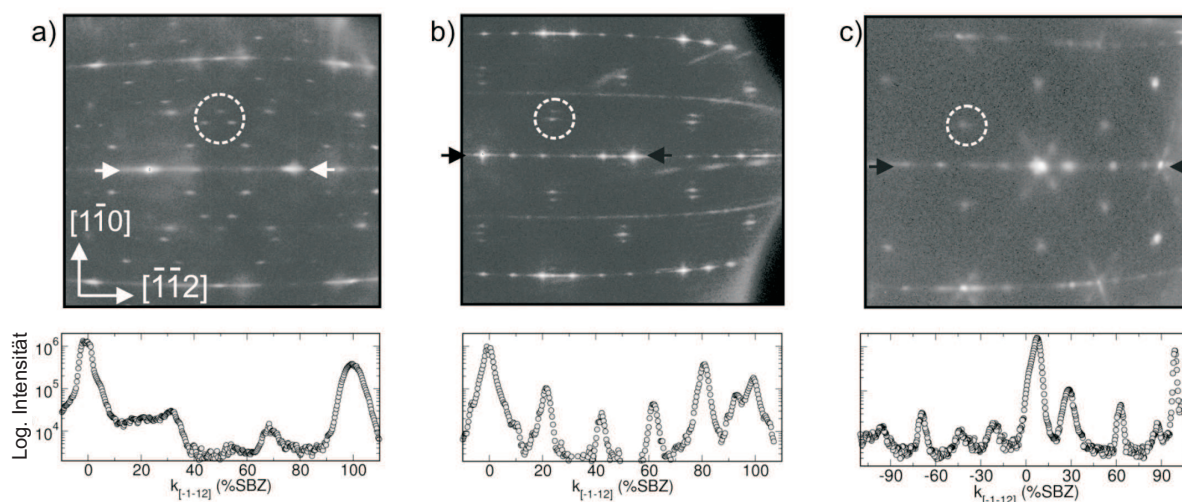


Abbildung 4.6.: LEED-Bilder von Pb/Si(557) im Bedeckungsbereich einer physikalischen Monolage. a) 1.2 ML Pb/Si(557): Die Stufenstruktur entspricht einer (223)-Facette, auf den Terrassen befinden sich lediglich $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ -Domänen, zu sehen an den dreieckigen Aufspaltungen um die $\sqrt{3}$ -Position. b) perfekt geordnete 1.31 ML Phase mit (223) Stufung und Domänenwandaufspaltung der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Reflexe von 10% BZ entlang der Pb-Ketten. c) 1.3 ML jedoch auf einer bereits sehr stark facettierten Oberfläche. Die Stufung ist nicht mehr perfekt, ebenso ist die Uniaxialität im Vergleich zu b) verloren gegangen. Die Linienprofile entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ zeigen den perfekten *steptrain* in b) und Imperfektionen in a) und c). Die Messungen wurden bei $T < 70$ K und einer Elektronenenergie von 99 eV ($S=5.1$) durchgeführt.

von großen Si(111)-Terrassen und Zusammenlaufen von Stufen (*step bunching*), verhindern die Ausbildung des quasi-1D Zustandes und den Phasenübergang gänzlich und erzeugen einen zweidimensionalen Transport, geprägt durch Ladungsträgerlokalisierung aufgrund der strukturellen Unordnung. Auf derartige Effekte wird im folgenden Kapitel 4.3 näher eingegangen.

4.3 Einfluss von Facettierung der Oberfläche auf die Transporteigenschaften

In den vorangegangenen Kapiteln wurden die Transporteigenschaften von ultradünnen Pb-Schichten vorgestellt. Im Besonderen wurde auf den 1D-2D Phasenübergang für die 1.31 ML Pb/Si(557) Phase eingegangen. Wie die Resultate dieses Kapitels jedoch zeigen werden, ist der Übergang in sensibler Weise von der mesoskopischen Struktur der Oberfläche abhängig und wird nur unter bestimmten Bedingungen beobachtet – schon geringe Abweichungen vom Optimum verhindern seine Existenz. Dass die exakte Pb-Bedeckung von entscheidender Bedeutung ist, sahen wir schon im Zusammenhang mit Abbildung 4.5 c) und d). Bei $\theta > 1.31$ ML ist bereits kein scharfer Sprung im Leitwert mehr zu beobachten.

Um Unterschiede der strukturellen Eigenschaften zu verdeutlichen sind in Abb. 4.6 Beugungsbilder dreier verschiedener Monolagenpräparationen gezeigt. Ausgangspunkt ist die perfekte

1.31 ML Phase in b), die auch den 1D-2D Übergang zeigt. Verglichen mit der reinen Si(557) Fläche (gezeigt in Abb. 2.15) hat sich das LEED-Muster drastisch geändert. Anstelle des *steptrain* mit 16 Reflexen zwischen den Hauptreflexen in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung beobachtet man nun noch 4 Reflexe im Abstand 21.4% BZ, entsprechend einer Länge von $4\frac{2}{3} a_{\text{Si}}$ im Realraum ($a_{\text{Si}}=3.325 \text{ \AA}$). Wie die spätere Diskussion zeigen wird, handelt es sich dabei um Facettenreflexe der [223]-Stufung, die bereits im Zusammenhang mit Abb. 2.14 b) angesprochen wurde. Durch die Pb-Adsorption findet eine Umstrukturierung der komplexen (557)-Stufenstruktur hin zu einer regelmäßig gestuften Fläche statt. Das Beugungsbild in 4.6 zeigt $\sqrt{3}$ -Reflexe, während die 7×7 gänzlich verschwunden ist. Dies ist verständlich, da die (111)-Terrassen der (223) Facette nun mit der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ Pb-Rekonstruktion versehen sind. Weiter wissen wir, dass entlang der Terrassen oder Ketten in dieser Phase eine bestimmte Periodizität besteht, die durch die $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -Domänenwände erzeugt wird (vgl. Abb. 2.14 c). Im Bereich einer physikalischen Monolage bilden sich bedeckungsabhängig die linearen Phasen der *devil's staircase* aus und verursachen ein Aufspalten des $\sqrt{3}$ -Reflexes in $[\bar{1}10]$ -Richtung, also entlang der Ketten. Für $\theta = 1.31 \text{ ML}$ beträgt die Aufspaltung $\Delta k_{[\bar{1}10]} = 10.5\% \text{ BZ}$ [82].

Ein anderes Bild ergibt sich im Falle etwas geringerer Bedeckung von 1.2 ML in 4.6 a)¹: Der (223)-*steptrain* in $[\bar{1}\bar{1}2]$ ist nicht vorhanden, anstatt dessen sieht man eine Aufspaltung von 37% BZ, die einer (112)-Facette zugeordnet werden kann, die jedoch weitaus weniger gut geordnet ist als die (223). Es treten dazwischen größere (111)-Terrassen auf, die die globale Orientierung der Probe erhalten. Auf diesen Terrassen bildet sich wegen der weniger dichten Bedeckung eine $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ Struktur, die im LEED-Muster eine symmetrische dreieckige Aufspaltung der Spots erzeugt (durch Kreis gekennzeichnet).

Aber auch im Fall, dass die Bedeckung 1.31 ML entspricht, ist eine Abweichung der Struktur vom Ideal möglich. Abb. 4.6 c) und 4.7 b) zeigen jeweils eine 10% BZ Aufspaltung der $\sqrt{3}$ -Reflexe, jedoch ist die Stufung im Vergleich zu b) deutlich inhomogener und der sichtbare *steptrain* hat eine Aufspaltung um 30% BZ (4.6 c) und entspricht damit eher dem Fall aus a), obwohl die Bedeckung höher ist. Auch bei diesen Präparationen ist die Oberfläche stark un-facettiert, da die reine Si-Fläche mehrmals auf sehr hohe Temperaturen um 1200 °C geheizt wurde und nicht mehr perfekt geordnet ist. Um die Facettenstruktur der hier diskutierten Präparationen näher zu untersuchen wurden Linienprofile ähnlich denen in Abb. 4.6 (unten) bei unterschiedlichen Energien gemacht und intensitätskodiert in einem k_{\perp} - k_{\parallel} -Plot (Heringplot) in 4.7 c) und d) dargestellt um die Beugungsstangen sichtbar zu machen. Für eine perfekt gestufte Fläche (a) verlaufen die Stangen parallel in [223]-Orientierung, während für die nicht ideale Fläche mit nominell 1.31 ML (b) zusätzlich noch Stangen in [111] und [113]-Richtung existieren. Auch sieht man anhand der nicht Gleichförmigkeit des LEED-Musters in b), dass die Fläche Bereiche verschiedener Rekonstruktionen und Phasen aufweist. All dies wirkt sich auf die Transporteigenschaften der Pb-Struktur aus und wird im folgenden diskutiert.

In Kapitel 4.2 wurde bereits die Empfindlichkeit des Leitwertssprungs in Abhängigkeit der exakten Pb-Bedeckung diskutiert und gezeigt, dass er bei $\theta > 1.31 \text{ ML}$ nur noch schwach ausgeprägt ist, da die Fermi-Nesting Bedingung exakt auf das Zusammenspiel aus Bandfüllung und Stufenstruktur reagiert. Der gleiche Datensatz wie in 4.5 d) ist bis zu höheren Temperaturen nochmals in 4.8 c) geplottet. Für G_{\parallel} sieht man einen starken Anstieg bei etwa 120 K, der charakteristisch für Ladungsträgerlokalisierung durch Defekte entlang der Ketten ist.

¹Diese Phase erhält man, indem man die Probe während der Pb-Bedampfung auf $T > 640 \text{ K}$ heizt und sich so eine Gleichgewichtsbedeckung kleiner als die 1.31 ML einstellt

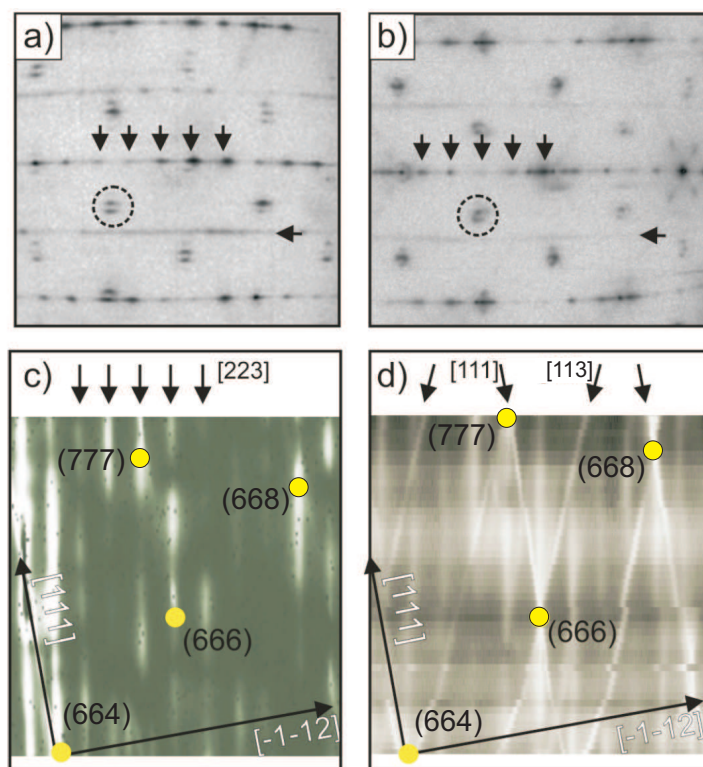


Abbildung 4.7.: LEED-Muster zweier Präparationen mit 1.3 ML Pb/Si(557), aufgenommen bei 99 eV Elektronenenergie ($S=5.1$). a) Perfekt gestufete (223)-Fläche mit Domänenwandaufspaltung wie in 4.6 b). b) Gleiche Bedeckung wie in a), jedoch mit leichter Umfacettierung der Oberfläche. Der Heringplot in c) und d) zeigt die Facettenorientierung in beiden Fällen. In d) sind neben der (223) noch (111) und (113)-Facetten sichtbar. (a) und c) aus [82])

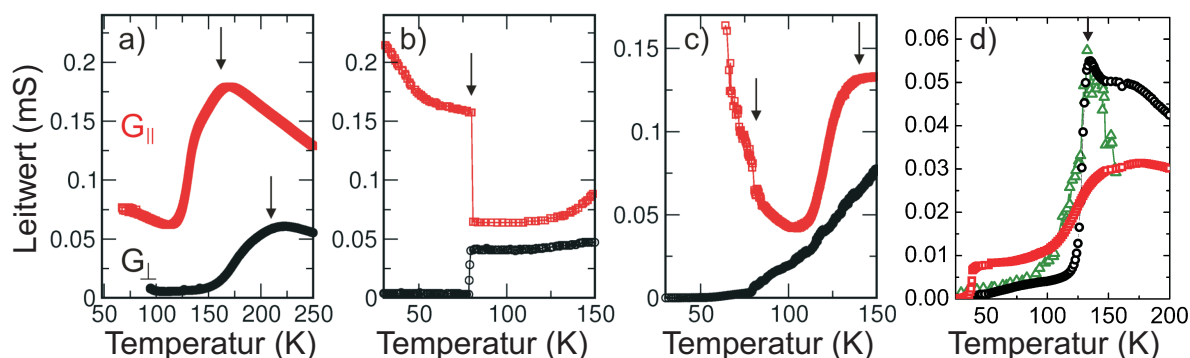


Abbildung 4.8.: Temperaturabhängige Leitwertmessungen verschiedener Pb/Si(557)-Phasen. In Rot ist jeweils G_{\parallel} in Schwarz G_{\perp} gezeichnet. a) 1.27 ML. b) 1.31 ML mit perfektem scharfem 1D-2D Phasenübergang. c) 1.32 ML weist einen deutlich weniger scharfen Übergang auf. d) 1.31 ML auf einer sehr stark umfacettierten Oberfläche entsprechend der Phase die in Abb. 4.6 c) gezeigt ist. In Grün wurden Daten aus [132] eingezeichnet, sie stimmen erstaunlich gut mit den vorgestellten Daten überein.

Den Einfluss von Defekten, korrespondierend mit einem starken Leitwertanstieg erkennt man auch in 4.8 a) und d) für Präparationen, die starke Umfacettierungen aufweisen.² In a) erkennt man zudem noch einen Übergang zwischen halbleitenden Charakter für niedrige Temperaturen zu metallischem Charakter für hohe Temperaturen³, dabei zeigt G_{\parallel} bei 160 K und G_{\perp} um 220 K ein Maximum. Im letzteren Fall korrespondiert die Temperatur sehr gut mit der Annahme, dass für hohe Temperaturen die Verarmungszone an der Si-Grenzfläche durch Ionisation der Störstellen zum Transport beiträgt [149]. Damit sieht man, dass senkrecht zu den Stufen nur der aktivierte Ladungsträgertransport in der Raumladungszone des Siliziums beiträgt. Entlang der Stufen hingegen wird durch Defekte aufgrund des geringen Füllgrads der Terrassen mit Pb-Atomen ein Ladungstransport verhindert, bzw. nur mit einer Aktivierungsenergie überwunden, die verständlicherweise geringer ist als senkrecht zu den Ketten und so der Isolator-Metall-Übergang bei niedrigeren Temperaturen auftritt.

Im Gegensatz dazu hat man bei d) bei dem 1.31 ML, auf eine durch vielmaliges Heizen umfacettierte Fläche, aufgebracht wurden das Maximum in beiden Richtungen bei 140 K. Der Absolutwert von G_{\parallel} liegt dabei um mindestens eine Größenordnung niedriger als für die perfekte Stufenstruktur. In einer Veröffentlichung von *Morikawa et al.* [132] wurde der 1D-2D-Phasenübergang bei 78 K in Frage gestellt und Messungen dieser vermeintlichen Phase mittels kollearer Mikrosonden vorgestellt. Die Autoren fanden einen Metall-Isolator Übergang bei 140 K. Die entsprechenden Daten sind mit einem Faktor 1/3 skaliert ebenfalls in die Abb. 4.8 d) in Grün gezeigt. Auffallend ist die sehr gute Übereinstimmung beider Datensätze.

In diesem Zusammenhang zu bemerken ist zusätzlich, dass für solche umfacettierte Phasen keinerlei strukturelle Änderung mit dem SPA-LEED beobachtet wurde, wie es bei der perfekten Fläche der Fall ist. Somit lässt sich sagen, dass der von *Morikawa* gefundene Metall-Isolator-Übergang, der auch in den hiesigen Messungen gefunden werden konnte von grundlegend anderer Natur ist, als der zuvor beobachtete 1D-2D Übergang bei 78 K. Er liegt vermutlich in der Lokalisierung von Ladungsträgern durch die hohe Defektdichte nicht perfekt präparierter Oberflächen begründet. Nur für langreichweitig geordnete Kettenstrukturen mit exakt richtiger und über die gesamte Probe hinweg homogenen Pb-Bedeckung lässt sich der Phasenübergang tatsächlich in scharfer Form, sowohl im Leitwert, als auch strukturell in der Elektronenbeugung nachweisen.

Um die Aktivierung von Ladungsträgern in diesen refacettierte Oberflächen zu quantifizieren, wurde eine Messserie gemacht, in der ausgehend von $\Theta=1.27$ ML geringste Pb-Mengen bei tiefen Temperaturen hinzugefügt wurden. Nach dem Ausheilen bei 200 K, wurde dann jeweils eine $G(T)$ -Messung durchgeführt. Im einfachsten Modell der Aktivierung hängt der Leitwert exponentiell von der Temperatur bei fester Aktivierungsenergie ab: $G = G_0 \exp\left(\frac{-E_a}{k_B T}\right)$ ($k_B=8.62 \times 10^{-5}$ eV/K, die Boltzmann-Konstante). Nach Logarithmieren und Umformung ergibt sich:

$$\ln(G) = \ln(G_0) - \frac{E_a}{k_B} \frac{1}{T}.$$

Trägt man also $\ln(G)$ gegen die inverse Temperatur in einem sogenannten Arrhenius-Plot auf, so ist die Steigung der sich ergebenden Geraden proportional zur Aktivierungsenergie E_a . Ein solcher Plot ist für die Daten aus 4.8 d) in Abb. 4.9 a) gezeigt. G_{\parallel} hat eine geringere Steigung als

²Diese Abbildung ist beinahe identisch aus [136] entnommen worden. Allerdings wurde in dieser Veröffentlichung ein Fehler in der Farbkodierung von Abb. d) gemacht, hier waren Rot und Schwarz vertauscht, sodass die G_{\parallel} und G_{\perp} ebenso vertauscht wurden. Dieser Fehler wurde in der Abbildung hier behoben.

³Also genau entgegengesetzt zum Leitwertübergang bei der perfekten Phase

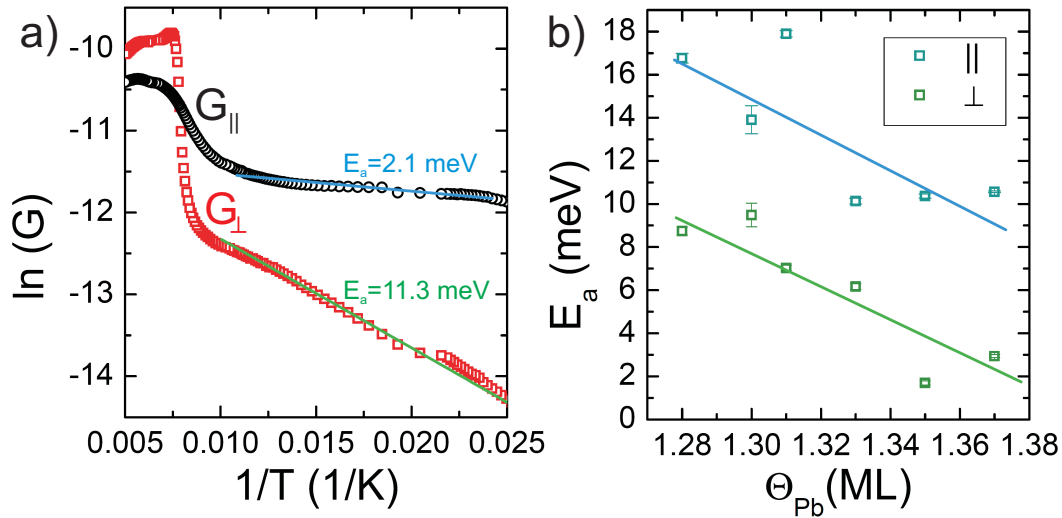


Abbildung 4.9.: a) Arrhenius-Plot der Daten aus 4.8 d) für 1.31 ML Pb, zur Bestimmung der Aktivierungsenergie. Entlang der Ketten ist eine geringere Steigung zu finden als senkrecht. b) Aktivierungsenergie E_a als Funktion der Pb-Bedeckung. E_a nimmt für beide Richtungen ab.

G_{\perp} , also ist die Aktivierungsenergie in dieser Richtung ebenfalls geringer. Die Auswertung der bedeckungsabhängigen Messreihe ist in 4.9 b) gezeigt. Die Aktivierungsenergien in $||$ - und \perp -Richtung nehmen mit der Zusatzbedeckung an Pb-Atomen ab, wobei für die Aktivierungsenergie für alle Θ gilt: $E_{a,||} < E_{a,\perp}$.

4.4 Magnetotransporteigenschaften von Pb/Si(557)

4.4.1. Multilagen

Im Fall von Pb-Filmen auf Si(557) einer Dicke mehrerer Monolagen, erwartet man keinen merklichen Einfluss der Stufenstruktur an der Pb-Si Grenzfläche auf die Magnetotransporteigenschaften, da der Pb-Film sowohl strukturell als auch elektronisch, bis auf die ersten 5 Lagen, isotrop ist (siehe Diskussion in den Kapiteln 4.1 und 4.2). Somit sollten Messungen daran vergleichbar mit denen an Pb/Si(111) sein. Abbildung 4.10 zeigt zwei $G(B)$ -Messkurven für einen 6.5 und 14 ML dicken Film bei 10 K. Zunächst erkennt man eine Abnahme des Leitwertes mit dem Magnetfeld, was im Wesentlichen durch den klassischen Magneto-Effekt verursacht wird. Nach Gleichung 2.22 folgt der Leitwert einer parabolischen Funktion des Magnetfeldes. In der Abbildung ist dies durch die blauen Kurven dargestellt. Diesem Hauptsignal überlagert sind Effekte der Schwachen Anti-Lokalisierung, die eine Abnahme des Leitwertes mit steigendem Magnetfeld zeigen (mit grünen Linien eingezeichnet). Dies steht im Gegensatz zu Messungen von *Pfennigstorff*, der überwiegend Schwache Lokalisierung bei Pb/Si(111) fand. Der Grund hierfür wird weiter unten diskutiert. Die Messdaten lassen sich für dünnere Schichten (hier die 6.5 ML) gut mit der Hikami-Theorie der schwachen Lokalisierung beschreiben. Für den 6.5 ML Film erhält

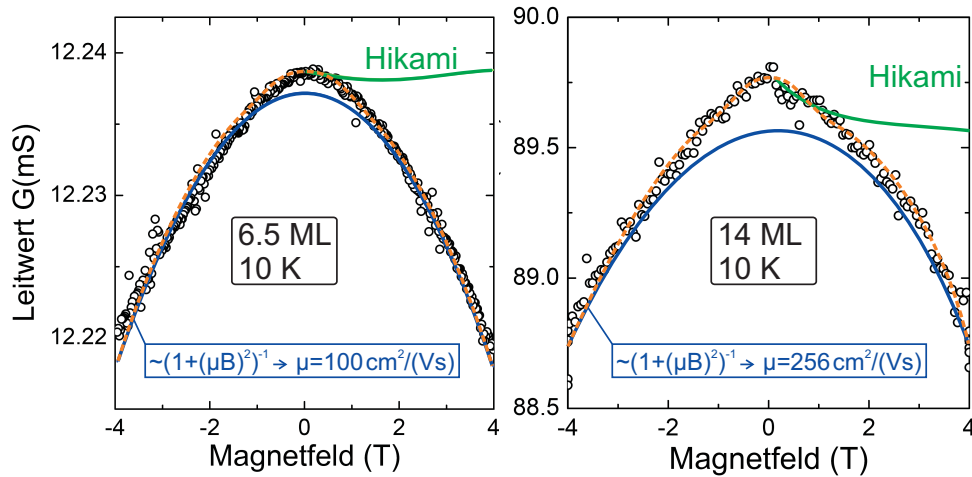


Abbildung 4.10.: Magnetotransportkurven von Pb-Multilagen auf Si(557) gemessen bei 10 K Substrattemperatur. Dem klassischen Magnetotransportverhalten ist ein kleines Signal von Schwacher Anti-Lokalisierung überlagert.

d(ML)	10 K		40 K	
	$\mu_{ } \left(\frac{cm^2}{Vs} \right)$	$\mu_{\perp} \left(\frac{cm^2}{Vs} \right)$	$\mu_{ } \left(\frac{cm^2}{Vs} \right)$	$\mu_{\perp} \left(\frac{cm^2}{Vs} \right)$
6.5	95.5	100.1	87.6	86.1
14	267.0	256.0	–	–

Tabelle 4.1.: Ladungsträgerbeweglichkeit dicker Pb-Filme

man Werte für die Streuzeiten von:

$$\tau_i = 4 \cdot 10^{-14} \text{ s}, \quad \tau_0 = 7 \cdot 10^{-15} \text{ s}, \quad \tau_{so} = 3.5 \cdot 10^{-14} \text{ s}.$$

Damit zeigt sich hier eine Dominanz der elastischen Streuzeit im Vergleich zur Spin-Bahn Streuzeit, jedoch ist letztere deutlich kürzer als für Pb/Si(111) von *Pfennigstorf* gefunden wurde[76, 53]. Die Ladungsträgermobilitäten, die man aus dem klassisch-parabolischen Verlauf der Kurven erhält, sind für die zwei gezeigten Messungen auch in der Abbildung 4.10 sowie Tabelle 4.1 eingetragen. Man erkennt, dass mit steigender Schichtdicke die Mobilität der Ladungsträger deutlich zunimmt, in Übereinstimmung mit dem größeren Leitwert G_0 ohne Magnetfeld. Der dickere Film zeigt einerseits eine bessere kristalline Ordnung und hat weniger Verspannungen durch die Fehlanpassung an der Pb/Si-Grenzfläche, andererseits ist das Verhältnis aus Volumen zu Oberfläche größer, sodass der Einfluss der Grenzflächenstreuung auf den Widerstand abnimmt und so die Streuung von Ladungsträgern insgesamt seltener wird. Auch ist in der Tabelle der Einfluss der Temperatur auf die Beweglichkeit gut zu erkennen, mit steigender Temperatur nimmt sie durch die zunehmende Elektron-Phonon Streuung ab.

4.4.2. Monolagen

Der schon mehrfach erwähnte 1D-2D-Phasenübergang für $\theta = 1.31$ ML Pb/Si(557) ist hinsichtlich seiner elektronischen und strukturellen Eigenschaften sehr detailliert untersucht und wurde erfolgreich mit Hilfe des Fermi-Nesting ($2\pi/d=2k_F$) senkrecht zu den Stufen erklärt. Bei

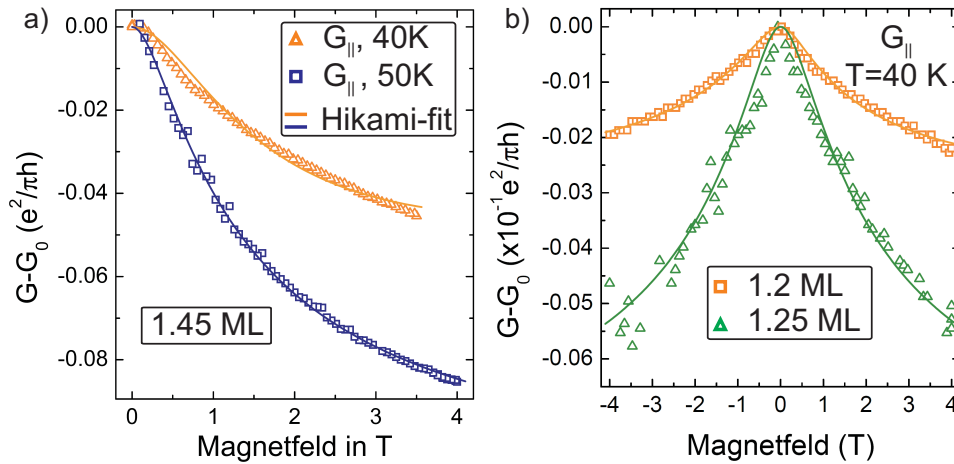


Abbildung 4.11.: Magnetotransportkurven für Pb Schichten im Bereich einer physikalischen Monolage, jeweils gemessen in paralleler Richtung. Die Amplituden sind empfindlich auf die Temperatur (a) und die Pb-Bedeckung (b). Die Linien entsprechen den besten Fits mit der Hikami-Theorie.

ARPES-Untersuchungen [21] konnte damit auch die Bandstruktur und die Gestalt der Fermi-Fläche untersucht werden und mit den temperaturabhängigen Leitfähigkeits- sowie SPA-LEED-Messungen verknüpft werden. Eine offene Frage blieb aber noch hinsichtlich der Spinstruktur. Also die Frage, ob die Oberflächenzustände spinaufgespalten sind. Die spinintegrierten ARPES-Daten zeigen abgespaltene Bänder entlang der Pb-Ketten, die die Fermi-Fläche durchstoßen. Aufgrund der hohen Kernladungszahl von $Z=82$ erwartet man für Pb auch eine starke Spin-Bahn-Wechselwirkung. In ARPES-Messungen an Pb/Ag(111) [150] sowie in Quantentopfzuständen von Pb-Schichten auf Si(111) [23] wurde eine Aufspaltung der parabolischen Bänder durch den Rashba-Effekt nachgewiesen, der allerdings im Vergleich zu anderen Systemen wie Bi/Ag(111) deutlich kleiner ist.

Wie in Kap. 2.2.4 erläutert, ist bei starker Spin-Bahn-Wechselwirkung durch die 4π -Periodizität der Spinwellenfunktion Schwache Anti-Lokalisierung zu erwarten, das heißt also eine Abnahme des Leitwertes mit angelegtem Magnetfeld. *Pfennigstorf* untersuchte Pb-Schichten auf Si(111) und fand lediglich schwache Lokalisierung [143, 75, 76], also einen geringen Einfluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung (SOI). Nach den ARPES-Experimenten an Multilagen-Pb/Si(111) ist die Spin-Bahn Aufspaltung aber für Zustände nahe der Fermi-Energie zu vernachlässigen. Sodass für den elektronischen Transport, bei dem nur Ladungsträger in einem $k_B T$ -Intervall um die Fermi-Energie beitragen, die Spin-Bahn-Wechselwirkung in Pb/Si(111) vernachlässigbar ist. Wie in Abb. 4.10 gezeigt, gibt es für Multilagen-Pb/Si(557) aber WAL-Charakter, ein Hinweis darauf, dass die Spin-Bahn-Kopplung durch die Stufen des Silizium verstärkt wird. Für Monolagenschichten also z.B. dem hier untersuchten Pb/Si(557) kann die Situation noch extremer sein und die SOI zu einer größeren Rashba-Aufspaltung führen (siehe Kapitel 4.5). Somit ist auch ein Einfluss der SOI auf das Magneto-Leitfähigkeitssignal von Pb/Si(557) möglich.

In Monolagenschichten ist die Beweglichkeit durch eine unvermeidbar hohe Defektdichte sehr gering, wodurch der klassische Magnetoleitwerteffekt keine Rolle spielt und in der Magnetfeldabhängigkeit des Leitwertes im Wesentlichen schwache (Anti-)Lokalisierung dominant ist. Nach Abbildung 4.11 beobachtet man in Magnetotransportmessungen an Pb/Si(557) typischerweise

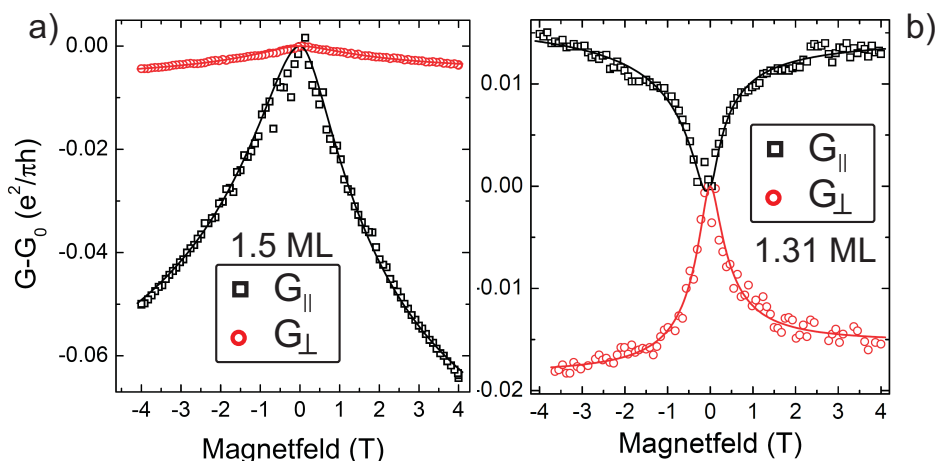


Abbildung 4.12.: Magnetotransportmessungen an (a) 1.5 und (b) 1.3 ML Pb/Si(557), bei $T=40$ K. Typisch für die Bedeckungen im Monolagen-Bereich ist schwache Anti-Lokalisierung, also eine Abnahme des Leitwertes mit B . Allerdings ergibt sich genau für 1.31 ML für G_{\parallel} eine nach oben gekrümmte Messkurve, also schwache Lokalisierung. Die Linien entsprechen den besten Fits mit der Hikami-Theorie.

eine negative Magnetoleitfähigkeit ($(G - G_0)/G_0 < 0$), der Leitwert nimmt mit ansteigendem B ab. Die Messungen wurden überwiegend bei Temperaturen zwischen 40 und 70 K durchgeführt, Supraleitungseinflüsse wie sie *Pfennigstorf* bei Pb/Si(111) beobachtete auszuschließen, da man weit oberhalb der Pb-Sprungtemperatur von 7.2 K ist. Die Übereinstimmung der Daten mit der Hikami-Theorie zeigt sich in überzeugender Weise in den durchgezogenen Linien in 4.11. Die Temperatur sowie die Pb-Bedeckung hat Einfluss auf die Form und Amplitude der $G(B)$ -Kurven. Man erkennt eine größere Amplitude für G_{\parallel} bei 1.25 ML im Vergleich zu 1.2 ML (b), sowie für 50 K im Vergleich zur Messung bei 40 K (a). Dies liegt daran, dass sich in Abhängigkeit dieser Parameter die charakteristischen Streuzeiten ändern.

Besonders eindeutig ist der Unterschied zwischen ΔG_{\parallel} und ΔG_{\perp} in Abb. 4.12 a) für einen 1.5 ML Pb-Film. Parallel zu den Stufen hat man einen deutlich größeren Effekt als senkrecht dazu. Dabei muss man aber beachten, dass die Leitfähigkeit ohne Magnetfeld ca. sechs mal größer in parallel Richtung ist ($G_{\parallel}/G_{\perp}(B=0)=6$). Wie bereits im vorigen Kapitel erläutert, wirken die Substratstufen als effektive Streuzentren für die Ladungsträger und beeinflussen so auch die Magnetfeldabhängigkeit des Leitwertes. Korrespondierend zu dieser Beobachtung erhält man aus der Anpassung der Messungen an die Hikami-Theorie (Gleichung 2.26) das Verhalten der Streuzeiten in paralleler und senkrechter Richtung in Abhängigkeit von der Pb-Bedeckung ⁴. Abb. 4.13 a) zeigt die erhaltenen Werte der elastischen Streuzeit τ_0 . Die Werte streuen auf dieser Skala sehr stark, insbesondere für $\tau_{0,\perp}$ in etwa um eine Größenordnung, was darauf zurück zu führen ist, dass die Stufenstruktur nicht perfekt geordnet wird und sich bei verschiedenen

⁴Die inelastische Streuzeit τ_i wurde in der Analyse dieser Messreihe in etwa als konstant angenommen: $\tau_i \approx 2 \cdot 10^{-14}$ s, da alle Messungen zwischen 40 und 50 K durchgeführt wurden und so die Elektron-Phonon Streuung einen unveränderten Beitrag liefert. Bei festgehaltenem τ_i werden zunächst die beiden Parameter τ_0 und τ_{so} und nach erfolgter Konvergenz des Fits mit den Messdaten auch τ_i nochmals frei gegeben. Durch Variation der Startwerte des Fits versucht man das globale Minimum dieses zweidimensionalen Parameterraums (aufgespannt durch τ_0 und τ_{so}) zu finden

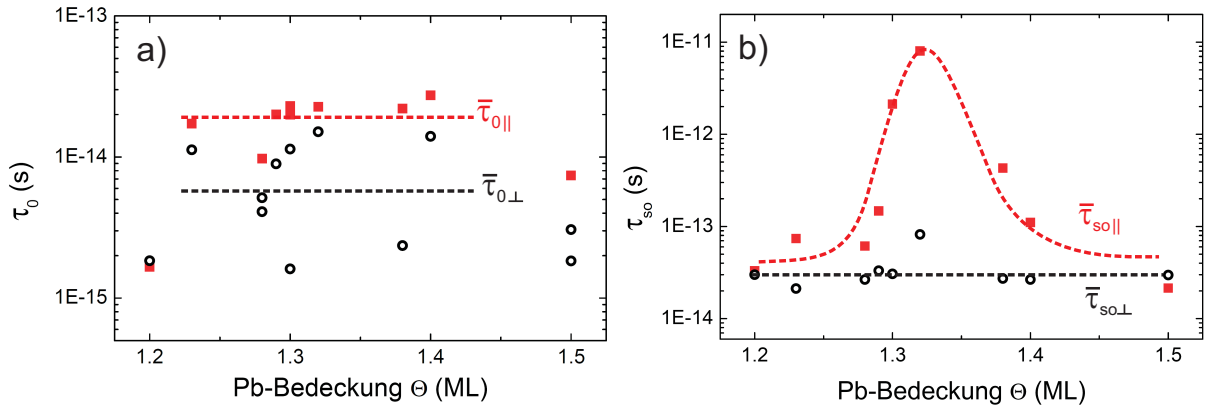


Abbildung 4.13.: Streuzeiten in Abhängigkeit von der Pb-Bedeckung. (a) Für die elastische Streuzeit τ_0 findet man höhere Werte entlang der Pb-Ketten als senkrecht zu den Stufen. (b) Die Spin-Bahn-Streuzeit zeigt in paralleler Richtung ein Maximum um 1.3 ML - entsprechend der Bedeckung, bei der der Phasenübergang beobachtet wird.

Präparationen Abweichungen voneinander ergeben. Dennoch ist deutlich zu erkennen, dass man eine größere Streuzeit (also weniger häufige Streuung) entlang der Pb-Ketten als senkrecht zu ihnen hat. Während im Mittel alle 2×10^{-14} s eine Streuung in paralleler Richtung vorkommt, passiert dies senkrecht dazu schon nach etwa $7 - 8 \cdot 10^{-15}$ s.

Eine Besonderheit ergibt sich für die 1.3 ML Phase, genau der Pb-Phase, die den Leitwertssprung bei 78 K zeigt. Nur für diese Bedeckung kehrt sich das Verhalten des Leitwertes $G_{||}$ um und wird zu Schwacher Lokalisierung (Abb. 4.12 b). Zur gleichen Zeit zeigt G_{\perp} weiterhin schwache Anti-Lokalisierung. Aus der Diskussion in Kapitel 2.2.4 in Zusammenhang mit Abbildung 2.7 ist ersichtlich, dass der wesentliche Parameter, der über einen Wechsel von WL zu WAL entscheidet die Spin-Bahn Streuzeit τ_{so} ist. Für im Vergleich zu τ_0 große (kleine) τ_{so} erhält man WL (WAL). Die detaillierte Auswertung der $G(B)$ -Daten für verschiedene Bedeckungen zeigt für $\tau_{so||}$ eine starke Erhöhung um bis zu drei Größenordnungen, im Bereich von 1.3 ML, während $\tau_{so,\perp}$ im Wesentlichen unabhängig von Θ_{Pb} bleibt (Abb. 4.13 b). Die Spin-Bahn-Wechselwirkung scheint also entlang der Ketten (in $[110]$ -Richtung) sehr sensibel auf die Pb-Bedeckung zu reagieren und erstaunlicher Weise mit dem 1D-2D-Phasenübergang zusammen zu fallen.

Daraus lässt sich folgern, dass die Spin-Bahn-Streuung in Abhängigkeit der Bedeckung, also der Bandfüllung der Eлектronenparabeln, entlang der Ketten durch einen bestimmten Mechanismus unterdrückt wird. Da dies mit der Fermi-Nesting-Bedingung zusammenfällt, lässt sich vermuten, dass die Bildung der Bandlücke bestimmte Streukanäle unterdrückt. Da das System in diesem Fall 1D-Charakter aufweist, stellt sich auch die Frage wie Spin-Bahn-Streuung hier überhaupt aussehen kann. Stellt man sich vor, die Bänder entlang der Pb-Ketten wären spinpolarisiert, so könnte ein entlang der Kette gestreutes Elektron seinen Spin gar nicht umdrehen, τ_{so} wäre dementsprechend sehr groß. An dieser Stelle ist dies nichts weiter als eine Hypothese, die mit spinaufgelösten Messmethoden überprüft werden muss. Aus dieser Motivation heraus wurden Messungen mit SARPES an der Swiss-Light Source durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Messungen werden im kommenden Kapitel 4.5 diskutiert.

4.5 SARPES an Pb/Si(557) – Rashba-Effekt und Spin Density Waves

Als Ausgangspunkt für die SARPES-Messungen erinnern wir uns nochmals an die Spin-integrierten ARPES-Messungen [21], in denen parallel verlaufende Fermi-Linien gefunden wurden, die bei passender Bandfüllung, bei einer Bedeckung von 1.31 ML, zu perfektem Fermi-Nesting in k_{\perp} -Richtung führen (siehe Abb. 2.19). Die Magnetotransportdaten aus dem vorangegangenen Kapitel legen aber nahe, dass in diesem System auch die Spin-Bahn-Wechselwirkung eine große Rolle spielt und die Erwartung ist nun, dass die elektronischen Zustände durch den Rashba-Effekt aufgespalten sind.

Um eine Vergleichbarkeit der SARPES-Messungen mit den vorangegangenen Messungen zu ge-

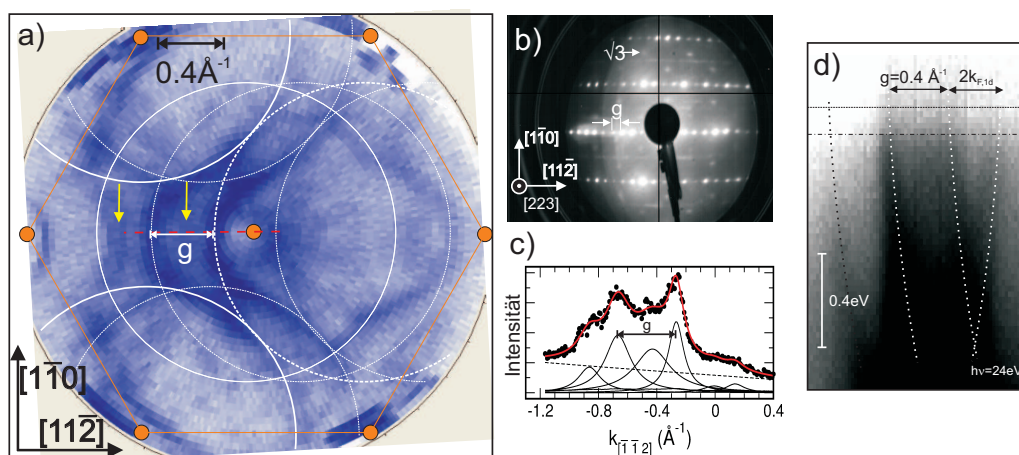


Abbildung 4.14.: Spin-integrierte ARPES-Messung an 1.31 ML Pb/Si(557). b) LEED-Bild mit charakteristischen Merkmalen. a) Constant energy surface 100 meV unterhalb der Fermi-Energie reproduziert die Daten aus [21]. c) MDC (spin-integriert) entlang der gestrichelten Linie in a). Es existieren Nebenmaxima genau in der Mitte zwischen den Hauptintensitäten, diese sind auch in a) durch Pfeile markiert. d) $E(k)$ -Diagramm entlang der gleichen Linie zeigt die Erfüllung der Nesting-Bedingung. Alle ARPES-Messungen wurden bei einer Primärenergie von 24 eV durchgeführt.

währleisten, wurde zunächst versucht die Spin-integrierten Daten zu reproduzieren. So wurden die perfekte 1.31 ML Phase präpariert wie das LEED-Muster in Abb. 4.14 b) zeigt. Facettenspots mit Abstand $1/(4\frac{2}{3})$ entsprechen der (223)-Facette. Ebenso sind die $\times 2$ -Reflexe erkennbar. Die $\sqrt{3}$ -Reflexe weisen Anzeichen einer Aufspaltung entlang der Terrassenrichtung auf, jedoch reicht die Auflösung des hier verwendeten konventionellen LEED nicht aus, um dies aufzulösen. Der bei konstanter Energie, 100 meV unterhalb der Fermi-Fläche, mit dem spin-integrierten Detektor aufgenommene Schnitt durch den k -Raum (constant energy surface, in a) zeigt die erwarteten Merkmale. Eine kreisartige Struktur die von der dicht gepackten $\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Phase des Pb auf den Terrassen stammt, wiederholt sich in Replicastrukturen im Abstand von $g=2\pi/d=0.4\text{ \AA}^{-1}$, bei einem Draht-Draht Abstand von $d=1.58\text{ \AA}$, wie es auch in [21] gefunden wurde. Die Gamma-Punkte von benachbarten Brillouin-Zonen sind durch orangefarbene Punkte gekennzeichnet. Auch das $E(k)$ -Diagramm in d), erzeugt durch einen Scan entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung (oder y -

Richtung) bei $k_x = k_{[1\bar{1}0]} = 0 \text{ \AA}^{-1}$, bestätigt diese Aussagen nochmals und zeigt die Realisierung der Nesting-Bedingung durch die Wiederholung der Elektronenparabeln mit passender Bandfüllung. An den Seiten sind die Kreise etwas abgeflacht und ermöglichen so Nesting für viele Punkte des reziproken Gitters. Diese einfache schematische Beschreibung der Fermi-Fläche stößt ohne Zweifel im Außenbereich der Brillouinzone, an der sich Kreise benachbarter Zonen überschneiden schnell an ihre Grenzen. Hier wird die Situation sehr unübersichtlich, dennoch kann der zentrale Bereich gut erfasst werden.

Allerdings fallen in d), wie auch in der Fermi-Fläche zusätzliche Intensitäten auf, die um einen Gittervektor 0.2 \AA^{-1} zu den Hauptkreisen verschoben sind und durch gelbe Pfeile in a) angedeutet sind. In der Momentum Distribution Curve (MDC, spin-integriert) also Intensität als Funktion des k -Vektors in c), die entlang der gestrichelten Linie in a) gemessen wurde, erkennt man Subpeaks, die genau zwischen den Hauptpeaks liegen.

Um ihre Natur näher zu beleuchten wird ein zu Abb. c) äquivalenter MDC-Scan durchgeführt,

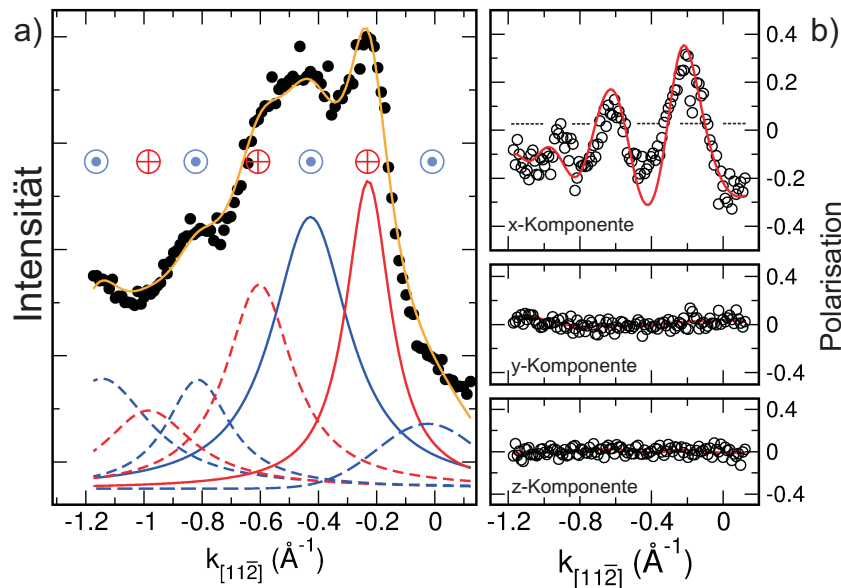


Abbildung 4.15.: SARPES-Messung an 1.31 ML Pb/Si(557). MDC entsprechend zu 4.14 c) mit den Mott-Detektoren gemessen. Die Auswertung ergibt eine starke Spin-Polarisation in x-Richtung (entlang der Ketten), wobei in y-Richtung (senkrecht zu den Ketten) sowie z-Richtung keine Polarisation zu messen ist. Die roten und blauen Kreise symbolisieren die Spinausrichtung in der Ebene. Die Spinrichtung ist alternierend und darüber hinaus sind die Zustände äquidistant verteilt, entsprechend der Situation in Abb. 4.16 d).

nun aber mit den Mott-Detektoren, also mit Spin-Auflösung. Dieser ist in Abb. 4.15 a) gezeigt. Wie die Analyse mit der in Kap. 3.3 vorgestellten Methode zeigt, kann die Intensitätskurve mit äquidistanten, um $g/2 = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ zueinander verschobenen Pseudo-Voigt Funktionen beschrieben werden. Zusammen mit den durch die Mott-Polarimeter gemessenen Spin-Asymmetrien die in b) für die x-, y- und z-Komponente gezeigt sind, lassen sich die drei Polarisationsvektoren P_x , P_y , P_z berechnen. Da die Spin-Asymmetrie nur in der x-Komponente Oszillationen zeigt, ergibt sich eine vollständige Spin-Polarisation in x-Richtung (also entlang der $[1\bar{1}0]$) von etwa 40%. Dabei weisen die Polarisationsvektoren der einzelnen um $g/2$ verschobenen Zustände in

die entgegengesetzten x-Richtungen. Im Vergleich dazu fand man bei Goldketten auf Si(557) dagegen keine in-plane Polarisation, sondern eine out-of-plane Spinpolarisation der Zustände[151]. Dieser Effekt wurde mit dem 1D-Charakter der Au-Ketten in Verbindung gebracht und eine starke Anisotropie der Ladungsdichte in der Richtung senkrecht zu den Stufen dafür verantwortlich gemacht. Beim Pb/Si(557) System ist anscheinend nur der Potentialgradient senkrecht zur Oberfläche entscheidend. Wobei die spätere Diskussion zeigen wird, dass die Stufen, bzw. die Wechselwirkung der Pb-Ketten untereinander, doch einen Einfluss auf die Größe der Rashba-Aufspaltung haben.

An dieser Stelle muss man also festhalten, dass das ursprüngliche Modell mit Replicastrukturen

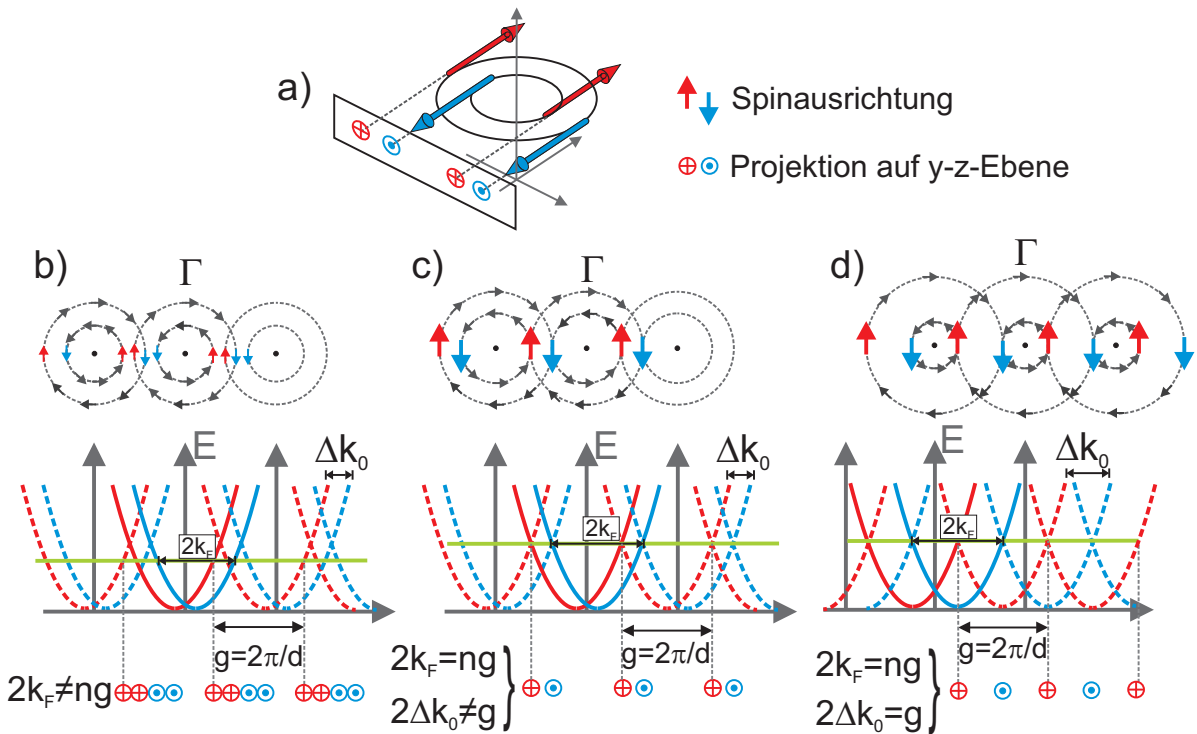


Abbildung 4.16.: Veranschaulichung des Zusammenspiels zwischen Bandfüllung und Stufenperiodizität bei Anwesenheit von starker SOI und damit verbundener Rashba-Aufspaltung. Gezeigt sind verschiedene Situationen. Nur wenn $2k_F = ng$ und gleichzeitig $2\Delta k_0 = g$ gilt, erhält man eine alternierende Spin-Textur mit äquidistantem Abstand der Zustände (d). Ansonsten hat man variierende Abstände (c) oder sogar nicht alternierende Spin-Richtungen (b).

aus Kreisen eines einzigen Durchmessers und Spin-entarteten Bändern (siehe Abb. 4.14 a) zu simpel ist. Durch die Rashba-Aufspaltung zerfällt jeder Spin-entartete Fermi-Kreis in einen inneren und äußeren Kreis mit entgegengesetzter Spin-Helizität (Vgl. Kap. 2.4). Ähnlich wie zuvor, wiederholt sich dieses Kreispaar nun periodisch entsprechend der Stufenperiodizität im Abstand $2\pi/d$. Abhängig von der Größe der Rashba-Aufspaltung Δk_0 und der Bandfüllung, also in welcher Höhe auf der Energieachse die Fermi-Fläche angeordnet ist, kann man unterschiedliche Ausprägungen der Fermi-Fläche, bzw. Abfolgen der spinpolarisierten Zustände in Mott-MDCs erwarten. Abb. 4.16 zeigt in b)-d) drei charakteristische Fälle, die hierbei zu unterscheiden sind: Der allgemeine Fall, in dem die Nesting-Bedingung nicht erfüllt ist ($2k_F \neq ng$, in b). Der Fall

mit Nesting aber beliebiger Rashba-Aufspaltung ($2k_F = ng$ und $2\Delta k_0 \neq g$, in c) und der speziellste Fall, bei dem die Nesting-Bedingung noch mit der Rashba-Aufspaltung komensurabel ist ($2k_F = ng$ und $2\Delta k_0 = g$, in d). In b) erhält man entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung eine zufällige Abfolge von *Spin-up* und *Spin-down* Zuständen (rot und blau) mit variierenden Zwischenabständen. Sobald aber Nesting zwischen Zuständen gleicher Helizität gegeben ist, erwartet man eine alternierende Spin-Abfolge mit um den Gittervektor g zueinander verschobenen Paaren aus rot und blau. Wenn zusätzlich auch noch die Rashba-Aufspaltung den maximal möglichen Wert $g/2$ annimmt⁵, so folgen in MDCs Zustände alternierender Spin-Richtung in äquidistantem Abstand von $g/2$ aufeinander. Und dies entspricht genau der gemessenen Situation für 1.31 ML Pb/Si(557). Die schwach erkennbaren Intensitäten der Fermi-Fläche in 4.14 entstammen also Kreisen mit der entgegengesetzter Spin-Helizität. Hier sollte noch angemerkt werden, dass zur Überprüfung auch ein MDC-Scan entlang eines Kreissegments durchgeführt wurde und keine Änderung der Spinpolarisation beobachtet wurde, sodass man davon ausgeht, dass die Spinpolarisation tatsächlich tangential, entlang der Kreise orientiert ist.

Um das obige Modell weiter zu überprüfen, variiert man einen einzelnen der drei Größen g , k_0 oder k_F . Hierfür bietet sich beim Pb-Si(557)-System besonders k_F an, der über die Bandfüllung eingestellt werden kann. Wie in [21] gezeigt wird, ändert die Pb-Bedeckung den Füllgrad der Bänder bei gleich bleibender (223)-Stufenperiodizität[82] und zerstört somit die Nesting-Bedingung.

Abb. 4.17 zeigt Messungen an einer 1.2 ML Pb/Si(557) Oberfläche. Das LEED-Bild in d) zeichnet sich durch scharfe (223)-Facettenreflexe aus, jedoch fehlen die $\sqrt{3}$ -Reflexe, was auf eine, im Vergleich zur 1.31 ML Phase, geringere Bedeckung zurückzuführen ist. Die $E(k)$ -Dispersionsmessung in b) zeigt deutlich, dass die Fermi-Nesting-Bedingung hier nicht erfüllt ist. Die auf dieser Fläche gemessene Mott-MDC senkrecht zu den Ketten ist in a) gezeigt. Die Intensität kann konsistent mit der gezeigten Abfolge von Pseudo-Voigt-Funktionen angepasst werden. Die Spin-Polarisation in (c) zeigt auch in diesem Fall nur in x-Richtung signifikante Werte, sodass auch hier, wie schon für 1.3 ML, die Spins in der Ebene ausgerichtet sind und immer senkrecht auf der Bewegungsrichtung der Ladungsträger stehen. Entsprechend der Erwartung aus dem Modell in 4.16 b) sind die Zustände nicht mehr äquidistant und eine alternierende Spin-Abfolge wird auch nicht mehr beobachtet. Die Daten sind aber konsistent mit der Annahme, dass die Rashba-Aufspaltung auch für 1.2 ML gleich bleibt, durch die Pb-Dotierung also nicht oder nur geringfügig beeinflusst wird.

Wie oben gezeigt beträgt die Rashba-Aufspaltung etwa $\Delta k_0 = 2k_0 = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ und der Rashba-Parameter ist bei Annahme einer effektiven Masse von $m^* = 0.4 m_e$ [152]

$$\alpha_{RB} = \frac{\hbar^2 k_0}{m^*} = 1.9 \text{ eV\AA}.$$

Dieser Wert ist im Vergleich zu anderen Systemen extrem groß und erreicht fast den Rekordwert von 3.05 eV\AA , der in der Oberflächenlegierungsschicht Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ /Ag(111) gefunden wurde[153]. Die Standardbeispiele großer Rashba-Aufspaltung, wie die Au(111)- und Bi(111)-Fläche, werden sogar um das Drei- bzw. Fünffache übertroffen. Auch die für die Pb-Monolage auf Germanium gefundene Aufspaltung ist mit 0.24 eV\AA deutlich kleiner [154]. Somit kann die hohe Kernladungszahl Z von Pb allein nicht für die große Aufspaltung verantwortlich sein. Vielmehr ist der

⁵Eine Rashba-Aufspaltung $\Delta k_0 = \frac{g}{2} + \delta$, mit $\delta > 0$, ist äquivalent zu einer Aufspaltung $\Delta k_0 = -(\frac{g}{2} - \delta)$, dessen Betrag kleiner ist als $g/2$.

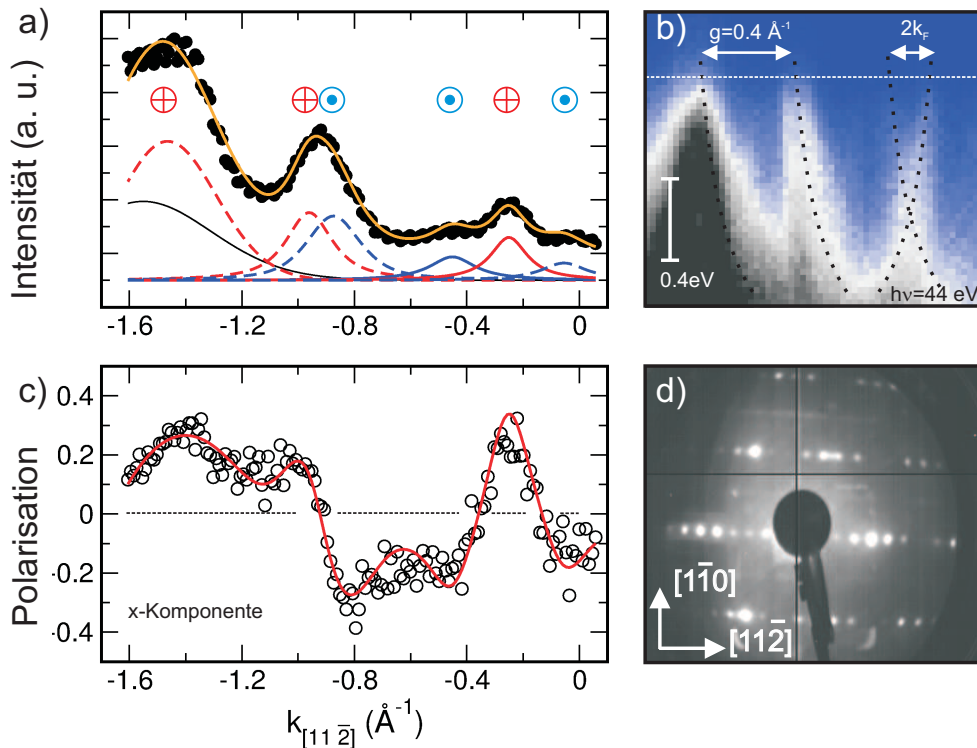


Abbildung 4.17.: SARPES-Messung an 1.2 ML Pb/Si(557). a) MDC mit Mott-Detektoren bei E_F-100 meV. b) $E(k)$ -Dispersion zeigt, dass die Nesting-Bedingung durch die geringere Bandfüllung nicht erreicht wird. c) Die Spin-Polarisation ist immer noch in x -Richtung ausgeprägt, allerdings wird sie hier mit Pseudo-Voigt-Funktionen beschrieben, deren Maxima nicht mehr äquidistant sind und bei dem die Spinausrichtung nicht alterniert (rote und blaue Kreise in a). d) Das LEED-Muster zeigt die Abwesenheit von $\sqrt{3}$ -Reflexen bei gleich bleibender Aufspaltung der (223)Facettenreflexe.

Potentialgradient an der Oberfläche und die genaue Verteilung der Ladungsdichte an der Oberfläche von entscheidender Bedeutung. Offensichtlich ist diese durch die Pb-Drähte im Vergleich zum isotropen 2D-Fall mit Pb/Ge(111) stark verändert und führt zu dem beobachteten Aufspaltungseffekt. Die Tatsache, dass Δk_0 den maximal möglichen Wert $g/2$ annimmt, macht es wahrscheinlich, dass ein grundlegender Mechanismus hierfür verantwortlich ist. Das Gesamtsystem versucht sich im energetisch günstigsten Zustand aufzuhalten. Dies ist für zwei in Antiphase befindlichen Ladungsdichtewellen (CDW) mit entgegengesetztem Spin erfüllt, da die Coulomb-abstoßung so minimal wird. Dieser Mechanismus erinnert an den Spindichtewellen-Formalismus (SDW), allerdings muss man beachten, dass die SARPES-Messungen natürlich eine Verschiebung der Spin-Zustände im Impulsraum zeigt, anders als die klassische SDW, die eine Verschiebung zweier spinpolarisierter CDW im Ortsraum beschreibt [15, 16, 17, 155].

Den Zusammenhang zwischen SDW im Orts- und Impulsraum beleuchtete erstmals *Overhauser* und zeigte am Beispiel des kubisch raumzentrierten Chrom (Cr), dass seine anti-ferromagnetischen Eigenschaften durch Fermi-Nesting und das Auftreten von SDW verursacht wird [157]. Danach unterscheidet man links und rechts zirkular polarisierte SDW. Berücksichtigt man die Austauschwechselwirkung zwischen den Teilchen mit Hilfe eines Hartree-Fock Potentials in ei-

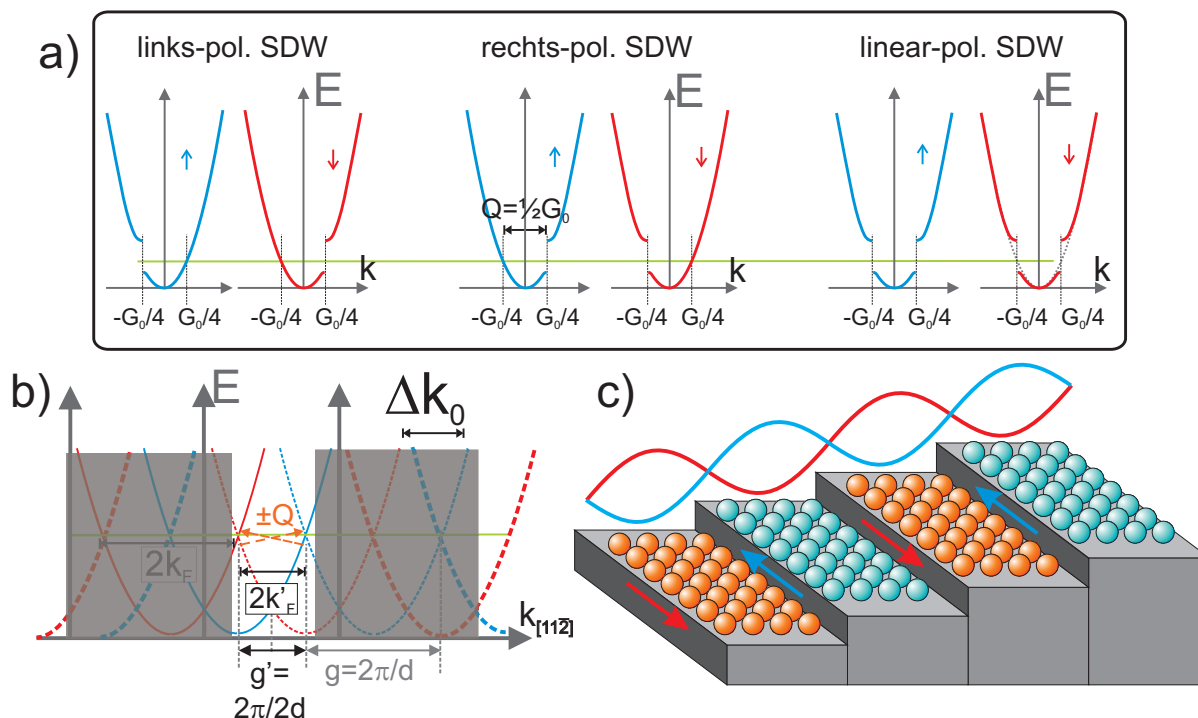


Abbildung 4.18.: a) Modell einer polarisierten SDW (nach [156]). Die zirkular polarisierten SDW verbinden Punkte gleicher Energie bei (\vec{k}, \uparrow) und $(\vec{k} \pm \vec{Q}, \downarrow)$. Die Energieparabeln sind nur zur Klarheit gegeneinander verschoben. Die Überlagerung zweier zirkular polarisierter SDW ergibt eine lineare SDW. b) damit lässt sich die Bandstruktur der 1.31 ML Pb/Si(557) auch mit einer linearen SDW beschreiben. Jedoch mit einem Nestingvektor der dem zweifachen Stufenabstand entspricht. c) Modell der alternierend spinpolarisierten Terrassen der 1.31 ML Pb/Si(557).

nem 1D Hubbard-Modell, so entsteht eine rechts zirkular polarisierte SDW durch Nesting zwischen Zuständen von $(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (\vec{k} + \vec{Q}, \downarrow)$, also Zustände mit entgegengesetzter Spinausrichtung (Q ist dabei der Nesting-Vektor). Dies ist nur möglich durch die Hinzunahme der Elektron-Elektron Wechselwirkung, die die TR-Symmetrie bricht, und so eine Rückstreuung zwischen entgegengesetzt spinpolarisierten, *per se* orthogonalen Zuständen (Kramers Paare), ermöglicht. Siehe dazu auch Kap. 2.5. Eine links zirkular polarisierte SDW wird durch Nesting zwischen $(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (\vec{k} - \vec{Q}, \downarrow)$ erzeugt. Dadurch werden Energielücken geöffnet, analog zur Situation beim Peierls-Effekt (Kap. 2.3). Abb. 4.18 a) zeigt die Situation für parabolisch dispergierende Bänder, mit einer links bzw. rechts polarisierten SDW mit Nestingvektor $G_0/2$, wobei G_0 100% BZ entspricht. Die Parabeln für Spin-up/-down sind zur besseren Darstellbarkeit gegeneinander verschoben worden. Durch Überlagerung der zirkularen SDW erhält man eine lineare SDW (rechts) mit Bandlücken auf beiden Seiten und für beide Spin-Richtungen.[156]

Angewendet auf den in Abb. 4.16 d) gezeigten Fall, der die 1.31 ML Pb/Si(557) Phase beschreibt, erkennt man in Abb. 4.18 b), dass eine lineare SDW mit Nesting-Vektor $Q = g' = 2\pi/2d$ und einem Fermi-Wellenvektor $k'_F = k_F/2$ die Situation passend beschreiben kann. Für diese Interpretation der Daten braucht man allerdings ein Argument, warum es einen Nestingvektor g' auf der Pb/Si(557) Oberfläche geben soll. In einer Diplomarbeit im hiesigen Institut wurde die Struktur der 1.31 ML Phase mit SPA-LEED detailliert untersucht [158]. Mit der H(S)-

und G(S)-Analyse eines $\sqrt{3}$ -Reflexes wurden Oszillationen mit der doppelten Periodizität des Stufenabstandes d gefunden. Die elektronische Struktur der Pb-Ketten ist also offenbar zur übernächsten Terrasse korreliert. Unter der Annahme, dass benachbarte Terrassen immer die entgegengesetzte Spin-Ausrichtung aufweisen, ließe sich der beobachtete schwache Korrelations-effekt erklären. Abb. 4.18 c) zeigt die mögliche Anordnung im Realraum. Zwei benachbarte Terrassen weisen entgegengesetzte Spin-Polarisation auf (blaue und rote Pb-Atome), da zwei SDW senkrecht zu den Stufen phasenverschoben angeordnet sind. Dies ist jedoch keine statische Situation. Die SARPES-Messungen zeigen ja, dass es eine Verschiebung im Impulsraum gibt. Die beiden Wellen bewegen sich also in entgegengesetzten Richtungen über die Oberfläche, so dass es einen ständigen Wechsel der Spin-Ausrichtungen gibt. Ändert sich die Ausrichtung auf einer Terrasse, reagieren die Spins auf der benachbarten Terrasse darauf und wechseln ebenfalls ihre Richtung.

Betrachtet man die Situation bei Pb/Si(557) und das Auftreten von Nesting mit dem halben reziproken Gittervektor $g'/2$ nochmal im Licht der Erhaltung der TR-Symmetrie, dass also Übergänge zwischen Kramers-Paaren $(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (-\vec{k}, \downarrow)$, wie in Abb. 4.18 b) gezeigt, nicht erlaubt sind (siehe Kap. 2.5), so stößt man hier vermeintlich auf einen Widerspruch. Diesen kann man aber damit beseitigen, dass die Annahme der Orthogonalität hier aufgrund der starken Elektron-Elektron-Wechselwirkung in den Ketten und von Kette zu Kette gar nicht mehr gegeben ist und so Streuung und Fermi-Nesting zwischen entgegengesetzten Spinzuständen möglich ist.

Zum Vergleich ist das Kettensystem Au auf Si(557) in diesem Zusammenhang sehr interessant. Schon lange ist bekannt, dass sich bei einer Au-Bedeckung unterhalb einer Monolage Ketten in der Mitte der Terrassen der Si(557) ausbilden, die nur ein Au-Atom breit sind [159, 160, 161]. In ARPES-Messungen fanden *Baer et al.* [160] in Kettenrichtung die Aufspaltung eines dispergierenden Bandes und hielten dies für Anzeichen kollektiver Ladungs- und Spin-Anregungen, dem Holon und Spinon, aus dem Tomonaga-Luttinger Bild [4, 5, 3]. Die eindimensionalen Ketten sollten sich also abweichend von einer Fermi-Flüssigkeit verhalten. Wie spätere ARPES- [162] und SARPES-Messungen aber zeigten, ist der Rashba-Effekt für die Aufspaltung verantwortlich, mit dem Resultat spinpolarisierter Zustände. Der Spin-Polarisationsvektor weist anders als im Fall von Pb/Si(557) und typischen anderen Rashba-Systemen aus der Oberfläche heraus, verursacht durch die anisotrope Ladungsdichteverteilung um die Goldatome herum [151]. Kontrovers bleibt dabei noch, ob beide Bänder metallisch sind, also die Fermi-Fläche durchstoßen oder eines von beiden durch einen Peierls-Übergang genestet wird und eine kleine Bandlücke von 20 meV aufweist. *Erwin und Himpfel* [13] sagen für dieses Kettensystem eine anti-ferromagnetische Ordnung der Dangling Bonds der Si-Atome an den Stufenkanten voraus. Jedes zweite Atom hat durch den Spin des ungebundenen Elektrons ein magnetisches Moment mit alternierender Ausrichtung. Für ihre DFT-Berechnungen berücksichtigen sie die Spin-Bahn-Wechselwirkung und Austauschwechselwirkung, die letztlich für die anti-ferromagnetische Ordnung verantwortlich ist. So zeigt dieses Beispiel auch die Verbindung zwischen Antiferromagnetismus und spinaufgespaltenen Bändern bei Anwesenheit von starker Austauschwechselwirkung zwischen benachbarten Atomen.

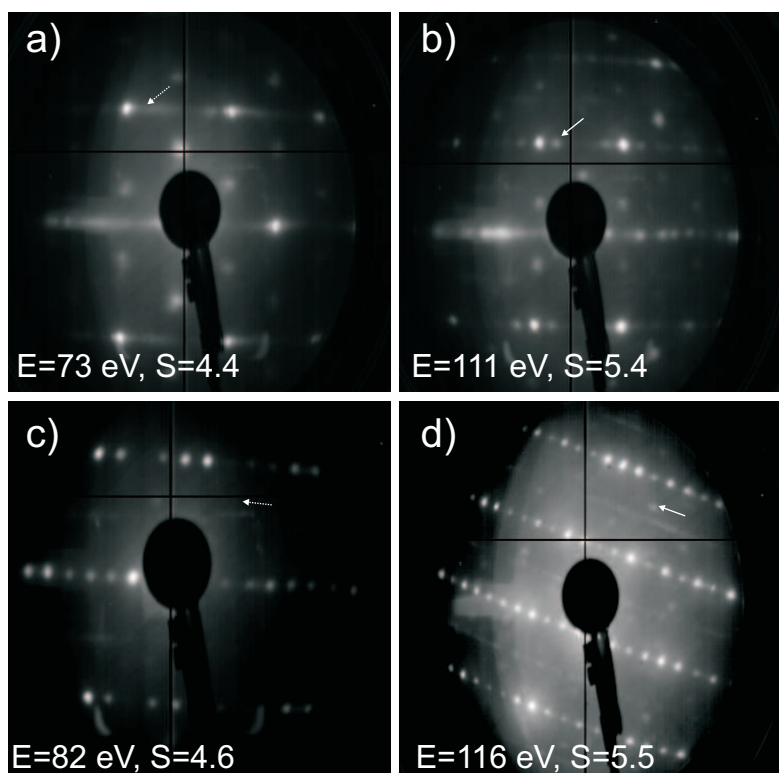


Abbildung 4.19.: LEED-Bilder von 4 verschiedenen Pb Phasen, die mittels XPS untersucht werden. a) und b) mit $\Theta > 1.3\text{ML}$, bei a) hat sich die (223) noch nicht komplett ausgebildet. c) Yeom-Phase mit (223)-Stufung aber ohne $\sqrt{3}$ -Reflexe. d) 1.31 ML Phase mit (223)-Stufung und $\sqrt{3}$ -Reflexen.

4.6 XPS an Pb/Si(557)

Um die Bindungsverhältnisse der Pb-Atome auf der Si-Oberfläche näher zu ergründen wurden mit Hilfe der Röntgenstrahlung an der SIS-Beamline XPS-Messungen an verschiedenen Phasen im Bereich einer Monolage Pb auf Si(557) durchgeführt. Diese Messungen werden mit den Daten von *Kim et al.* [163] verglichen. Abbildung 4.19 zeigt LEED-Aufnahmen von vier unterschiedlichen Pb-Phasen, die durch heizen zu unterschiedlichen Temperaturen bei gleichzeitigem Aufdampfen von mehreren ML Pb, erzeugt wurden. In a) ist eine Präparation bei 600 K gezeigt, die (223)-Stufung hat sich noch nicht komplett ausgebildet, jedoch sind $\sqrt{3}$ -Reflexe zu beobachten. Die Bedeckung dieser Phase liegt oberhalb von 1.3 ML. Dies ergibt sich aus der Tatsache, dass die Menge an Pb, die auf der Oberfläche verbleibt im Wesentlichen durch die Substrattemperatur während des Aufdampfens bestimmt wird. Um eine 1.3 ML-Phase zu bekommen, benötigt man aber höhere Temperaturen (siehe unten). Auch die Oberfläche in b), die bei 605 K hergestellt wurde, liegt Θ über 1.3 ML, jedoch hat sich die (223)-Stufung durch die leicht höhere Temperatur nun gut ausgebildet, sodass deutliche LEED-Reflexe der Facetten beobachtet werden können. c) entspricht der in [163] mit $\alpha \times 2$ bezeichneten Phase, bei der zwar die (223) sehr intensive Reflexe zeigt, aber von der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur, die an der Position des weißen Pfeils zu erwarten ist, nichts zu sehen ist. Man muss beachten, dass *Kim et al.* diese Phase mit der von *Tegenkamp et al.*[14, 21] gleichsetzen, die den 1D-2D Phasenübergang zeigt.

Dies ist aber nicht richtig, da die letztere deutliche $\sqrt{3}$ -Reflexe zeigt. Eine solche Phase wurde ebenso bei einer Temperatur von 640 K präpariert und ist in d) gezeigt. Einer der $\sqrt{3}$ -Reflexe ist wieder durch einen weißen Pfeil markiert. Wie in Abb. 2.17 gezeigt, sollte diese Phase im SPA-LEED auch eine Aufspaltung der $\sqrt{3}$ -Reflexe entlang der Kettenrichtung zeigen. Mit dem hier verwendeten konventionellen LEED sind diese Strukturen aber nur schwer auflösbar und daher nicht zu erkennen.

Die XPS-Messungen wurden mit einer Photonenenergie von $h\nu=150$ eV und zirkularer Polarisation durchgeführt. Die Photoelektronen wurden bei diesem Experiment in Normalemission detektiert. Die Bindungsenergien aller Spektren sind auf den Si $2p_{3/2}$ -Peak mit einer Energie von $E_b=99.2$ eV bezogen, um Einflüsse eventueller Bandverbiegungen an der Oberfläche auszuschließen. Die Spektren zeigen drei interessante Bereiche, die hochauflösend aufgenommen wurden: Die Si $2p$ -Peaks bei $E_b=99-100$ eV (Abb. 4.21), die Pb $5d$ bei $E_b=18$ und 21 eV (Abb. 4.20), sowie die Valenzband und Oberflächenzustände bei niedrigen Bindungsenergien zwischen $0-3$ eV (Abb. 4.22). Um den Beitrag der inelastisch gestreuten Photoelektronen herauszufiltern wurde bei den Messdaten zunächst ein Shirley-Untergrund abgezogen [164]. Die Peak-Positionen wurden dann durch Anpassung der Daten mit Hilfe von Voigt-Funktionen (Faltung aus Gauss- und Lorentz-Profil) vorgenommen und die hellgrünen Linien zeigen die Summe der Peaks.

Der Pb $5d$ Peak ist aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung in den $5d_{5/2}$ und $5d_{3/2}$ aufge-

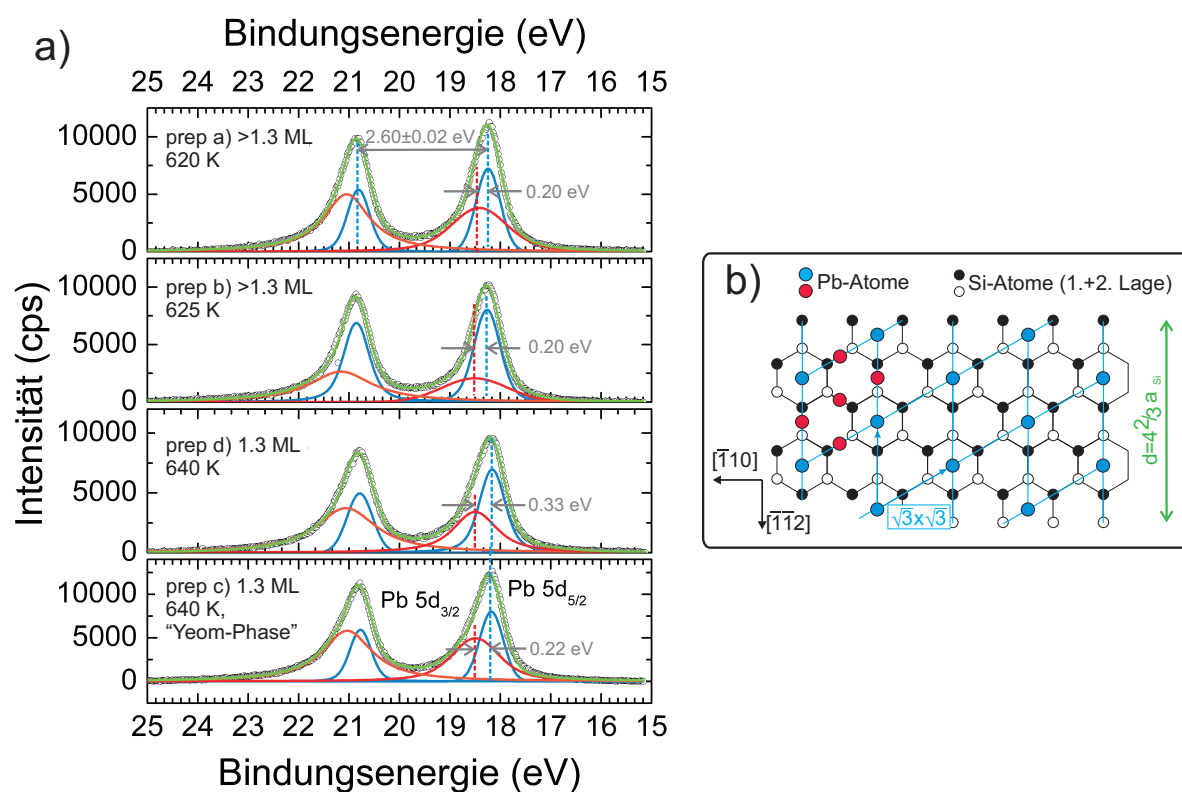


Abbildung 4.20.: a) XPS-Messungen am Pb $5d$ -Peak als Funktion der Bindungsenergie bei verschiedenen Pb-Phasen. Der durch SOI aufgesplante Peak zeigt Schultern zu hohem E_b , die durch einen zweiten Adsorptionsplatz in der $\sqrt{3}$ -Einheitszelle entstehen (b).

spalten und man findet ein $\Delta E_{so}=2.60\pm 0.02$ eV (Abb. 4.20 a). Zu höheren Bindungsenergien zeigen beide Peaks Schultern. Die Ursache dieser Schulter ist zum einen ein Chemical Shift, zum anderen erwartet man für metallische Oberflächen eine Peak-Asymmetrie zu hohen Bindungsenergien. Letzterer Effekt wird dadurch verursacht, dass das Elektronengas am Fermi-Niveau, das bei der Photoemission entstandene Core-Level Loch, abschirmt [165]. Diese Asymmetrie wird oft mit einem Doniach-Sunjić Profil beschrieben. Dennoch braucht man für die Beschreibung der Messdaten auch noch einen Schulterpeak, daher wurden in der hier gezeigten Auswertung nur symmetrische Profile verwendet. Der metallische Charakter der Oberfläche wird im Zusammenhang mit den Valenzband- und Oberflächenzuständen weiter unten diskutiert.

Der vom Chemical Shift verursachte Schulterpeak begründet sich auf der Tatsache, dass in der Einheitszelle der dicht gepackten $\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Phase zwei unterschiedliche Adsorptionsplätze existieren. Dies ist in Abb. 4.20 b) durch magentafarbene und blaue Pb-Atome illustriert. Pro Zelle sitzt ein Atom auf einer zentralen Position (blau) und 3 Atome auf Brückenplätzen (magenta). Die chemische Umgebung ist für diese Pb-Atome unterschiedlich. Hiervon wird die Bindungsenergie beeinflusst und so existieren zwei Peaks, Haupt- und Schulterpeak. Die Aufspaltung ist durch vertikal gestrichelte Linien angedeutet, sie beträgt bei allen Präparationen etwa 0.2 eV, sowie 0.3 eV bei der Präparation c. Das gleiche Verhalten wurde auch in [163] beobachtet, allerdings waren die dort gefundenen Aufspaltungen etwa 0.1 eV größer. Und für ihre " $\sqrt{3}\times 10$ ", die hier der 1.31 ML-Phase (Präparation c) entspricht, erhielten sie 0.40 eV. Die Pb-Atome in der zentralen Position haben eine höhere Bindungsenergie im Vergleich zu den Brückenplatzatomen, da sie drei statt zwei nächste Nachbarn haben.

Die XPS-Daten von Si 2p sind in Abb. 4.21 für die Präparationen a-d, sowie für die saubere Si-Oberfläche vor der Pb-Adsorption, gezeigt. Die Spin-Bahn-Aufspaltung in $p_{1/2}$ und $p_{3/2}$ beträgt $\Delta E_{so}=0.60$ eV mit $E_{b,3/2}=99.2$ eV. Bei der reinen Fläche existiert ein Peak bei 88.7 eV, der von Restatomen der 7×7 -Rekonstruktion stammt [163]. Dieser *Surface Core Level Shift* entsteht durch eine geringere Koordination dieser Si-Atome und der damit geringeren Bindungsenergie. Dieses Charakteristikum verschwindet, sobald man Pb auf der Oberfläche hat und zeigt, dass die 7×7 -Rekonstruktion wie erwartet durch die Pb-Adsorption zu Gunsten einer $\sqrt{3}$ -Struktur verschwindet. Auch hier tritt eine chemische Verschiebung der Silizium-Peaks auf, sichtbar durch Schultern zu jeweils niedrigeren Bindungsenergien bei Präparation c und d (rot Kurven). Dies könnte zum einen an den unterschiedlich starken Bindungen in der $\sqrt{3}$ -Einheitszelle liegen, zum anderen durch Siliziumatome an den Stufenkanten verursacht werden. *Kim et al.* zeigen durch Variation des Emissionswinkels der XPS-Messungen, dass diese Schulterpeaks aus bis zu vier Subpeaks S1-S4 bestehen können und ordnen sie den Si-Terrassenatomen sowie Stufenkantennatomen zu. Da die hier vorgestellten Messungen aber nur unter Normalemission gemessen wurden, lassen sich diese Schlussfolgerungen hier nicht eindeutig verifizieren. Allerdings misst man den Abstand der Schulter vom $p_{3/2}$ -Peak zu 0.28 eV für Präparation c und 0.2 eV für Präparation d, was in etwa dem Schwerpunkt der drei Peaks S1-S3 aus [163] entspricht. Die Tatsache, dass die Schulter in Präparation a und b nicht zu erkennen ist, lässt darauf schließen, dass sie in der Tat von nicht mit Pb-Atomen bedeckten Si-Stufenkanten-Atomen verursacht werden. Da für Präparation a und b die Bedeckung höher ist und die $\times 2$ Reflexe im LEED auch nicht beobachtet werden (siehe LEED-Bilder).

Der letzte charakteristische Ausschnitt des XPS-Spektrums der Pb/Si(557) Fläche liegt bei sehr kleinen Bindungsenergien und entstammt dem Silizium-Valenzband, sowie Pb-Si-Oberflächen- π -Zuständen. Abb. 4.22 zeigt vier Spektren zwischen -0.5 eV und 2.9 eV. Das der reinen Silizium-

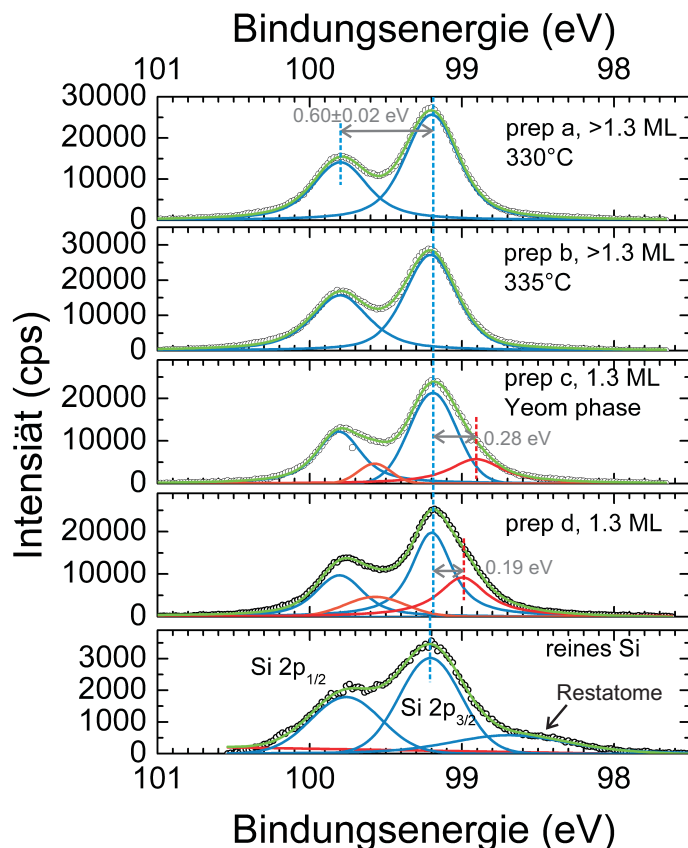


Abbildung 4.21.: XPS-Messungen am Si 2p-Peak als Funktion der Bindungsenergie bei verschiedenen Pb-Phasen. Die reine Si-Fläche zeigt einen Peak bei 98.5 eV der von gering koordinierten Si-Restatomen in der 7×7 -Struktur stammt und nach Pb-Adsorption verschwindet. Schultern zu niedrigen E_b stammen von Si-Stufenkantenatomen, die keine Bindung zu Pb-Atomen aufweisen und für $\Theta > 1.3$ ML verschwinden.

Fläche, und das der Präparationen b, c und d. Die reine Si(557) in 4.22 d) ist konsistent mit Messungen an Si(111) 7×7 [166, 167]. Ein Peak bei 1.5 eV entstammt dem Si-Valenzband. Zu niedrigeren Bindungsenergien erkennt man noch zwei weitere Peaks bei etwa 1.1 eV und 0.6 eV, die Si-Oberflächenzuständen zugeordnet werden können, die den Dangling Bonds der Si-Adatome und Restatome entspringen. An der Fermi-Kante misst man noch eine endliche, wenn auch kleine, Zustandsdichte, sodass man schließen kann, dass auch die 7×7 -Struktur metallisch ist, wie es auch von *Karlsson et al.* berichtet wurde [167].

Nach Adsorption von Pb ändert sich das Spektrum. Nun ist bei 1.3 eV der Volumenzustand lokalisiert (blau). An seiner rechten Flanke benötigt man bei allen Pb-Präparationen drei Peaks (rot, SS1-SS3) um den Intensitätsverlauf hinreichend gut anzupassen. Sie sind mit Oberflächenzuständen der Pb-Si-Oberfläche in Verbindung zu bringen. Mit Halbwertsbreiten um etwa 0.3 eV sind diese Peaks relativ scharf und die Anpassung ergibt, dass sie sich bei 0.5, 0.7 und 0.95 eV befinden. In [163] wurde argumentiert, dass SS3 immer vorhanden ist, SS1 und SS2 aber charakteristisch für die $\alpha \times 2$ -Phase sei. Jedoch zeigt der dortige Verlauf der Daten, dass SS1 und SS2 auch bei den anderen Pb-Phasen vorhanden ist, wenn auch nicht so ausgeprägt wie im $\alpha \times 2$ -Fall.

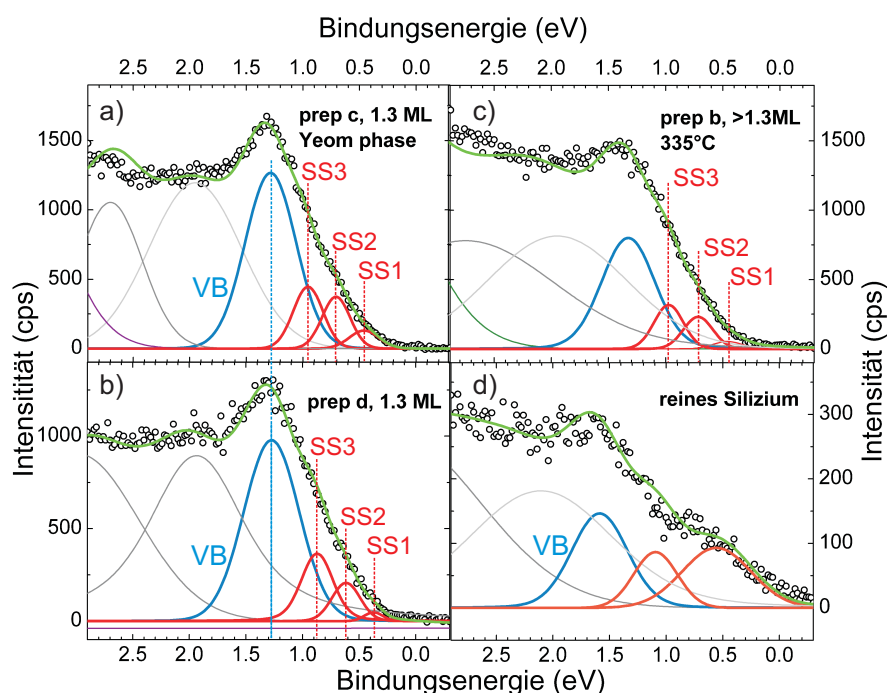


Abbildung 4.22.: XPS-Messungen am Pb-Si Oberflächenzustand als Funktion der Bindungsenergie bei verschiedenen Pb-Phasen. Drei Oberflächenzustände können für alle Präparationen mit Pb entlarvt werden (a-c). Diese unterscheiden sich von den Siliziumzuständen der reinen Fläche (d). Die endliche Zustandsdichte an der Fermi-Energie zeigt den metallischen Charakter der Pb-Ketten.

Der Grund warum die Zustände SS1-SS3 in unserem Fall weniger scharf definiert sind als bei [163] kann einerseits an einer geringeren Integrationszeit liegen und zum zweiten mit der unterschiedlichen Photonenenergie zusammenhängen (150 eV zu 140 eV). Hier können Matrixelementeffekte beim Übergang von Anfangs- in den Endzustand eine Rolle spielen, die aber bisher nicht systematisch untersucht worden sind.

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, dass die XPS-Messungen im Wesentlichen die Studie von *Kim et al.* unterstützen. Es existieren zwei Bindungsplätze der Pb-Atome in der $\sqrt{3}$ -Einheitszelle und es existieren Si-Stufenkantenatome, die keine Bindung zu Pb-Atomen aufweisen. Die Oberflächenzustände sind metallisch in Übereinstimmung mit der metallischen Leitfähigkeit der Pb-Ketten.

4.7 Diskussion der Ergebnisse zu Pb auf Si(557)

Die wesentlichen Ergebnisse der Untersuchung von Pb auf Si(557) können wie folgt zusammengefasst werden:

- Durch das Wachstum von Pb-Filmen auf Si(557) konnte von Beginn an ein epitaktisches Lage-für-Lage Wachstum erzielt werden. Dies wurde durch Leitwertoszillationen als Funktion der Schichtdicke in Verbindung mit SPA-LEED Untersuchungen bestätigt

(Kap. 4.1). Offenbar findet durch die Stufen und das initiale Wachstum auf den schmalen (111)-Terrassen eine effektive Reduzierung des Wachstumsstressses statt, welcher auf planarem Si(111) noch zu amorphem Wachstum der ersten Lagen führte. Die Oszillationen des Leitwerts zeigen dabei im Vergleich der parallelen und senkrechten Richtung eine Verschiebung der Minima und Maxima zueinander, was einerseits mit unterschiedlichen Perkolationsgrenzen entlang und senkrecht zu den Stufen zusammenhängt, andererseits aber auf Quanten-Size-Effekte zurück geführt wird. Bei Schichtdicken deutlich größer als 5 ML ist die Oberfläche des Films isotrop und kein Stufeneinfluss im LEED detektierbar. Dennoch ist die Leitfähigkeit des Films weiterhin größer entlang der Stufen als senkrecht dazu. Die elektronischen Transportmessungen detektieren also die kristalline Struktur auch im Volumen des Films und an der Pb-Si Grenzfläche. Dies führt zum nächsten Ergebnis-

- Strukturelle Defekte wie Stufen können in effektiver Weise die Ladungsträger streuen. Dies zeigt sich auch in der Monolage, mit ihrer anisotropen Leitfähigkeit. Jedoch bestimmt die Güte der Oberfläche ob es zur Ausbildung des 1D-2D Phasenübergangs bei 78 K kommt. Schon kleinste Abweichungen, etwa durch Refacettierung der Oberfläche oder inhomogene Pb-Bedeckung über mesoskopische Längenskalen, verhindern sein Auftreten. Statt dessen findet man in beiden Messrichtungen aktivierten Transport und im Fall starker Refacettierung einen Halbleiter-Metall Übergang bei Temperaturen um 150 K, der mit der hohen Defektdichte entlang der Pb-Ketten und der Aktivierung von lokalisierten Ladungsträgern entlang der Ketten zu tun hat ($E_a \approx 10$ meV).
- XPS-Messungen zeigen, dass es zwei Adsorptionsplätze in der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Einheitszelle, entsprechend dem Strukturmodell, gibt. Für die 1.31 ML Phase sind die Terrassen mit Pb-Atomen bedeckt, nicht jedoch die Stufenkanten.
- In Magnetotransportmessungen zeigte sich die Dominanz der Spin-Bahn Kopplung. Man beobachtete in der Regel Schwache Anti-Lokalisierung, was auf eine häufige Spin-Bahn Streuung hindeutet. Genau für die 1.31 ML Phase jedoch beobachtet man ein Umklappen der G(B)-Kurve hin zu Schwacher Lokalisierung. Die Auswertung ergibt eine, für den Bedeckungsbereich um 1.3 ML, um Größenordnung reduzierte Streurrate $\tau_{so,||}^{-1}$ entlang der Ketten (vgl. Abb. 4.13). Es findet hier also keine Streuung zwischen Zuständen entgegengesetzter Spinausrichtung statt, für von 1.31 ML abweichende Bedeckungen allerdings schon.
- SARPES-Messungen konnten zunächst die bereits bekannte elektronische Bandstruktur von Pb/Si(557) reproduzieren. Darüber hinaus gehend konnte gezeigt werden, dass die Oberflächenzustände, durch den Rashba-Effekt, eine Spin-Polarisation aufweisen und sich in der Richtung senkrecht zu den Pb-Ketten, immer alternierende In-Plane Spinausrichtungen abwechseln (Kap. 4.5). Das exakte Zusammenspiel aus Stufenperiodizität g , Bandfüllung k_F und Rashba-Aufspaltung Δk_0 führt zu äquidistant verschobenen Kreisen auf der Fermi-Fläche mit Abstand $g' = g/2 = 2\pi/(2d)$. Dies entspricht also zwei phasenverschobenen spinpolarisierten Ladungsdichtewellen mit Nestingvektor $g = 2\pi/d$. Im Bild der linearen Spindichtewelle kann man dies auch auf zwei zirkular polarisierte Spindichtewellen mit entgegengesetzter Bewegungsrichtung und Nestingvektor $g' = g/2$ zurück führen. Aufgrund

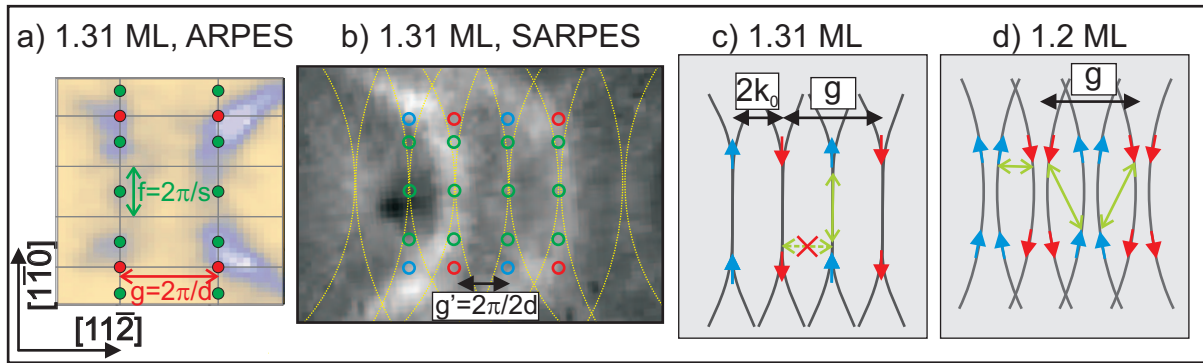


Abbildung 4.23.: a) Nach ARPES-Messungen aus [21] besteht die Fermi-Fläche aus Punkten (rot und grün). An den roten Punkten entsteht durch Nesting ein Bandlücke. Die grünen Punkte sind die Durchstoßpunkte der metallischen 1D-Zustände entlang der Kettenrichtung mit Periodizität $2\pi/s$. b) Entsprechender Ausschnitt der Fermi-Fläche aus Abb. 4.14 a). Auch hier wurde das Punktmuster übernommen. c) Schematischer Verlauf der Fermi-Kreise bei $\Theta = 1.31$ ML. Durch Renormalisierung gibt es nur Zustände entlang der Ketten, senkrecht sind die Zustände genestet. d) Schematische Situation für $\Theta = 1.2$ ML. Nesting ist aufgehoben. Streuung kann auch zwischen entgegengesetzten Spinzuständen auftreten.

der Elektron-Elektron Wechselwirkung ist das Konzept des freien Elektronengases modifiziert und die eindeutigen Auswahlregeln der TR-Symmetrie sind nicht mehr anwendbar, sodass eine Streuung zwischen solchen Zuständen möglich wird.

Nachdem jetzt die Spinstruktur der Fermi-Fläche bekannt ist, kann man versuchen dies mit den Magnetotransportdaten in Verbindung bringen. Das bemerkenswerteste Resultat war dabei, die um Größenordnungen reduzierte Spin-Bahn Streurrate $\tau_{so,||}^{-1}$ im Bedeckungsbereich um $\Theta=1.31$ ML (vgl. Abb. 4.13). Dies lässt sich mit den Ergebnissen der SARPES-Messungen in Verbindung mit schon bekannten ARPES-Messungen plausibel machen. Abb. 4.23 a) zeigt die Fermi-Fläche, gemessen von *Tegenkamp et al.* [21]. Wie gezeigt wurde, entsteht durch das Fermi-Nesting bei 1.31 ML eine Renormalisierung der Zustandsdichte und die Intensität konzentriert sich in bestimmten Punkten (rot und grün markiert) auf einer Linie entlang der Stufenrichtung. Die roten Punkte entsprechen dabei *genesteten* Zuständen, an denen eine Bandlücke von etwa 20 meV existiert. Die grünen Punkte aber befinden sich in einem Abstand von $2\pi/s$, mit $s=10 a_{Si}$, der Periodizität der (5,1)-Phase entlang der Kettenrichtung. Sie stammen also von den Pb-Ketten und weisen nur in $[1\bar{1}0]$ -Richtung eine Dispersion auf und durchstoßen die Fermi-Fläche – sind also 1D-metallisch. Ein entsprechender Ausschnitt der ARPES-Fermi-Fläche aus Abb. 4.14 ist in 4.23 b) gezeigt. Hier sind auch im Vergleich zu a) auf $g/2$ -Positionen Kreise zu erkennen, die in a) unterdrückt sind und von der entgegengesetzten Spinorientierung stammen. Die *genesteten* Punkte sind hier rot und blau, jetzt aber mit einem Nestingvektor $g'=2\pi/2d=g/2$ der linearen SDW. Die metallischen 1D-Zustände sind wieder in Grün dargestellt. Im *genesteten* Fall bei $\Theta=1.31$ ML können sich die Ladungsträger nur entlang der Ketten bewegen, da die Dispersion nur in diese Richtung vorhanden ist. Auch für die Streuung stehen nur entlang dieser Richtung Zustände zur Verfügung. Nun weiß man aber aus den SARPES-Messungen, dass die Zustände spinpolarisiert sind (entsprechend der Darstellung in 4.23 c). Bei SARPES-Scans

entlang eines Kreises konnte keine Änderung der Spinpolarisation festgestellt werden, die Spins sind also entlang der Kreise orientiert. Bei einer Streuung entlang der Ketten kann also gar kein Spinumklapp stattfinden und die Spin-Bahnstreurate $\tau_{so,\parallel}^{-1}$ ist dementsprechend groß. Sobald die Pb-Bedeckung und damit die Bandfüllung kleiner ist ($\Theta=1.2$ ML, Abb. 4.23 d) ist das Fermi-Nesting aufgehoben und die Kreise schneiden sich nicht mehr. Jetzt kann es auch Streuung in Zustände anderer Spinausrichtung geben, die ja durch die e-e-Wechselwirkung und damit verbundener Aufhebung der TR-Symmetrie erlaubt ist. Für diesen Fall erwartet man zwangsläufig eine Erhöhung der Spin-Bahn-Streurate.

Untersuchung von ultradünnen Bismutschichten auf Si(111)

Im vorangegangenen Kapitel sahen wir, inwiefern sich die Spin-Bahn-Kopplung in quasi-eindimensionalen metallischen Systemen auf die elektronischen Transporteigenschaften auswirkt. Dabei war es die starke Elektron-Elektron Wechselwirkung, die eine Streuung zwischen *per se* orthogonalen Zuständen ermöglichte. Um die grundlegenden Eigenschaften der TR-Symmetrie zu überprüfen ist es von Vorteil zweidimensionale Elektronengase zu untersuchen. Hierfür sind dünne Bi(111)-Filme ideal geeignet. Sie lassen sich epitaktisch auf Si(111) wachsen und bilden sehr homogene und atomar glatte Oberflächen. Durch Quanten-Size Effekte wird der Volumenbereich dieser Filme halbleitend, wohingegen die Oberfläche in diesem System metallisch bleibt und so von der Unterlage elektronisch entkoppelt wird. Eine große Rashba-Aufspaltung resultiert in spinpolarisierten Bändern mit loch- und elektronenartigem Charakter. STM-Messungen belegten, dass die Rückstreuung zwischen Kramers Paaren unterdrückt ist, die TR-Symmetrie hier also erhalten ist. Magnetotransportmessungen ermöglichen in diesem zweidimensionalen System eine Propagation der Ladungsträger in beiden Richtungen, senkrecht zum Magnetfeld und lassen Schwache Antilokalisierung erwarten. Durch gezielte Einbringung von magnetischen und nichtmagnetischen Störstellen auf der Oberfläche soll die TR-Symmetrie gestört werden und Einflüsse auf die Transport und Magnetotransporteigenschaften ermittelt werden.

Dieses Kapitel gliedert sich wie folgt: Zunächst wird in 5.1 das epitaktische Wachstum von Bi auf Si(111) geschildert und die strukturellen Eigenschaften der Filme mit SPA-LEED untersucht. In Abschnitt 5.2 wird die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit vorgestellt. Gefolgt von Magnetotransportmessungen an reinen Bi-Filmen in 5.3. Der Einfluss der Adsorption von Bi, Co, Fe und Tb auf Bi-Filmen wird dann in Kapitel 5.4 behandelt. Am Ende folgt eine Diskussion der Ergebnisse in Kap. 5.5.

Teile der hier vorgestellten Ergebnisse wurden bereits in [120, 121, 168] veröffentlicht.

5.1 Epitaktisches Wachstum von Bismutschichten auf Si(111)

In Kapitel 2.8.2 wurde der mehrphasige Prozess des Wachstums von Bi auf Si(111) vorgestellt. In Übereinstimmung mit der LEED-Studie von *Kammler et al.* [106], kann dieser Prozess auch in den hier vorgestellten Experimenten verifiziert werden. Abb. 5.1 zeigt Beugungsbilder verschiedener Bi-Schichtdicken, gewachsen auf Si(111), bei 200 K Substrattemperatur. Ausgehend vom reinen Si(111) mit 7×7 -Überstruktur (a) entstehen zunächst für sehr dünne Filme

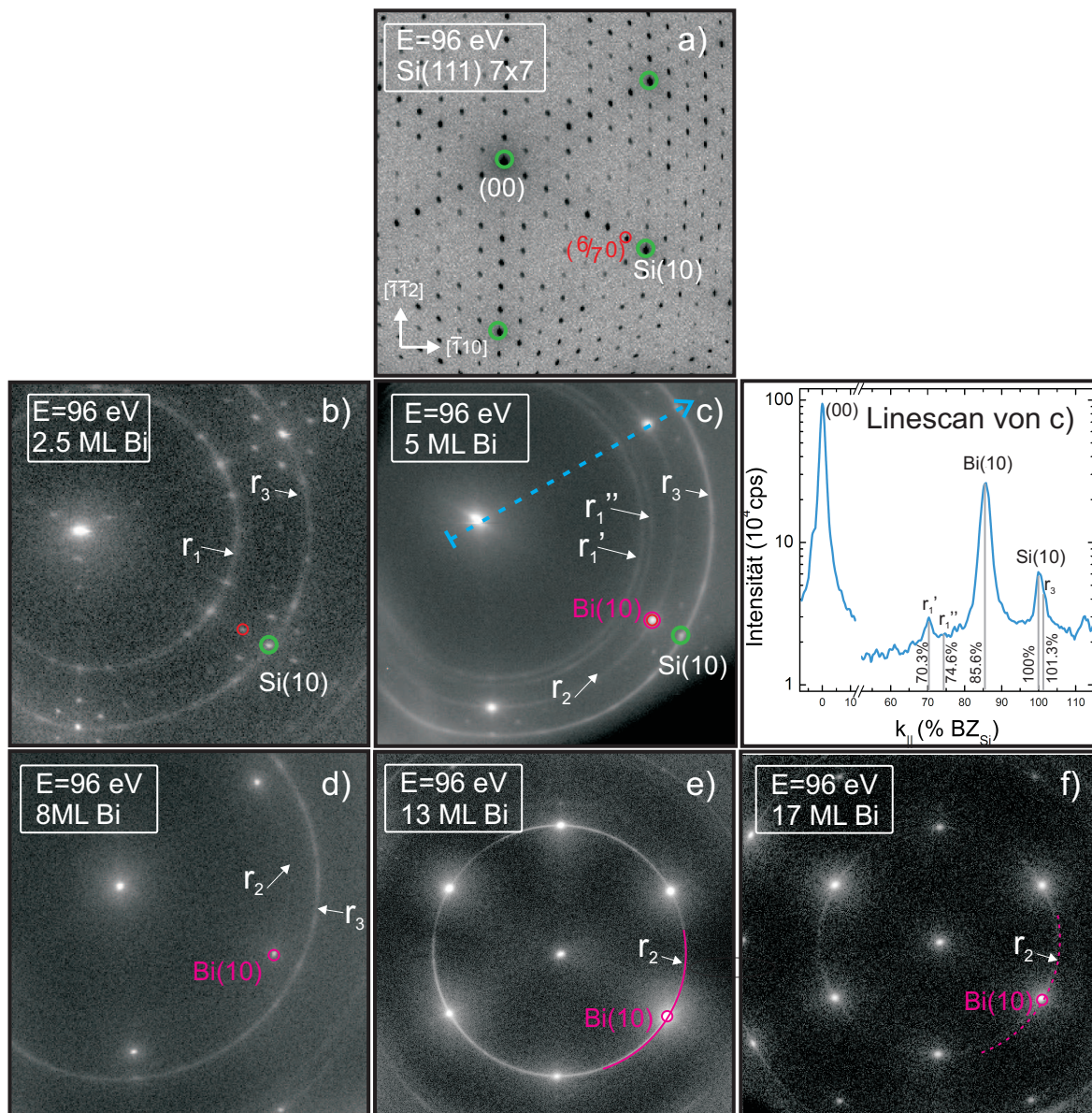


Abbildung 5.1.: LEED-Bilder verschiedener Bi-Schichtdicken auf Si(111). a) Reine Si(111) Fläche mit 7×7 -Rekonstruktion. b) 2.5 ML Bi: ringförmige Intensitäten bei $r_1 = 71.4\%$ BZ und $r_3 = 101.3\%$ BZ stammen von Bi(110)-Kristalliten. c) Nach 5 ML erscheinen hexagonale Reflexe von Bi(111) und einem Ring mit $r_2 = \frac{6}{7}$ BZ=86% BZ. r_1 spaltet sich in r_1' und r_1'' auf. Entlang des blauen Pfeils wurde ein Linienprofil gemessen, das die Positionen der Kreise verdeutlicht. d) 8 ML: r_1 verschwindet, dafür werden die Bi(111)-Reflexe intensiver, während die Silizium-Reflexe gänzlich unterdrückt sind. e+f) mit steigender Schichtdicke wird die Filmqualität immer besser und die Ringintensität nimmt zu Gunsten der (111)-Reflexe ab. ($E=96$ eV, $S_{\text{Bi}(111)}=6.3$, $T_{\text{dep}} = 200$ K, $T_{\text{anneal}}=450$ K.)

von 2.5 Monolagen (ML)¹ ringförmige Strukturen mit Radien $r_1 = 5/7 \text{ BZ} = 71.4\% \text{ BZ}$ sowie $r_3 = 101.3\% \text{ BZ}$. Dies entspricht Realraumabständen von 4.66 \AA und 3.28 \AA und stimmt gut mit einem der Basisvektoren der pseudo-kubischen Bi(110) von $a_1 = 4.75 \text{ \AA}$, und dem Reihenabstand von 3.28 \AA überein. Die Reflexe der erste Ordnung von Silizium, sowie einige der 7×7 sind weiterhin sichtbar, das bedeutet, dass der Film zunächst nicht geschlossen ist.

Bei 5 ML (c) spaltet r_1 in $r'_1 = 70.3$ $r'_2 = 74.6\% \text{ BZ}$ auf. Dies entspricht Realraumabständen von 4.73 \AA , sowie 4.45 \AA , letzterer ist passend zum zweiten Basisvektor der (110)-Fläche von $a_2 = 4.54 \text{ \AA}$. Hier sollte angemerkt werden, dass *Kammler et al.* leicht andere Werte von 67.5% sowie $72\% \text{ BZ}$ für die beiden inneren Ringe fanden. An der Interpretation ändert sich jedoch nichts, die initiale Wachstumsrichtung ist die $[110]_{\text{rhom}}$ -Richtung. Jedoch schon bei 5 ML erkennt man eine drastische Änderung im Vergleich zu b), die der in Kap 2.8.2 erwähnten allotropen Wachstumsänderung entspricht. Nachdem die Bi(110)-Kristallite zusammengewachsen sind (die 7×7 -Intensität ist unterdrückt) zeigt sich an den $6/7$ -Positionen der 7×7 eine deutliche Intensitätssteigerung, was nun auf hexagonal angeordnete Bi(111)-Kristalle schließen lässt. $6/7 = 86\% \text{ BZ}$ entspricht im Realraum 3.88 \AA , somit ergibt sich eine leichte Kompression im Vergleich zum Bi-Volumenwert von $4.54 \times \cos(30^\circ) = 3.93 \text{ \AA}$ von etwa 1.5% . An dieser Tatsache erkennt man die Bedeutung der 7×7 -Rekonstruktion für das epitaktische Wachstum von Bi(111)-Filmen, die komensurabel in die vorgegebene Struktur einrasten. Als weiteres Merkmal dieser Schichtdicke erkennt man noch einen Ring bei $r_3 = 86\% \text{ BZ}$, der von rotationsfehlgeordneten Bi(111)-Kristalliten herrührt, die keine feste Orientierung relativ zur Si(111)-Unterlage haben und zufällig rotiert sind.

Für das weitere Wachstum nach der Phasentransformation werden die (111)-Reflexe immer dominanter und die Ringstrukturen der (110)-Orientierung schwächen sich ab (siehe 8 ML in d), da die (110)-Kristalle schicht von den (111)-Kristallen überwachsen werden. In e) und f) für noch dickere Schichten ist schließlich nur noch das Bi(111)-Beugungsbild zu erkennen, mit sehr intensiven hexagonal angeordneten Reflexen und einem, relativ dazu, schwächeren Ring von fehlrotierten Kristalliten. Aber auch diese schwächen sich in der Intensität immer weiter ab, sodass am Ende nur noch die hexagonale Struktur des epitaktischen Bi(111)-Films relevant ist.

In der Literatur sind verschiedene Rezepte für die Herstellung qualitativ hochwertiger Bi-Filme bekannt. So werden in [106] die Filme bei einer Substrattemperatur von 300 K und einer Bedampfungsrates im Bereich 1 ML/min erzeugt. Auch wird häufig ein zweistufiger Wachstumsprozess berichtet, bei dem zunächst ein dünner Film bei niedrigen Temperaturen ($\approx 150 \text{ K}$) erzeugt wird und im weiteren Verlauf die Substrattemperatur auf 300 K erhöht wird. Es hat sich bei den hiesigen Experimenten gezeigt, dass das Wachstum bei niedrigen Temperaturen bessere Resultate liefert. Bei einer Substrattemperatur von $150\text{-}200 \text{ K}$ werden die Filme von einigen 10 Bilagen (BL) zunächst adsorbiert. In einem Ausheilschritt wird die Probe auf Temperaturen um $400\text{-}450 \text{ K}$ für $20\text{-}40 \text{ min}$ erwärmt. Das Aufdampfen bei $T = 200 \text{ K}$ hat den Vorteil, dass eine Inselbildung (Stranski-Krastanov Wachstum) verhindert wird und so geschlossene Filme wachsen. Diese weisen zunächst noch eine große Rauigkeit und Unordnung auf, sodass im LEED beispielsweise nur schwache Reflexe beobachtbar sind. Abbildung 5.2 zeigt den Vergleich vor und nach dem Ausheilschritt einer 6.5 BL dicken Schicht. Vor dem Ausheilen erkennt man in a) nur

¹Hier wird die Schichtdicke in ML angegeben, da das initiale Wachstum in Bi(110)-Richtung stattfindet und um eine Vergleichbarkeit zur LEED-Studie von *Kammler et al.* zu gewährleisten. $1 \text{ ML}_{\text{Bi}(110)} \hat{=} 9.82 \times 10^{14} \text{ Atomen/cm}^2$. Im restlichen Teil dieses Kapitels wird die Bi-Schichtdicke aber für gewöhnlich anhand der Bi(111)-Flächendichte in Bilagen (BL) angegeben $1 \text{ BL}_{\text{Bi}(111)} \hat{=} 1,14 \times 10^{15} \text{ Atomen/cm}^2$. Eine Ausnahme davon bildet die Angabe der Zusatzbedeckung $\delta\Theta$ in Kap. 5.4, sie bezieht sich auf die Anzahl der freien Adsorptionsplätze auf der Oberfläche und wird auch in ML angegeben.

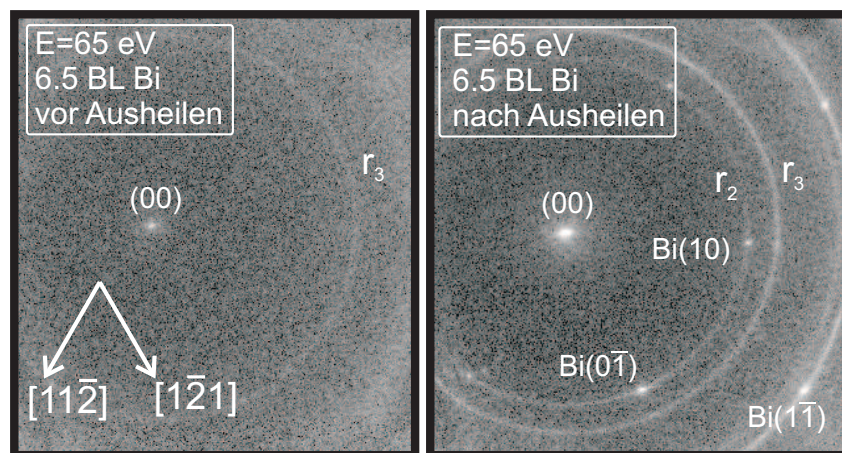


Abbildung 5.2.: Ausheileneffekt bei einer 6.5 BL Bi-Schicht. a) Direkt nach dem Aufdampfen bei 200 K. b) Nach einem Ausheilsschritt bis 400 K für 20 min.

schemenhaft die Existenz eines Beugungsringes bei 101% BZ, während nach dem Temperaturschritt in b) deutlich die Bi(111)-Reflexe heraustreten und von einer verbesserten Filmqualität zeugen. Der Erwärmungsschritt auf $T \geq 400$ K bewirkt eine Erhöhung der Mobilität der Bi-Atome, sodass sich nach einiger Zeit eine bessere kristalline Ordnung und Glättung der Filme ergibt.

Die kristalline Ordnung des Films hat auch direkten Einfluss auf die Leitfähigkeit der Schicht, da eine Verringerung der Defektdichte die Streurate der Ladungsträger verringert und so die Leitfähigkeit erhöht. Dies ist in Abb. 5.3 gezeigt. Der Leitwert eines 36 BL starken Films in a), ebenfalls bei 200 K gewachsen, ist im zeitlichen Verlauf dargestellt, während er bei 420, 430 und 450 K ausgeheilt wird. Für die Interpretation des Verlaufs muss man zunächst verstehen, dass die Volumenzustände von Bismut halbmimetallisch sind und in diesem Temperaturbereich den Leitfähigkeitsverlauf gegenüber den Oberflächenzuständen bestimmen. Eine Erhöhung von T bewirkt also auch einen Anstieg im Leitwert. Sobald die Temperatur aber einen konstanten Wert erreicht hat (z.B. 420 K), sind jegliche Änderungen von G auf strukturelle Veränderungen des Films zurück zu führen. Wie die Abbildung zeigt, ist bei $T=420$ K ein Anstieg von G zu verzeichnen, der Film wird also wie gewünscht ausgeheilt. Dies gilt auch bei 430 K. Bei 450 K durchläuft die Kurve jedoch ein Maximum und der Leitwert wird bei konstanter Temperatur schlechter. Ab dieser Stelle führt die erhöhte Mobilität der Bi-Atome zu einem verstärkten Aufbrechen des Films also einer vermehrten Bildung von zueinander separierten Inseln, sodass der Leitwert abnimmt. Um dies zu verhindern wird die Probe sodann möglichst schnell abgekühlt, wodurch der Leitwert in der Abbildung sehr stark fällt, was jetzt aber wieder durch die halbmimetallischen Eigenschaften hervor gerufen wird und nicht mit strukturellen Veränderung zusammen hängt. Ein in 5.3 b) dargestellter 20 BL Film zeigt einen ganz ähnlichen Verlauf des Leitwerts während des Ausheilens bei 450 K. Hier wurde aber gleichzeitig mit dem SPA-LEED die Intensität des Bi(00)-Reflexes, in der Gegenphase bei $S=4.5$, aufgenommen. In der Aufwärm- und Abkühlphase ändert sich die Intensität stark durch den temperaturabhängigen Debye-Waller Faktor. Bei 450 K allerdings erkennt man eine Abnahme der zentralen Intensität, zu Gunsten einer Zunahme der diffusen Intensität. Das Erwärmen des Films führt also zu einer Glättung

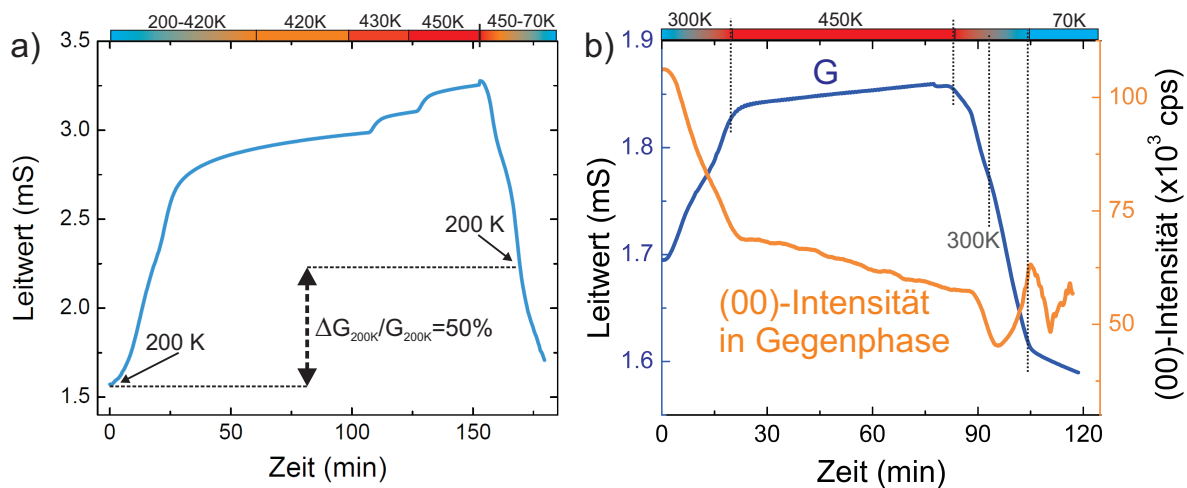


Abbildung 5.3.: a) Ausheileffekt einer 36 BL Bi-Schicht, die bei $T=200$ K aufgedampft wurde. Leitwert als Funktion der Zeit, während des Erwärmens der Schicht, von 200 K auf zunächst 420 K, 430 K und zuletzt 450 K. Sobald der Leitwert bei konstanter Temperatur abnimmt, wird die Probe auf 70 K abgekühlt. Der Ausheilerfolg beträgt wie eingezeichnet etwa 50%. b) Leitwert und LEED-(00)-Intensität eines 20 BL Film während des Ausheilens. ($T_{\text{dep}}=200$ K, $E=49$ eV, $S=4.5$)

der Oberfläche, die sich unmittelbar in einer Erhöhung des Leitwertes widerspiegelt.

Je nach Filmdicke ist der Ausheilprozess früher oder später beendet. Da es sich um einen Aktivierungsprozess handelt, sind die beiden Parameter Zeit und Temperatur entscheidend, wobei die Zeit linear eingeht, die Temperatur aber exponentiell. Für sehr dünne Schichten von nur wenigen BL ist eine zu hohe Temperatur schädigend, sodass der Leitwert irreversibel abfällt. In diesen Fällen muss eine geringere Temperatur um 400 K verwendet werden. Bei $d \geq 15$ BL werden standardmäßig 450 K benutzt. Um den optimalen Zeitpunkt zu bestimmen, wird jeweils das Maximum im Leitwert abgewartet und danach eingekühlt. Vergleicht man die Leitwerte vor und nach dem Ausheilen bei gleicher Temperatur von 200 K, so erkennt man eine deutliche Erhöhung (den sogenannten Ausheilerfolg) von etwa 50% durch die strukturelle Verbesserung des Films.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Ausheiltemperatur von entscheidender Bedeutung für die Filmqualität ist. Die besten Filme konnten bei $T_{\text{dep}}=200$ K und $T_{\text{ausheil}}=450$ K erzielt werden. Filme die bei $T_{\text{dep}}=150$ K und $T_{\text{ausheil}}=400$ K hergestellt wurden zeichnen sich durch eine höhere Defektdichte aus, wie die später gezeigten Leitwerts- und Magnetoleitwertsmessungen zeigen (siehe Kap. 5.3 und 5.4). An dieser Stelle soll nur ein Vergleich ein und desselben Films (36 BL) gezeigt werden, der zunächst nur auf 400 K und danach auf 450 K erwärmt wurde. Die Magnetoleitwertskurven in Abb. 5.4 unterscheiden sich deutlich voneinander, die Amplitude steigt mit der Ausheiltemperatur an, was auf eine höhere Ladungsträgerbeweglichkeit schließen lässt. Die Analyse der Daten mit Hilfe von Gl. 2.24 zeigt eine um etwa 40% erhöhte Beweglichkeit μ_n und μ_p der Elektronen und Löcher.

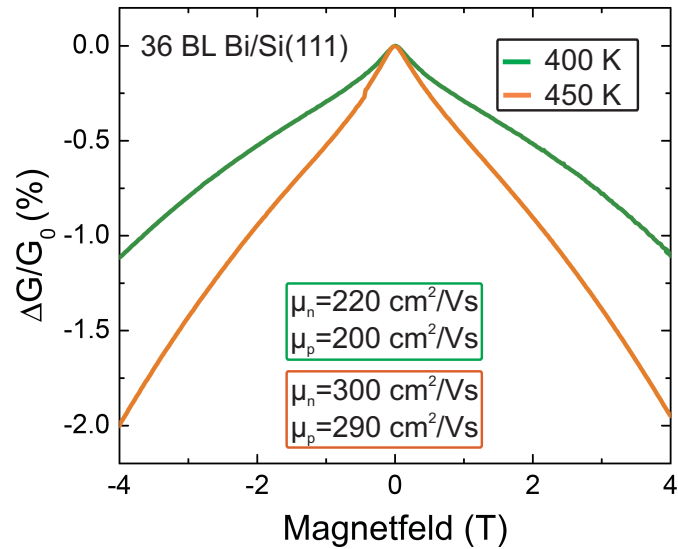


Abbildung 5.4.: Ausheileffekt auf die Magnetoleitwertsabhängigkeit. Ein bis 400 K ausgeheilter Film zeigt eine geringere Amplitude der $G(B)$ -Kurve als der gleiche Film nach dem Tempern auf 450 K. Die Messtemperatur beträgt in beiden Fällen 10 K.

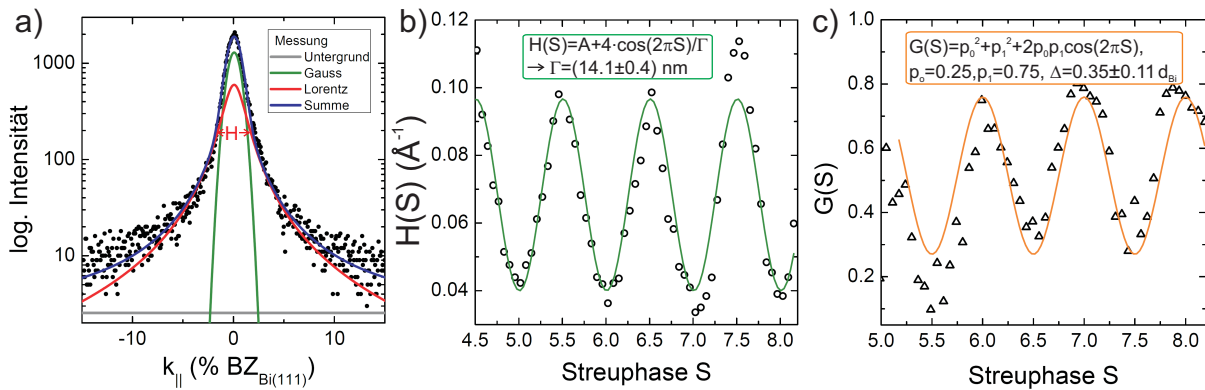


Abbildung 5.5.: a) Linienprofil des (00)-Reflexes eines 20 BL Bi-Films bei einer Streuphase von $S=7.2$ ($T_{\text{dep}} = 200 \text{ K}$, $T_{\text{anneal}} = 450 \text{ K}$). Die Auswertung der Halbwertsbreiten und relativen Intensitäten in Abhängigkeit der Streuphase ermöglicht die Bestimmung der mittleren Korngröße und der Rauigkeit im Zuge einer $H(S)$ -Analyse (b), bzw. einer $G(S)$ -Analyse (c).

5.1.1. G(S)/H(S)-Analyse dünner Bi-Filme

Nach einem Ausheilschritt zeigt sich die atomar glatte Struktur im LEED-Experiment sehr deutlich. Bei Messung des Linienprofils des (00)-Reflexes unter Variation der Elektronenenergie beobachtet man Oszillationen der Halbwertsbreite (sogenannte H(S)-Analyse), sowie der relativen Intensität $G = \frac{I_{\text{Gauss}}}{I_{\text{Gauss}} + I_{\text{Lorentz}}}$ (sogenannte G(S)-Analyse, siehe Kap. 2.1.2, 2.1.3). Hieraus lassen sich die mittlere Breite atomarer Inseln oder Korngröße des Films, sowie dessen Rauigkeit bestimmen. Abb. 5.5 a) zeigt beispielhaft das Linienprofil des (00)-Reflexes für einen 20 BL Film bei einer Energie von $E=128$ eV (entspricht $S_{\text{Bi}}=7.2$). Die Halbwertsbreite des Lorentz-Profiles oszilliert mit S und ist minimal in der In-Phase Bedingung (b). Der Fit der Daten an Gleichung 2.15 ergibt eine Inselgröße von etwa $\Gamma = 14.1 \pm 0.4$ nm, sie ist damit größer als der Durchmesser des Films von $d \approx 8$ nm. Auch die G(S)-Analyse in c) zeigt oszillatorisches Verhalten über mehrere Streuphasen hinweg. Die Messpunkte lassen sich mit einer Kosinus-Funktion einer einzigen Frequenz beschreiben, was darauf hindeutet, dass nur eine Stufenhöhe ($d_{\text{Bi}(111)}=3.94$ Å) in diesen Filmen vorhanden ist. Da zusätzlich die Oszillationen nicht gedämpft werden, ist davon auszugehen, dass es sich um ein Zwei-Level-System handelt. Die mittlere Rauigkeit ergibt sich aus Abb. 5.5 c) unter Anwendung von Gl. 2.14 zu $\Delta = 0.35 \pm 0.11$ d_{Bi} und bestätigt, dass der Film sehr glatt ist.

5.1.2. Leitwertoszillationen beim Bi-Filmwachstum – Schichtdickeneichung

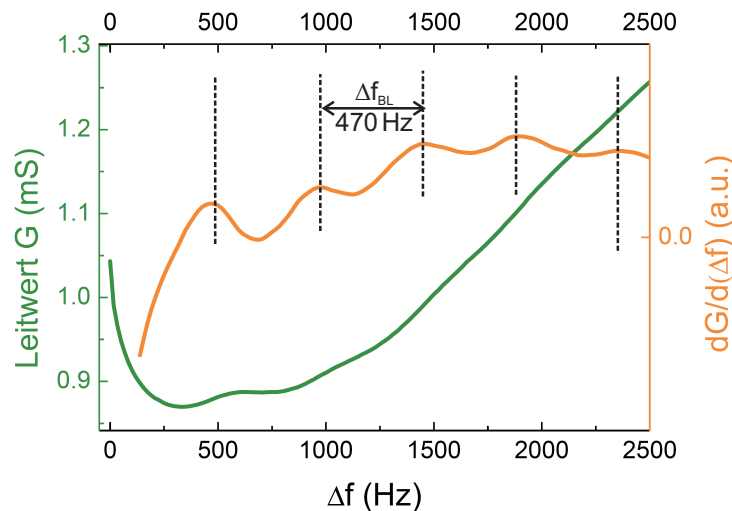


Abbildung 5.6.: Leitwert eines 15 BL dicken ausgeheilten Bi-Films während des Aufdampfens von zusätzlichem Bi bei 80 K (grün). Es ergeben sich Leitwertoszillationen die besonders deutlich in der Ableitung $\frac{dG}{d(\Delta f)}$ (orange) zu sehen sind. Die Periode von 470 Hz entspricht einer Bilage Bismut und wird zur Kalibrierung der Schichtdicke verwendet.

Bisher wurden bei den vorgestellten Messungen die Schichtdicken der Bi-Filme in Einheiten einer Bilage angegeben, ohne näher darauf einzugehen, wie diese bestimmt wurden. In Kapitel 3.1.3 wurde bereits darauf eingegangen, dass die Messung der Schichtdicke auf einer Quarzwaage beruht, die am Ausgang des jeweiligen Verdampfers angebracht ist. Um allerdings zu wissen welche Frequenzänderung am Quarz einer Lage aufgedampften Materials auf der Probe

entspricht benötigt man eine Eichungsmethode. Dies kann im Fall von Bismut glücklicherweise über die Messung der Leitfähigkeit während des Filmwachstums passieren. Wie *Jnawali et al.* zeigten, wächst Bi auf Bi(111)-Filmen Bilage für Bilage [169, 30]. So wurden Oszillationen der Leitfähigkeit, als auch der (00)-Intensität mit SPA-LEED nachgewiesen, die eine Bilagenperiodizität hatten. Abb. 5.6 zeigt den Leitwert G eines ausgeheilten 15 BL Filmes bei 80 K, während des Aufdampfens zusätzlicher Bi-Mengen, aufgetragen gegen die Frequenzänderung des Schwingquarzes am Ausgang des Verdampfers. Nach einer anfänglichen Abnahme ergeben sich Oszillationen in G , die dem generellen Anstieg überlagert sind. Sie können, ähnlich wie in Kapitel 4.1 bei der Epitaxie von Pb auf Si(557), auf eine periodische Änderung der Oberflächenrauigkeit zurück geführt werden. Für geschlossene Lagen hat man glatte Filme, spiegelnde Reflexion der Elektronen und damit einen maximalen Leitwert. Für halb geschlossene Lagen eine maximal raue Oberfläche und daher minimalen Leitwert. Bildet man die Ableitung der Messkurve, so erkennt man besonders deutliche Oszillationen, die in diesem Fall eine Periode von etwa 470 Hz (Frequenzänderung des Schwingquarzes) haben. Dies entspricht einer Bilage Bismut mit einer Flächendichte von 1.14×10^{15} Atomen/cm². Somit hat man für Bismut eine Eichung der Schichtdicke erhalten die im folgenden benutzt wird. Ausgehend von diesen Werten kann man nun alle anderen Verdampfer kalibrieren, bzw. die aufgedampfte Schichtdicke berechnen. Details hierzu sind in Kapitel 3.1.3 zu finden.

Im Fall der Adsorptionsexperimente in Kap. 5.4 bei dem Co, Fe und Tb im %-Monolagen-Bereich auf ausgeheilte Bismutfilme aufgedampft wird, werden neben dieser Berechnung noch weitere Kalibrierungsmessungen gemacht. Auf reine Bi-Filme wird dabei solange aufgedampft, bis nach anfänglicher Abnahme von G ein Minimum durchlaufen wird. Diese Position wurde dann mit einer halben Monolage identifiziert, da man bei $T=10$ K davon ausgeht, dass die Atome zufällig auf Adsorptionplätzen der Oberfläche adsorbieren und bei 0.5 ML die Perkolationsgrenze überwunden wird. Es entstehen also leitende Strompfade durch die neue Schicht, die die Leitfähigkeit erhöhen. Diese Methode erwies sich als genauer, da die Fe- und Co-Bedeckung im %-Bereich sehr exakt bestimmt werden musste. Dabei ist die Monolage in diesem Fall definiert als die Anzahl der möglichen Adsorptionsplätze in der oberen Lage der Bismut-Bilage, d.h.: $1 \text{ ML} = 0.5 \times 1.14 \times 10^{15}$ Atome/cm².

Für die Bi-Epitaxie ergeben sich Oszillationen des Leitwertes auch bei $T=30$ K Proben temperatur (Abb. 5.7), mit vier deutlich erkennbaren Maxima. Dies spricht für eine hohe Mobilität der Bi-Atome auf der Oberfläche. Wieder ergibt sich eine Periode von 1 BL, allerdings sind die Maxima und Minima relativ zur vollen und halben BL verschoben. Das erste Minimum liegt bei etwa 0.7-0.8 BL in Übereinstimmung mit *Jnawali et al.*, sie fanden bei der Homoepitaxie auf Bi(111) ebenfalls ein verspätetes Auftreten der Leitwertoszillationen und erklärten dies mit nicht perfektem Lage für Lage Wachstum und zunehmender Filmrauigkeit mit der Schichtdicke [30]. Ihre Experimente fanden bei 80 K statt, demnach würde man erst recht für niedrigere Temperaturen ein nicht perfektes Lage für Lage Wachstum erwarten. Da die Oszillationen gedämpft sind steigt die Rauigkeit des Films mit zunehmender Dicke.

Eine weitere Erkenntnis des Experiments in 5.7 ergibt sich in der Tatsache, dass der Anstieg des Leitwertes, dem die Oszillationen überlagert sind, linear ist. Bildet man die erste Ableitung (blaue Linie im unteren Teil der Abbildung), so zeigen sich Oszillationen um null. Im Vergleich zur Epitaxie von Pb auf Si(557) erhält man hier also keinen d^2 - oder d^3 -Anstieg, sondern lediglich einen linearen Verlauf. Dies lässt sich damit erklären, dass der elektronische Transport im Wesentlichen von den Oberflächenzuständen getragen wird. Das Volumen hat durch *Confi-*

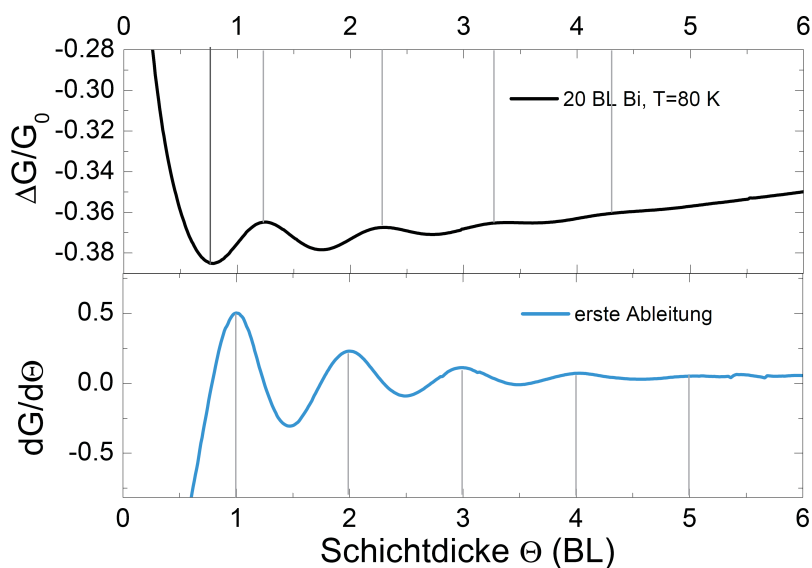


Abbildung 5.7.: Leitwertoszillationen beim Wachstum von Bi auf 20 BL Bi ($T=80$ K, $f=0.1$ ML/min). Das erste Minimum und Maximum ist zur halben und vollen BL verschoben. Insgesamt steigt der Leitwert mit der Schichtdicke linear an.

nement-Effekte halbleitenden Charakter, wie die späteren Kapitel demonstrieren werden. Somit bleibt der Leitwert mit steigender Schichtdicke beinahe konstant gleich dem Oberflächenleitwert. Nur ein geringer Beitrag des Volumens führt zu einer Erhöhung des Leitwerts proportional zu d . Im hier gemessenen Fall beobachtet man nach 8 BL eine lineare Erhöhung von G von etwa 0.2 mS, also etwa $25 \mu\text{S}/\text{BL}$. Bei einem Oberflächenleitwert in der Größenordnung von etwa $2\text{-}3$ mS erkennt man, wie gering der Volumeneinfluss ist.

5.2 Temperaturabhängigkeit des Leitwerts dünner Bi-Filme

Bereits im vorangegangenen Kapitel 2.8 wurde auf die speziellen elektronischen Eigenschaften dünner Bismutfilme eingegangen. Anders als das Volumenmaterial, welches halbmetallisch ist, besitzen dünne Filme besonders stark ausgeprägte metallische Oberflächenzustände mit vergleichsweise hoher Ladungsträgerdichte. Durch die Einschränkung der Volumenladungsträger in z -Richtung verschieben sich die Volumenbänder, sodass eine Energielücke zwischen Leitungs- und Valenzband entsteht (vgl. Abb. 2.21 b) und sich somit halbleitender Charakter der Volumenbänder einstellt.

Diese grundlegend unterschiedlichen Eigenschaften von Volumen und Oberfläche dünner Bismutfilme machen sich in der Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit bemerkbar. Dies ist in Abbildung 5.8 zu sehen. Die $G(T)$ Kurven in a)-d) weisen nach anfänglichem Abfall ein deutliches Minimum im Bereich zwischen 30 und 50 K auf, gefolgt von einem starken Anstieg bis hin zu RT. Diese beiden Regime lassen sich nun eindeutig dem metallischen Oberflächenzustand mit abnehmendem $G(T)$ und dem halbleitenden Volumen des Films – mit aktiviertem, exponentiell ansteigendem Leitwert – zuordnen. Für größer werdende Schichtdicken d dominiert immer mehr der Volumenbeitrag gegenüber dem geringen Abfall im Oberflächenzustand, sodass z.T. lediglich

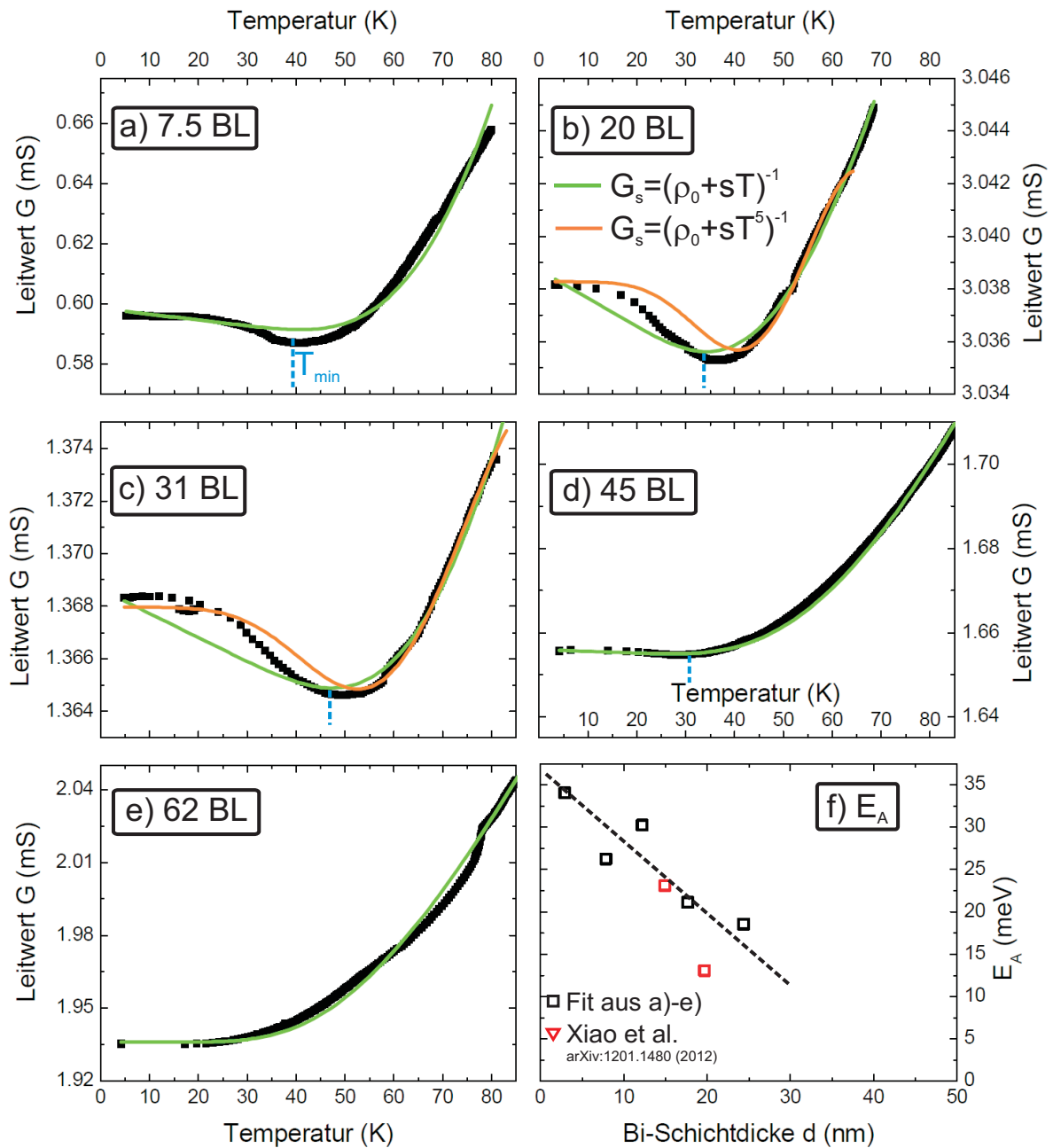


Abbildung 5.8.: a-e) Temperaturabhängigkeit des Leitwertes (schwarze Quadrate). Für $d < 45$ BL erkennt man jeweils ein Minimum in $G(T)$, das durch die Überlagerung von Oberflächenleitwert G_s und Volumenleitwert G_b zu Stande kommt. Die Linien sind Fits an die Daten mit Hilfe von Gl. 5.1, wobei einmal ein linearer (grün) und ein T^5 -Zusammenhang (orange) für G_s angenommen wurde. f) Aktivierungsenergie in Abhängigkeit von der Schichtdicke d . E_A nimmt mit d ab, so dass man für noch größere Schichtdicken einen Übergang vom Halbleiter zum Halbmetall erwartet. Eingezeichnet sind ebenfalls Daten aus [102] (rot).

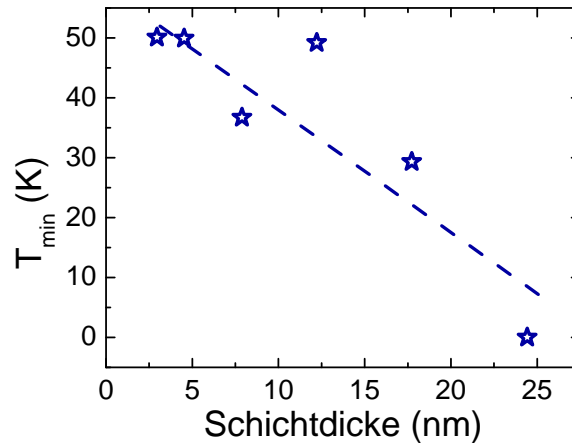


Abbildung 5.9.: Schichtdickenverlauf des Minimums der $G(T)$ -Kurven. Mit zunehmender Schichtdicke, also zunehmendem Einfluss des Volumenbeitrages, verschiebt T_{\min} zu tieferen Temperaturen.

ein Anstieg zu beobachten ist (5.8 e).

Abb. 5.9 zeigt den Verlauf der Minimumsposition der $G(T)$ -Kurven mit der Schichtdicke. T_{\min} verschiebt tendenziell mit der Schichtdicke zu kleineren Temperaturen. Man muss hier aber beachten, dass auch die Präparationsbedingungen bei der Filmherstellung einen großen Einfluss haben. So schwankt T_{\min} von Präparation zu Präparation zum Teil um mehr als 10 K. Diese Varianz zeigt sich auch am Leitwert des 20 BL Films in 5.8 b), der im Vergleich zu dickeren Schichten deutlich größer.

Wie in Abschnitt 2.2.2 hergeleitet wurde, zeichnet sich die Temperaturabhängigkeit des Leitwertes von Metallen durch eine T^{-5} -Abhängigkeit bei $T \ll \Theta_D$ und einer T -Abhängigkeit bei $T > \Theta_D$ aus. *Xiao et al.* schlugen vor, den temperaturabhängigen Leitwert mit folgender Gleichung zu beschreiben[102]:

$$G(T) = G_s(T) + G_b(T) = \frac{1}{\rho_{s,0} + sT} + a \cdot \exp\left(-\frac{b}{k_B T d^2}\right). \quad (5.1)$$

$\rho_{s,0}$ bezeichnet den Oberflächenwiderstand bei $T=0$ und der Einfachheit halber wird der metallische Beitrag zu $G(T)$, der durch Elektron-Phonon Streuung der Oberflächenladungsträger verursacht wird, mit einem linearen Verhalten mit Proportionalitätskonstante s angenommen, was für $T \ll \Theta_D$ sicherlich nicht der Realität entspricht, für höhere T aber korrekt ist (siehe Diskussion in Kapitel 2.2.2). Des Weiteren ist k_B die Boltzmann-Konstante, während a und b Fitkonstanten sind. Die Aktivierungsenergie E_A im halbleitenden Volumen hängt vom Inversen Quadrat der Schichtdicke d ab: $E_A = \frac{b}{d^2}$ [96]. Dieser Ausdruck ist mit der Diskussion in Abschnitt 2.8.1 verknüpft: Man erwartet für dünne Bismutfilme einen Halbleiter-Halbmetall-Übergang (SMSC transition), der durch eine Bandverschiebung abhängig von der Schichtdicke und dem dadurch bedingten *Confinement* verursacht werden soll. Schränkt man d ein, so vergrößert sich der Abstand der Subniveaus, entsprechend des Problems eines *Teilchens im Potentialkasten*, $\propto d^{-2}$.

Der Fit der Gl. 5.1 an die Daten ist durch grüne Linien in Abb. 5.8 repräsentiert. Vor allem der exponentielle Anstieg und das Zustandekommen des Minimums lässt sich hiermit in über-

zeugender Weise beschreiben, sodass die entsprechenden Aktivierungsenergien bestimmt werden können. Sie sind in Abb. 5.8 f) gemeinsam mit Daten aus [102] gegen d aufgetragen. Die Daten lassen eine Abnahme der Aktivierungsenergie also der Volumenbandlücke mit zunehmender Schichtdicke erkennen. Für noch dickere Schichten als die hier untersuchten, erwartet man also ein komplettes Verschwinden der Bandlücke des Volumenbereiches und damit halbmimetallische Eigenschaften. Die zwei Datenpunkte aus *Xiao et al.* (rot) zeigen eine etwas stärkere Abnahme der Aktivierungsenergie mit der Schichtdicke, allerdings können sie auch im Bereich des Messfehlers mit den hier bestimmten Daten in Einklang gebracht werden.

Versucht man die Messdaten alternativ mit einer Oberflächenleitwertsfunktion $G_s = (\rho_{s,0} + sT^5)^{-1}$ zu beschreiben (in 5.8 b) und c), orangefarbene Linien) so erkennt man, dass zwar der anfängliche Verlauf besser beschrieben wird, doch auch hier die exakte Position des Minimums nicht reproduziert werden kann. Jetzt treten für hohe Temperaturen Abweichungen auf, da hier ja eine T^5 -Abhängigkeit grob falsch ist. Augenscheinlich findet im hier untersuchten Temperaturbereich ein Übergang zwischen dem T^5 - und T-Verlauf statt, sodass eine exakte Beschreibung der Daten mit Gl. 5.1 für den gesamten Temperaturbereich nur schwer möglich ist. Allerdings ändert die Wahl von G_s an der Bestimmung der Aktivierungsenergie nicht sonderlich viel. Und die zunächst kompliziert wirkende Temperaturabhängigkeit kann mit dem vorgestellten Modell in befriedigender Weise verstanden werden.

5.3 Magnetotransporteigenschaften von ultradünnen Bismutschichten

Die einzigartigen elektronischen Eigenschaften von Bismutfilmen, wie die Dominanz der Oberflächenzustände und deren spinaufgespaltene Bänder machen neben den bisher vorgestellten Transportmessungen im Besonderen auch magnetfeldabhängige Messungen interessant. Schon im Kapitel 4.4 zeigten sich starke Einflüsse der Spin-Bahn Kopplung auf die Magnetotransporteigenschaften von Pb auf Si(557), sodass auch für Bismut mit seiner großen Rashba-Aufspaltung signifikante Einflüsse zu erwarten sind. Im Speziellen sollten sich mögliche Quantenkorrekturen entsprechend der Schwachen Anti-Lokalisierung (WAL) verhalten. [170, 171, 172, 173, 174]

5.3.1. Klassisches Magnetotransportverhalten und WAL-Beitrag

Abb. 5.10 zeigt den Leitwert G eines 15 BL dicken Films ($T_{\text{dep}}=150$ K, $T_{\text{ausheil}}=400$ K) in Abhängigkeit des Magnetfeldes (schwarze Punkte). Man erkennt eine monotone Abnahme hin zu großen Magnetfeldern, allerdings fällt auf, dass sich die Kurve in zwei Bereiche einteilen lässt. Für kleine Magnetfelder weist die Kurve eine andere Krümmung auf als für große B . Man könnte auch von einem Peak um $B=0$ und einer Schulter für große B sprechen. Die Schulter kann gut durch eine parabolische Funktion entsprechend dem klassischen Magnetoleitwerteffekt (Gl. 2.24) beschrieben werden (blau gestrichelte Kurve). Während der Peak eine entgegengesetzte Krümmung aufweist und eher an WAL erinnert. *Komnik et al.* untersuchten Bismutfilme größerer Schichtdicke und fanden ganz ähnliche Kurvenverläufe [171]. Die Autoren verwendeten eine Methode zur Bestimmung des klassischen Anteils der Magnetoleitwertskurve, die erstmals zur Beschreibung von Magnetoleitwertmessungen an 2D-Elektronengasen in AlGaAs-Heterostrukturen in [175]

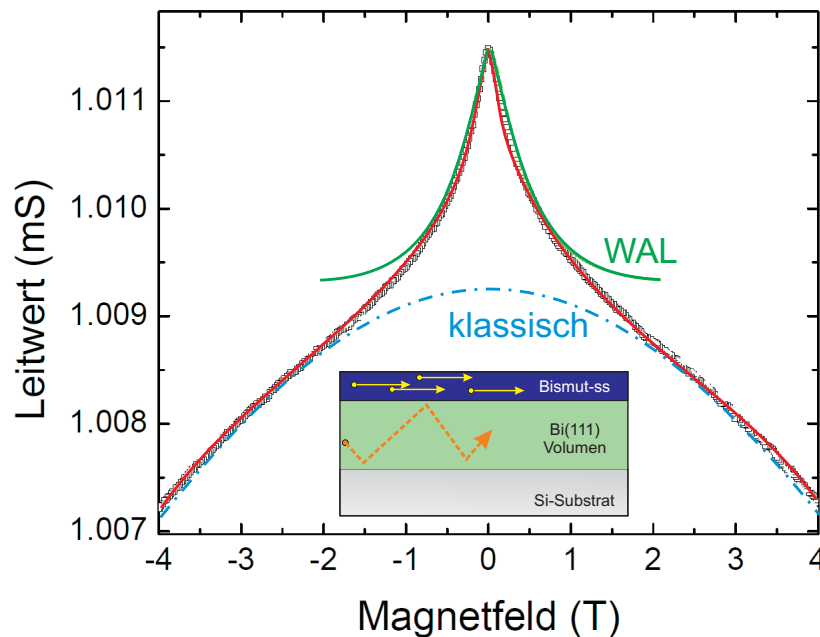


Abbildung 5.10.: Magnetoleitwertskurve einer 15 BL Bi-Schicht bei 10 K. Es sind zwei Bereiche unterschiedlicher Krümmung erkennbar, einer Peak-Struktur bei kleinen B-Feldern und einer breiteren Schulter für hohe Felder. In Blau ist der klassische Beitrag, in Grün der WAL-Beitrag, eingezeichnet. Die Summe beider ergibt den Gesamtverlauf (in Rot).

vorgeschlagen wurde. Im Bereich hoher Magnetfelder, in denen die WAL bereits in Sättigung gegangen ist erwartet man, dass lediglich der klassische Effekt beiträgt. Passt man also in diesem Bereich die Kurve entsprechend der Gleichung 2.24 an, so findet man die Werte für Beweglichkeit und Ladungsträgerkonzentration und kann die Kurve von den Messdaten abziehen. Übrig bleibt der Beitrag der Quantenkorrekturen, also in diesem Fall der WAL (grüne Kurve in 5.10). Insgesamt wird so der gesamte $G(B)$ -Verlauf nachvollzogen, wie die rote Linie als Summe aus klassischem und WAL Anteil zeigt. Die spätere Diskussion (Kap. 5.3.2) wird zeigen, dass der klassische Beitrag ausschließlich von den Oberflächenzuständen stammt, während der WAL-Anteil zu einem großen Teil von Volumenladungsträgern erzeugt wird, aber unter bestimmten Umständen auch die Oberflächenladungsträger beitragen.

Abb. 5.11 a) vergleicht $G(B)$ -Messungen bei 10 K Substrattemperatur von Bi-Filmen mit Schichtdicken d zwischen 10 und 62 BL. Auch hier zeigen alle Filme eine Abnahme des Leitwertes. Für dünne Filme ist der Peak um $B=0$ besonders stark ausgeprägt, während er für größere d scheinbar abnimmt. Dies ist aber nur ein Skalierungseffekt, in Wirklichkeit bleibt seine Amplitude in etwa konstant wie Abbildung 5.11 b) verdeutlicht. Allerdings steigt die Amplitude des klassischen Beitrags mit d sehr stark an, wodurch der Peak relativ gesehen weniger ins Gewicht fällt. Ein Erstarren des klassischen Effekts bedeutet zunächst nichts anderes als eine Erhöhung der Ladungsträgerbeweglichkeiten μ_n und μ_p , wie in Zusammenhang mit Abb. 2.5 a) bereits erläutert wurde. Hier drängt sich die Frage auf, warum die Beweglichkeiten ansteigen, obwohl es sich doch um die Eigenschaften des Oberflächenzustandes handeln soll und diese vom Prinzip her unabhängig von d sein sollten. Zur Beantwortung dieser Frage erinnern wir uns an die struk-

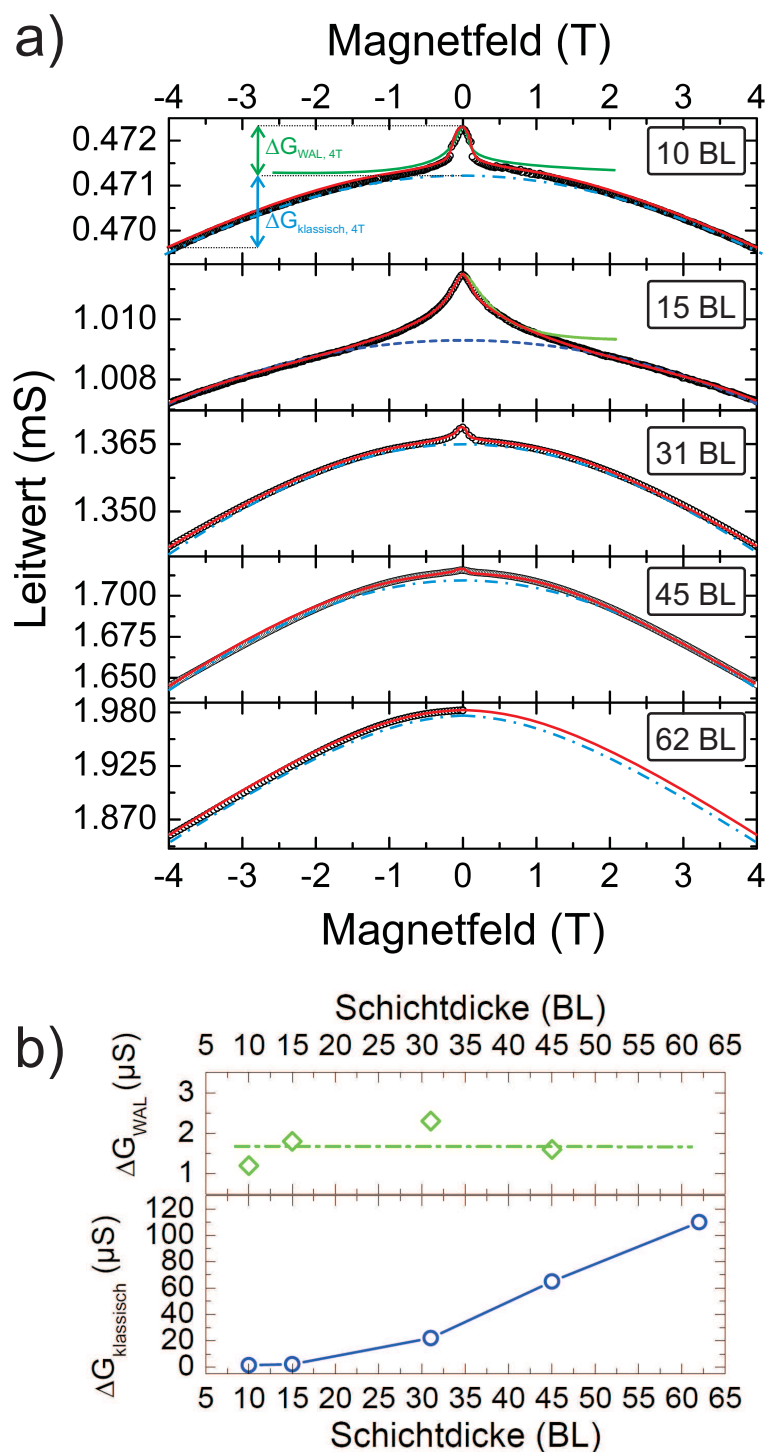


Abbildung 5.11.: a) Einfluss der Bi-Schichtdicke auf $G(B)$. Der klassisch-parabolische Beitrag zu $G(B)$ (blau gestrichelt) wird mit wachsender Schichtdicke immer dominanter, während der WAL-Beitrag (grün) im Wesentlichen unverändert bleibt. Rote Linien entsprechen der Gesamtanpassung, also der Summe aus klassischem und WAL-Beitrag. Für die 62 BL-Messung wurden die Kurven für positives B extrapoliert. b) Die Amplituden der beiden Beiträge zu $G(B)$ sind gegen die Schichtdicke aufgetragen. ($T=10$ K)

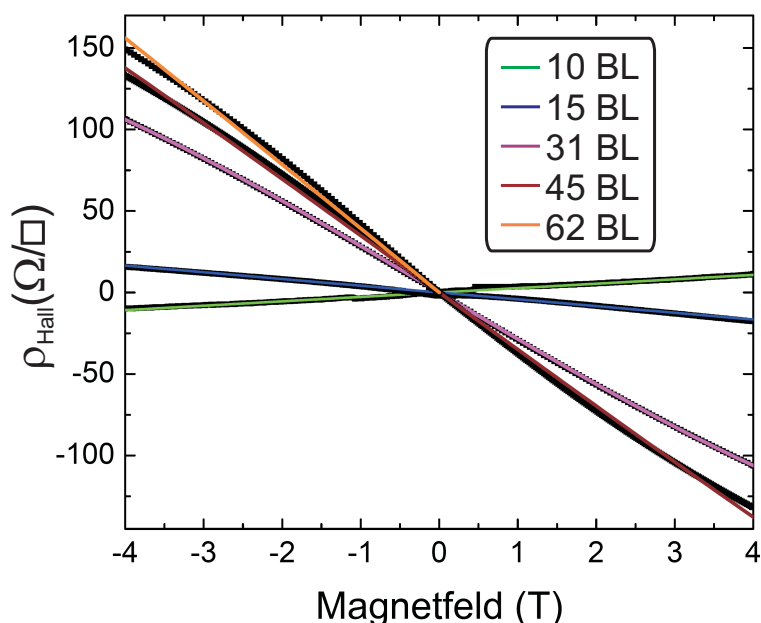


Abbildung 5.12.: Der spezifische Hall-Widerstand von Bi-Filmen verschiedener Schichtdicke verläuft linear, wechselt aber von positiver zu negativer Steigung. ($T=10$ K)

turellen Eigenschaften der Bismutfilme in Abhängigkeit der Schichtdicke. Wie Abb. 5.1 zeigt, erhöht sich die strukturelle Qualität der Oberfläche mit wachsender Schichtdicke. Der Anteil rotationsfehlgeordneter Kristallite verringert sich und die mittlere Korngröße erhöht sich, wodurch die Defektdichte abnimmt und damit die Beweglichkeit zunimmt. Sicherlich erhöht sich auch die Qualität des darunter liegenden Volumens, dies fällt aber für den elektronischen Transport weniger ins Gewicht, da die Zustandsdichte hier extrem gering ist ².

Zusätzlich zu den $G(B)$ -Daten zeigt 5.12 den simultan gemessenen spezifischen Hall-Widerstand ρ_{Hall} . Er zeichnet sich vor allem durch einen linearen Verlauf für alle Schichtdicken d aus. Allerdings wechselt die Steigung das Vorzeichen zwischen 10 BL und 15 BL von positiv auf negativ, wobei die Steigung in der Folge zunehmend negativer wird. Die Oberflächenzustände haben teils elektronischen, teils lochartigen Charakter, wodurch das Vorzeichen der Steigung von ρ_{Hall} zunächst nicht den Schluss erlaubt, dass man im einen Fall Elektronentransport im anderen Löchertransport hat. Nur durch eine gemeinsame Auswertung der $\rho_{\text{Hall}}(B)$ - und $G(B)$ -Daten mit Hilfe der Gleichungen 2.24 und 2.25 lassen sich die Ladungsträgerbeweglichkeiten und -konzentrationen zweifelsfrei bestimmen. Die erhaltenen Fitfunktionen sind jeweils mit eingezeichnet und die erhaltenen Fit-Werte im linken Teil der Tabelle 5.1 eingetragen. Für die Kurvenanpassung wurden Erkenntnisse aus ARPES-Messungen [111, 113] zu Grunde gelegt und als Startwerte bzw. Randbedingungen für die Fitparameter verwendet. Dies betrifft vor allem die Ladungsträgerkonzentration in der Größenordnung von $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, sowie die Tatsache, dass die Bandkrümmung – und damit die Beweglichkeit der Ladungsträger darin – der Elektronentaschen größer ist als die der Lochtaschen (vgl. Abb. 2.23). Der Wert des Oberflächenleitwertes $G_s(0)$ wird aus dem $G(B)$ -Graphen abgelesen und während der Anpassung konstant gehalten. Somit reduziert sich die Anzahl der Fitparameter auf μ_n , μ_p , c und n , wobei letztere nur in

²Wie in Kapitel 5.2 gezeigt wurde befindet sich das Volumen bei dieser Schichtdicke im halbleitenden Zustand

Tabelle 5.1.: Fitergebnisse der G(B)-Kurven aus Abb. 5.11 und $\rho_{\text{Hall}}(\text{B})$ -Messungen in 5.12. Gezeigt sind die Mobilitäten der Elektronen und Löcher in den Oberflächenzuständen, sowie deren Ladungsträgerkonzentrationsverhältnis c , wobei für alle Messungen ein $n \approx 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ gefunden wurde. Daraus erhält man Oberflächenleitfähigkeiten $\sigma_s \approx 0.1\text{-}0.6 \text{ mS}/\square$. Nach Abzug des klassischen Beitrages konnte der schwache Lokalisierungsanteil analysiert werden und die entsprechenden Streuzeiten ermittelt werden. Daraus wurde dann eine mittlere Beweglichkeit der Volumenladungsträger $\bar{\mu}$ gewonnen, die wiederum in die Berechnung der Oberflächenleitfähigkeit $\sigma_{b,2D} = ne\bar{\mu}d$ einfließt. Der Anstieg von τ_{so} ist konsistent mit [171].

Schichtdicke (BL)	Oberfläche					WAL (Volumen)			
	$G_s(0)$ (mS)	μ_n (cm^2/Vs)	μ_p	$c=p/n$	$\sigma_s = ne(\mu_n + c\mu_p)$ (mS/\square)	τ_0	τ_i	τ_{so}	$\sigma_{b,2D}(0)$ (mS/\square)
10	0.47	166	152	1.26	0.17	0.8	4.5	2.7	0.003
10+0.5 ML Pb	0.39	28	8	0.1	–	0.85	3.8	2.7	0.003
15	1.0	125	100	1.3	0.12	1.4	3.8	2.7	0.010
31	1.36	400	260	1.27	0.35	2.6	5.0	3.6	0.033
45	1.71	640	380	1.3	0.53	3.0	5.0	6.0	0.059
62	1.92	810	520	1.1	0.66	–	–	–	–

engen Grenzen variiert werden.

Wie man aus der Tabelle ablesen kann, lassen sich die Messungen mit einem für alle d konstanten Ladungsträgerverhältnis $c = p/n \approx 1.3$ anpassen, wobei die Elektronenkonzentration ebenfalls konstant ist und $n \approx 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ beträgt. Lediglich die Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher steigen mit d an, wobei immer gilt: $\mu_n > \mu_p$. Der Wechsel der Steigung von positiv auf negativ in ρ_{Hall} markiert einzig und allein den Punkt an dem die Bedingung $\mu_n/\mu_p = \sqrt{c}$ erfüllt ist (Vgl. Abb. 2.5 b). Sie wird durchlaufen, da μ_n/μ_p sukzessive etwas größer wird, verursacht durch die oben diskutierte Verbesserung der Oberflächengüte.

Die sich aus diesen Fitparametern ergebende Oberflächenleitfähigkeit $\sigma_s = ne(\mu_n + c\mu_p)$ beträgt im untersuchten Schichtdickenbereich $0.1\text{-}0.7 \text{ mS}/\square$. Wie bereits in Abb. 5.4 gezeigt und im späteren Kapitel evident wird, lässt sich die Mobilität der Filme noch um einen Faktor zwei erhöhen, wenn man leicht höhere Präparationstemperaturen wählt ($T_{\text{dep}}=200 \text{ K}$, $T_{\text{ausheil}}=450 \text{ K}$). Unter diesem Gesichtspunkt stimmt σ_s mit dem in [29] erhaltenen Wert von $1.5 \text{ mS}/\square$ sehr gut überein.

Genauere Aufschlüsse über die Eigenschaften der WAL in den untersuchten Bi-Filmen liefert die Hikami-Theorie (Gl. 2.26). Die Ergebnisse der Anpassung an die Messdaten zeigt der rechte Teil der Tabelle 5.1. Sie ermöglicht quantitative Aussagen über die relevanten Zeitskalen der beteiligten Streumechanismen. Zwei wesentliche Tatsachen fallen bei der Betrachtung der Streuzeiten auf. Während τ_i im Wesentlichen konstant bleibt, nehmen sowohl τ_0 als auch τ_{so} mit der Schichtdicke zu. Die Zunahme der elastischen Streuzeit mit d ist sehr gut mit der Vorstellung vereinbar, dass die Volumenladungsträger vorwiegend an den Grenzflächen gestreut werden, bzw. die Oberflächenladungsträger an Korngrenzen. Nimmt d zu, so sollte auch τ_0 größer werden. Nimmt man also an dass $\ell_{\text{mfp}} \approx d$, so erhält man Fermi-Geschwindigkeiten von $v_F = \ell_{\text{mfp}}/\tau_0 \approx 0.5 - 1 \times 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, die in der richtigen Größenordnung liegen. Eine Zunahme der Spin-Bahn Streuzeit τ_{so} mit d wurde bereits von *Komnik et al.* für dickere Bi-Filme beobachtet [171]. Dort erklären die Autoren, dass die Spin-Bahn Streuung der Volumenladungsträger

überwiegend an der Oberfläche stattfindet und so der Einfluss dieses Mechanismus mit steigendem d geringer wird. Dies ist vernünftig, da das Volumenmaterial, durch seine zentrosymmetrische Struktur, überhaupt keine Spinaufspaltung der Bänder aufweist und so nur oberflächennahe Streuprozesse dafür verantwortlich sein können. Berechnet man aus den Streuzeiten zunächst eine gemittelte Mobilität $\bar{\mu}_b = e\bar{\tau}/m^*$, wobei $m^* = 0.03 m_e$ ist und mit Hilfe der Ladungsträgerdichte $n = 2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ die Volumenleitfähigkeit $\sigma_{b,2D} = ne\bar{\mu}_b d$, so ergibt sich die letzte Spalte der Tabelle. Die hier erhaltenen Werte liegen mehr als eine Größenordnung unter der Oberflächenleitfähigkeit und zeigen eindeutig die Dominanz des Oberflächenzustandes gegenüber den Volumenzuständen.

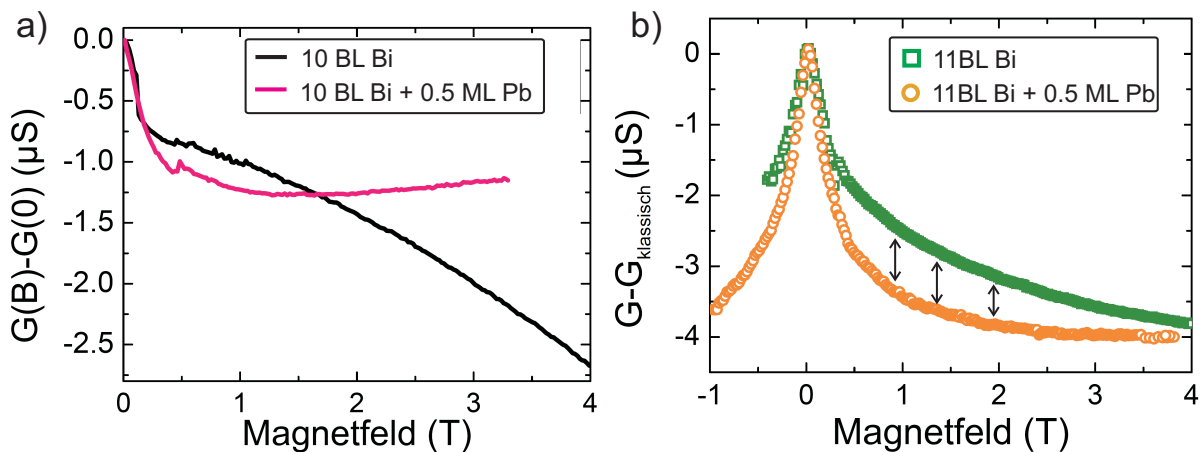


Abbildung 5.13.: a) Vergleich der Magnetotransportkurve eines 10 BL Bi-Films vor und nach der Adsorption von 0.5 ML Pb. Die Schulter für hohe Magnetfelder verschwindet vollkommen, während der Peak für kleine Felder erhalten bleibt. b) Nach Abzug des klassischen Beitrags erkennt man WAL für einen reinen 11 BL-Film und für den mit 0.5 ML Pb adsorbierten Film. Es ergibt sich lediglich eine kleine Differenz zwischen beiden Kurven.

5.3.2. Ursprung des klassischen und WAL-Beitrags – Unterdrückte Rückstreuung

Ein weiterer Beweis dafür, dass der klassische Magnetoeffekt tatsächlich von den Oberflächenladungsträgern stammt, ist in Abb. 5.13 a) gezeigt. Die Form der $G(B)$ -Kurve eines 10 BL Films ändert nach Adsorption einer halben Monolage Pb bei 10 K. Die magentafarbene Kurve mit Pb weist keine Anzeichen einer Schulter mehr auf, während der Peak um $B=0$ weiterhin stark ausgeprägt ist. Die Pb-Atome wirken als sehr effektive Streuzentren und reduzieren die Beweglichkeit der Ladungsträger in der Oberfläche (siehe Tabelle), sodass μB sehr klein wird und der klassische Effekt nicht mehr zu beobachten ist.

Der WAL-Beitrag hingegen scheint fast gar nicht beeinflusst zu werden. Abb. 5.13 b) zeigt einen 11 BL Film jeweils nach Abzug des klassischen Beitrags, vor und nach der Adsorption von Pb. Hier ist nur ein, im Vergleich zur drastischen Reduktion des klassischen Anteils, sehr geringer Unterschied feststellbar. Diese geringe Veränderung wird durch die Abnahme der elastischen Streuzeit τ_0 verursacht, wie die Diskussion in Kap. 5.4.3 noch zeigen wird.

Präpariert man Bismutfilme derart, dass sich gar kein dominanter Oberflächenzustand ausbilden

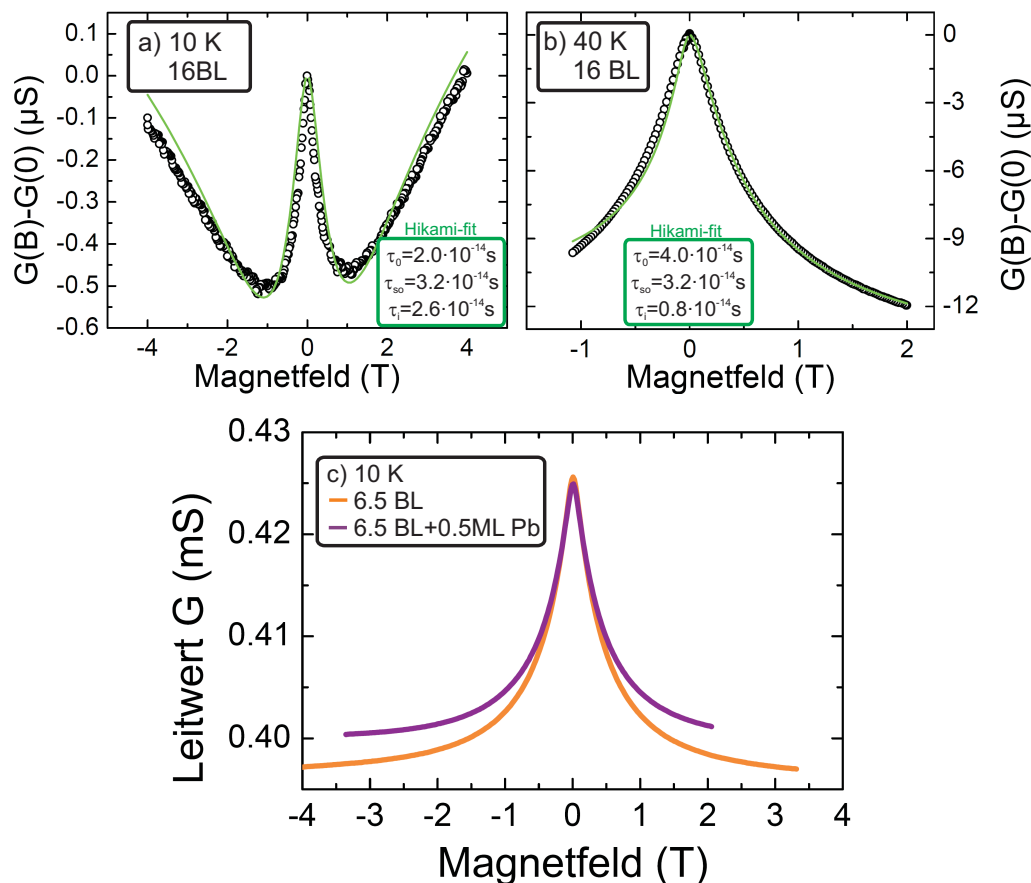


Abbildung 5.14.: Magnetoleitwertskurven bei Abwesenheit eines dominanten Oberflächenzustandes. Man erkennt keinen parabolischen Verlauf, sondern lediglich WAL. a)+b) Ein 16 BL Bi-Film, der bei 200 K aufgedampft, aber nicht ausgeheilt wurde und somit eine große Rauigkeit und Unordnung aufweist. Die Messtemperatur beeinflusst die inelastische Streuzeit und damit die Magnetfeldabhängigkeit. c) Ein sehr dünner Film (6.5 BL) zeigt auch nach dem Ausheilen keinen ausgeprägten Oberflächenzustand. Auch die Adsorption von Pb verändert den Ausgangsleitwert und die Magnetfeldabhängigkeit kaum. (Daten ohne Fit)

kann, etwa indem man den Film nicht ausheilt und er dadurch sehr rau und ungeordnet bleibt oder sehr dünne Bi-Filme gerade oberhalb der Transformationsgrenze hin zu (111)-Wachstum erzeugt, so zeigen die $G(B)$ -Messungen ebenfalls keinen quadratischen Verlauf (siehe Abb. 5.14). In a) und b) folgt die $G(B)$ Kurve eines nicht ausgeheilten 16 BL Films eindeutig der Hikami-Theorie für Schwache Anti-Lokalisierung (grüne Linien). Abhängig von der Messtemperatur ändert sich die Kurvenform, wie es auch durch die Theorie mit einer verkürzten inelastischen Streuzeit τ_i aufgrund der zunehmenden Elektron-Phonon-Streuung erklärt werden kann. In c) erkennt man, dass ohne Anwesenheit des Oberflächenzustandes, sowohl vor als auch nach der Deposition von Submonolagen Pb, bemerkenswerter Weise kaum eine Änderung von $G(0T)$ zu verzeichnen ist. Zunächst erinnern auch diese $G(B)$ -Kurven an WAL, allerdings ist ihre Amplitude mit $G(4T)-G(0T)=30 \mu S$ viel zu groß. In diesem ungeordneten System scheint der Transport gänzlich im Volumen, bzw. an der Si-Bi-Grenzfläche statt zu finden, sowie durch Streuung an den Korngrenzen der Bi(110)-Kristallite der ersten 4 Schichten beeinflusst zu werden. Diese Ef-

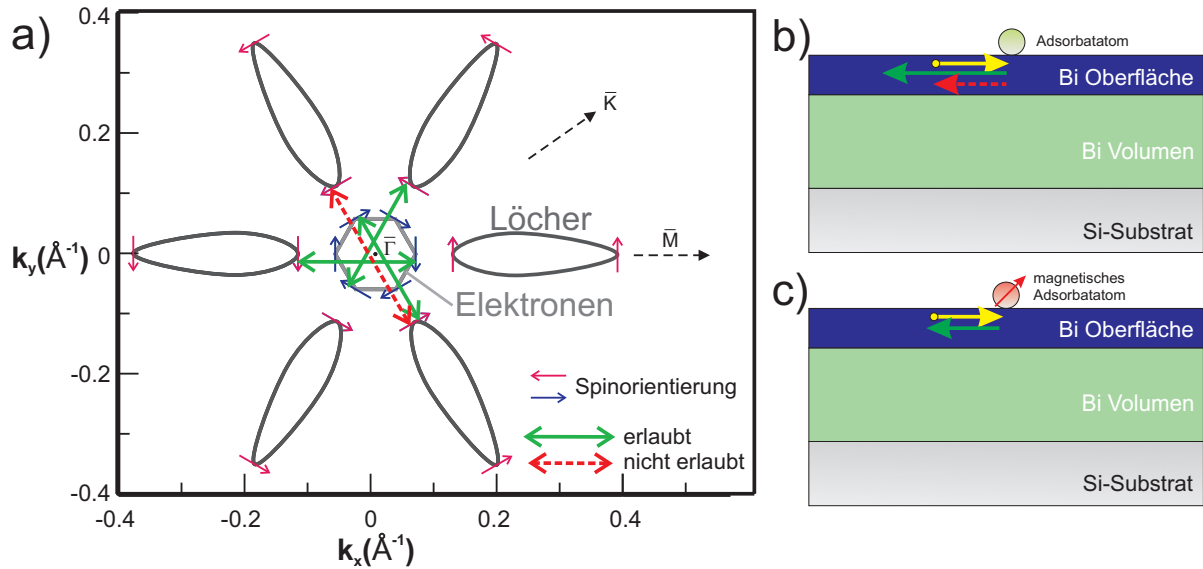


Abbildung 5.15.: a) Streuprozesse innerhalb der Fermifläche von Bi(111). Es sind nur bestimmte Prozesse, bei denen Anfangs- und Endzustand die gleiche Spinausrichtung haben, erlaubt. Solche mit entgegengesetzten Richtungen kommen nicht vor, eine exakte Rückstreuung von $+\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ ist auf dieser Fläche unterdrückt. Nach [112]. b) Äquivalente Situation im Realraum. c) Öffnung des Rückstreukanals bei Anwesenheit einer magnetischen Störstelle.

fekte wurden hier aber nicht weiter untersucht.

Diese Feststellungen legen die folgende Interpretation nahe: Der WAL-Peak wird von Volumenladungsträgern verursacht, die an der Oberfläche reflektiert bzw. gestreut werden. Die spinaufgespaltenen Oberflächenzustände bzw. die gebrochene Rauminversionssymmetrie an der Oberfläche, gepaart mit der starken Spin-Bahn-Wechselwirkung, führt damit zu Quantenkorrekturen der Volumenleitfähigkeit, die sich im WAL-Charakter äußert. Auch die Ladungsträger der Oberfläche akkumulieren, auf zueinander äquivalenten, zeitinvertierten Streupfaden, aufgrund der starken Spin-Bahn Kopplung, eine sogenannte Berry-Phase von π und haben deshalb auch einen WAL-Charakter (siehe Kap.2.2.4). Jedoch scheint deren Einfluss vergleichsweise gering, da die Manipulation der Oberflächenzustände durch Pb kaum Änderungen zeigt.

Ein geringer Beitrag der Oberfläche zur WAL ist in der Spintextur der Fermifläche begründet. Zur Erinnerung ist sie in Abb. 5.15 a) nochmals gezeichnet (siehe dazu auch Kap. 2.8.3). Durch die Rashba-Aufspaltung haben zwei im k -Raum gegenüberliegende Zustände bei $\pm\vec{k}$ immer die entgegengesetzte Spinausrichtung. Somit ist die Rückstreuung ($(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (-\vec{k}, \downarrow)$), also Streuung mit Streuwinkel 180° , in einem Einfachstreuprozess, aufgrund der TR-Symmetrie verboten (siehe Kap. 2.5). Wie es schematisch auch die Abb. 5.15 b) zeigt. Streuung unter Winkeln $\neq 180^\circ$ ist dagegen erlaubt, jedoch stehen aufgrund der Fermifläche mit seinen schmalen Elektronen- und Lochtaschen nicht sonderlich viele Endzustände eines Streuprozesses zur Verfügung.

Diese Argumentation wird von STM-Messungen an Bi(111)-Oberflächen unterstützt [112]. Dabei wurden Streumuster um nicht weiter spezifizierte Punktdefekte untersucht und gezeigt, dass die auftretenden stehenden Wellen nur unter Berücksichtigung ganz bestimmter Streuvektoren erklärt werden können, nämlich genau solche, deren Anfangs- und Endzustände die gleiche Spinausrichtung aufweisen. Streuereignisse mit $(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (-\vec{k}, \downarrow)$, die genau der Rückstreuung entsprechen,

chen würden, wurden dagegen nicht identifiziert. Diese Situation ist in Abb. 5.15 b) schematisch dargestellt. Nur durch Hinzunahme eines Gitterimpulses kann es es Streuung in Rückwärtsrichtung geben. Aus den Beobachtungen schloss man, dass die Rückstreuung in Bismutfilmen stark unterdrückt ist, ähnlich wie es bei Topologischen Isolatoren mit seinen Randzuständen in ARPES und STM Messungen gefunden wurde [176, 69].

Durch die Unterdrückung der direkten Rückstreuung wird aber die Interferenz zweier Elektronenwellen in Rückwärtsrichtung weniger wahrscheinlich, da jetzt Mehrfachstreuungen notwendig sind und somit die Phaseninformation in der Zwischenzeit durch inelastische Streuung verloren gehen kann. Demzufolge ist der Beitrag der Oberfläche zur WAL ebenfalls reduziert und macht sich auch bei der Pb-Adsorption nicht bemerkbar. Wie im späteren Kapitel 5.4.2 gezeigt werden wird, ist dies nicht in jedem Fall richtig und der WAL-Beitrag kann sehr wohl durch Manipulation der Oberfläche stark beeinflusst werden, vor allem wenn magnetische Störstellen auf der Oberfläche eingebracht werden, die lokal die TR-Symmetrie brechen können (Abb. 5.15 c)).

5.4 Defektinduzierte Änderung der Transporteigenschaften von Bismut-Dünnschichten

Es stellt sich die Frage, in wie weit man die Streumechanismen in den Oberflächenzuständen beeinflussen kann. Für etwaige Anwendungen von Materialien und Bauelementen, die auf spinpolarisiertem Transport basieren, wie etwa den von *Datta und Das*[1] vorgeschlagenen Spin-Transistor, ist eine Kontrolle dieser Eigenschaften von hohem Interesse. Da die Rückstreuung in den spinpolarisierten Zuständen durch die TR-Symmetrie verhindert wird, könnte man versuchen eben diese Symmetrie zu brechen. Lokale magnetische Momente auf der Oberfläche würden eine Störung der TR-Symmetrie hervorrufen. Der Spin eines daran gestreutes Elektrons wechselwirkt mit dem magnetischen Moment, sodass sich die Spinausrichtung ändert und nicht notwendigerweise erhalten bleiben muss. Somit könnte es auch eine Streuung in Zustände mit entgegengesetztem Spin geben, die Rückstreuung um 180° also ermöglicht werden [177, 173]. Schematisch ist diese Idee in Abb. 5.15 b) und c) dargestellt, das magnetische Moment eines Adsorbatatoms auf der Oberfläche öffnet den Rückstreukanal, da es lokal die TR-Symmetrie bricht.

In der Literatur sind einige Beispiele bekannt, bei denen versucht wurde, eine Änderung der Streueigenschaften mittels magnetischen Atomen (vorwiegend Fe, Co oder Cr) zu beeinflussen. Besonders herauszustellen sind hier Arbeiten an Topologischen Isolatoren, die aufgrund ihrer spinpolarisierten Bandstruktur gut mit Bi-Filmen verglichen werden können, obgleich ihre Oberflächenzustände topologisch geschützt sind und damit das Verbot der Rückstreuung strenger ist als für Bi. Allgemein erwartet man für Topologische Isolatoren, dass bei Anwesenheit von magnetischen Störstellen sich eine Bandlücke Δ am Dirac-Punkt öffnet. Dies wurde für Bi_2Se_3 in Verbindung mit Bandhybridisierungen beobachtet [177]. Sodass die Bandstruktur und Spinsymmetrie stark abgeändert ist.

Okada et al.[178] fanden mit Hilfe von Fouriertransformation ihrer STM-Messungen Streuvektoren in Fe dotiertem $(\text{Bi}_{1-x}\text{Fe}_x)_2\text{Te}_3$ ($x=0.00025$), die auf eine lokale Störung der TR-Symmetrie schließen lassen, die Konzentration an Fe ist mit etwa 2.5% bereits sehr hoch. Bei Bi_2Se_3 führt die Deposition von Fe-Atomen zu einer drastisch geänderten Bandstruktur und der Erzeugung

neuer Dirac-Punkte[177], allerdings liegen die hier die aufgebrauchten Mengen oberhalb von 10% einer Monolage. Andererseits beobachten *Pan et al.*[179, 180] in ARPES-Experimenten eine starke Insensitivität der Oberflächenzustände von Bi_2Se_3 gegenüber Adsorbaten jeglicher Art, und widersprechen damit der Erwartung der Rückstreuungserhöhung durch magnetische Verunreinigungen. Auch auf Bi-Filmen konnten bei der Physisorption von MnPc-Molekülen, die ein großes magnetisches Moment aufweisen, in STM-Messungen einmal mehr nur Spin erhaltende Streuprozesse nachgewiesen werden, wie es auch bei [112] der Fall war.

Als Signatur in Magnetotransportmessungen wurde 2011 von *Lu et al.* [173] eine Änderung von WAL hin zu WL für Topologische Isolatoren unter Anwesenheit von magnetischen Störstellen vorhergesagt. Die Akkumulation der Berry-Phase sollte abhängig von der Größe der Bandlücke Δ sein und einen Wert von $\varphi = \pi$ für $\Delta = 0$ und $\varphi = 0$ für $\Delta = 2E_F$ haben. Anders ausgedrückt spielt im ersten Fall der Spin für die Streuung und Interferenz der Ladungsträger eine Rolle und man erwartet WAL-Eigenschaften, im zweiten Fall ist der Spin nicht entscheidend und man bekommt WL-Charakter. Ein Jahr später zeigten *Liu et al.* [174] mit der Einlegierung von Cr-Atomen in den Topologischen Isolator $\text{Bi}_{2-x}\text{Cr}_x\text{Se}_3$ eben diesen vorhergesagten Effekt. Zwischen $x=0.04$ und 0.07 beobachten sie ein Umklappen von WAL- zu WL-Verhalten.

Welche Einflüsse verschiedene Adsorbate auf den Oberflächenzustand von Bismut und seine Magnetotransporteigenschaften haben, wird in Kap. 5.4.2 gezeigt. Im folgenden wird zunächst der Einfluss auf den Gleichstromwiderstand bei Adsorption von Bi, Fe und Co auf Bi-Filmen vorgestellt. Dabei haben die letzteren beiden Atome ein magnetisches Moment³, während Bi nicht-magnetisch ist. Erst danach wird auf die adsorbatinduzierte Änderung des Magnetotransports eingegangen.

5.4.1. Leitwertsänderung bei Adsorption von Bi, Fe und Co

Bei Adsorption von bereits geringsten Mengen an Adsorbatatomen auf Bi-Filmen erwartet man bei niedrigen Temperaturen eine Abnahme der Leitfähigkeit, entsprechend einer Erhöhung der Steurrate durch die zusätzlich eingebrachten Störstellenatome. Dies haben wir bereits weiter oben bei der Adsorption von Pb auf Bi-Filmen gesehen, welches den Leitwert und die damit verbundene Ladungsträgerbeweglichkeit drastisch reduzierte. In Abb. 5.16 b) ist der Leitwert eines jeweils 20 BL dicken Bi-Films gegen die Zusatzbedeckung $\delta\Theta$ an Bi, Fe und Co bei einer Depositionstemperatur von 10 K aufgetragen.⁴ Bei allen drei Aufdampfexperimenten reduziert sich G schon bei weniger als einem ‰ einer Monolage, sodass sich bei etwa 5‰ML der relative Leitwert bereits um etwa 10% reduziert hat. Für höhere Zusatzbedeckungen schwächt sich die Abnahme immer weiter ab, jedoch zeigen die drei Elemente leicht unterschiedliche Gesamtamplituden in $\Delta G/G_0$. Am stärksten reduziert Co den Leitwert, gefolgt von Bi und Fe. Daraus könnte man zunächst schließen, dass dementsprechend auch die Streuquerschnitte der Atome für die Ladungsträger in den Bi-Oberflächenzuständen sortiert sind.

Zur genaueren Untersuchung dieser Messkurven bedient man sich einem einfachen Modell, welches von zufällig auf der Oberfläche adsorbierten Streuzentren ausgeht. Schematisch ist dieses

³Die elektronische Konfiguration von Fe und Co ist: $[\text{Ar}]3d^64s^2$, $[\text{Ar}]3d^74s^2$. Das magnetische Moment wird also von den teilgefüllten d-Schalen verursacht.

⁴ $\delta\Theta$ wird hier einerseits in Einheiten einer Monolage sowie Atome/cm² angegeben. Eine ML bezieht sich dabei auf die Anzahl der Adsorptionsplätze auf der Bi Oberfläche, die $0.5 \times 1.14 \times 10^{15}$ Atome/cm² entspricht. Die aufgebrauchte Menge wird jeweils mit einer Quarzwaage am Verdampfer bestimmt und durch Kalibrierungsmessungen geeicht, siehe dazu Kap. 3.1.3 und 5.1.2.

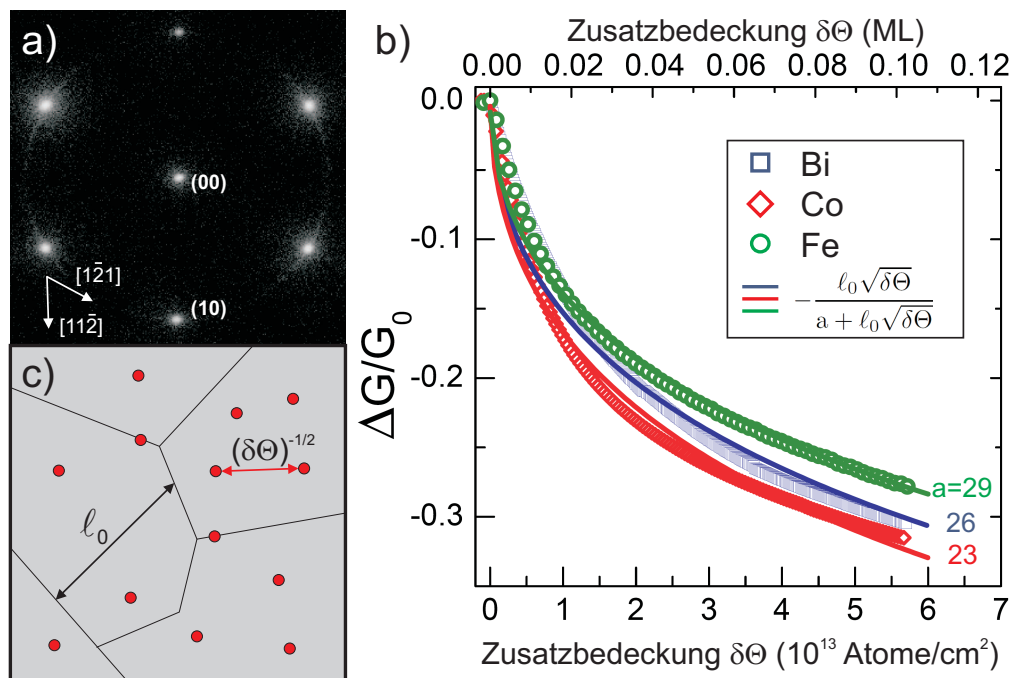


Abbildung 5.16.: Adsorptionsexperiment von Bi, Fe und Co auf 20 BL Bi-Filmen bei $T=10$ K. a) LEED-Bild des 20 BL Bi-Films vor der Adsorption. Bei $E=96$ eV, $S_{Bi(111)}=6.3$ also nahe einer Out-Phase Bedingung. b) $\frac{\Delta G(\delta\Theta)}{G_0}$, offene Punkte sind Messdaten, durchgezogene Linien sind Fits des Modells aus c) mit Hilfe von Gl. 5.2 an die Messdaten. c) Schematische Darstellung des Modells zufällig adsorbierter Streuzentren.

Modell in Abb. 5.16 c) gezeigt. Der Bismutfilm besteht aus Körnern einer mittleren Größe ℓ_0 , einzig diese wirken auf der reinen Fläche als Streuzentren und verursachen bei einer Fermi-Geschwindigkeit v_F eine mittlere Streuzeit von $\tau_0 = \ell_0/v_F$. Die Adsorbatatome landen zufällig auf der Oberfläche und bilden bei geringen Konzentrationen (wenige % ML) keine Cluster oder Inseln. Damit haben die Fremdatome einen mittleren Abstand der von der Zusatzbedeckung $\delta\Theta$ abhängt: $(\delta\Theta)^{-1/2}$. Nimmt man an, dass die Ladungsträger an diesen Atomen mit einer Wahrscheinlichkeit $P=1/a$ gestreut werden, so ergibt sich durch die Adsorbate eine zusätzliche Streuzeit $\tau = \ell/v_F$, wobei ℓ durch $\ell = a/\sqrt{\delta\Theta}$ gegeben ist. Es findet also an jedem a -ten Adsorbatatom eine Streuung statt. Beide Streuzeiten sind unabhängig voneinander, daher kann man deren Raten addieren: $\tau_0^{-1} + \tau^{-1} = \tau'^{-1}$. Aus dem wohlbekanntem Zusammenhang $G \propto \frac{ne^2}{m} \tau'$ folgt: $\frac{G(\delta\Theta)}{G_0} = \frac{\tau}{\tau_0 + \tau} = \frac{a}{a + \ell_0 \sqrt{\delta\Theta}}$. Hieraus ergibt sich sofort:

$$\frac{\Delta G(\delta\Theta)}{G_0} = \frac{G(\delta\Theta)}{G_0} - 1 = -\frac{\ell_0 \sqrt{\delta\Theta}}{a + \ell_0 \sqrt{\delta\Theta}}. \quad (5.2)$$

Eine Gleichung, die nur von der mittleren freien Weglänge des reinen Films ℓ_0 vor der Deposition, und der Zusatzbedeckung $\delta\Theta$ abhängt. ℓ_0 ist identisch mit der mittleren Korngröße und wurde in Kapitel 5.1.1 mittels SPA-LEED auf etwa 15 nm bestimmt. Durch Anpassung der Gleichung an die Daten in Abb. 5.16 b) lässt sich der Parameter a und damit die Streuwahrscheinlichkeit

P für die verschiedenen Adsorbatatome bestimmen. Dabei wird auch ℓ_0 noch leicht variiert, da die mittlere Korngröße von Präparation zu Präparation leicht unterschiedlich sein kann. Die durchgezogenen Linien in der Abbildung zeigen die besten Fits an die Messdaten und die dabei bestimmten Werte für a sind: $a_{\text{Fe}} = 29$, $a_{\text{Bi}} = 26$, $a_{\text{Co}} = 23$. Die Wahrscheinlichkeit für eine Streuung an einem Adsorbatatom beläuft sich demnach auf:

$$P_{\text{Fe}} = 3.4\%, P_{\text{Bi}} = 3.8\%, P_{\text{Co}} = 4.3\%.$$

Nach diesem Modell wird ein Ladungsträger des Oberflächenzustandes also am wahrscheinlichsten durch ein Cobaltatom gestreut, während dies durch ein Eisenatom am wenigsten wahrscheinlich ist. Überraschenderweise sind aber die Absolutwerte der Wahrscheinlichkeit sehr klein und eine Streuung findet überhaupt nur an jedem 25. bis 30. Fremdatom statt.

Zudem kann man dieses einfache Modell leicht in Frage stellen, da es nur von einer Erhöhung der Streurrate ausgeht, Änderungen der Ladungsträgerkonzentration, wie es in einem solchen Dotierungsexperiment aber zu erwarten ist, gänzlich unberücksichtigt lässt. Darüber hinaus kann man sich auch vorstellen, dass es auch schon bei so geringen Adsorbatkonzentrationen zu Nukleation der Atome auf der Oberfläche kommen kann. Jnawali et al. konnten bei der Adsorption von Bi auf Bi bei $T=80$ K einen merklichen Inselbildungseffekt belegen und zeigen, dass kleine Bi-Inseln den gleichen Streuquerschnitt besitzen wie Bi-Monomere [30, 117]. Demnach hat die Nukleation der Atome einen starken Einfluss auf den Verlauf von $G(\delta\Theta)$. An dieser Stelle soll darauf aber nicht weiter eingegangen werden, jedoch wird auf die Nukleationstheorie noch im späteren Kapitel 5.4.5 bei Adsorptionsexperimenten mit Terbium auf Bismutfilmen näher eingegangen.

Wichtiger ist an dieser Stelle die Frage nach der Änderung der Ladungsträgerkonzentration durch Adsorption. Aus diesem Grund werden im folgenden Abschnitt Magnetotransport und Hall-Effekt Messungen vorgestellt und diskutiert.

5.4.2. Einfluss der Bi, Fe und Co Adsorption auf Magneto- und Hall-Widerstand

Jeweils ausgehend von reinen Bismutfilmen wie zuvor ($d=20$ BL, $T_{\text{dep}}=200$ K, $T_{\text{anneal}}=450$ K), werden sequentiell kleinste Adsorbatmengen der drei Materialien aufgedampft und jeweils eine magnetfeldabhängige Messung ($G(B)$ und $\rho_{\text{Hall}}(B)$) durchgeführt.

Bi auf 20 BL Bi: Abb. 5.17 zeigt die Daten für die Bi auf Bi Messreihe. In a) erkennt man die $G(B)$ -Kurve des reinen Films in Schwarz. Zunächst scheint die Kurve nur eine quadratische Schulter zu zeigen, der Peak bei $B=0$ wie er z.B. in Abb. 5.10 und 5.11 vorhanden war ist hier nicht auszumachen. Erst bei genauerem Hinsehen (der Inset in a) wird die Abweichung vom klassischen Verhalten für kleine B deutlich. Dies liegt an der unterschiedlichen Präparation im Vergleich zu den obigen Messungen. Die hier untersuchten Filme zeichnen sich aufgrund der höheren Präparationstemperaturen durch qualitativ bessere Schichten aus. Dies erkennt man an der Amplitude der $G(B)$ -Kurve. Bei 4 T beträgt sie für den reinen Film etwa $40 \mu\text{S}$, während sie in 5.11 a) sogar für einen dickeren 31 BL Film lediglich etwa $22 \mu\text{S}$ beträgt, die Mobilität der „neuen“ Filme also höher ist. Somit wird der WAL-Beitrag ähnlich wie in 5.11 für sehr dicke Filme durch den klassischen Beitrag überdeckt. Dennoch lässt sich der WAL-Beitrag durch einen sorgfältigen B^2 -Abzug ohne weiteres freilegen (siehe Diskussion im Zusammenhang mit Abb. 5.20 c).

Der klassische $G(B)$ -Beitrag wird mit steigender Zusatzbedeckung $\delta\Theta$ immer kleiner. Schon bei 1.6% ML reduziert sich die Amplitude um etwa 50%, während die Form der Kurve unverändert

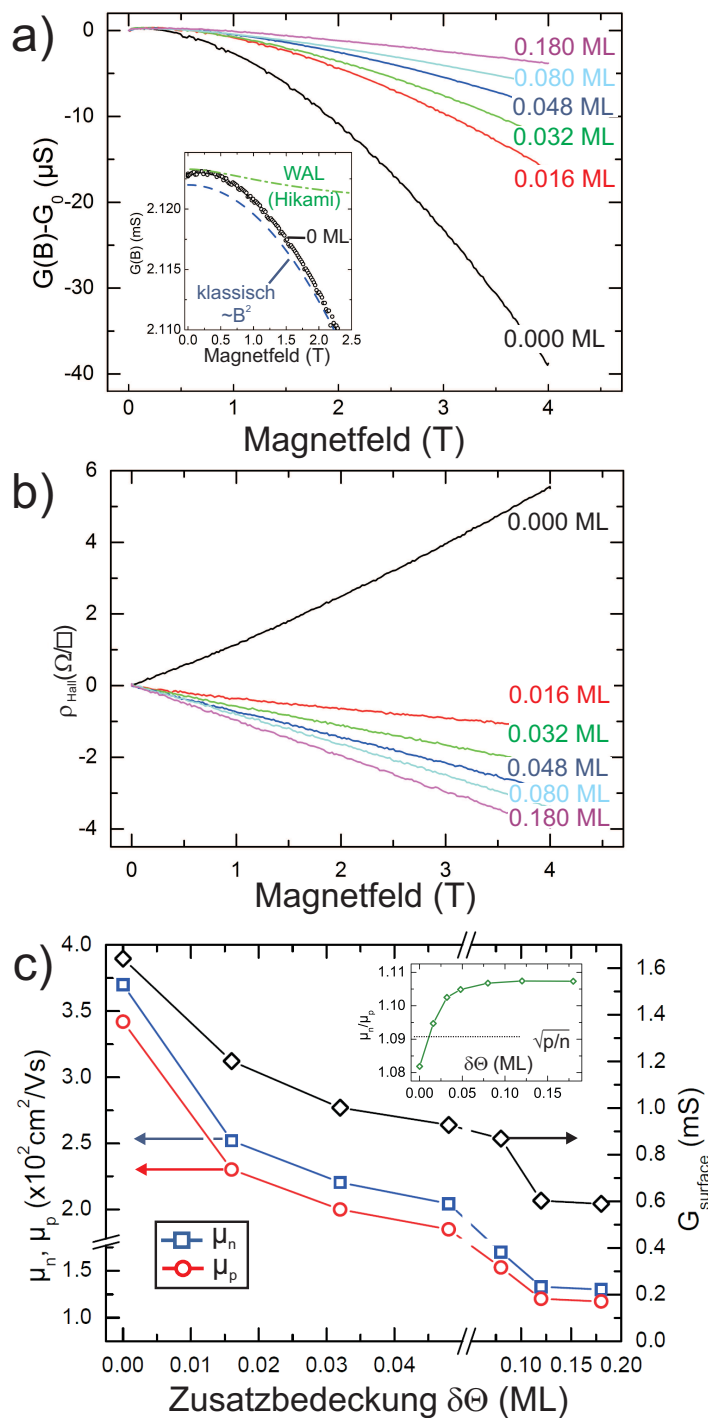


Abbildung 5.17.: Magnetotransportverhalten bei Deposition von Bi auf Bi bei 10 K. a) $G(B)$ bei variierender Zusatzbedeckung. Der Inset zeigt den klassischen und WAL-Beitrag beim reinen Film. b) Spezifischer Hall-Widerstand der gleichen Messserie. Die Steigung nimmt mit $\delta\Theta$ ab. c) Aus den Fits der Daten in a) und b) erhaltene Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher. Oberflächenleitwert $G_s = \pi/\ln(2) \cdot ne(\mu_n + c\mu_p)$. Der Inset verdeutlicht das Vorzeichen der Steigung von ρ_H in Abhängigkeit der Werte von $\mu_{n,p}$ und n, p .

klassisch beschrieben werden kann. Der Magnetoleitwert reagiert also noch viel empfindlicher auf die Adsorbatkonzentration als der Leitwert. Dies liegt daran, dass $G \propto \mu$, aber $G(B) \propto \mu^2$. Reduziert sich also die Beweglichkeit durch die zusätzlichen Streuer auf der Oberfläche, so hat dies viel drastischere Auswirkungen auf $G(B)$.

Der Hall-Widerstand $\rho_{\text{Hall}}(B, \delta\Theta)$ ist in Abb. 5.17 b) gezeigt. Er verhält sich für alle $\delta\Theta$ linear, ändert jedoch das Vorzeichen seiner Steigung von positiv auf negativ nach Adsorption von Bi und wird in der Folge immer negativer.

Ähnlich wie oben bei der Schichtdicken-abhängigen Messreihe wird auch hier $G(B)$ und $\rho_{\text{Hall}}(B)$ simultan mit den Gl. 2.24 und 2.25 angepasst. Dabei wird angenommen, dass sich die Ladungsträgerkonzentration n und $c=p/n$ während der Adsorption von Bi auf Bi nicht ändert, da es sich um Homoepitaxie handelt. Im späteren Verlauf bei Fe und Co wird sehr wohl eine Änderung der Konzentration zugelassen. Tatsächlich lassen sich alle Kurven sehr gut mit einem konstanten $n = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ und $p = 4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ beschreiben. Einzige freie Parameter sind demnach nur noch die Beweglichkeiten μ_n und μ_p , sie sind in 5.17 c) gegen $\delta\Theta_{\text{Bi}}$ aufgetragen. Ausgehend von etwa $350 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und leicht größerem μ_n im Vergleich zu μ_p , fallen beide Werte stark mit $\delta\Theta$ ab. Die rechte Skala in c) zeigt den aus μ sowie n und p berechneten Oberflächenleitwert (schwarze Rauten). Dieser stimmt qualitativ mit den Gleichstrom-Messwerten überein. So ist der gemessene Wert für den reinen Film 2.1 mS (siehe Inset in a), der berechnete 1.6 mS. Und auch der Abfall in G ist mit etwa $\frac{\Delta G}{G_0}|_{0.05 \text{ ML}} = 40\%$ im berechneten und $\frac{\Delta G}{G_0}|_{0.05 \text{ ML}} = 23\%$ im gemessenen Fall (siehe Abb. 5.16 b) in etwa vergleichbar. Dies zeigt, dass die erhaltenen Fitwerte vernünftig sind.

Auch kann man mit den erhaltenen Werten das Umklappen der Steigung des Hall-Widerstandes nachvollziehen. Im Inset in c) ist das Verhältnis der Beweglichkeiten gegen die Bedeckung aufgetragen. Solange $\frac{\mu_n}{\mu_p} < (>) \sqrt{\frac{p}{n}}$, ist $\frac{d\rho_H}{dB} > (<) 0$. Und wird somit nur durch die Änderung der Beweglichkeiten, nicht aber durch eine Änderung der Ladungsträgerkonzentrationen (die konstant sind) hervorgerufen.

Co und Fe auf 20 BL Bi: Abb. 5.18 zeigt $G(B)$ und $\rho_H(B)$ nach Adsorption von Fe (a und b) und Co (c und d). Zunächst erkennt man einige Ähnlichkeiten zum Bi auf Bi Experiment. Auch hier nimmt die Amplitude der $G(B)$ -Kurven mit $\delta\Theta$ drastisch ab und auch die Steigung des Hall-Widerstandes wird geringer. Jedoch gibt es im Detail doch große Unterschiede. Erstens weichen die $G(B)$ -Kurven besonders für große Co- und Fe-Bedeckung vom klassischen Verhalten ab und zeigen im Fall von Fe sogar einen leicht positiven Magnetoleitwerteffekt für die maximale Bedeckung. Zweitens bleibt $\frac{d\rho_H}{dB} > 0$ für fast alle Zusatzbedeckungen, anders als es für Bi auf Bi der Fall war. Dies ist ein erster Hinweis, dass in diesen Fällen auch die Ladungsträgerkonzentration durch die Metalladsorption beeinflusst wird.

Wertet man die Datensätze abermals entsprechend der obigen Vorgehensweise aus, so erhält man Abb. 5.19. Die Beweglichkeiten reduzieren sich stärker als im obigen Fall. Ausgehend von in etwa gleichen Startwerten, landet man für $\delta\Theta=0.03 \text{ ML}$ bei 25% bis 50% kleineren Werten als bei Bi auf Bi. Dies zeigt, dass Fe- und Co-Atome deutlich effektivere Streuzentren für die Ladungsträger darstellen als Bi-Atome. Die Auswertung ohne Berücksichtigung der Ladungsträgerkonzentration im Zuge der $G(\delta\Theta)$ -Messung (Abb. 5.16 b) hatte in etwa gleiche Querschnitte für die drei Atome ergeben und Fe als den schwächsten Streuer identifiziert, was im Lichte dieser Messungen nicht mehr haltbar ist. Wodurch diese größere Streufähigkeit verursacht wird, wird weiter unten diskutiert.

Ebenfalls sehr interessant ist die Entwicklung von n und p mit der Zusatzbedeckung in 5.19 b)

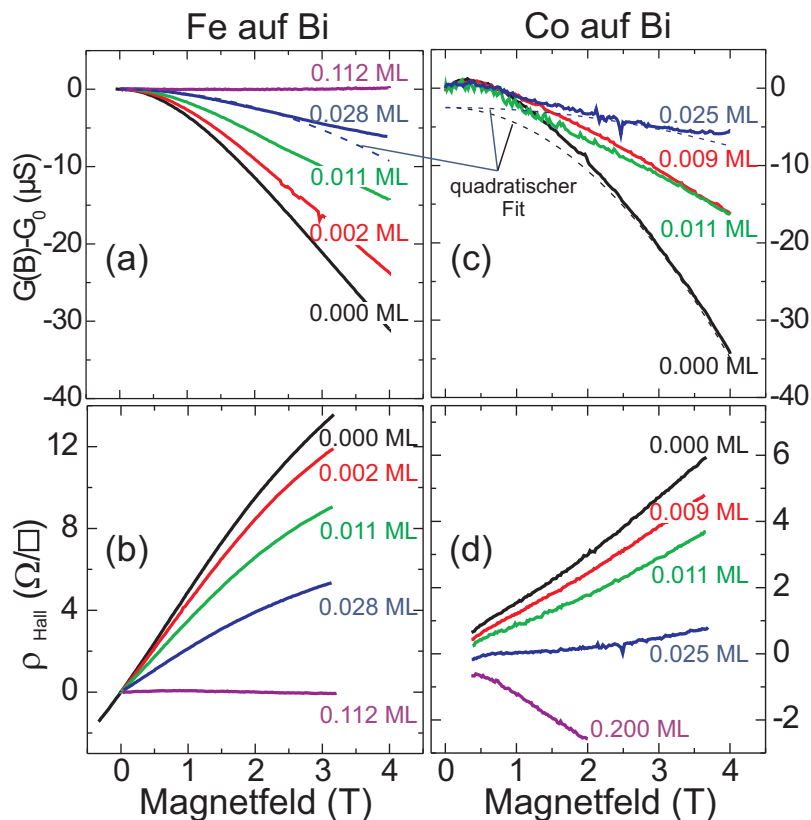


Abbildung 5.18.: Magnetotransportverhalten und Hall-Widerstand von Fe (a und b) und Co (c und d) bei Deposition auf 20 BL Bi-Filmen bei $T=10$ K.

und d). Jeweils in Rot dargestellt erkennt man einen Anstieg der Löcherkonzentration mit $\delta\Theta$, während die Elektronenkonzentration im Rahmen des Fehlers konstant bleibt. Dies ist auch der Grund dafür, dass hier $\frac{d\rho_H}{dB} > 0$ bleibt, und ein Umklappen der Steigung durch die Zunahme von p verhindert wird. Sowohl die Fe- als auch Co-Atome wirken als Akzeptoren, entziehen der Oberfläche also Elektronen. Die elektronische Konfiguration von Fe ist $[\text{Ar}]3d^64s^2$, von Co $[\text{Ar}]3d^74s^2$. Beide haben also teilgefüllte d-Bänder, die auch das magnetische Moment der beiden Atome hervorrufen. Vorstellbar ist, dass die d-Bänder von Elektronen der Bi-Oberfläche aufgefüllt werden, sodass dort die Löcherkonzentration steigt.

Hier sollte bemerkt werden, dass die Co-Adsorption auf dem Topologischen Isolator Bi_2Se_3 zu einer Erhöhung der Elektronenkonzentration führt [181], was aber nicht wirklich gut mit Bi vergleichbar ist, da die Autoren dies auch mit chemischen Bindungen zwischen Co- und Se-Atomen erklären. Andererseits wird für Fe auf Bi_2Se_3 eine von der Adsorptionstemperatur abhängige Dotierung von Elektronen bei RT und Löchern bei tiefen Temperaturen berichtet und ebenfalls mit temperaturabhängigen chemischen Umgebungen begründet [182].

Wie Abb. 5.19 b) und d) zeigt, steigt die Dichte der Löcher zu Beginn in etwa linear mit der Zusatzbedeckung an, sodass man abschätzen kann, dass jedes Fe-Atom 0.5 ± 0.1 und jedes Co-Atome 0.6 ± 0.1 Elektronen des Bi-Oberflächenzustandes an sich bindet. Somit ist nicht ohne weiteres klar, was mit dem magnetischen Moment der Atome geschieht und ob es nach der Adsorption überhaupt noch vorhanden ist. Die Anfangsannahme, dass das magnetische Moment der Atome den Transport in den Bi-Oberflächenzuständen beeinflusst, kann durch den starken

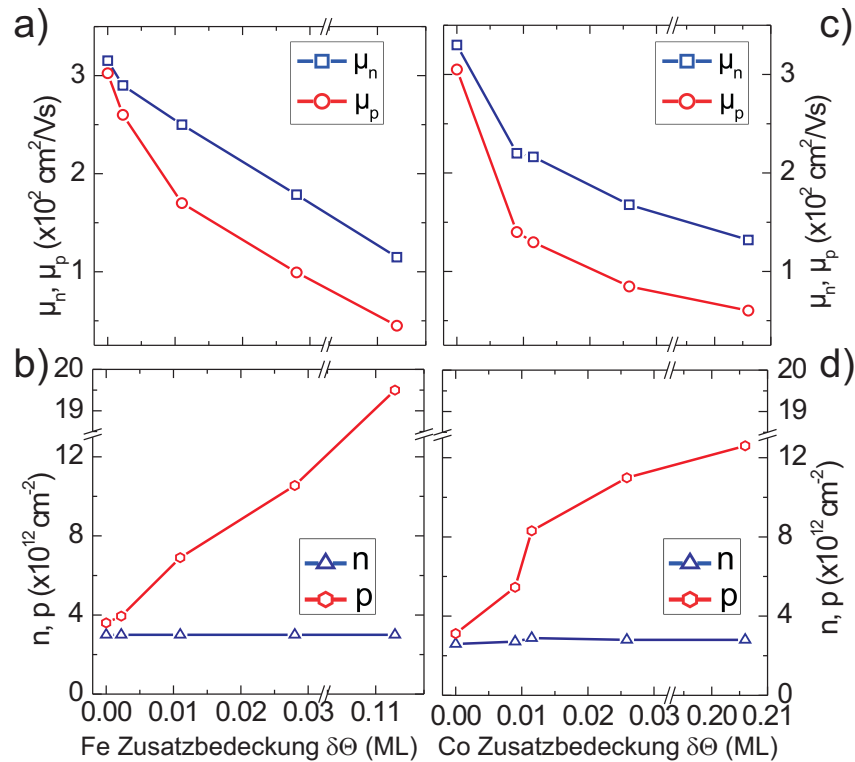


Abbildung 5.19.: Beweglichkeiten (a und c) und Ladungsträgerkonzentrationen (b und d) in Abhängigkeit der Co und Fe Zusatzbedeckung.

Ladungsaustausch zunichte gemacht werden. Darüber hinaus kann es auch zu einer Hybridisierung der Atomorbitale mit den Zuständen der Oberfläche kommen und so die Bandstruktur verändert werden. Derartige Effekte wurden bei Topologischen Isolatoren unter Anwesenheit magnetischer Verunreinigungen gefunden [177] und können auch die Spinstruktur der Oberflächenzustände ändern.

Um nähere Informationen über den Einfluss der magnetischen Eigenschaften der Atome zu bekommen und die Frage nach dem Erhalt oder Bruch der TR-Symmetrie (siehe Diskussion zu Beginn dieses Kapitels) zu klären, muss man den WAL-Beitrag zur Magnetoleitfähigkeit untersuchen.

5.4.3. Einfluss der Bi, Fe und Co Adsorption auf den WAL-Beitrag - TR-Symmetriebruch

Nach Abzug des klassischen Magneto-Beitrages erhält man die von der WAL verursachte B-Feld Abhängigkeit des Leitwertes. Abb. 5.20 zeigt die dabei erhaltenen Daten für die Bi auf Bi (a), Fe auf Bi (c) und Co auf Bi Messreihe (e). Wie erwartet, zeigt in allen drei Fällen der reine Film eine Abnahme des Leitwertes mit B, also WAL.

Für Bi auf Bi bleibt dies auch für alle Zusatzbedeckungen der Fall, wobei die Amplitude doch deutlich zurück geht. Dies ist etwas anders als in Kap. 5.3 bei der Adsorption von Pb auf Bi. Aus der Abwesenheit einer Änderung durch Pb-Adsorption schloss man dabei, dass der WAL-Beitrag im Wesentlichen von Volumenladungsträgern verursacht wird. Bei Betrachtung dieser Messreihe

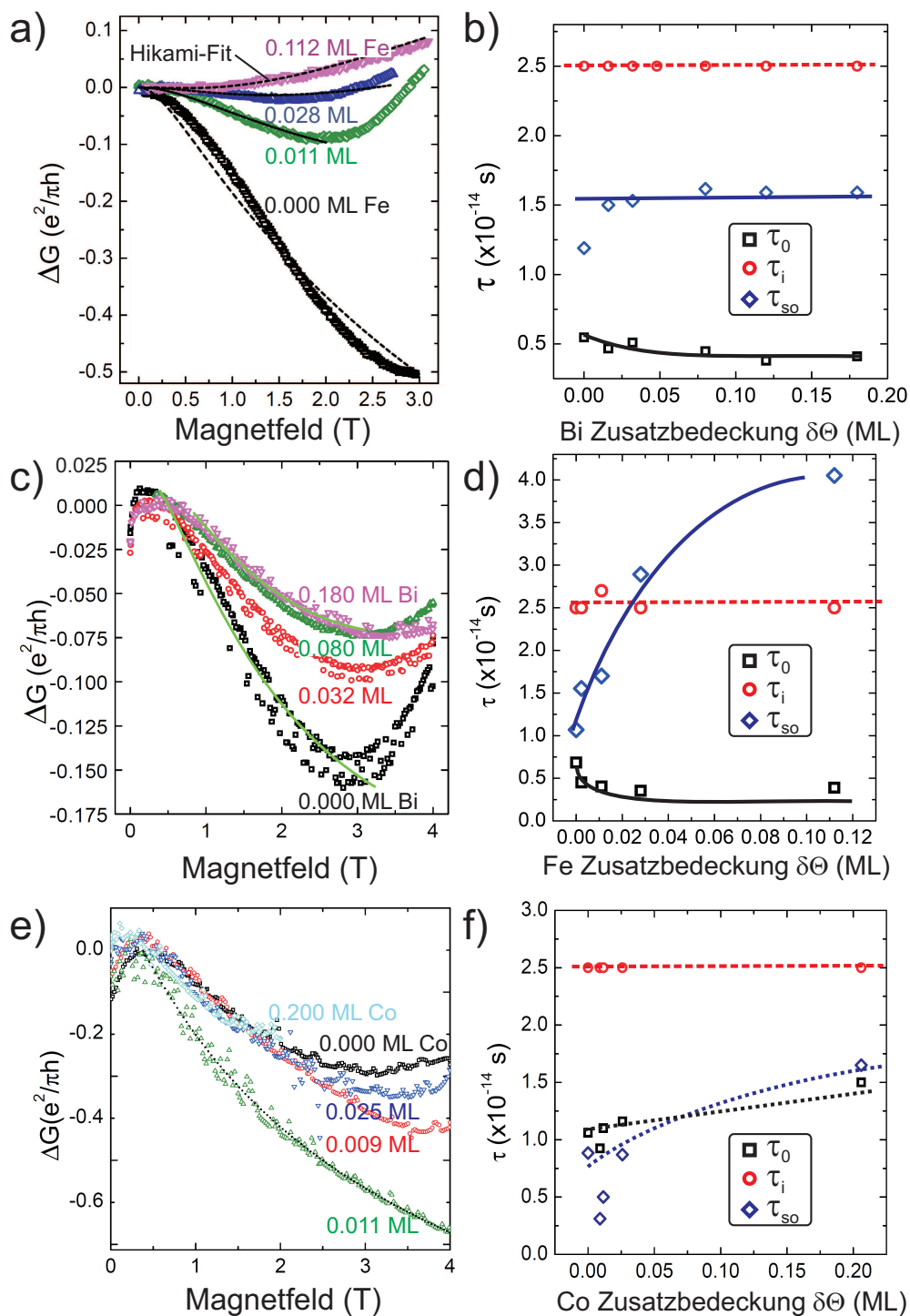


Abbildung 5.20.: WAL-Beitrag zu den $G(B)$ -Messungen von Bi auf Bi (a), Fe auf Bi (c) und Co auf Bi (e) im Vergleich. Bei Fe beobachtet man einen Übergang von WAL zu WL. Gestrichelte und durchgezogene Linien stellen Fits der Hikami-Theorie an die Daten dar. b), d) und f) zeigt die jeweiligen Auswertungen der Streuzeiten nach der Hikami-Theorie.

muss man diese Aussage allerdings etwas einschränken, da man doch eine Änderung durch die Oberflächenmanipulation messen kann. Die Auswertung dieser Kurven mit der Hikami-Theorie liefert die Streuzeiten, die in b) gegen $\delta\Theta$ aufgetragen sind. Bei konstantem τ_i und τ_{so} nimmt hier die elastische Streuzeit τ_0 ab. Da τ_0 direkt proportional zu μ ist und die Beweglichkeit der Volumenladungsträger kaum von der Oberflächenmanipulation beeinflusst werden kann, zeigt dies schon, dass auch die Oberflächenladungsträger zumindest zum Teil für den WAL-Beitrag verantwortlich sind. Die nicht-magnetischen Bismutatome lassen τ_{so} konstant, beeinflussen also nicht die TR-Symmetrie, wie es auch zu erwarten war.

Beim magnetischen Fe stellt sich die Situation deutlich anders dar. Wie man in c) sieht, entwickelt sich die zunächst deutlich nach unten gekrümmte WAL-Kurve mit steigender Fe-Bedeckung immer mehr zu einer nach oben gekrümmten Kurve, und wird für $\delta\Theta \approx 0.03$ ML zu einer WL-Kurve. Dieser WAL-WL Übergang wurde, wie eingangs dieses Kapitels erwähnt, bei Topologischen Isolatoren unter Anwesenheit magnetischer Verunreinigungen gefunden [173, 174]. Auch die Hikami-Theorie der Schwachen Lokalisierung lässt einen Einfluss magnetischer Verunreinigungen auf den Streuprozess erwarten. Da die Wechselwirkung der Spins mit dem magnetischen Moment zu einer Änderung der Spinorientierung führt, diese aber richtungsabhängig ist, geht die Phaseninformation beim Streuprozess nach einer Zeit τ_s verloren [51] und ändert so die Form der $G(B)$ -Kurve. Abb. 5.20 d) zeigt die Streuzeiten in Abhängigkeit der Fe-Bedeckung. Bei konstanter inelastischer Streuzeit τ_i reduziert sich die elastische Streuzeit wieder, entsprechend der Reduktion der Beweglichkeit durch die zusätzlichen Streuer. Anders als für Bi auf Bi ändert sich jetzt auch τ_{so} und wird deutlich größer, die Häufigkeit der Spin-Bahn-Streuung nimmt damit auf etwa $\frac{1}{4}$ des Anfangswertes ab.

Fe bricht also die TR-Symmetrie auf der Oberfläche, sodass die strikten Streubedingungen zwischen den spinpolarisierten Bändern aufgeweicht werden. Es kann jetzt auch Streuung zwischen Zuständen mit entgegengesetzter Spinausrichtung stattfinden, indem die Ladungsträger mit dem magnetischen Moment des Atoms wechselwirken. Somit bestätigt sich hier die anfängliche Modellannahme der Symmetriebrechung durch magnetische Verunreinigungen (Abb. 5.15). Durch den lokalen Bruch der TR-Symmetrie ist Rückstreuung erlaubt. Dadurch würde man erwarten, dass der WAL-Beitrag zunimmt, da jetzt noch mehr Ladungsträger in Rückwärtsrichtung destruktiv interferieren. Genau das Gegenteil tritt aber ein. Dies liegt daran, dass bei der Streuung an einem magnetischen Moment, das zufällig orientiert ist, die Information über die Spinausrichtung vor dem Streueignis verloren geht und so nur die Ortswellenfunktion des Ladungsträgers bei der Interferenz eine Rolle spielt. Somit kommt es in Rückwärtsrichtung zu konstruktiver Überlagerung und WL-artigem Verhalten. Allerdings wurde in Kap. 5.4.2 gezeigt, dass durch Fe und Co Adsorption die Ladungsträgerkonzentration stark ansteigt, was zum Teil mit Bandhybridisierungen erklärt wurde. Von solch starken Veränderungen wird auch die Spinstruktur nicht unberührt bleiben, wie die Messungen an Topologischen Isolatoren zeigen [177], sodass auch dies zur Aufhebung der Rückstreuunterdrückung beitragen kann.

Nach dem bisher Gesagten, würde man auch für Co einen Übergang von WAL zu WL-Verhalten erwarten. Abb. 5.20 e) zeigt jedoch ein unklares Bild. So ist kein klarer Trend mit steigender Fe-Konzentration erkennbar. Die Auswertung der Daten in f) ist ebenso widersprüchlich. So steigt zwar die Spin-Bahn Streuzeit τ_{so} wie für Fe an, jedoch steigt in gleichem Maße auch die elastische Streuzeit τ_0 , die aber durch die zusätzlichen Streuzentren abnehmen sollte. Diese Diskrepanz ist mit dem, in diesem Fall, nicht eindeutig festlegbaren Abzug des klassischen Untergrundes aus den Rohdaten in Verbindung zu bringen. Die $G(B)$ -Rohdaten in Abb. 5.18 c)

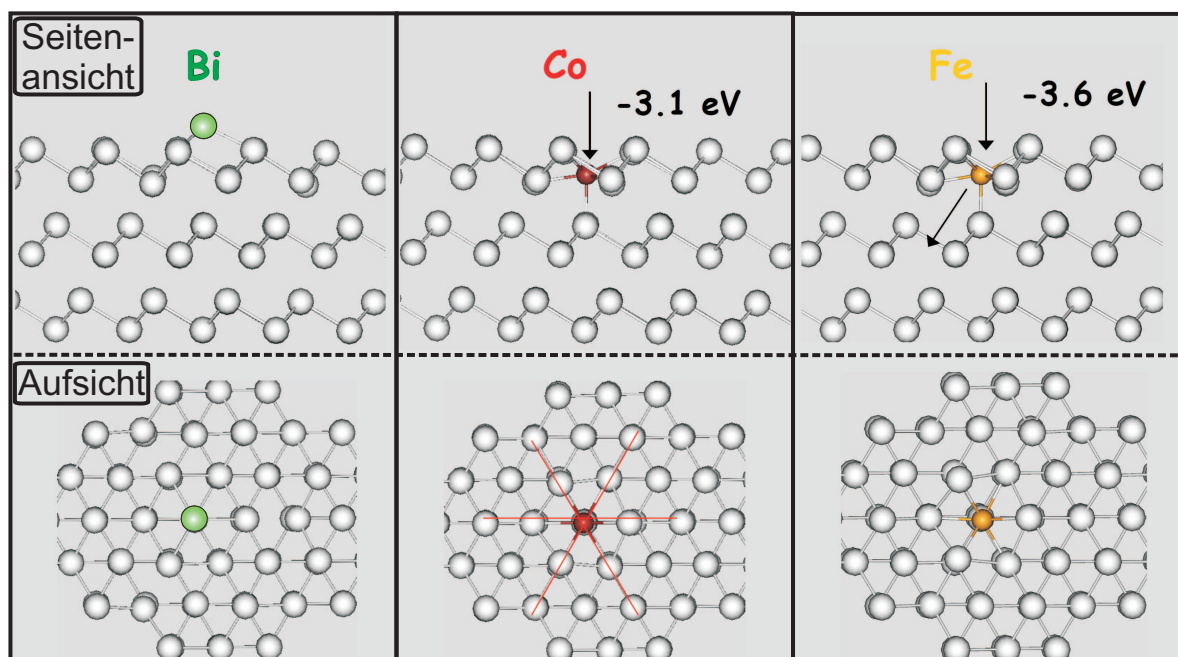


Abbildung 5.21.: Energetisch bevorzugte Adsorptionsplätze von Bi, Co und Fe auf der Bi(111)-Fläche, berechnet mit DFT [von U. Gerstmann]. Bi lagert sich oberhalb der ersten genau über einem Atom der 2. Bilage an. Fe und Co gehen barrierefrei in die erste Bilage und brechen dort die Symmetrie.

beinhalten ein starkes Rauschsignal, sodass ein eindeutiger Abzug des quadratischen Untergrund schwierig ist und dementsprechend das Hikami-Residuum mit einer Unsicherheit belegt ist. Wie Kap. 5.4.5.2 noch zeigen wird, ist aber die Zunahme von τ_{so} ein robuster Effekt und wird auch für Tb-Adsorption auf Bi-Filmen gefunden.

Die Aufhebung der Rückstreuunterdrückung könnte zum Teil auch erklären, warum Fe und Co einen stärkeren Einfluss auf die Reduzierung der Beweglichkeit haben. Allerdings betrifft dies nur die kohärenten Streueignisse. Der Widerstand wird aber zu einem großen Teil durch inkohärente Streuung, etwa unter Einbeziehung von Phononen, erzeugt. Zur weiteren Klärung dieses Problems ist es sinnvoll sich die Adsorptionsplätze der verschiedenen Materialien auf der Bi-Oberfläche anzusehen.

5.4.4. Adsorptionsplätze von Bi, Fe und Co - DFT-Rechnungen

Dazu wurden von Kooperationspartnern⁵ Dichte-Funktional-Theorie Rechnungen (DFT) durchgeführt, die nach den energetisch bevorzugten Positionen der Adsorbate auf der Oberfläche suchen. Wie Abbildung 5.21 zeigt unterscheidet sich Bi von Fe und Co in der Wahl seines energetisch bevorzugten Adsorptionsplatzes. Bi lagert sich oberhalb der Oberfläche in einem H-Platz an, und liegt damit genau oberhalb eines Bi-Atoms der zweiten Bilage. Dies ist zu erwarten gewesen, da Bi auf Bi im Lage-für-Lage Modus wächst [169] und sich somit auf der Oberfläche ansammeln sollte. Damit hat das Bi-Adsorbatatom drei nächste und drei übernächste Nachbarn. Eine Auslenkung der Bi-Oberflächenatome aus ihrer Gitterposition ist dabei nicht feststellbar.

⁵U. Gerstmann, E. Rauls und W.G. Schmidt, Lehrstuhl für Theoretische Physik, Universität Paderborn

Fe und Co hingegen suchen sich Plätze innerhalb der ersten Bilage. So gehen sie auch auf H-Plätze wie die Bi-Atome, jedoch zwischen die obere und untere Hälfte der Bilage. Dieser Platz ist in sofern ausgezeichnet, dass die Atome nun 6-fach koordiniert sind, also 6 statt 3 nächste Nachbarn haben. Die Rechnungen ergeben, dass sie dafür keinerlei Energie aufwenden müssen und barrierefrei ihren Platz finden. Dabei gewinnt man bei Co 3.1 eV und 3.6 eV pro Fe-Atom. Dies stellt für die Bi-Atome der ersten Bilage selbstverständlich eine große Störung dar. Wie man in der Abbildung unten sieht, werden die nächsten Nachbaratome von ihren Gitterplätzen Richtung Co- und Fe-Atom ausgelenkt.

Eine solche Gitterverzerrung hat verständlicherweise auch Auswirkungen auf die Streuung von Ladungsträgern und macht die größeren Streuquerschnitte von Co und Fe im Vergleich zu Bi plausibel. Inwieweit sich dabei auch die Bandstruktur ändert (wie es bei Topologischen Isolatoren gefunden wurde) ist an dieser Stelle unklar. Rechnungen dazu sollen in Zukunft gemacht werden und weitere Erkenntnisse in dieser Richtung bringen.

5.4.5. Adsorption von Terbium auf Bi(111)-Filmen - starke Oberflächendiffusion bei tiefen Temperaturen

Im Fall von Co und Fe haben wir bereits gesehen welchen Einfluss das magnetische Moment auf den Transport in den Oberflächenzuständen von Bi haben kann, und dass sie einen Bruch der TR-Symmetrie hervorrufen. Allerdings geht die Adsorption mit starkem Ladungstransfer einher und die Adsorptionsplätze liegen für niedrige Bedeckungen innerhalb der ersten Bi-Lage. Als zusätzlichen Test der Modellvorstellung im Zusammenhang mit magnetischen Verunreinigungen auf Bi-Flächen wird Terbium (Tb) als Adsorbat verwendet.

Tb gehört zu den Selten Erden mit Ordnungszahl $Z=65$. Seine elektronische Konfiguration lautet: $[Xe]4f^95s^25p^65d^06s^2$. Die innere 4f-Schale ist also nur teilgefüllt und verursacht ein starkes magnetisches Moment. So hat z.B. das dreifach ionisierte Tb^{+3} ein Moment von $9.76 \mu_B$ [183], wobei $\mu_B = \frac{eh}{2mc}$ das Bohrsche Magneton ist. Während der Adsorption von Tb auf der Bi-Oberfläche kann man also in erster Näherung erwarten, dass die inneren Schalen nicht zum möglichen Ladungstransfer beitragen und nur die äußeren 6s und 5d-Schalen beteiligt sind. Somit sollte das magnetische Moment auch nach Adsorption erhalten bleiben und groß sein.

Adsorbiert man Tb bei geringer Rate und tiefen Temperaturen ($T=10$ K) auf Bi, so ergibt sich ein sehr interessanter Leitwertverlauf als Funktion der Zusatzbedeckung. In Abb. 5.22 a) ist die entsprechende Kurve im Vergleich zu den bereits in Abb. 5.16 b) gezeigten Adsorptionskurven der anderen untersuchten Materialien aufgetragen. Anstatt monoton zu fallen, durchläuft die Tb auf Bi Kurve bei extrem geringen Konzentrationen unterhalb 1% ML, nach anfänglichem Abfall, ein Minimum und steigt dann bis etwa 2.5% wieder an und erreicht dort beinahe das Ausgangsniveau. Von hier aus fällt G bis zum Erreichen der Perkolation um 0.5 ML parallel zu den übrigen 3 Materialien. Der anfängliche Abfall ist dabei fast identisch mit den schon bekannten Kurven.

Wird eine höhere Substrattemperatur bei der Bedampfung, aber gleicher Aufdampftrate f , verwendet (Abb. 5.22 b), so erkennt man, dass bei $T=80$ K der qualitative Verlauf noch ähnlich ist, wobei der initiale Abfall weniger steil verläuft. Bei 300 K ist kein Minimum mehr zu beobachten und der Leitwert steigt unmittelbar an und durchläuft auch wie die anderen Kurven ein Maximum um $\delta\Theta_{Tb} = 2 - 2.5\%$ ML. Da der Leitwert nur durch die Ladungsträgerkonzentration und -beweglichkeit beeinflusst werden kann, muss es eine dynamische Änderung zumindest einer der

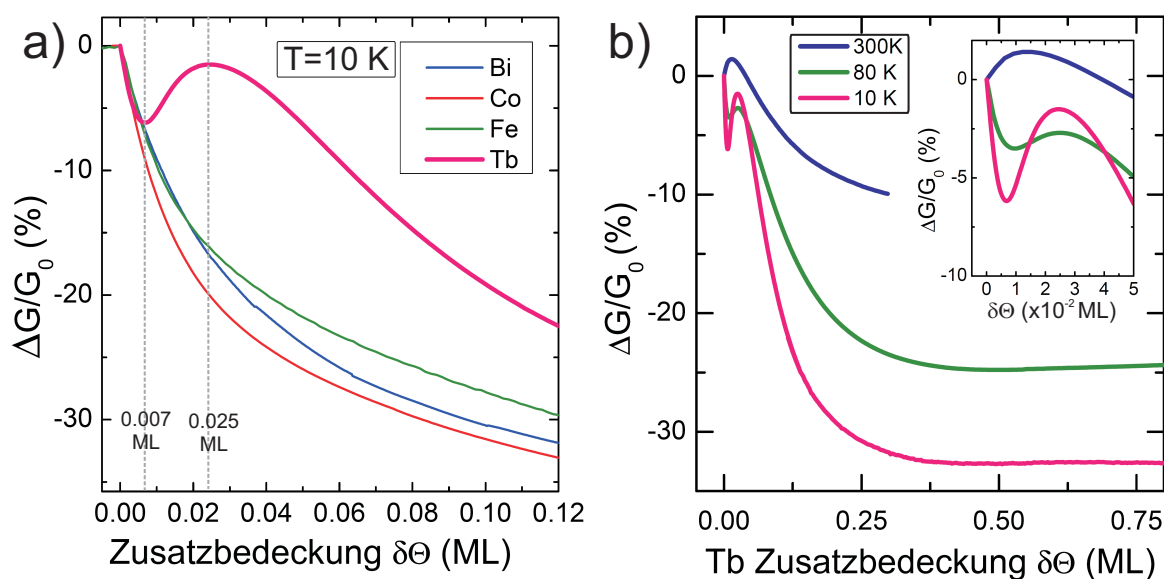


Abbildung 5.22.: a) $\frac{\Delta G(\delta\Theta)}{G_0}$ von Tb auf Bi im Vergleich zu Bi, Co und Fe. Es existiert ein Minimum bei sehr kleinen Bedeckungen unter 1% ML. ($T=10$ K, $f=5 \times 10^{-5}$ ML/s) b) $\frac{\Delta G(\delta\Theta)}{G_0}$ für Tb bei verschiedenen Temperaturen. Die Kurve verschiebt sich nach oben. Bei RT nimmt der Leitwert unmittelbar zu. Der Inset zeigt die Situation für kleine Zusatzbedeckungen nochmals deutlicher.

beiden Größen während der Bedampfung geben, damit sich derart komplexe Verläufe erklären lassen. Da bei 300 K der Leitwert ansteigt, kann man zunächst einmal feststellen, dass sich hier n oder p erhöhen müssen, es also definitiv einen Dotierungseffekt durch die Tb-Adatome gibt. Eine Verringerung von μ_p oder μ_n durch Erhöhung der Defektdichte ist hier nicht zu erwarten. Bei 10 K folgt die Kurve für kleine $\delta\Theta$ fast exakt dem Verlauf der Bi, Co und Fe Kurve, sodass man vermuten kann, dass hier die Beweglichkeit auch ähnlich stark abnimmt. Zwischen 1% und 2.5% ML muss es jedoch einen Prozess geben, der die Beweglichkeit wieder erhöht. Für höhere Bedeckungen $\delta\Theta > 2.5\%$ nimmt $\mu_{n/p}$ dann so stark ab, dass die Zunahme von n/p überkompensiert wird und der Leitwert stark abfällt, in Übereinstimmung mit den Verläufen der 3 anderen Materialien.

Was für ein Prozess die dynamische Änderung der Beweglichkeit verursacht, ist zunächst unklar. Daher wurden LEED Untersuchungen durchgeführt. Abb. 5.23 zeigt das Linienprofil des Bi-(00)-Reflexes vor der Deposition von 5% ML Tb, sowie nach einigen Minuten und einer Stunde Wartezeit bei konstanter Proben temperatur von $T=10$ K, gemessen mit einer Out-Phasen (a) und In-Phasen Energie (b). In beiden Fällen lässt sich die Beobachtung machen, dass unmittelbar nach der Deposition der Reflex deutlich verbreitert ist und nach 1 h die Peakbreite wieder zum Ausgangspunkt zurück gekehrt ist. Es sollte bemerkt werden, dass sich keinerlei Überstruktureffekte durch die Tb-Adsorption beobachten lassen. Augenscheinlich wird die lokale kristalline Ordnung durch die Anwesenheit der Tb-Atome auf der Bi-Oberfläche stark gestört, etwa durch Gitterverzerrungen, wie es bei den DFT-Rechnungen für Co und Fe der Fall ist. Somit werden die Bereiche der perfekt geordneten kristallinen Bi-Oberfläche verkleinert und dementsprechend der LEED-Reflex, sowohl in Gegenphase als auch in Inphase, verbreitert. Die Tatsache, dass die

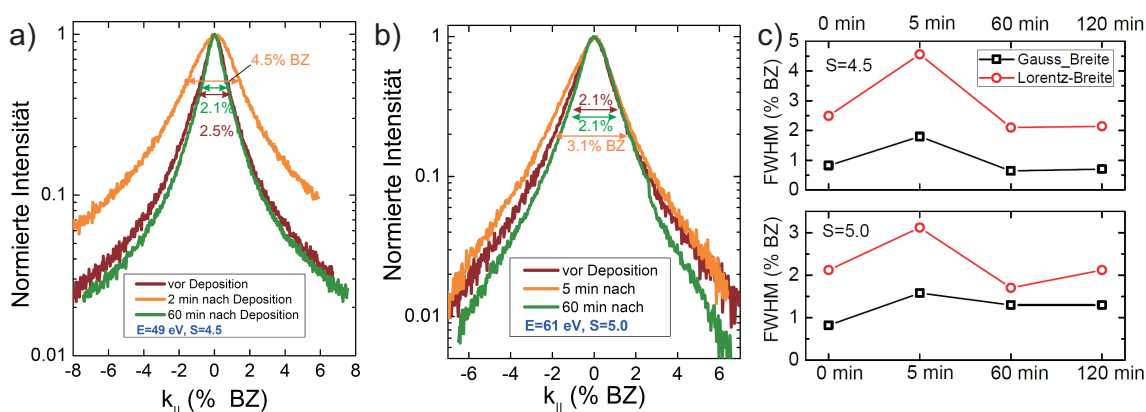


Abbildung 5.23.: Linienprofile des (00)-Reflexes vor der Deposition von 5%₀₀ ML Tb auf 20 BL Bi, sowie 5 min und 60 min danach, bei $T=10$ K. Sowohl in der Out-Phase (a) als auch in der In-Phase (b) verbreitert sich das Profil zunächst und kehrt wieder in den ursprünglichen Zustand zurück. c) Entwicklung der Breite des Lorentz- und Gauss-Peaks mit dem die Profile beschrieben werden. Die Verbreiterung unmittelbar nach der Tb-Deposition ist deutlich zu erkennen.

Profilbreite nach endlicher Wartezeit von 1 h wieder den Ausgangswert annimmt, bedeutet, dass nun die kristalline Ordnung wieder vergleichbar mit der reinen Fläche ist, folglich müssen die Tb-Atome migriert sein.

Die dafür in Frage kommenden Prozesse sind einerseits Volumendiffusion und andererseits Oberflächendiffusion. Gegen Volumendiffusion sprechen LEED-Messungen, die in Abb. 5.24 dargestellt sind. Bei steigender Zusatzbedeckung mit Tb, misst man eine immer weiter abschwächende Intensität aller Reflexe und letztlich eine komplette Unterdrückung im Bereich ≤ 1 ML Tb. In f) ist die (00)-Intensität als Funktion der Bedeckung aufgetragen, welche exponentiell abfällt. Zu bedenken ist auch, dass Verspannungen des Bi-Gitters durch die Tb-Atome zu einer Unterdrückung der Reflexe führen kann, wie es bereits für Fe und Co diskutiert wurde. Dennoch ist die Volumendiffusion eher ein untergeordneter, bzw. schnell absättigender Prozess, da auch die Leitfähigkeit für hohe Bedeckungen irreversibel abnimmt, was bedeutet, dass in diesem Fall viele Störstellen in oberflächennahen Bereichen verbleiben. Die Tb-Atome diffundieren also im Wesentlichen auf der Oberfläche (oder innerhalb der ersten Lage) und werden entweder von Defekten wie z.B. Korngrenzen eingefangen oder finden sich zu Inseln zusammen. Beides würde die Störung der kristallinen Ordnung wieder reduzieren, da so im Fall von Abb. 5.23 nur etwa 5 %₀₀ der Fläche gestört wären und damit nur noch schwer vom LEED detektiert werden könnten.

Für die Diffusionshypothese sprechen auch zeitabhängige Leitwertmessungen bei konstanter Temperatur. Abb. 5.25 zeigt ein Experiment, bei dem intervallweise Tb auf einen 20 BL Bi-Film aufgedampft wurden und nach Schließen des Shutters die Entwicklung des Leitwerts gegen die Zeit bei $T=10$ K beobachtet wurde. Durch Adsorption von 1%₀₀ ML Tb fällt der Leitwert stark ab. Nach Schließen des Shutters steigt er aber wieder deutlich an. Nach einem Erwärmungsschritt bis 100 K (durch Farbbalken am oberen Rand symbolisiert) kehrt der Leitwert wieder zum Ausgangswert G_0 zurück. Dieses Spiel lässt sich auch nach der Adsorption von 5%₀₀ ML Tb wiederholen. Erst wenn mehr als 2% ML Tb auf der Oberfläche sind, wird der ursprüngliche Wert

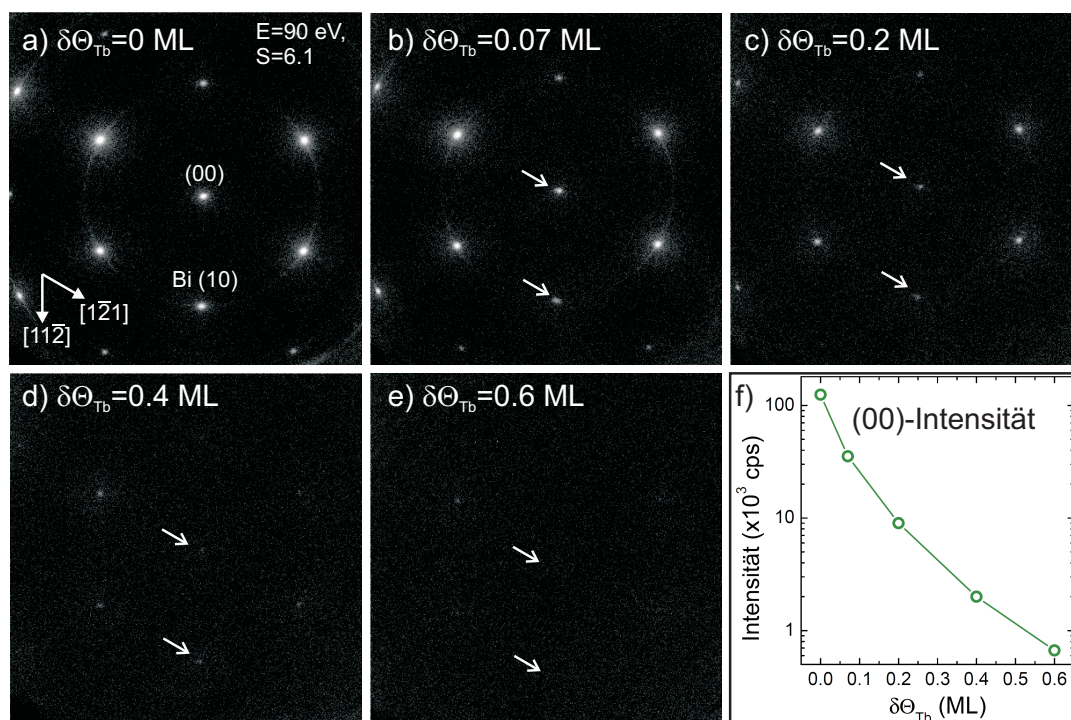


Abbildung 5.24.: LEED-Bilder bei steigender Tb-Bedeckung auf einem 20 BL Bi(111)-Film bei $T=10$ K (a-e). Nach etwa 0.6 ML Tb werden die Bi-Reflexe komplett unterdrückt. f) Die Intensität des (00)-Reflexes reduziert sich sehr stark mit der Tb-Bedeckung.

nicht mehr erreicht. Diese Beobachtungen können damit erklärt werden, dass die zusätzlichen Tb-Streuzentren auf der Oberfläche diffundieren und sich zu Inseln zusammenschließen oder an Defekten (z.B. Korngrenzen) gebunden werden. Der Streuquerschnitt der Inseln muss dabei im ersten Fall kleiner sein als die Summe der Streuquerschnitte der Monomere. Im zweiten Fall wirken die Defekte, an denen sich die Tb-Atome binden, ja bereits als Streuer und die Tb-Atome “verstecken“ sich sozusagen hinter den Defekten und führen nicht zu einer Erhöhung der Streurrate. Wenn sehr viele Tb-Atome auf der Oberfläche sind, ist der Leitwert irreversibel reduziert, da nun alle Defekte abgesättigt sind und/oder die Streuung an Tb-Inseln relevant wird.

5.4.5.1. Nukleation von Tb auf der Oberfläche – Simulation

Um die Diffusion der Tb-Atome auf der Oberfläche besser zu verstehen kann man sich der Nukleationstheorie von *Venables* [184, 185] bedienen. *Jnawali et al.* [117] taten dies für die Untersuchung der Bi-Adsorption auf Bi-Filmen. Sie benutzten die folgenden Ratengleichungen zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Monomer- und Inseldichte n_a und n_{is} (in Einheiten von ML) auf der Oberfläche:

$$\frac{dn_a}{dt} = f - 2k_a n_a^2 - k_i n_a n_{is} - f(ft - n_a) - 2fn_a \quad (5.3)$$

$$\frac{dn_{is}}{dt} = k_a n_a^2 + fn_a \quad (5.4)$$

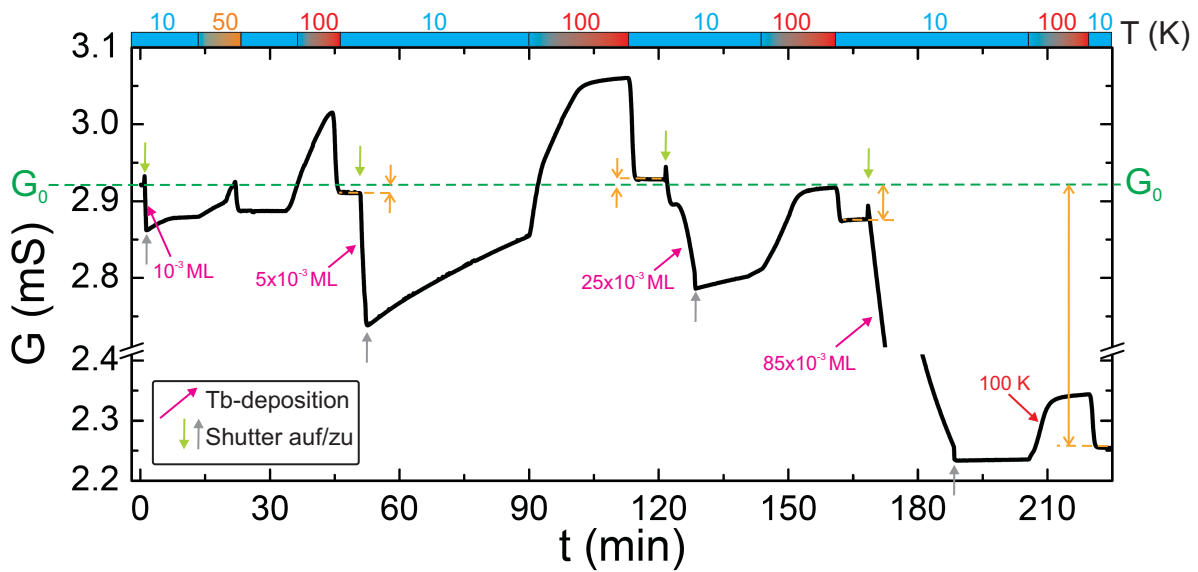


Abbildung 5.25.: Depositions-Experiment mit Tb auf 20 BL Bi ($T=10$ K, $f=5 \times 10^{-5}$ ML/s). Aufgetragen ist der Leitwert gegen die Zeit in min. Es wird vier mal, jeweils für kurze Zeit Tb aufgedampft und dann bei $T=10$ K die Relaxation beobachtet. Ein Erwärmungsschritt zu 100 K bringt bei kleinen Tb-Bedeckungen G wieder auf G_0 -Niveau. Erst über 2.5% bleibt $G < G_0$.

Dabei ist f die Flussrate (in ML/s) des auf der Oberfläche ankommenden Atomstrahls und k_a und k_{is} die Rate (in 1/s) mit der Monomere und Inseln diffundierende Tb-Atome einfangen. Die in der ersten Gleichung vorkommenden Terme, beschreiben die Änderung der Adatomdichte durch verschiedene Prozesse: Die Zunahme der Dichte durch die Adsorption mit der Flussrate f ; die Abnahme durch den Stoß zweier Adatome auf der Oberfläche ($-2k_a n_a^2$); Einfang von Adatomen durch eine Insel ($-k_{is} n_a n_{is}$); Auftreffen eines Atoms des Atomstrahls auf eine bereits existierende Insel ($f n_a$); sowie das Auftreffen auf ein Monomer ($-f n_a$). Die zweite Gleichung beschreibt die Zunahme der Inseldichte durch Stoß zweier Monomere ($k_a n_a^2$) sowie durch Auftreffen eines Atoms auf ein Monomer ($f n_a$). Diese Ratengleichungen können bei gegebenem f (welches dem Experiment entnommen wird), k_{is} und k_a numerisch gelöst werden. Somit erhält man einen zeitlichen Verlauf der Monomer- und Inseldichte.

Wie bereits in Kap. 5.4.1 motiviert wurde gilt:

$$\frac{\Delta G}{G_0} = -\frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau} = -\frac{\tau_0}{\tau_0 + (\tau_a^{-1} + \tau_{is}^{-1})^{-1}}$$

dabei sind τ_a^{-1} und τ_{is}^{-1} die Streuraten, die durch Monomere und Inseln verursacht werden. Zur einfacheren Behandlung der Gleichungen wird der folgende Zusammenhang der Streuzeiten von den aus Gl. 5.3 bestimmten Dichten angenommen: $\tau_0 = \ell_0/v_F$ und $\tau_a = 1/(p_a v_F n_a)$ sowie $\tau_{is} = 1/(p_{is} v_F n_{is})$ ⁶, dabei sind p_a und p_{is} die Streuwahrscheinlichkeiten an Monomer und Insel.

⁶In Kapitel 5.4.1 wurde eine Proportionalität zu $(\delta\Theta)^{-1/2}$ statt $(\delta\Theta)^{-1}$ für den mittleren Abstand der Adsorbatome angenommen. Jedoch würden sich die Gleichungen dadurch deutlich verkomplizieren und nicht zu einer besseren Beschreibung bei kleinen Bedeckungen führen.

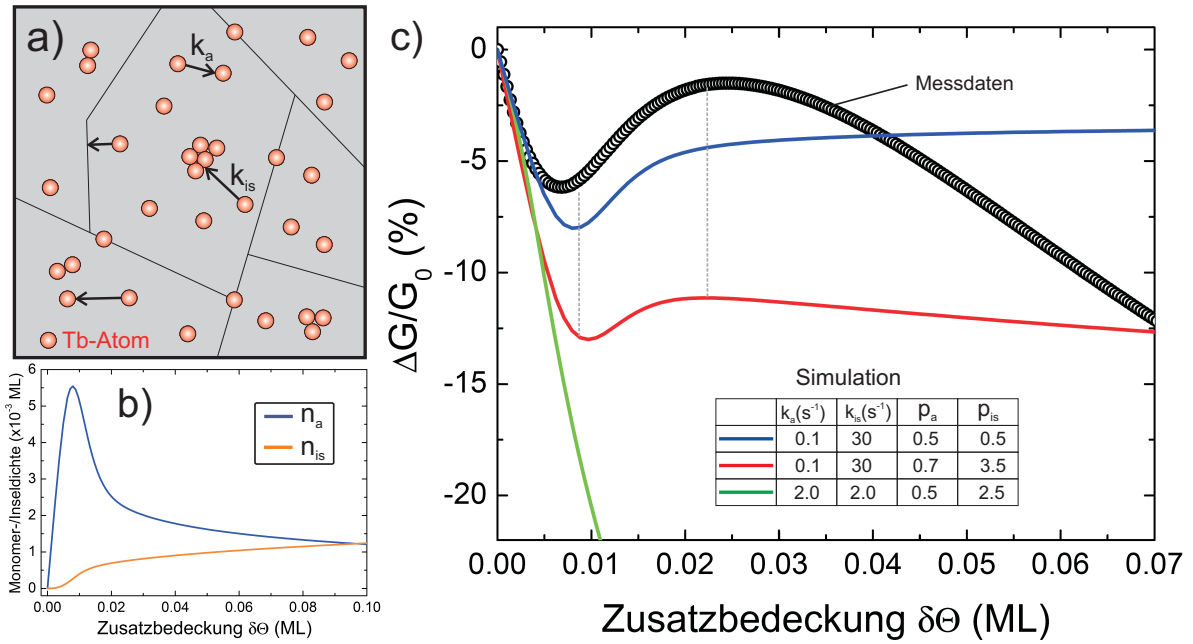


Abbildung 5.26.: Diffusion von Terbium auf Bi(111). a) Schemaskizze des Modells mit Einfangrate für Atome k_a und Inseln k_{is} . b) Lösung der Differentialgleichungen für n_a und n_{is} für $f = 5 \times 10^{-5}$ ML/s, $k_a=0.1$, $k_{is}=30$. c) Aus n_a und n_{is} berechnetes $\Delta G/G_0$ unter Variation der Parameter im Vergleich zu den Messdaten (schwarze Kreise). Das Minimum bei geringer Bedeckung wird sehr gut reproduziert und im Fall der roten Kurve auch das Maximum mit anschließendem Abfall des Leitwerts. ($\ell_0 = 30 a_{Bi}$ und $f = 5 \times 10^{-5}$ ML/s)

Letztlich ergibt sich:

$$\frac{\Delta G}{G_0} = -\frac{\ell_0/v_F}{\ell_0/v_F + (p_a v_F n_a + p_{is} v_F n_{is})^{-1}} = -\frac{\ell_0}{\ell_0 + (p_a n_a + p_{is} n_{is})^{-1}} = -\frac{\ell_0(p_a n_a + p_{is} n_{is})}{\ell_0(p_a n_a + p_{is} n_{is}) + 1}. \quad (5.5)$$

Durch Variation der Größen ℓ_0 , k_{is} , k_a , p_{is} und p_a wird nun der Verlauf der experimentell erhaltenen Leitwertkurven nachvollzogen. Die mittlere freie Weglänge ℓ_0 bei den hier verwendeten Bi-Filmen wurde durch eine H(S)-Analyse mit LEED auf etwa 10-15 nm bestimmt (siehe Kap. 5.1.1), was etwa 20-40 a_{Bi} entspricht.

Abb. 5.26 b) zeigt die Lösung der Ratengleichung bei einer Flussrate von $f=5 \times 10^{-5}$ ML/s und $k_a \ll k_{is}$. Die Monomerdichte steigt zunächst sehr stark an, fällt dann aber ab, sodass für große $\delta\theta$ die Inseldichte dominiert. Nach Gl. 5.5 ergibt sich daraus ein bedeckungsabhängiger Leitwert wie er in c) für verschiedene Parametersätze im Vergleich zu den Messdaten gezeigt ist. Wie man erkennt, lässt sich so der qualitative Verlauf mit Minimum unter 1% und Maximum bei 2.5% reproduzieren. Allerdings nur, wenn $k_a \ll k_{is}$ und gleichzeitig $p_{is} > p_a$ ist (rote Kurve). In allen anderen Fällen bekommt man davon abweichende Verläufe. So ist bei $p_a = p_{is}$ (blau) nur ein Minimum, ohne Maximum und für $k_a = k_{is}$ (grün) lediglich ein monotoner Abfall zu beobachten. Dies ist konsistent mit den Ergebnissen aus [117], die den monotonen Verlauf bei Bi auf Bi mit gleichen Einfangraten $k_{is} = k_a$ beschreiben konnten. Im Fall der Tb-Diffusion kommt man also zu der Erkenntnis, dass die Einfangrate von Inseln deutlich größer ist als die von Einzelatomen

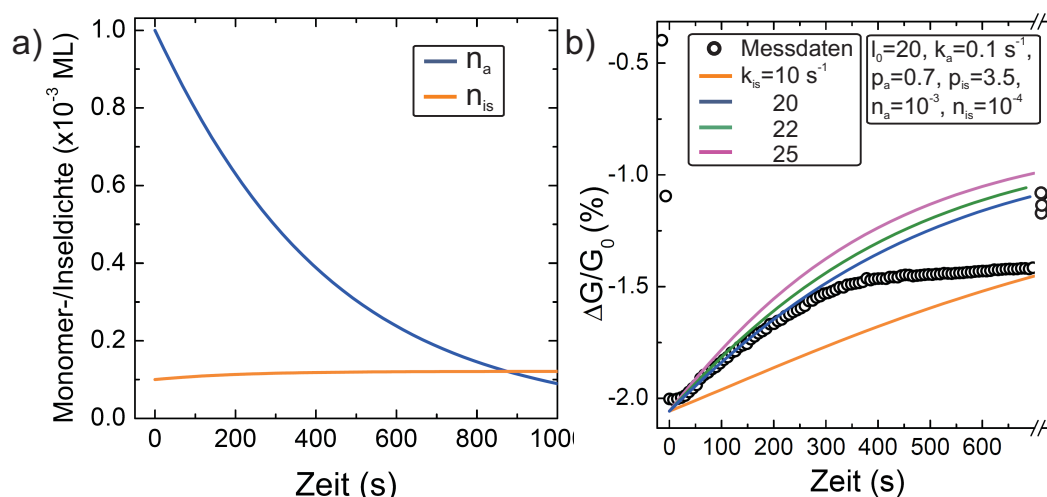


Abbildung 5.27.: a) Simulation der Situation nach Deposition von 1% ML Tb und schließen des Shutters ($f=0$). Die Monomere agglomerieren in Inseln. b) Der Leitwert (schwarze Kreise) steigt nach Schließen des Shutters bei konstanten 10 K mit der Zeit an und wird durch das Modell für eine Einfangrate von $k_{is}=20 \text{ s}^{-1}$ (blaue Linie) für die ersten 300 s beschrieben.

und dass zusätzlich der Streuquerschnitt einer Tb-Insel größer ist als der eines Tb-Monomers. Die Tatsache, dass die Simulation den starken Abfall der Messdaten für große $\delta\Theta$ nicht korrekt beschreibt, hängt mit dem Einfang der Tb-Atome an Defekten zusammen. Dieser Prozess wird vom Modell nicht richtig erfasst. Man könnte sich z.B. vorstellen, dass die Korngrenzen zunächst Tb-Atome an sich binden, sodann aber abgesättigt sind und keine weiteren Atome mehr einfangen. Dies würde bewirken, dass die scheinbare Einfangrate der Inseln k_i mit der Zeit kleiner wird und so die Dichte der Monomere nicht so stark reduziert wird, wie vom Modell vorhergesagt. Ein stärkerer Abfall des Leitwertes für hohe Bedeckungen wäre die Konsequenz und würde die rote Kurve den Messdaten angleichen. Für ein Korn mit Durchmesser von etwa $30 a_{Bi}$ beträgt der Umfang etwa $\pi \cdot 30 a_{Bi} \approx 100 a_{Bi}$, also in etwa 100 Adsorptionsplätze für Tb-Atome. Dies entspricht einer Bedeckung von etwa 3.5% ML, wenn jedes auf der Oberfläche ankommende Atom zuerst an Korngrenzen adsorbiert würde, was nicht zu erwarten ist. Jedoch zeigt diese Abschätzung, dass nach einigen Hundertstel Monolagen eine Änderung von k_{is} realistisch ist und das Modell die Daten hier nicht mehr richtig beschreiben kann. Zudem berücksichtigt es in keiner Weise Ladungstransfer-Effekte, die aber nach den vorigen Kapiteln sehr entscheidend sein können.

Als Test des Modells werden nun noch die $G(t)$ Daten in Abb. 5.27 (sie sind der Abb. 5.25 entnommen) nach Deposition von 1% und Schließen des Shutters beschrieben. Dazu wird jetzt $f=0$ gesetzt und die Startwerte $n_a = 10^{-3}$, $n_{is} = 10^{-4}$ gewählt. Die übrigen Parameter werden wieder leicht variiert. Mit ähnlichen Werten wie zuvor, lassen sich die Messdaten über einen langen Zeitraum sehr gut beschreiben und zeigen die Richtigkeit des Modells (b). Erst nach etwa 5 min weicht die blaue Kurve von den Messdaten ab.

Diffusion auf der Oberfläche ist ein aktivierter Prozess, sodass die Vorgänge bei höherer Temperatur schneller ablaufen. Dementsprechend sind die Einfangraten k_{is} und k_a bei $T=80 \text{ K}$ und 300 K größer als bei 10 K . So kann man auch die $G(\delta\Theta)$ -Daten in 5.22 b) erklären. Bei stärkerer

Diffusion wird die Monomerdichte n_a schnell klein, sodass weniger Streuer auf der Oberfläche sind und daher auch der Leitwertabfall bei $T=80$ K zu Beginn weniger steil verläuft als für 10 K. Bei 300 K ist die Diffusion derartig schnell, dass alle Adatome praktisch instantan in Inseln oder an Defekten gebunden werden und so keine Erhöhung der Streurrate durch Adsorption zu verzeichnen ist. Allerdings wird die Ladungsträgerkonzentration mit wachsender Zusatzbedeckung erhöht, sodass zu Beginn der Leitwert steigt. Dieser initiale Anstieg lässt sich dafür nutzen, die Änderung der Ladungsträgerdichte n (ohne an dieser Stelle zu wissen, ob es sich um Elektronen oder Löcher handelt) abzuschätzen. Bei konstantem $\mu \approx 300 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und $\frac{\Delta G}{\Delta(\delta\Theta)} = 0.01 \text{ S/ML}$ gilt für die Änderung:

$$\frac{\Delta n}{\Delta(\delta\Theta)} = \frac{\Delta G \cdot \ln(2)}{\Delta(\delta\Theta)e\mu\pi} \approx 0.08 \frac{e^-}{\text{Tb-Atom}}.$$

Nach dieser Abschätzung erhöht sich also die Ladungsträgerdichte um etwa 1/10 Elektronen oder Löcher pro adsorbiertem Tb-Atom und damit deutlich weniger drastisch als bei Fe und Co.

5.4.5.2. Magnetotransportmessungen an Tb auf Bi-Filmen

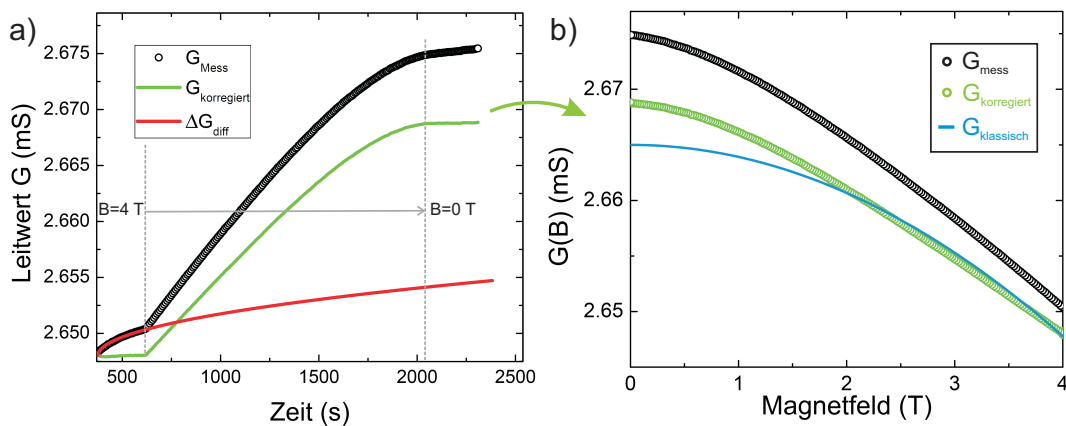


Abbildung 5.28.: a) Leitwert während einer magnetfeldabhängigen Messung für 20 BL Bi + 5×10^{-3} ML Tb (schwarz), nukleationsbedingtes ΔG (rot), nukleationskorrigiertes $G(t)$ (grün). b) Korrigierte Kurve als Funktion von B mit klassischem Anteil.

Zur näheren Untersuchung des Ladungstransfers wurden Magnetotransportmessungen durchgeführt. Dabei führt die starke Diffusion und Agglomeration zu Problemen, da sich der Leitwert ja nun unter konstanten Umgebungsbedingungen mit der Zeit ändert und den Magnetotransportdaten überlagert ist. Bei typischen Sweep-Raten des Magneteten von 0.2 Tesla/min dauert eine Messung von $G(B)$ (von 0 bis 4 T) etwa 20 min=1200 s. In dieser Zeitspanne kann sich durch Diffusion ein $\Delta G_{\text{diff}} \approx 10 - 20 \mu\text{S}$ einstellen, was in etwa der gleichen Größenordnung von $\Delta G(B)$ für reine 20 BL Bi-Filme entspricht. Dieser Beitrag muss von den $G(B)$ -Kurven subtrahiert werden, wie es in Abb. 5.28 angedeutet ist. Nach Abzug des Nukleationsanteils (rot), der sich aus der $G(t)$ Messung bei festem B (entweder bei 0 T oder 4 T) ergibt, erhält man die grüne Kurve, die man nun wie üblich gegen B aufträgt und auswerten kann (b). Unweigerlich ändert sich so durch die Nukleation die Ladungsträgerbeweglichkeit während der Messung, dies kann durch den Abzug von ΔG_{diff} jedoch nicht kompensiert werden und muss bei der folgenden

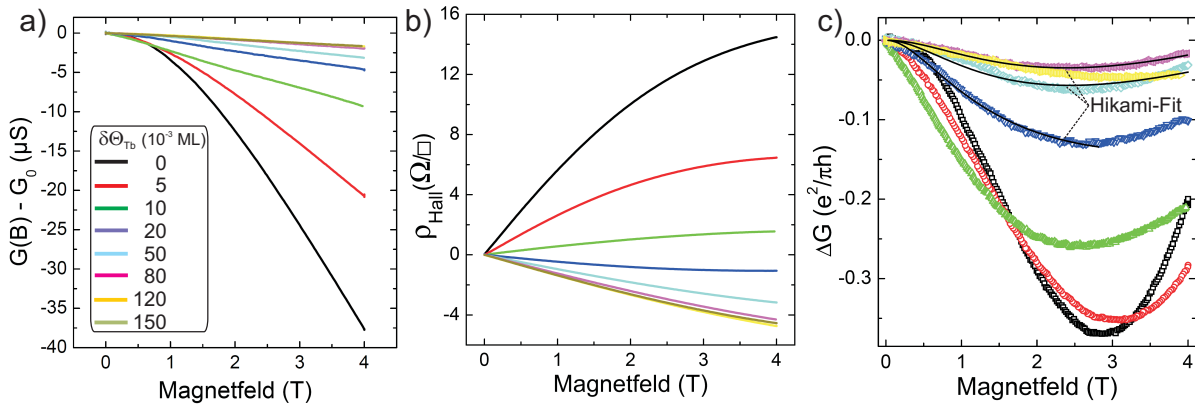


Abbildung 5.29.: a) Magnetoleitwertskurven eines 20 BL Bi Films mit variierender Tb-Zusatzbedeckung. b) Hall-Widerstand $\rho_{\text{Hall}}(B)$. c) WAL-Beitrag zu den Messungen in a), nach Abzug des klassischen Anteils. Beispielhaft sind bei einigen Kurven die Hikami-Fits gezeigt (schwarze Linien).

Auswertung unberücksichtigt bleiben.

Abb. 5.29 a) und b) zeigen die nach obigem Vorgehen korrigierten $G(B)$ - und $\rho_{\text{Hall}}(B)$ -Daten bei Variation der Zusatzbedeckung mit Tb-Atomen. Wie üblich ergibt sich bei $G(B)$ ein klarer Trend, dass die Amplitude stark reduziert wird. Bei 0.1 ML hat man bereits einen 75%-Effekt und damit eine stärkere Reduktion als für alle anderen Materialien (s.o.). Der Hall-Widerstand ändert das Vorzeichen seiner Steigung bei etwa 1.5% und damit etwa zur gleichen Zeit wie bei Bi auf Bi und deutlich früher als bei Fe und Co (hier passierte dies erst für $\delta\Theta > 2.5\%$). Die Auswertung der Daten mit der klassischen Magnetotransporttheorie ist in Abb. 5.30 a) und b) aufgetragen. Man erkennt einen sehr drastischen Rückgang der Beweglichkeiten. Tb streut offenbar noch stärker als Co- und Fe-Atome. Die Elektronenkonzentration n steigt leicht an, während p auf konstantem Niveau bleibt. Dies ist genau entgegengesetzt zur Co- und Fe-Adsorption bei dem die Löcherkonzentration anstieg. Aus dem Anstieg von etwa $\Delta n = 0.4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ nach 1% ML ergibt sich ein Wert von

$$\frac{\Delta n}{\Delta(\delta\Theta)} = 0.07 \frac{e^-}{\text{Tb-Atom}},$$

was erstaunlich gut mit dem zuvor abgeschätzten Wert übereinstimmt. Da Tb in seiner äußeren Schale nur zwei s-Elektronen hat, ist ein Elektronentransfer zur Bi-Oberfläche plausibel.

Der WAL-Beitrag dieser Messserie ist in Abb. 5.29 c) gezeigt. Ein ursprünglich negativer Verlauf reduziert sich immer mehr mit steigendem $\delta\Theta$, jedoch kann man auch bei hohen Bedeckungen keine nach oben gekrümmte Kurve, also eindeutige WL feststellen. Die Hikami-Fits sind teilweise durch schwarze Linien in der Abbildung gezeigt und beschreiben die Messdaten in befriedigender Weise. Die daraus erhaltenen Streuzeiten sind in Abb. 5.30 c) gezeigt. Bei konstantem $\tau_i = 2.6 \times 10^{-14}$ ergibt sich zunächst eine Abnahme von τ_0 , entsprechend der Abnahme der Beweglichkeit μ . Darüber hinaus erhöht sich die Spin-Bahn Streuzeit τ_{so} um einen Faktor 2. Ganz ähnlich wie im Fall von Fe (Abb. 5.20) nimmt also die Spin-Bahn Streuung mit $\delta\Theta$ ab. Tb bricht, analog zur Diskussion der Co- und Fe-Adsorption, mit seinen magnetischen Eigenschaften die TR-Symmetrie und führt zu einer verstärkten Rückstreuung der Ladungsträger im

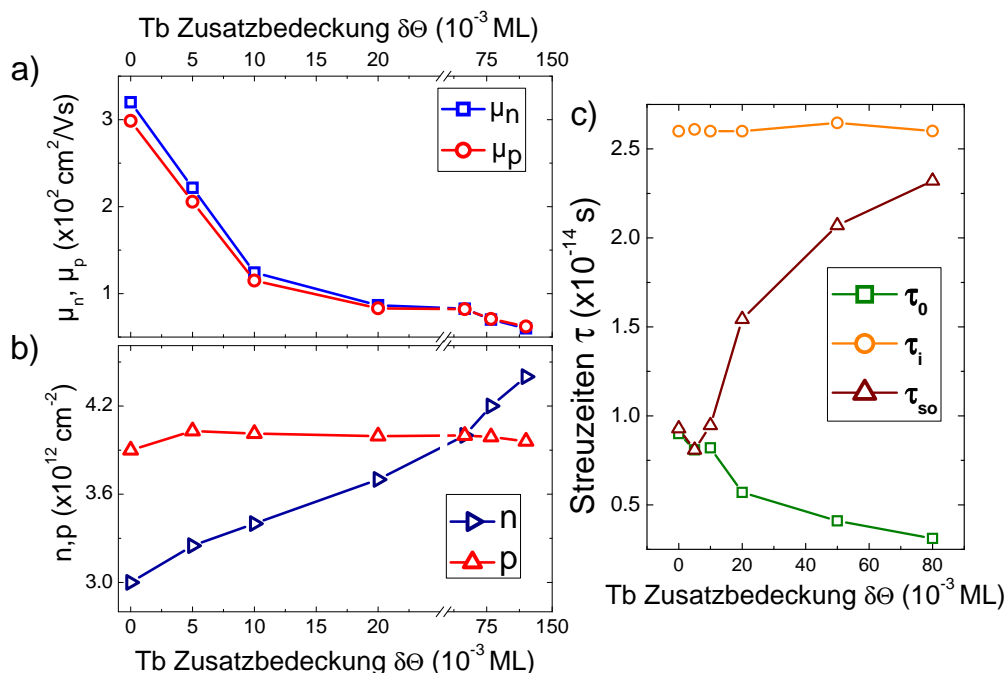


Abbildung 5.30.: Verlauf der Ladungsträgerbeweglichkeiten (a), -konzentrationen (b) und Streuzeiten (c) als Funktion der Tb Zusatzbedeckung $\delta\Theta$.

Oberflächenzustand.

5.5 Diskussion der Ergebnisse zu Bi(111)-Filmen auf Si(111)

Die Ergebnisse dieses Kapitels können wie folgt zusammengefasst werden:

- Das epitaktische Wachstum von Bi(111)-Filmen auf der Si(111)- 7×7 Oberfläche führt zu atomar glatten und geschlossenen Filmen. Leitwertoszillationen während des Schichtwachstums belegen das Lage-für-Lage Wachstum der Bismutschichten in Bilagen (Kap.5.1).
- Die G(T)-Messungen in Kap. 5.2 lassen sich mit metallischen Oberflächenzuständen und halbleitendem Volumenbereich verstehen. Aus der Abnahme der Aktivierungsenergie mit der Schichtdicke wird der Halbleiter-Halbmatal Übergang bei $d=45 \text{ nm}$ erwartet.
- G(B)-Messungen in Kap. 5.3 an reinen Bi(111)-Filmen zeigen eine Peak-Schulter Struktur. Die Schulter resultiert aus der hohen Beweglichkeit der Oberflächenladungsträger, verbunden mit dem klassischen Magnetoleitwerteffekt. Der Peak entsteht durch Schwache Anti-Lokalisierung, zum einen durch die Ladungsträger im Oberflächenzustand, aber auch durch Volumenladungsträger, die in oberflächennahen Schichten gestreut werden. In Verbindung mit Halleffekt-Messungen wurde eine Ladungsträgerdichte des Oberflächenzustandes von $n=3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und $p=4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und eine Oberflächenleitfähigkeit von $\sigma_s \approx 0.5 \text{ mS}/\square$, in Übereinstimmung mit Messungen anderer Gruppen, bestimmt.
- Die Adsorption von Bi-Atomen reduziert die Beweglichkeit des Oberflächenzustandes, lässt

die Ladungsträgerkonzentration aber unverändert. Anders im Fall von Fe, Co und Tb, hier erkennt man zum einen eine stärkere Abnahme der Mobilität im Vergleich zu Bi, zum anderen aber ändert sich die Ladungsträgerkonzentration im Oberflächenzustand. Fe und Co führen zu einer starken Erhöhung der Löcherkonzentration p , während Tb die Elektronenkonzentration n leicht erhöht. (Kap. 5.4.2 und 5.4.5.2)

- Im Fall von Tb auf Bi-Filmen muss Nukleation auf der Oberfläche, auch bei tiefen Temperaturen, berücksichtigt werden, um die $G(\delta\Theta)$ -Kurven (Abb. 5.22) zu verstehen und seinen Einfluss auf die $G(B)$ -Messungen heraus zu rechnen (Kap. 5.4.5).
- Der unterschiedliche Einfluss der Adsorbate auf den Leitwert hängt entscheidend mit den Adsorptionsplätzen zusammen. DFT-Rechnungen in Kapitel 5.4.4 zeigen, dass Co und Fe in die erste Lage der Bi-Schicht eindringen und dort das Kristallgitter verzerren. Bi-Atome hingegen ordnen sich oberhalb der Schicht als Adatome an.
- Die magnetischen Adsorbate Fe, Co und Tb führen zu einer Änderung des WAL-Charakters, oberhalb einer kritischen Bedeckung beobachtet man WL-Charakter (Abb. 5.20 und 5.29).

Bei Anwesenheit magnetischer Momente auf der Oberfläche wird das Verbot der Streuung zwischen Kramers Paaren aufgehoben. Rückstreuung um 180° in Einzelstreuprozessen ist nun möglich. Dadurch, dass die magnetischen Momente der Adsorbate zufällig auf der Oberfläche ausgerichtet sind, verlieren die Ladungsträger beim Streuprozess an diesen magnetischen Momenten jegliche Information über ihre Spinausrichtung vor dem Stoß. Somit ist die Spinausrichtung der Ladungsträger nicht mehr entscheidend bei der Überlagerung der Wellenfunktionen in Rückstreurichtung und es ergibt sich Schwache Lokalisierung, anstatt einer Verstärkung der Anti-Lokalisierung. Des Weiteren ist durch mögliche Hybridisierung der Atomorbitale mit den Oberflächenzuständen eine Änderung der Bandstruktur und damit verbundenen Spinstruktur nicht ausgeschlossen, was offensichtlich zu Änderungen der Quantenkorrekturen in $G(B)$ nach sich ziehen würde.

Gestufte Bi(110)-Filme auf Si(557)

Nach der Untersuchung atomar glatter und homogener Bi-Filme auf Si(111), mit seinen interessanten elektronischen Eigenschaften, stellt sich die Frage, inwiefern sich die Eigenschaften ändern, wenn die Filme strukturiert sind. Also zum Beispiel gestuft sind und damit eine Vorzugsrichtung aufweisen. *Wells et al.*[28] zeigten kürzlich mit SARPES-Messungen, dass die gestufte Bi(114)-Oberfläche eines Bi-Kristalls eindimensionale topologische Kantenzustände (engl. *edge states*) beherbergt, die sich durch eine lineare Dispersion auszeichnen. Die Fermi-Fläche besteht aus zwei parallel verlaufenden Linien, die eine entgegengesetzte Spinausrichtung haben. Anders als bei der Bi(111)-Fläche erhält man also aufgrund der Topologie der Oberfläche eine Spinaufspaltung anstatt durch den Rashba-Effekt. Dies ist in der Hinsicht interessant, dass topologische Kantenzustände für den Quanten-Spin-Hall-Effekt verantwortlich gemacht werden. Anders als im Fall des Quanten-Hall-Effektes, erhalten solche Randkanalzustände im Quanten-Spin-Hall-Effekt die TR-Symmetrie und können daher auch nur ohne magnetisches Feld existieren [28, 186, 187]. Topologische Isolatoren wurden in Kap. 2.5 näher diskutiert. Die Untersuchungen an Bi(114) haben jedoch den Nachteil, dass sie an der Oberfläche eines Bi-Kristalls gemacht wurden. Jegliche metallische Transporteigenschaften der topologischen Randkanäle werden durch das halbmetallische Volumen aber komplett überdeckt. Daher schlagen die Autoren vor, die (114)-Oberfläche von $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ zu untersuchen, da dieses ein isolierendes Volumen bei in etwa gleichen Oberflächenzuständen aufweisen soll.

Der Ansatz in der hiesigen Arbeit ist jedoch ein anderer. Da bei dünnen Bi-Filmen wie bereits ausführlich diskutiert das Volumen halbleitend ist, könnte man versuchen eine der (114) ähnlichen Oberfläche durch Expitaxie dünner Schichten zu erzeugen. Ziel der Arbeit ist also zunächst einmal, gestufte Bi-Filme herzustellen. Der einfachste Ansatz hierbei ist das Wachstum auf einem gestuften Substrat, in der Hoffnung, dass die Stufung auf den Film übertragen werden kann. Die hier vorgestellten Messungen entstanden zu einem großen Teil im Zuge der Masterarbeit von Herrn *Saddam Banyoudeh* und werden hier nochmals ausgewertet und mit den Messergebnissen der voran gegangenen Kapitel in den Kontext gesetzt.

In der Folge wird das epitaktische Wachstum von Bi-Filmen auf Si(557) untersucht. Dabei zeigte sich nach vielmaligen Versuchen, dass es nicht möglich ist, Bismut epitaktisch auf der reinen Si(557)-Fläche zu wachsen. Die Filme zeichnen sich durch eine hohe Unordnung aus und zeigen im SPA-LEED lediglich unstrukturierte ringartige Strukturen von fehlorientierten Bi(111)-Kristallen, ohne eine Vorzugsrichtung aufzuweisen. Anders aber die Situation auf der mit einer Bi-Benetzungsschicht versehenen Si(557)-Oberfläche. Wie im Kapitel 6.2 gezeigt werden wird, ist auf einer bestimmten $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Phase ein epitaktisches Wachstum von Bi(110)-Filmen möglich, die darüber hinaus noch eine Stufung aufweisen. In Transport und Magnetotransportmessungen (Kap. 6.3) zeigt sich zudem ein anisotroper Charakter der Leitfähigkeit mit metallischen Zuständen entlang der Stufenkanten.

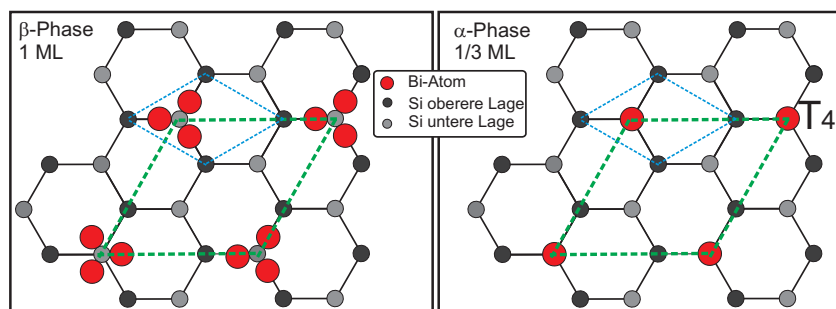


Abbildung 6.1.: Strukturmodell der zwei möglichen $\sqrt{3}$ -Phasen. Der energetisch günstigste Adsorptionsplatz ist der T₄-Platz oberhalb eines Si-Atoms der zweiten Lage. Bei der α -Phase (1/3 ML) sitzt dort ein Bi-Atom, bei der β -Phase (1 ML) sind es 3. Nach [188].

Zunächst wird aber die Präparation und Eigenschaften der Bi $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ /Si(557) Oberfläche vorgestellt.

6.1 Struktur der Bi-Benetzungsschichten auf Si(557)

Die Bi $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Struktur auf der Si(111) Oberfläche ist sehr gut untersucht [189, 190, 191, 192, 188]. So konnte gezeigt werden, dass es zwei stabile Phasen gibt, die nach ihrer nominellen Bedeckung unterschieden werden können. Die α - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Phase mit $\Theta = 1/3$ ML und β - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Phase mit $\Theta = 1$ ML. Abb. 6.1 zeigt das Strukturmodell dieser beiden Phasen. Energetisch günstig ist die Adsorption der Bi-Adatome auf T₄-Plätzen oberhalb eines Si-Atoms der zweiten Atomlage. In der α -Phase sitzt an jeder $\sqrt{3}$ -Position ein Bi-Atom, somit befinden sich in einer Einheitszelle 1 Bi-Atom, jedoch 3 Siliziumatome, sodass $\Theta = 1/3$. In der β -Phase hat man an jeder $\sqrt{3}$ -Position ein Bi-Trimer, sodass nun drei Bi-Atome in der Einheitszelle sind und damit ist $\Theta = 1$. Zur Präparation der beiden Phasen dampft man in der Regel deutlich mehr als eine Monolage Bismut auf die Si(111)-7 \times 7 Oberfläche bei erhöhter Temperatur (300-500 °C) auf. Ist die Temperatur hoch genug, so bleibt nur eine Benetzungsschicht zurück, dabei entscheidet die Temperatur der Oberfläche wie groß die Gleichgewichtsbedeckung ist. Bei niedriger Temperatur erhält man die 1 ML- β -Phase, mit steigender Temperatur nimmt die Bedeckung ab und erreicht bei $T \approx 500$ °C 1/3 ML, entsprechend der α -Phase. Zwischen α - und β -Phase liegt die Bedeckung zwischen 1/3 und 1 ML, dabei besteht die Oberfläche aus Teilbereichen mit α und β -Phase und wird daher auch als Mix-Phase bezeichnet.

Drei verschiedene Präparationen bei variierender Temperatur auf der Si(557)-Oberfläche sind in Abb. 6.2 gezeigt und weisen charakteristische Eigenschaften auf. So erkennt man bei einer Präparationstemperatur von 300-400 °C, dass die 7 \times 7-Reflexe zu Gunsten der $\sqrt{3}$ -Reflexe (grüne Raute) verschwunden sind und scharf sind. Das bedeutet, dass die $\sqrt{3}$ -Domänen weit ausgeht sind. Durch die Beschränkung der Domänen auf die Stufen sind die Reflexe senkrecht zu den Stufen verbreitert. Der *steptrain* ist zwischen den Hauptreflexen unterdrückt, allerdings sind um die Si-Hauptreflexe noch deutlich aufgespaltene Reflexe mit $\Delta k = 1/17$ BZ auszumachen (weißer Kreis). Die generelle Stufenstruktur der Si(557) ist also weiterhin vorhanden und wurde nicht durch die Adsorption zerstört.

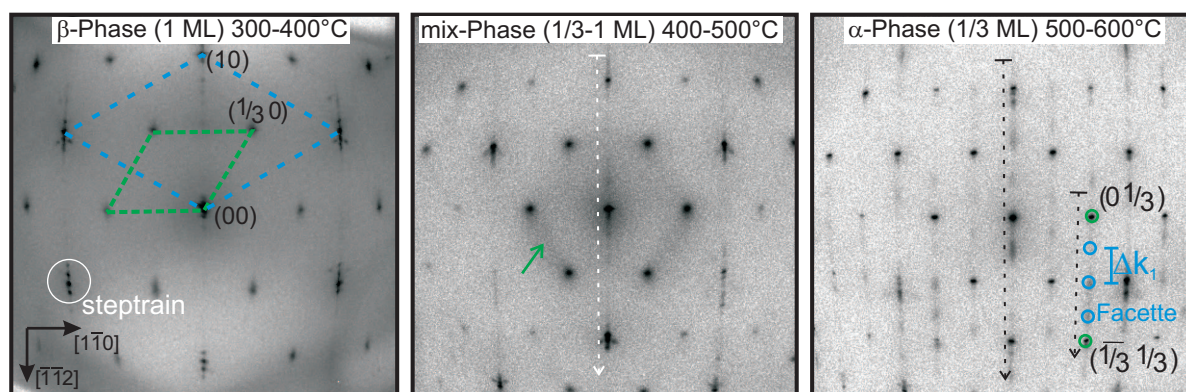


Abbildung 6.2.: LEED-Bilder der Bi-Benetzungsschicht nach der Präparation in unterschiedlichen Temperaturbereichen. Es ergibt sich die β -Phase bei $T=300-400$ °C, α -Phase bei $T>500$ °C und eine Mix-Phase dazwischen ($E=140$ eV, $S=6.0$). Entlang der gestrichelten Linien wurden Linienprofile vermessen (siehe Abb. 6.3).

Bei $T=400-500$ °C (mittleres Bild) ergibt sich eine deutlich diffusere Intensitätsverteilung, so erkennt man etwa schattenartige Intensitäten zwischen den erste Ordnungs- $\sqrt{3}$ -Reflexen, die auf eine gewisse Unordnung der Oberfläche hindeuten. In dieser Mixphase ergeben sich Teildomänen die jeweils aus α - und β -Phase bestehen, sodass die Oberfläche sich durch eine geringere Ordnung auszeichnet als die perfekte 1 ML- β -Phase. Der Si(557)-*steptrain* ist nicht mehr zu erkennen, dafür erkennt man andere Facettenspots, sodass man erwarten kann, dass eine Umstrukturierung der Stufung stattgefunden hat. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Prozesstemperatur nun höher ist und so mehr thermische Energie für die Bewegung von Silizium und Bi-Atomen zur Verfügung steht.

Bei Temperaturen über 500 °C (rechtes Bild) ergibt sich erneut ein anderes Beugungsbild, das der α -Phase entspricht. Die Reflexe sind erneut deutlich schärfer, da nun so viele Bi-Atome desorbiert sind, dass die Oberfläche großflächig nur noch aus der 1/3 ML- α -Phase besteht. Signifikant ist hier das Auftreten zusätzlicher Reflexe (rechtes Bild, blau markiert) mit konstantem Abstand $\Delta k_1 = 28.5 \pm 1.5\%$ BZ, die neuen Facetten zugeordnet werden können. Diese Reflexe tauchen nicht nur zwischen den Si-Hauptreflexen senkrecht zu den Stufen auf, sondern auch zwischen den $\sqrt{3}$ -Reflexen. Dies zeigt, dass die $\sqrt{3}$ -Struktur auf den Terrassen dieser neuen Facetten existiert und zusätzlich, dass die $\sqrt{3}$ -Domänen verschiedener Terrassen miteinander korreliert sind. Die erhöhte Präparationstemperatur führt also zu einer geordneten Facettenstruktur, die sich von der 1 ML-Phase deutlich unterscheidet.

Um die Stufung der Oberfläche besser zu verstehen, wurden k_{\perp} - k_{\parallel} -Plots der verschiedenen Phasen angefertigt (siehe dazu auch Kap. 2.1.4). In $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung wurden bei variierender Energie/Streuphase Linienprofile entlang der gestrichelten Pfeile in Abb. 6.2 aufgenommen und als Intensitätsdarstellung gegen k_{\parallel} und k_{\perp} aufgetragen. (Abb. 6.3). In allen drei Darstellungen deutlich zu erkennen sind sich schneidende Beugungsstangen, ein klares Indiz für das Vorhandensein von Facetten auf der Oberfläche. In a) ist der k_{\perp} - k_{\parallel} -Plot der Mix-Phase gezeigt. Hier werden die senkrechten, zur $[111]$ -Richtung gehörenden Stangen von zwei Gruppen unterschiedlich stark geneigter Stangen gekreuzt. Einmal die orangefarbenen Stangen mit einem Abstand von $\Delta k_{\parallel,1} = (28.5 \pm 1.5)\%$ BZ, sowie die blau gekennzeichneten Stangen mit $\Delta k_{\parallel,2} = (60 \pm 2)\%$ BZ. Aus dem reziproken Abstand schließt man auf die mittlere Terrassenbreite Γ . Mit $\Gamma = 2\pi/\Delta k$

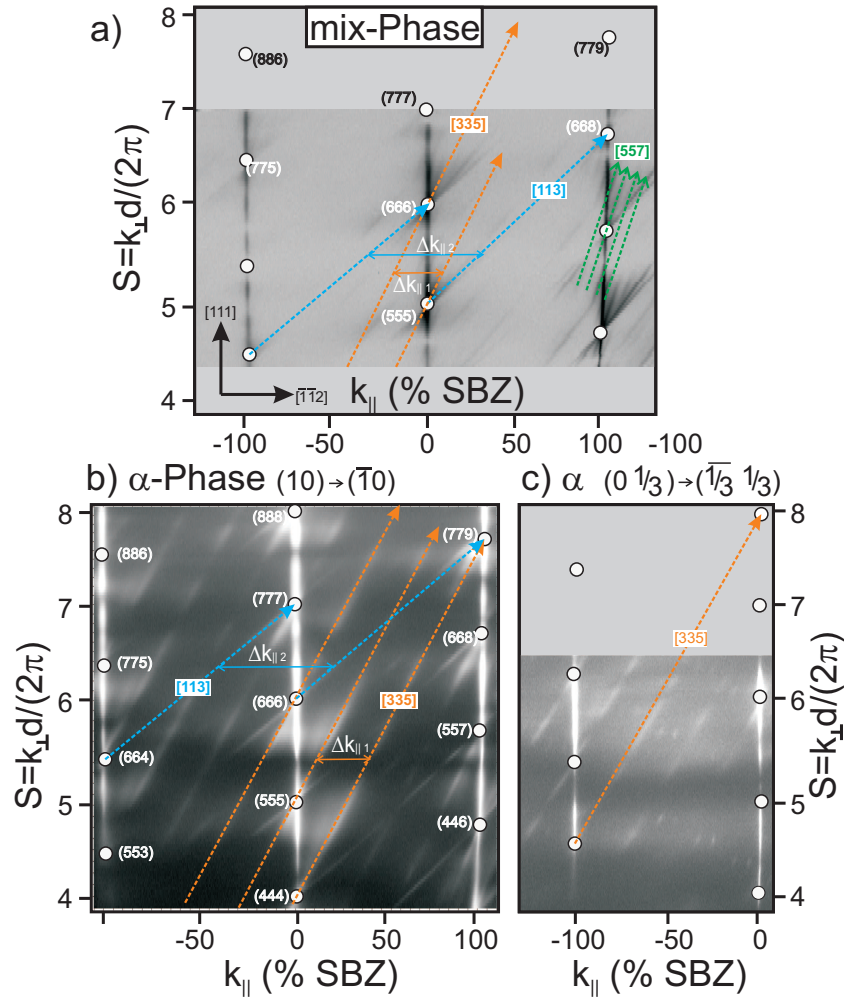


Abbildung 6.3.: k_{\perp} - k_{\parallel} -Plots der Mix und α -Phase. Die Stangen der [111] werden durch mehrere Facettenstangen geschnitten. Dominant sind dabei die [113]- und [335]-Facetten. Der k_{\perp} - k_{\parallel} -Plot in c) durch die $\sqrt{3}$ -Reflexe zeigt, dass die Terrassen der [335]-Facetten eine $\sqrt{3}$ -Rekonstruktion tragen und diese miteinander korreliert sind.

ergibt sich

$$\Gamma_1 = 3.5 \pm 0.2 a_{\text{Si}}, \quad \Gamma_2 = 1.7 \pm 0.1 a_{\text{Si}}.$$

Die blauen Linien verbinden z.B. die eingezeichneten Bragg-Punkte (668) und (555). Aus der Differenz der beiden erhält man die Orientierung dieser Facette zu: $[668] - [555] = [113]$. Die orangefarbene Facette schneidet (779) und (444) (besser zu sehen in b), daher entspricht dies einer $[779] - [444] = [335]$ -Orientierung. Neben diesen zwei Hauptfacetten erkennt man noch Reste der (557)-Stufung (grüne Pfeile) mit $\Delta k \approx 6\%$ BZ. Die noch mäßige Präparationstemperatur hat noch nicht komplett zur Umfacettierung der Oberfläche geführt. So existieren neben den schmalen Terrassen der [335] auch noch breitere (111)-Terrassen von der ursprünglichen Si(557)-Struktur. Auf beiden Terrassen bildet sich die Überstruktur aus (siehe Abb. 6.4).

Eine vollständige Umfacettierung ist aber bei $T > 500$ °C vollzogen, wie der Heringplot der α -Phase in b) zeigt. Die Stangen der [335] sind nun deutlich stärker ausgeprägt, die der [113] noch vorhanden aber auch schwächer, jedoch ist die [557]-Orientierung vollständig verschwunden. Die

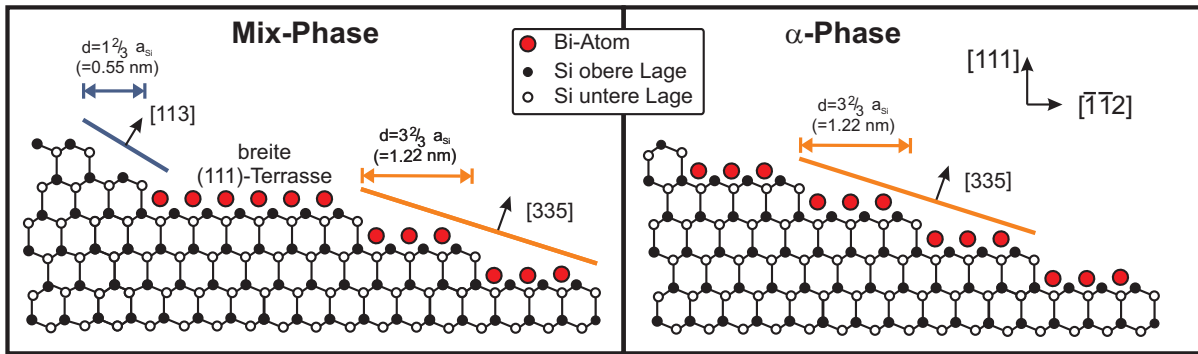


Abbildung 6.4.: Modell der Stufenstruktur von Bi auf Si(557) in der Mix-Phase und der α -Phase. Die [335]-Stufung ist dominant in der α -Phase, während bei niedrigeren Präparationstemperaturen noch breitere Si(111)-Terrassen vorhanden sind, auf denen sich die $\sqrt{3}$ -Rekonstruktion ausbildet.

Oberfläche besteht nun also überwiegend aus (335)-Facetten, also einer Abfolge von Stufen der Breite $3\frac{2}{3} a_{\text{Si}}$ und Höhe d_{Si} , wie es in der Schemazeichnung 6.4 gezeigt ist¹. Diese Stufen sind breit genug, um eine Einheitszelle der $\sqrt{3}$ -Struktur (sie ist nur $2a_{\text{Si}}$ breit) zu tragen, sodass sich auf den Terrassen der (335) eine $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Rekonstruktion ausbildet. Den Beweis, dass dies tatsächlich der Fall ist liefert der Heringplot in c), der durch Linienprofile erzeugt wird, die entlang der $\sqrt{3}$ -Reflexe (in 6.2 (rechts) durch den kurzen gestrichelten Pfeil angedeutet) ausgerichtet sind. Hier ist nur eine Facette auszumachen, die wieder der [335] entspricht.

6.2 Wachstum gestufter Bi(110)-Filme auf Alpha-, Beta- und Mix-Phase Bi/Si(557)

Die drei verschiedenen Benetzungsschichten α -, β - und Mixphase werden nun als Substrat für das Schichtwachstum von Bismut verwendet. Schon auf dem nominell ebenen Si(111) zeigt sich, dass das Wachstum auf der Bi- $\sqrt{3}$ -Oberfläche fundamental anders ist als auf der reinen Si(111)- 7×7 . In Abb.6.5 a) ist das LEED-Muster eines 30 ML Films² gezeigt, der auf einer Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - β -Phase auf Si(111) gewachsen wurde ($T_{\text{dep}} = 2000 \text{ K}$, $T_{\text{anneal}} = 450 \text{ K}$). Hierbei ergibt sich ein sehr kompliziertes Muster mit einer Vielzahl an Beugungsreflexen. Jedoch wurde es schon in der Literatur von *Yaginuma et al* berichtet und diskutiert [103]. Wie die Analyse zeigt, setzt sich das Bild aus insgesamt sechs Domänen einer Bi(110)-Fläche zusammen, die gegeneinander rotiert sind. Dabei ordnen sich die Bi(110)-Kristalle derart an, dass die Diagonale der Einheitszelle entlang einer der zur $[\bar{1}\bar{1}2]$ äquivalenten-Richtungen orientiert ist, wie es in c) schematisch gezeigt ist. Durch die Streckung der pseudo-kubischen Einheitszelle ergibt sich ein Winkel von etwa 3° zwischen der zweiten Diagonalen und der $[\bar{1}10]$ -Richtung. Der Mechanismus der die Bi(110)-Kristalle auf der Oberfläche einrasten lässt hängt mit der $\sqrt{3}$ -Periodizität zusam-

¹Die [335] ist deutlich steiler als die [557]-Stufung, sodass die Erhaltung der globalen Ausrichtung der Oberfläche in [557]-Richtung durch entgegengesetzte Facetten gewährleistet werden muss, die aber nicht in regelmäßiger Anordnung vorhanden sind und daher vom SPA-LEED nicht detektiert werden können.

²1 ML bezieht sich hier auf eine Flächendichte von $9.82 \times 10^{14} \text{ Atomen/cm}^2$, entsprechend einer Bi(110)-Lage, da dies auf Bi- $\sqrt{3}$ die bevorzugte Wachstumsrichtung ist.

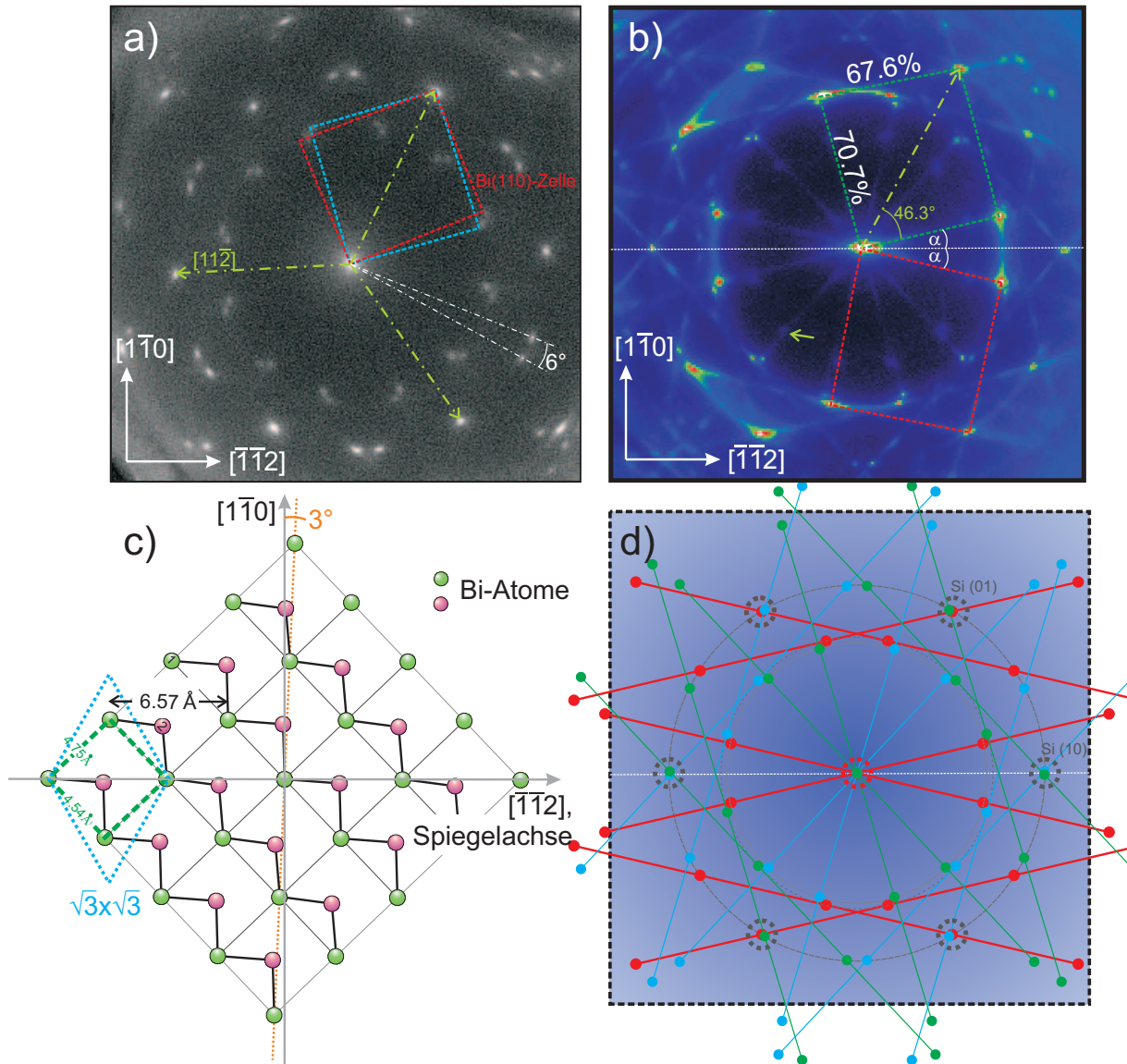


Abbildung 6.5.: Bi(110)-Filme auf $\sqrt{3}$ -Benetzungsschichten. a) LEED-Bild eines 30 ML-Films auf Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - β -Si(111) ($E=90$ eV). b) LEED-Bild eines 30 ML Films auf Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - β -Si(557) ($E=70$ eV). c) Modell einer Domäne im Realraum mit Orientierung der Einheitszellendiagonalen entlang einer $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung. d) Modell mit sechs gegeneinander rotierten Domänen im k-Raum reproduziert die Messung in b) sehr gut.

men. So stimmen $\sqrt{3} \cdot a'_{\text{Si}} = 6.65 \text{ \AA}$ und die Diagonale der Bi(110)-Einheitszelle mit 6.57 \AA mit einer Abweichung von 1.2% überein. In c) sind die entsprechenden Einheitszellen in blau und grün markiert. Entlang einer der drei von der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ vorgegebenen Richtungen können sich die Kristalle nun mit jeweils einer ihrer beiden Diagonalen anordnen, sodass in der Summe 6 Konfigurationen möglich sind und folglich das beobachtete LEED-Muster resultiert.

Ein ganz ähnliches Bild zeigt sich, wenn man den Bismutfilm auf der Bi- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Phase auf Si(557) präpariert, wie es in b) zu sehen ist. Wieder ergeben sich Reflexe, die denen der auf dem flachen Substrat gewachsenen Filme entsprechen (a). Die Länge der Bi(110)-Einheitszelle wurde zu $k_1 = (67.6 \pm 2.0)\% \text{ BZ}_{\text{Si}}$ und $k_2 = (70.7 \pm 1.7)\% \text{ BZ}_{\text{Si}}$ bestimmt. Womit sich die Gitterkonstanten $4.93 \pm 0.18 \text{ \AA}$ und $4.71 \pm 0.11 \text{ \AA}$ ergeben, die etwa 3% größer sind als die Volumenwerte, die in der Zeichnung in c) eingetragen sind. Dies liegt an der Anpassung des wachsenden Films an die Unterlage und die durch die $\sqrt{3}$ -Struktur vorgegebene Periodizität. Allerdings scheint der Einfluss der Stufen des Substrats gering zu sein, da die Fläche im Wesentlichen isotrop erscheint – alle 6 Domänen haben die gleiche Intensität. Zusätzlich zu den Reflexen zeigen sich nun geradlinige, streifige Intensitäten die die Reflexe miteinander zu verbinden scheinen. Darüber hinaus erkennt man auf diesen Streifen noch Reflexe (grüner Pfeil in b), diese könnten auf Facetten der Bi-Kristalle zurückzuführen sein, allerdings würden diese Facetten dann in sechs verschiedene Richtungen weisen, sodass keine Vorzugsrichtung vorläge und man in Transportmessungen keinerlei anisotropes Verhalten zu erwarten hätte.

6.5 d) zeigt eine Rekonstruktion des Musters in b), es wurde erzeugt indem drei Bi(110) Domänen (mit Dimensionen wie in der Messung bestimmt) jeweils entlang der drei äquivalenten $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtungen orientiert wurden und die dazu gespiegelten Domänen hinzugefügt wurden. Alle beobachteten Reflexe können damit übereinstimmend gefunden werden, was das oben entwickelte Modell nochmals untermauert.

Präpariert man einen Bi-Film in ähnlicher Weise auf einer Mix-Phase so weicht das LEED-Bild von dem zuvor diskutierten Muster mit 6 Domänen ab. Wie Abb. 6.6 a) zeigt, sind nun nur noch 2 der 6 Domänen dominant und verursachen ein Muster aus sich kreuzenden Linien mit Beugungsreflexen darauf. Die zwei dominanten Domänen schließen mit ihrer $[001]_{\text{rhom}}$ -Richtung zur $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung des Substrats (senkrecht zu den Si-Stufen) einen Winkel von $\alpha = 13.7^\circ$ ein, sodass die Diagonale entlang einer zur $[\bar{1}\bar{1}0]$ äquivalenten Richtung (rot gestrichelte Linie in 6.6 c) ausgerichtet ist, die andere entlang einer $\sqrt{3}$ -Richtung. Der Grund, warum im Vergleich zur Präparation auf der Beta-Phase nun 4 der 6 Domänen unterdrückt werden und nur noch 2 dominant sind, liegt an der unterschiedlichen Stufenanordnung der beiden Grenzflächen. Wie wir oben sahen, existieren bei der Mix-Phase durch die höhere Prozesstemperatur bereits $[335]$ -Facetten mit einer Terrassenbreite von $3\frac{2}{3} a_{\text{Si}}$, im Vergleich zu deutlich breiteren (111)-Terrassen bei der Beta-Phase. Dementsprechend sind die nun darauf wachsenden Bi(110)-Kristalle auf der Mix-Phase senkrecht zu den Stufen stärker eingeschränkt. Nur die in c) eingezeichnete und um -13.7° rotierte Domäne gewährleisten eine ungestörte Anordnung der Atome entlang der Terrasse über etwa fünf Gittereinheiten hinweg. Die Terrassenbreite ist durch den gestrichelten, orangefarbenen Kasten angedeutet. Die Domäne die in Abb. 6.5 c) gezeigt ist, würde andererseits schon nach nur etwa zwei Gittereinheiten an eine Stufenkante stoßen, sodass das Wachstum dieser Domäne erschwert wird.

Neben den Hauptreflexen der Bi(110)-Fläche (orangefarbene Kreise in a) tauchen nun aber sehr deutlich zusätzliche Reflexe auf (blau), die mit Änderung der Energie entlang der Linien (je-

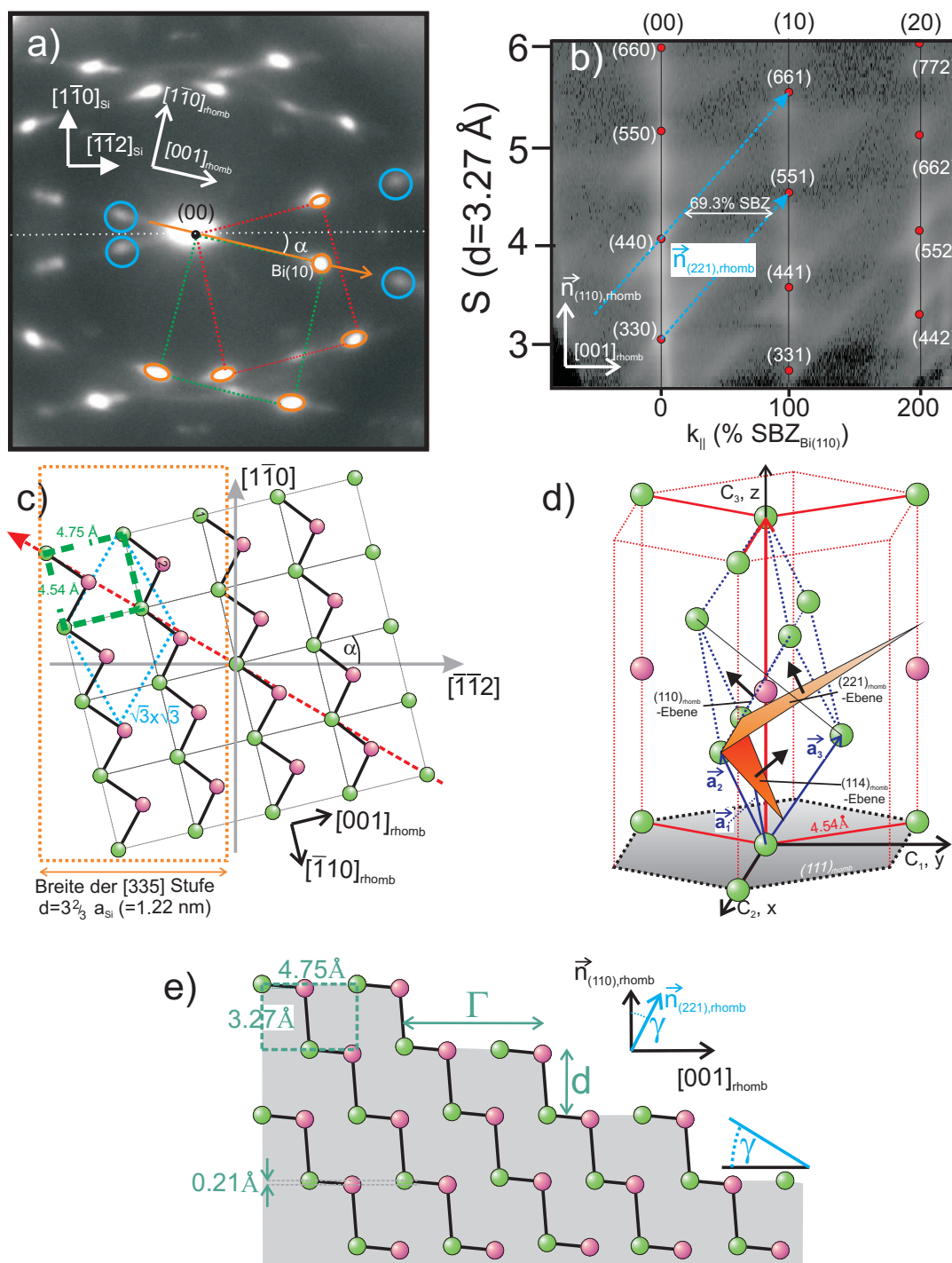


Abbildung 6.6.: 30 ML Bi-Film präpariert auf Mix-Phase auf Si(557). a) LEED-Muster bei $E=83 \text{ eV}$. Nur noch zwei der sechs (110)-Domänen sind dominant und zeigen Facettenspot, die mit der Energie wandern. b) k_{\parallel} - k_{\perp} -Plot entlang der $[001]_{\text{rhomb}}$ -Richtung. Es ergibt sich eine Facette in der (221)-Ebene. c) Modell der Kristallorientierung im Realraum, relativ zur Si-Unterlage. d) Orientierung der (221)-Fläche in der Volumeneinheit von Bismut, relativ zur (110)-Ebene, auch die (114)-Ebene ist mit eingezeichnet. e) Stufenstrukturmodell eines (110) Kristalls mit 7.1 \AA ($1.5 a_{\text{Bi}(110)}$) breiten Stufen. Die Ausrichtung ist senkrecht zur $(221)_{\text{rhomb}}$ -Ebene.

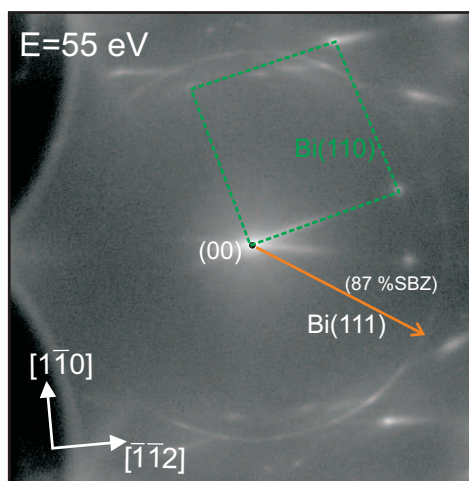


Abbildung 6.7.: LEED-Bild eines 30 ML Bi-Films, gewachsen auf der Alpha-Phase auf Si(557). Neben den zwei Bi(110)-Domänen, wie auf der Mix-Phase, erhält man hier zusätzlich einen Bi(111)-Ring.

weilige [001]-Richtung) wandern und daher auf Facetten zurückzuführen sind. Der Film ist also gestuft.

Der k_{\parallel} - k_{\perp} -Plot in Abb. 6.6 b) zeigt deutlich, gegenüber der Normalen zur $(110)_{\text{rhomb}}$ -Ebene (vertikale Richtung) verkippte Facettenstangen, die einen Abstand von $\Delta k = 69.3 \pm 1.0\% \text{ SBZ}_{\text{Bi}(110)}$ haben. Dies entspricht einer Stufenbreite von $\Gamma = (1.45 \pm 0.05) \cdot a_{\text{Bi}(110)} = 1.45 \cdot 4.93 \text{ \AA} \approx (7.1 \pm 0.2) \text{ \AA}$, bei einer zu Grunde gelegten Stufenhöhe von 3.27 \AA [193]. Abb. e) zeigt ein Stufenstrukturmodell der Bi(110) Fläche mit $1\frac{1}{2}$ -Gittereinheiten breiten Terrassen. Die Bindungen zu den nächsten Nachbaratomen sind nicht in der (110)-Ebene orientiert, sondern nach unten gerichtet [25, 193], wodurch eine solche Stufung der Oberfläche plausibel erscheint. Diese Stufung hat einen Winkel zur (110)-Ebene von $\gamma = \arctan \frac{3.27}{7.1} = 24.7^\circ$. Einen solchen Winkel schließt die $(110)_{\text{rhomb}}$ -Ebene mit der $(221)_{\text{rhomb}}$ -Ebene ein (siehe Anhang A.1). Dies kann man auch aus der Konstruktion der Bragg-Punkte im k_{\parallel} - k_{\perp} -Plot in b) entnehmen. Die Indizierung der Facette ist demnach ebenfalls: $(551)-(330)=(221)_{\text{rhomb}}$. Zur Veranschaulichung ist in 6.6 d) erneut die Volumeneinheit zelle von Bismut gezeigt und die rhomboedrischen Flächen (110), (221), (111) und (114) eingezeichnet. Man sollte darauf hinweisen, dass im rhomboedrischen Kristallsystem die Vektoren $[hkl]$ im Allgemeinen nicht senkrecht auf der Ebene (hkl) stehen. Daher sind die Normalenvektoren auf den in 6.6 d) eingezeichneten Ebenen auch nicht beschriftet. Im Anhang wird beispielhaft die Indizierung des auf der (221)-Ebene senkrechten Vektors in kartesischen Koordinaten vorgeführt.

Es ist zunächst nicht ohne weiteres klar, ob es Auslöschungen von Bragg-Punkten in diesem Gitter gibt. Hierzu muss man die Strukturamplitude betrachten. Dies wird im Anhang A.2 diskutiert. Dabei findet man die Bedingung für Auslöschung wenn: $h+k+l=16, 31, 63$, usw. Dies betrifft also nur Bragg-Punkte außerhalb des betrachteten Bereichs in 6.6 b).

Bei der Präparation von Bi-Schichten auf der Alpha-Phase würde man entsprechend der obigen Diskussion eine noch perfektere Anordnung der zwei Bi(110)-Domänen erwarten, da auch die Stufung in [335]-Richtung deutlich ausgeprägter und perfekter ist und so alle anderen Domänen unterdrückt werden müssten. Abb. 6.7 zeigt das entsprechende LEED-Muster. Zusätzlich zu den

beiden erwarteten Bi(110)-Domänen erhält man einen Beugungsring bei 87% SBZ, der auf rotationsfehlgeordnete Bi(111)-Kristalle schließen lässt. Jedoch liegt dies daran, dass in diesem Fall bei der Präparation der Alpha-Phase die Temperatur im Bereich von 600 °C zu hoch gewählt wurde und teilweise die Oberfläche schon wieder aus blankem Silizium besteht, welches sich in 2D-LEED-Bildern in der Existenz von 7×7 -Reflexen äußert (hier nicht gezeigt). Die 7×7 führt dann wieder zur Ausbildung der Bi(111) Oberflächenausrichtung (siehe Kap. 5.1) und stört die fehlerfreie Ausbildung der Bi(110)-Domänen. Prinzipiell sollte es durch homogeneres Heizen der Probe möglich sein eine perfekte Alpha-Phase zu präparieren, die dann die gewünschte Stufung in $[335]$ aufweist, ohne dass in Teilbereichen die Bi-Atome schon komplett desorbiert sind. Auf einer solchen Fläche erwartet man dann auch noch besser gestufte Bi(110)-Filme.

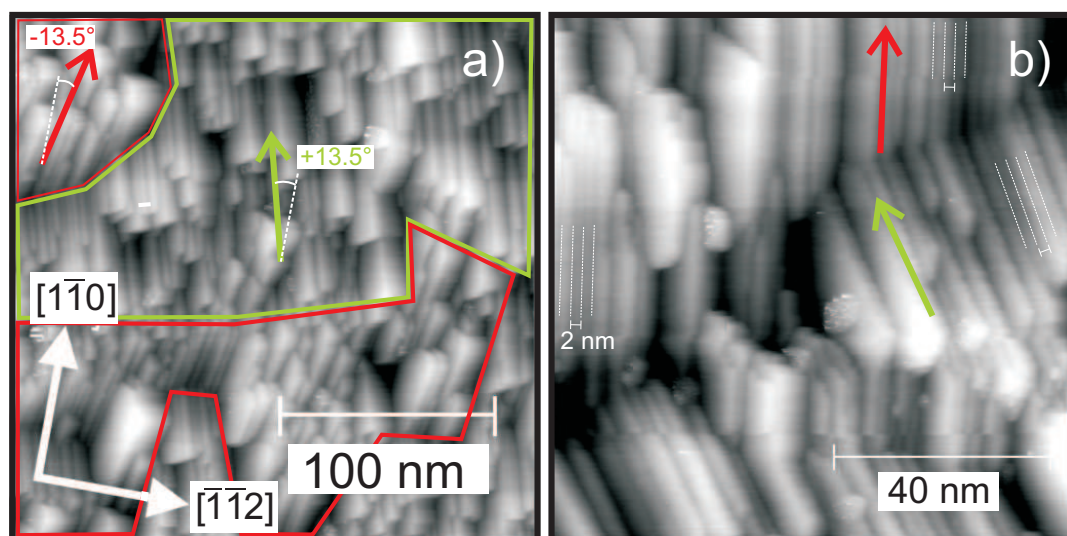


Abbildung 6.8.: STM-Messungen an einem 30 ML Bi(110)-Film gewachsen auf der $\sqrt{3}$ Mix-Phase. a) Die Oberfläche besteht aus zwei Domänen, die gegenüber der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung des Substrats um $\pm 13^\circ$ rotiert sind. b) Die Oberfläche weist Stufen mit einer Periodizität von ≈ 2 nm auf. Die Messungen wurden von M. Sc. Christian Brand durchgeführt. $U=+1$ V, $I=10$ pA.

Zur Überprüfung der mittels Elektronenbeugung gefundenen Modellvorstellung der Filmstruktur wurden STM-Messungen³ an Filmen unter gleichen Präparationsbedingungen gemacht. Man erkennt länglich ausgedehnte rechteckige Kristallite, was dafür spricht, dass auch die Einheitszelle kubisch ist und zur Bi(110)-Fläche gehört. Eine atomare Auflösung konnte nicht erzielt werden, sodass der Beleg für die Existenz der pseudo-kubischen (110)-Zelle noch aussteht. Die Oberfläche besteht aber überwiegend aus zwei Domänen, die einen Winkel zur $[\bar{1}\bar{1}2]$ von etwa 13° einschließen (rot und grün umrandete Bereiche in a), in Übereinstimmung mit den LEED-Messungen. Die typische Ausdehnung der Kristallite beträgt einige Nanometer, es können aber bis zu 10×50 nm große Körner identifiziert werden. Die lange Seite verläuft, abgesehen von der 13° -Rotation, entlang der Stufenrichtung des Substrats. Die Kristallite sind also um ein Vielfaches größer als die Terrassen des Substrats (die (335)-Terrassen sind 1.2 nm breit) und überwachsen diese. Auch ist eine regelmäßige Stufung der Bi-Kristallite auszumachen, dies ist

³Die Messungen wurden von M. Sc. Christian Brand am hiesigen Institut durchgeführt

durch weiß-gestrichelte Linien in b) angedeutet. Man misst eine Periodizität von 2 nm senkrecht zu den Stufen. Nach den LEED-Messungen würde man allerdings eine Terrassenbreite von nur 0.7 nm erwarten. Hochauflösendere STM-Messungen könnten diese Diskrepanz beseitigen und die genaue Struktur klären. Allerdings bleibt festzustellen, dass die STM-Messungen die grundlegenden Eigenschaften der Oberfläche, also die Existenz von zwei (110)-Domänen mit Vorzugsrichtung entlang der Si-Stufen und eine Stufung des Films bestätigen konnten.

Nach Abb. 6.6 e) hat die Bi(221)-Fläche alle 7.1 \AA eine Stufe, also eine Stufendichte von 0.14 \AA^{-1} . Die Bi(114)-Fläche hat nach [28] im unrekonstruierten Fall 2 Stufen pro 14.2 \AA , bzw. 4 Stufen innerhalb der 28.4 \AA breiten 1×2 Zelle, dies entspricht ebenfalls einer Stufendichte von 0.14 \AA^{-1} . Aus diesem Grund können auch für die gestufte Bi(221)-Fläche interessante elektronische Eigenschaften erwartet werden. Im folgenden Kapitel werden daher die elektronischen Transporteigenschaften dieser anisotrop gestuften Filme untersucht und die Frage geklärt, ob es metallische Randzustände, die durch die Topologie geschützt sind, auf dieser Oberfläche gibt, ähnlich wie es bei Bi(114) beobachtet wurde [28].

6.3 Leitfähigkeitseigenschaften gestufter Bi(110)-Filme

Die Präparation der gestuften Bi(110)-Filme auf der $\sqrt{3}$ -Mixphase-Grenzfläche findet optimalerweise bei einer Substrattemperatur von 200 K, während der Bedampfung und einer Ausheiltemperatur bis zu 450 K statt. Dabei geht man analog wie bei der Präparation von Bi(111) vor (Kap 5.1) und wartet das Durchlaufen eines maximalen Leitwerts bei konstanter Temperatur ab, bevor die Probe wieder abgekühlt wird. Schichten mit $d=20-30$ ML ergeben typischerweise Leitwerte im Bereich von 1-2.5 mS. Dabei ist in allen präparierten Filmen eine Anisotropie, also ein höherer Leitwert entlang der Stufen als senkrecht dazu, nachweisbar. So ist $G_{||}$ ungefähr 30-50% größer als G_{\perp} .

Auch für die Bi(110)-Filme kann man zeigen, dass der Oberflächenzustand wesentlich für die Leitfähigkeit des gesamten Films verantwortlich ist. Abb. 6.9 zeigt den Verlauf von $\Delta G/G_0$ in Abhängigkeit der zusätzlichen Bi-Menge in ML bei einer Substrattemperatur von $T=10$ K. Durch die hinzu kommenden Streuzentren reduziert sich der Leitwert stark. Allerdings ist der Effekt bei $G_{||}$ deutlicher ausgeprägt als bei G_{\perp} und erreicht etwa -26% und damit eine etwas geringere Magnitude als auf Bi(111)-Filmen vergleichbarer Dicke (siehe Kap. 5.4.1). Bei G_{\perp} beträgt der maximale Abfall des Leitwerts lediglich -17%. Dies hängt damit zusammen, dass die Stufen des Bi(110)-Films, sowie die Korngrenzen bereits als Streuzentren wirken, wodurch auch der Leitwert in \perp -Richtung reduziert ist, und so die Zusatzbedeckung weniger Auswirkung zeigt. In $||$ -Richtung hingegen bewegen sich die Ladungsträger vor der Bedampfung zusätzlichen Bismuts ungehindert, sodass der Einfluss der neuen Streuzentren signifikanter ist. Somit ist auch für dieses System die Oberflächensensitivität bei Leitwertmessungen offensichtlich.

Darüber hinaus zeigt der Vergleich der Leitwertskurven in 6.9 noch eine Verschiebung des ersten Minimums beider Kurven zueinander (gestrichelte Linien in Grün und Orange). So liegt das Minimum bei 0.5 ML für die \perp -Richtung, aber erst bei 0.75 ML für die $||$ -Richtung. Dies ist in der Ableitung des Leitwerts nach der Schichtdicke deutlicher zu erkennen. Man beobachtet Oszillationen des Leitwertes durch das Lage-für-Lage Wachstum. Für $\Theta > 2$ ML sind beide

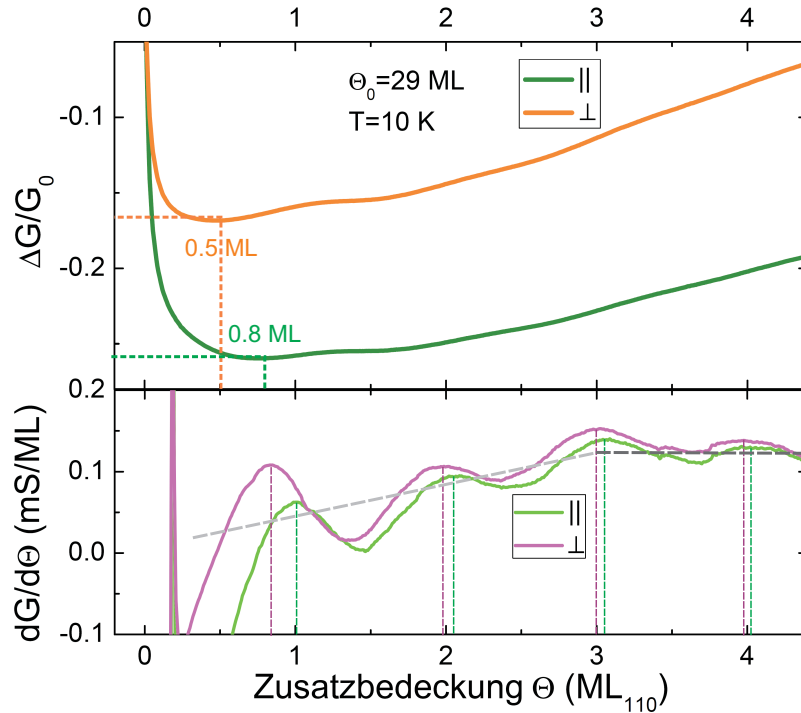


Abbildung 6.9.: Verlauf des Leitwerts während des zusätzlichen Bedampfens mit Bismut bei $T=10$ K auf 29 ML Bi(110). Der relative Leitwert nimmt stark ab, wobei der Effekt in paralleler Richtung ausgeprägter ist. Die Startwerte sind: $G_{0,\parallel} = 1.72$ mS und $G_{0,\perp} = 1.35$ mS. In der Ableitung des Leitwerts erkennt man die Oszillationen deutlich. \parallel - und \perp -Richtung sind zunächst gegeneinander verschoben, gleichen sich aber beide der ML-Eichung an.

Kurven dann aber wieder in Phase. Allerdings stimmen die Maxima der Ableitung mit der ML-Eichung des Schwingquarzes überein, dies gilt nicht für den Leitwert selbst. Er zeigt Maxima und Minima dazu verschoben.

Ein ähnliches Verhalten haben wir beim Wachstum von Pb auf Si(557) gesehen, bei dem die Leitwertmaxima der ersten Lagen auch nicht mit der vollen Monolage übereinstimmen. Dies wurde bei Pb auf die geänderte Perkolationsgrenze auf gestuften Flächen, sowie Quanten-Size-Effekte zurück geschoben. *Jnawali et al.* fanden bei der Homoepitaxie auf Bi(111) ebenfalls ein verspätetes Auftreten der Leitwertoszillationen und erklärten dies mit nicht perfektem Lage für Lage Wachstum und zunehmender Filmrauigkeit mit der Schichtdicke [30]. In Abb. 5.7 sieht man für Bi(111)-Filme das gleiche Verhalten. Die Ableitung von G ist dort ebenfalls in Phase mit der Bilagen-Eichung.

Die Ableitung in 6.9 steigt, abgesehen von den Oszillationen, in den ersten drei Monolagen ganz schwach linear an. Das bedeutet, dass G hier proportional zu Θ^2 in beiden Richtungen zunimmt. Erst für $\Theta > 3$ ML bleibt $dG/d\Theta$ konstant, sodass G also $\propto \Theta$ ist. Interessanterweise wurde bei Bi(111) von Beginn an ein $\propto \Theta$ -Zusammenhang gefunden und auf die lineare Zunahme des Volumenleitwertes mit der Schichtdicke, bei konstantem Oberflächenleitwert, bezogen. Diese Interpretation ist für Bi(110)-Filme auch sinnvoll. In den ersten vier ML nimmt der Leitwert nach Durchlaufen des Minimums um etwa 0.1 mS zu, sodass man eine Änderung von G_{bulk} pro Lage von 0.025 mS/ML erhält. Verglichen mit dem Oberflächenleitwert jenseits von 1 mS ist dies ganz

analog zur Situation auf Bi(111) verschwindend gering.

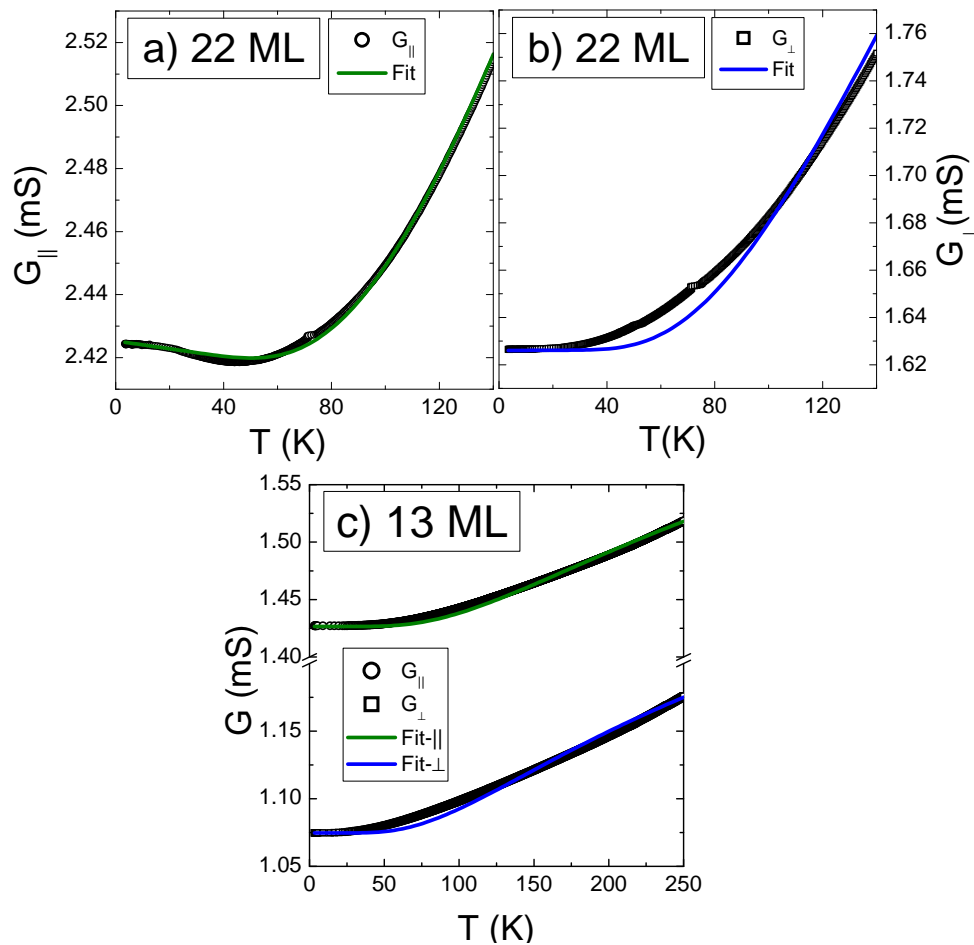


Abbildung 6.10.: Temperaturverlauf des Leitwertes entlang und senkrecht zur Stufenrichtung eines 22 ML dicken Bi(110)-Films (a+b). $G_{||}$ zeigt metallisches Verhalten für tiefe Temperaturen, G_{\perp} nicht. Die farbigen Kurven entsprechen Fits mit Hilfe von Gl. 5.1. c) $G(T)$ eines 13 ML Films, der in beiden Richtungen temperaturaktivierten Transport zeigt.

Signifikant gestaltet sich der Unterschied der Leitfähigkeit $G_{||}$ - G_{\perp} in der Temperaturabhängigkeit. Während $G_{||}$ ganz ähnlich wie Bi(111)-Filme durch ein Zusammenspiel aus metallischem Oberflächenzustand und halbleitendem Volumen zunächst mit der Temperatur abnimmt und nach Durchlaufen eines Minimums bei einigen 10 K wieder ansteigt, zeigt G_{\perp} lediglich halbleitenden Charakter durch seinen monotonen Anstieg über den gesamten erfassten Temperaturbereich (siehe Abb. 6.10 a+b). Bei viel dünneren Filmen, bei denen sich der Oberflächenzustand noch nicht vollständig ausgebildet hat und die Unordnung größer ist, zeigt sich in beiden Richtungen lediglich temperaturaktivierter Transport (Abb. 6.10 c).

Der Temperaturverlauf lässt sich sehr gut mit Hilfe von Gleichung 5.1 beschreiben, wie die durchgezogenen Linien in der Abbildung zeigen. So ergibt sich, dass der Parameter s , der ein Maß für die Stärke des metallischen Beitrags ist, für die parallele Richtung um Größenordnungen höher liegt als für die senkrechte Richtung.

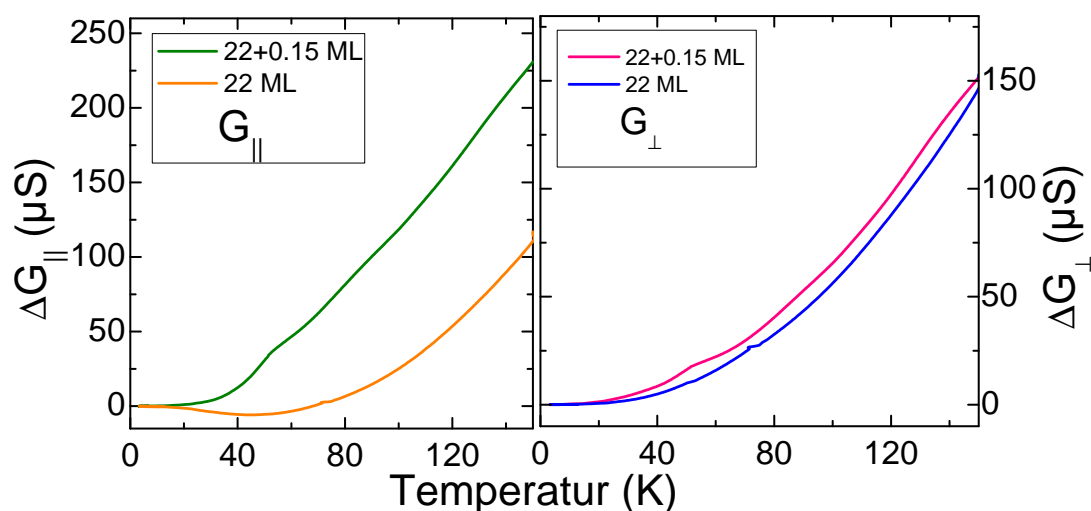


Abbildung 6.11.: $\Delta G(T)$ eines 22 ML Bi-Films (von Daten aus 6.10 a und b) in \parallel - und \perp -Richtung, vor und nach Adsorption von 0.15 ML Bi bei tiefen Temperaturen.

Der aus den Fits erhaltene Wert für die Energielücke im Bi-Volumen schwankt über alle Messungen zwischen 30 und 50 meV, ohne dass ein klarer Trend der Abnahme mit der Schichtdicke zu erkennen ist. Dies liegt aller Wahrscheinlichkeit nach an leicht unterschiedlichen Präparationsbedingungen für die untersuchten Filme. Im Vergleich zu Bi(111)-Filmen in Kap. 5.2 entsprechen die gefundenen Werte leicht größeren Bandlücken. Daher ist auch der metallische Charakter in paralleler Richtung einfacher zu beobachten, so setzt er sich bei einigen Messungen bis $T=100$ K fort und durchläuft erst dort sein Minimum. Allerdings können die Messungen für eine Schichtpräparation in \parallel - und \perp -Richtung mit ein und derselben Energielücke E_a beschrieben werden, der exponentielle Anstieg für hohe Temperaturen ist also in der Tat nur durch das halbleitende und isotrope Volumen bestimmt.

Der Einfluss von Adsorbaten auf der Oberfläche auf die Temperaturabhängigkeit des Leitwerts ist in Abb. 6.11 veranschaulicht. Verglichen wird jeweils der Verlauf von ΔG_{\parallel} und ΔG_{\perp} vor und nach der Adsorption von Submonolagenmengen Bismut. Entlang der Stufen ändert sich der Verlauf drastisch, ein metallisches Verhalten ist nicht mehr zu beobachten, und die Kurve steigt vom Beginn steil an. Der metallische Zustand entlang der Stufen wird also effektiv durch die Streuzentren unterdrückt. Erst für höhere Temperaturen, bei denen nur noch der Volumenbeitrag eine Rolle spielt, sind die Steigungen der zwei Kurven wieder identisch. Dagegen verläuft die Kurve, die senkrecht zu den Stufen gemessen wurde, beinahe exakt auf der der reinen Fläche und ein durch das Adsorbat induzierter Einfluss ist kaum feststellbar. Auch die Absolutwerte während der Adsorption bei tiefen Temperaturen ändern sich unterschiedlich stark, in paralleler Richtung von 2.42 auf 2.02 mS und in senkrechter Richtung nur von 1.62 auf 1.56 mS. Senkrecht zu den Stufen ist die Defektdichte bereits vor der Adsorption sehr hoch, sodass die Bi-Atome nur noch einen geringen Einfluss haben.

6.4 Magnetotransporteigenschaften gestufter Bi(110)-Filme

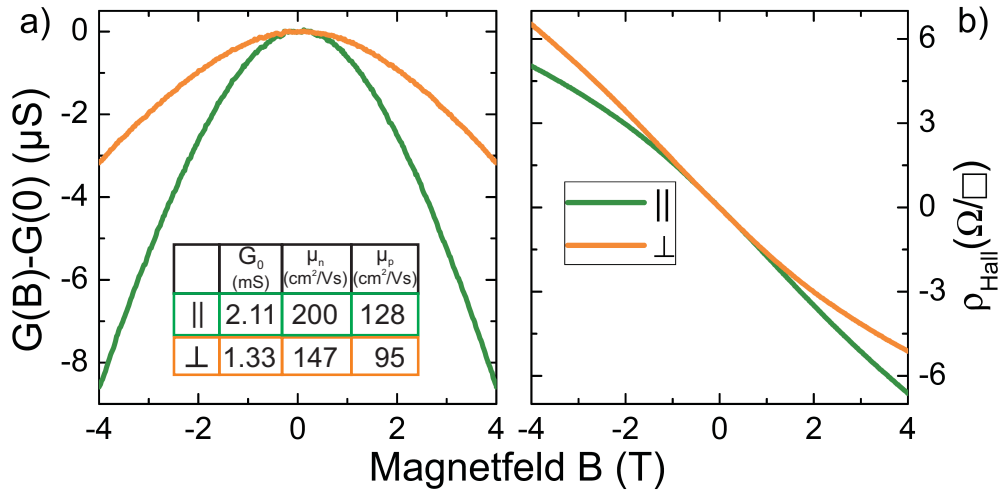


Abbildung 6.12.: a) Magnetleitwerts- und b) Hall-Widerstandsverhalten eines 23 ML dicken gestuften Bi(110)-Films bei $T=10$ K. Der klassische Magnetleitwerteffekt ist in ||-Richtung ausgeprägter. Die Hall-Widerstandskurven verlaufen fast parallel und zeigen beide eine negative Steigung. Die Tabelle in a) zeigt die Ergebnisse der Auswertung, dabei sind $n=1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und $p=3.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ für beide Richtungen.

Da der Leitwert anisotrop ist, erwartet man auch, dass die Beweglichkeit in ||-Richtung größer ist und sie in ⊥-Richtung durch Streuung an den Stufenkanten reduziert ist. Dies sollte in Magnetotransportmessungen beobachtet werden können. Abb. 6.12 zeigt die Messung an einem gestuften 23 ML dicken Bi(110)-Film. Die $G(B)$ Kurven weichen deutlich voneinander ab, und $G_{||}$ zeigt eine größere Amplitude. Jedoch folgen beide einem quadratischen Verlauf, entsprechend der klassischen Theorie und können mit Gl. 2.24 beschrieben werden. Im Vergleich zu Bi(111)-Filmen gleicher Dicke ist der klassische Effekt aber deutlich geringer ausgeprägt und $G(4T)-G(0T)$ beträgt hier nur um die $10 \mu\text{S}$, während er etwa $30\text{-}40 \mu\text{S}$ bei 20 BL Bi(111) beträgt. Ein Hinweis darauf, dass die Filmqualität weniger perfekt ist als bei glatten Bi(111)-Filme.

Die Hall-Messungen in b) verlaufen für beide Richtungen beinahe parallel zueinander und weisen eine negative Steigung auf, anders als bei Bi(111)-Filmen, bei denen typischerweise eine positive Steigung beobachtet wird. Dies kann dadurch erklärt werden, dass auch die Bi(110)-Fläche Elektronen und Löcher beherbergt, die nun aber im Allgemeinen andere Beweglichkeiten und Dichten aufweisen und so einen anderen Verlauf haben (vgl mit Gl. 2.25). Aus ARPES-Messungen an Bi(110)-Flächen [114] ist die elektronische Bandstruktur und Fermifläche experimentell bekannt. Dabei zeigt sich, dass auf der Fermifläche lochartige Zustände dominieren, so existieren Lochtaschen um $\bar{\Gamma}$ und \bar{M}_1 und kleinere Elektronentaschen zwischen \bar{M}_1 und \bar{X}_1 . Sodass man abschätzen kann, dass $c=p/n \approx 2\text{-}3$ sein sollte. Aus der Dispersion der Zustände und deren Krümmung an der Fermi-Kante wird ersichtlich, dass die Elektronen eine größere Beweglichkeit haben sollten als die Löcher. Diese Randbedingungen wurden für die Analyse der Magnetotransportdaten zu Grunde gelegt. Die Tabelle in 6.12 a) zeigt die danach erhaltenen Fitergebnisse. Tatsächlich ha-

$\delta\Theta_{\text{Bi}}$ (ML)	-Richtung			\perp -Richtung		
	$G_{0,\parallel}$ (mS)	μ_n ($\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$)	μ_p ($\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$)	$G_{0,\perp}$ (mS)	μ_n ($\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$)	μ_p ($\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$)
0	2.42	220	134	1.63	171	105
0.05	2.14	190	116	1.57	147	90
0.15	2.02	170	103	1.56	135	83

Tabelle 6.1.: Auswertung der Daten aus Abb. 6.13. Die Ladungsträgerkonzentrationen sind, $n=1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $p=3.75 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ für ||- und \perp -Richtung.

ben die Elektronen ein größeres μ als Löcher, ganz ähnlich wie es bei Bi(111)-Filmen der Fall war. Entlang der Stufen ist die Beweglichkeit größer als senkrecht dazu. Die Ladungsträgerdichten wurden für beide Messrichtungen gleich zu $n=1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und $p=3.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ bestimmt, was einem Verhältnis von $c=2.4$ entspricht. Man kann also feststellen, dass die Zustandsdichte im Wesentlichen isotrop über die Fläche verteilt ist, jedoch die Ladungsträger durch die höhere Defektdichte in \perp -Richtung häufiger gestreut werden. Die Anisotropie im Leitwert ist also auf strukturelle, weniger auf elektronische Eigenschaften zurückführbar.

In einer Messreihe wird der Einfluss der Adsorbate auf den Magnetotransport untersucht. Dabei

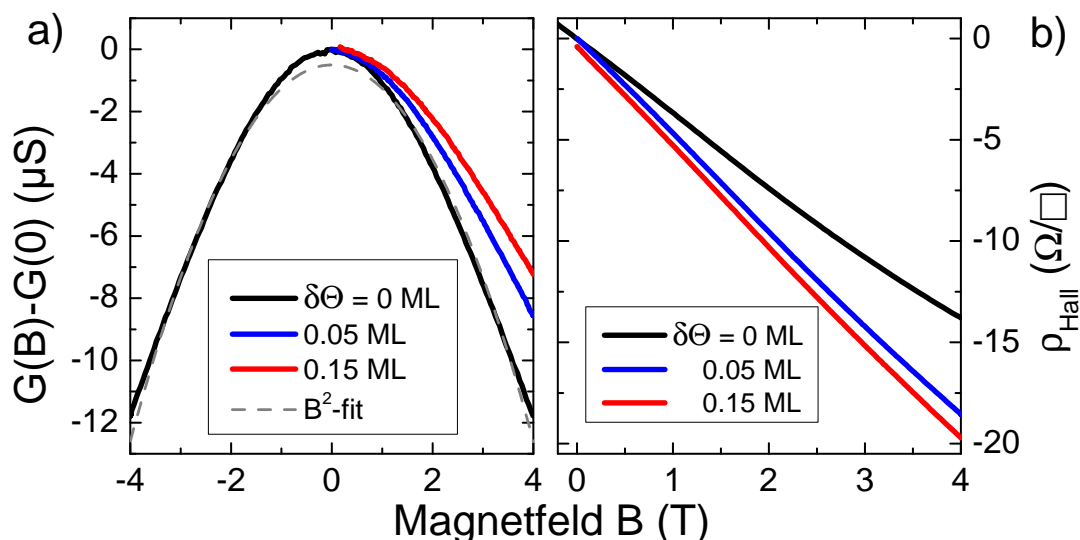


Abbildung 6.13.: $G(B)$ und $\rho_{\text{Hall}}(B)$ in paralleler Richtung, bei variierender Adsorbatkonzentration an Bi-Atomen ($T=10 \text{ K}$).

werden aufeinander folgend Submonolagenmengen Bi auf eine ursprüngliche 22 ML Fläche aufgebracht. Abb. 6.13 zeigt $G(B)$ und ρ_H dieser Messreihe. Auch nach der Deposition von 0.15 ML Bi bleibt die Änderung von $G(B)$ im Vergleich zur reinen Fläche eher gering. Die Auswertung der Daten ergibt nur eine geringfügige Abnahme der Beweglichkeiten in ||-Richtung und einer nochmals geringeren in \perp -Richtung (Tabelle 6.1) Dies ist konsistent mit den Schlussfolgerungen aus Abb. 6.9. Der Transport in den Bi(110)-Oberflächenzuständen wird durch Adsorption weniger stark gestört als auf Bi(111) und durch die ohnehin vorhandenen Störstellen in \perp -Richtung resultiert in dieser Richtung auch ein noch geringerer Einfluss. Wie die zuvor gezeigten $G(T)$ -Messungen (6.11) aber nahe legen, wird das System stark genug gestört, um die metallische Leitfähigkeit so weit zu unterdrücken, dass sie im Volumenuntergrund nicht mehr zu messen ist.

6.5 Diskussion der Ergebnisse zu gestuften Bi(110)-Filmen auf Si(557)

Die in diesem Kapitel erarbeiteten Ergebnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

- Ein Wachstum epitaktischer Bi-Filme ist auf der Si(557) direkt nicht möglich. Vielmehr ist die Auswahl geeigneter Benetzungsschichten für das Filmwachstum entscheidend.
- Auch auf der gestuften Si(557)-Oberfläche existieren, wie schon für die planare Si(111)-Fläche bekannt, zwei Phasen der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Rekonstruktion, die β -Phase mit $\Theta=1$ ML und die α -Phase mit $\Theta=1/3$ ML. Man erhält sie durch Präparation bei $T < 400$ °C im ersten und $T > 500$ °C im zweiten Fall. Im Temperaturintervall dazwischen existiert eine Mischung beider Phasen. Allerdings führt hier bereits die erhöhte Temperatur zu einer Umordnung der Stufenfolge, die für das Wachstum der Bi(110)-Filme von entscheidender Bedeutung ist. Man findet (335)-Facetten mit einer Stufenbreite von $3\frac{2}{3} a_{\text{Si}}$. Bei der α -Phase ist diese Stufenfolge noch besser ausgebildet und die $\sqrt{3}$ -Rekonstruktion auf den Terrassen sind miteinander korreliert, wie SPA-LEED Untersuchungen zeigen (Abb. 6.3).
- Das Wachstum von Bi-Filmen auf der $\sqrt{3}$ - β -Phase resultiert in sechs gegeneinander verdrehten Bi(110)-Domänen, in Analogie zu schon bekannten Epitaxieuntersuchungen auf $\sqrt{3}$ - β -Phase auf planarem Si(111). Die pseudo-kubische Bi(110)-Einheitszelle rastet in eine der drei $\sqrt{3}$ -Richtungen ein, dabei gibt es jeweils 2 Möglichkeiten der Anordnung aufgrund der Spiegelsymmetrie der Bi(110)-Zelle (Abb. 6.5). Diese Fläche ist mehr oder weniger isotrop und daher für die Leitfähigkeitsuntersuchungen nicht weiter interessant. Sie liefert aber wichtige Erkenntnisse für das Wachstum auf $\sqrt{3}$ - α - und Mix-Phase.
- Auf der Mixphase werden vier der sechs Bi(110) Domänen unterdrückt und man findet nur noch zwei Domänen, die entlang der Stufenkanten des Silizium um $\pm 13.7^\circ$ verdreht sind. Nur diese beiden Domänen können entlang der schmalen (335)-Terrassen des Substrats wachsen, die übrigen vier stoßen sehr schnell an Stufenkanten, sodass ihr Wachstum unterdrückt wird. Die zwei verbleibenden Domänen weisen eine Stufung auf. Zu erkennen, an Facettenspots im SPA-LEED, die mit der Energie wandern (Abb. 6.6). Stufen mit einer Terrassenbreite von 7 Å und Stufenhöhe von 3.3 Å wurden identifiziert, was einer Facette in der (221)_{rhom}-Ebene entspricht. STM-Messungen bestätigen diese Befunde (Abb. 6.8).
- Die Leitfähigkeit der so hergestellten Bi(110)-Filme ist anisotrop in Bezug auf die Stufung des Films. Bei $T=10$ K liegt G_{\parallel} etwa 50% über G_{\perp} . Darüber hinaus zeigen $G(T)$ -Messungen metallisches Verhalten entlang der Terrassen, während senkrecht zu den Stufen lediglich aktivierter Transport des Filmvolumens zu finden ist (Aktivierungsenergien zwischen 30 meV und 50 meV, Kap. 6.3).
- $G(B)$ -Messungen in Kap. 6.4 und deren Analyse bestätigen die höhere Mobilität der Ladungsträger in \parallel -Richtung im Vergleich zur \perp -Richtung, wobei $\mu_n > \mu_p$ gilt und die Ladungsträgerdichten, mit $n=1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und $p=3.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, in beiden Richtungen

gleich groß ist. Die Anisotropie von G ist an dieser Stelle eher auf strukturelle und weniger auf elektronische Einflüsse zurück zu führen.

Somit finden diese Messungen keine deutlichen Anzeichen für topologische Randzustände auf diesen Flächen. Inwieweit die metallischen Oberflächenzustände entlang der Stufenrichtung mit topologisch geschützten Zuständen in Verbindung gebracht werden können, ist an dieser Stelle ungeklärt. Komplementäre Messungen sind dafür notwendig. So sind nur SARPES-Messungen in der Lage die Spinstruktur der Fermi-Fläche dieser gestuften Bi(110)-Filme offen legen. Hierfür wäre es allerdings erstrebenswert die Filmqualität weiter zu verbessern und die mittlere Korngröße durch optimierte Präparationsbedingungen zu erhöhen. Des Weiteren könnte durch die Wahl eines anders gestuften Substrats das Wachstum nur einer einzigen, statt zwei Domänen bevorzugt sein, was deutliche Vorteile bei der Untersuchung der elektronischen Eigenschaften mit sich brächte.

Zusammenfassung und Ausblick

Für die hier vorgestellten Messungen standen drei Fragestellungen im Zentrum:

1. Wie kann man das Wachstum von metallischen Strukturen mit langreichweitiger Ordnung verbessern, um elektronischen Transport an Oberflächen auf einer makroskopischen Skala messen zu können?
2. Wie wirkt sich die Spin-Bahn Wechselwirkung auf elektronischen Transport, sowie auf kollektive Phänomene in niedrigdimensionalen Elektronengasen aus?
3. Inwiefern ist der elektronische Transport durch die Zeitinversionssymmetrie (TR-Symmetrie) bestimmt und welche Möglichkeiten der Manipulation dieses Mechanismus gibt es?

Zur Klärung dieser Fragen wurden drei Systeme untersucht: Pb-Kettenstrukturen auf Si(557), dünne Bi-Filme auf Si(111) und gestufte Bi(110)-Filme auf Si(557). Die grundlegende Gemeinsamkeit aller drei Systeme ist die starke Spin-Bahn-Kopplung, die zu einer Rashba-Aufspaltung der Oberflächenbänder führt, sodass eine Spin-Polarisation der Bänder im reziproken Raum nachweisbar ist (Rashba-Parameter $\alpha_{\text{RB}}=0.56 \text{ eV\AA}$ für Bi(111) [153], sowie $\alpha_{\text{RB}}=1.9 \text{ eV\AA}$ für Pb/Si(557) [137]).

Bei Anwesenheit spinpolarisierter Bänder, wie auf der Bi(111)-Oberfläche, muss die TR-Symmetrie erhalten sein und tatsächlich zeigen STM Untersuchungen eine unterdrückte Rückstreuung zwischen Zuständen $(\vec{k}, \uparrow) \rightarrow (-\vec{k}, \downarrow)$ [112]. Anhand von Magnetotransportmessungen konnte gezeigt werden, dass der Oberflächenzustand eine hohe Ladungsträgermobilität hat und daher der klassische Magnetoleitwerteffekt dominiert. Da die direkte Rückstreuung verboten ist, ist der WAL-Beitrag nicht besonders stark. Erst nach Abzug des klassischen Beitrags lässt er sich deutlich heraus stellen. Die Volumenleitfähigkeit ist aufgrund von *Confinement*-Effekten bei niedrigen Temperaturen zu vernachlässigen. Das Volumen der Bi-Filme befindet sich in einem halbleitenden Zustand und zeigt temperaturaktivierten Transport, während sich die Oberflächenzustände, die sowohl Elektronen als auch Löcher beherbergen, durch metallisches Verhalten auszeichnen. Die Aktivierungsenergie im Volumen nimmt mit steigender Schichtdicke ab, sodass der Halbleiter-Halbmetail-Übergang für Schichtdicken um 45 nm ermittelt wurde.

Durch Adsorption von Fremdatomen auf der Bi-Oberfläche sollten gezielt die Streumechanismen und die TR-Symmetrie beeinflusst werden. Dabei wurde gezeigt, dass magnetische Atome wie Fe, Co und Tb tatsächlich zu einer erhöhten Rückstreuung im Vergleich zu nicht-magnetischen Atomen (Bi und Pb) führen. Der Übergang des WAL-Beitrages in einen WL-Charakter in Magnetotransportmessungen, ab einer kritischen Adsorbatbedeckung im Prozentbereich einer Monolage, kann mit Messungen an Topologischen Isolatoren (Bi_2Se_3) korreliert werden. Zum einen wird die TR-Symmetrie, durch die Wechselwirkung der Ladungsträger mit den magnetischen Verunreinigungen, lokal gebrochen. Zum anderen sind Bandhybridisierungen und damit verbundene Änderungen der Spinstruktur wahrscheinlich, da eine drastische Erhöhung der Löcherkonzentration

tration (bestimmt mit Hall-Messungen) mit der Co und Fe Bedeckung gefunden wurde. Beides führt dazu, dass die Spinausrichtung der Ladungsträger im Streuprozess keine Rolle mehr spielt und so eine konstruktive Interferenz in Rückstreurichtung, also WL, beobachtet wurde.

DFT-Rechnungen zeigen, dass auch der Adsorptionsplatz der Fremdatome einen Einfluss auf die Streueigenschaften hat. Während Bi oberhalb der Oberfläche adsorbiert, dringen Co und Fe barrierefrei in die erste Bi-Lage ein und verzerren lokal das Kristallgitter. Ohne Frage ist damit auch eine starke Störung der elektronischen Zustände verbunden, sodass die größere Streuamplitude dieser beiden Atome gegenüber Bi auch teilweise hiermit zusammen hängen.

Am Beispiel der Tb-Adsorption auf Bi(111)-Filmen wurde gezeigt, dass des Weiteren Nukleationseffekte bei Oberflächenleitfähigkeitsmessungen eine große Rolle spielen können. Bei niedrigen Temperaturen um 10 K konnte eine Relaxation des Leitwerts nach der Deposition von Tausendstel Monolagen unter konstanten Umgebungsbedingungen beobachtet werden. SPA-LEED Messungen untermauerten, dass die kristalline Qualität der Oberfläche zunächst von Tb-Atomen gestört wird, dann aber wieder den Ausgangszustand einer reinen Fläche erreicht. Darüber hinaus zeigten Leitwertmessungen, während der Deposition von Tb, ein Minimum bei $\Theta \leq 1\%$ ML – einem Wert, der 50-mal kleiner ist, als dass man ihn mit einer rauigkeitsbedingten Änderung der Reflexionswahrscheinlichkeit an der Oberfläche erklären könnte. Mit Hilfe von Ratengleichungen, die die Agglomeration von Atomen in Inseln beschreiben, wurde das Minimum unter Annahme realistischer Flussraten und Insel-Einfangraten simuliert.

Tb führt, im Gegensatz zu Fe und Co, zu einer leichten Erhöhung der Elektronenkonzentration. Diese adsorbatspezifische Dotierung kann mit der Elektronenkonfiguration der Atome verstanden werden. Tb erhöht die Elektronenkonzentration durch eine Abgabe der 6s-Elektronen an den Oberflächenzustand, während bei Fe und Co wahrscheinlich die teilgefüllten d-Schalen mit Elektronen des Oberflächenzustandes bevölkert werden und so die Löcherdichte erhöhen.

Um die Konzepte der TR-Symmetrie in einem Extremfall zu überprüfen, geht man auf das Pb/Si(557)-System über, welches anisotrope Eigenschaften aufweist. Den Einfluss der Stufen des Si-Substrats erkennt man nicht nur in der elektronischen Struktur der Pb-Monolagen, sondern auch während des epitaktischen Wachstums von Multilagen Pb-Filmen. So ergibt sich ein anisotropes Wachstum für die ersten fünf Lagen, erkennbar in phasenverschobenen Leitwertoszillationen während des Lage-für-Lage Wachstums. Ab 5 ML erscheint die Oberfläche in LEED-Messungen isotrop zu sein. Allerdings bleibt die Leitfähigkeit des Gesamtfilms noch für größere Schichtdicken anisotrop, was die Streuung der Ladungsträger an den Stufen des Substrats und der anisotrop gewachsenen ersten Lagen zeigt. Überhaupt spielen strukturelle Defekte bei Pb-Monolagen und der Ausbildung der metallischen Pb-Ketten eine entscheidende Rolle. So können Umfacettierungen der Oberfläche und Imperfektionen der (223)-Stufung auf makroskopischen Skalen die Beobachtung des 1D-2D-Phasenübergangs bei 78 K verhindern und das System, bis hin zu tiefen Temperaturen, in einen zweidimensionalen Zustand mit temperaturaktiviertem Transport drängen.

Magnetotransportmessungen an dicken Pb-Filmen auf Si(557) offenbaren im Vergleich zu Bi(111) zunächst nur einen geringen Einfluss der Spin-Bahn Streuung, da auch die Aufspaltung in Pb-Filmen gering ist [23]. Zudem ist der Beitrag des Volumens zum elektronischen Transport viel größer als für Bi, bei dem man sich *Confinement*-Effekte zu Nutze macht, sodass eine Trennung zwischen Oberflächen- und Volumenbeitrag bei Pb-Schichten, mit seiner viel kürzeren Volumen-Fermiwellenlänge, schwierig ist. Eine Möglichkeit diese Trennung zu realisieren ist die

Untersuchung der Monolagenschicht Pb/Si(557). Sie weist in dieser Hinsicht sehr interessante Eigenschaften auf. Die Aufspaltung der Spin-Zustände ist sehr groß und einzig Oberflächeneffekte tragen zu Magnetoleitfähigkeitsmessungen bei.

Hochaufgelöste XPS-Messungen konnten belegen, dass in der $\text{Pb-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-}\alpha$ -Phase, die der Grundbaustein des Pb-Kettensystems ist, zwei unterschiedliche Adsorptionsplätze vorhanden sind, sodass das Strukturmodell der Pb-Ketten mit einer Bedeckung von 1.31 ML bestätigt wurde.

SARPES-Messungen an Monolagen Pb/Si(557) fanden eine große Rashba-Aufspaltung. Die senkrecht zu den Ketten einen Rashba-Parameter von $\alpha_{\text{RB}} = \frac{\hbar^2 k_0}{m^*} = 1.9 \text{ eV}\text{\AA}$ hervorruft, der nur vom Bi/Ag(111)-System übertroffen wird. Der Grund für die große Aufspaltung, die sogar den maximal möglichen Wert mit $\Delta k_0 = g/2$ für dieses System annimmt, liegt in der starken Interaktion der Pb-Ketten untereinander. Mit dem Modell der linearen Spindichtewelle (SDW), also der Superposition zweier gegenphasiger zirkularer Spindichtewellen, mit Nestingvektor $g' = g/2$, kann eine Interpretation der Realraumsituation geschaffen werden. Diese zeigt, dass sich benachbarte Terrassen der 1.31 ML Pb/Si(557) Oberfläche im entgegengesetzten Spinzustand befinden, also antiferromagnetisch angeordnet sind. Dies stellt energetisch gesehen ein Minimum dar, da die Coulomb-Abstoßung so minimal wird. Wenn die Welle weiter wandert und der Spin einer Terrasse umgeschaltet wird, reagieren darauf instantan die benachbarten Terrassen und schalten ebenfalls um. Die vermeintliche Verletzung der TR-Symmetrie bei Streuung/Nesting zwischen Kramers-Paaren, wird durch die starke Elektron-Elektron Wechselwirkung in den Pb-Ketten aufgehoben.

Vor diesem Hintergrund lassen sich auch die Magnetotransportmessungen an Pb/Si(557) deuten. Dabei wurde eine Unterdrückung der Spin-Bahn Streuung, genau für die 1.31 ML *genestete* Phase, entlang der Pb-Ketten gefunden. Dies äußert sich im Übergang von Schwacher Anti-Lokalisierung zu Schwacher Lokalisierung (WAL \rightarrow WL). Da in diesem Fall aber alle Übergänge senkrecht zu den Ketten *genestet* sind und auf einer Kette nur eine Spinausrichtung vorhanden ist, kann es hier auch keine Spin-Bahn-Streuung, also Spin-Umklapp geben. Somit interferieren zurück gestreute Elektronen auf einer Kette immer konstruktiv miteinander und führen zu WL-artigem Charakter in $G(B)$ -Messungen. Erst wenn die Bedeckung und damit die Bandfüllung von $\Theta = 1.31 \text{ ML}$ abweicht wird die Nesting-Bedingung aufgehoben und der Übergang in Zustände mit entgegengesetztem Spin wird wieder möglich und erhöht somit die Spin-Umklapp-Streurate, was sich in WAL-Charakter äußert.

Die Ergebnisse belegen, dass die TR-Symmetrie auf Oberflächen mit starker Spin-Bahn Aufspaltung effektiv die Rückstreuung von Ladungsträgern unterdrückt. Nur durch Mehrfachstreuungsprozesse erfolgt eine Umkehrung in 180° -Richtung, ebenfalls verbunden mit der Umkehrung der Spin-Orientierung, sodass Schwache Anti-Lokalisierung beobachtet wird. Abweichungen von diesen strikten Streubedingungen wurden in dieser Arbeit durch zweierlei Maßnahmen bewirkt. Zum einen durch die Einbringung magnetischer Momente auf der Oberfläche, im Fall von Bi. Zum anderen durch die Einschränkung auf eindimensionale Ketten im Fall von Pb/Si(557), verbunden mit der Elektron-Elektron Wechselwirkung in diesem System. Im letzteren Fall ist es die Rückstreuung senkrecht zu den Ketten, die zur Ausbildung der Nesting-Bedingung und isolierendem Charakter führt, und gleichzeitig eine ungestörte Propagation entlang der Ketten ermöglicht.

Mit dem Wachstum von dünnen Bi(110)-Filmen auf Si(557) konnte erstmals mit SPA-LEED und STM gezeigt werden, dass es möglich ist, gestufte Bi-Filme zu erzeugen. Dies ist in der Hinsicht interessant, da bei Bi(114) Oberflächen an Stufenkanten, topologisch geschützte Randkanäle entdeckt wurden. Bei dünnen Filmen sollte es daher möglich sein, die Transporteigenschaften solcher topologischer Zustände zu vermessen.

Präpariert man zunächst eine Bi-Benetzungsschicht auf der Si(557) bei etwa 450 °C so liegt die Bi-Bedeckung zwischen 1/3 ML und 1 ML. Dabei facettiert die Oberfläche partiell in die (335)-Richtung um. Dieses Substrat erwies sich als am besten geeignet zur Erzeugung gestufter Bi-Filme. So wachsen hier Bi(110)-Filme, bestehend aus zwei Domänen, die um einen Winkel von $\pm 13.7^\circ$ gegenüber der Stufenrichtung des Substrats verdreht sind. Diese Domänen zeichnen sich durch eine Stufung mit charakteristischer Periode aus. Bei einer Terrassenbreite von 7.1 Å und einer Stufenhöhe von 3.27 Å wurde eine Facettenorientierung in der (221)-Ebene, in rhomboedrischer Notation, ermittelt. Leitfähigkeitsmessungen zeigen eine deutliche Anisotropie, mit 50% höherem Leitwert entlang der Stufen des Films. Darüber hinaus verhält sich der Leitwert in dieser Richtung metallisch, während senkrecht dazu aktivierter, elektronischer Transport vorherrscht, wie temperaturabhängige Messungen belegen. Magnetotransportmessungen zeigen eine größere Mobilität der Elektronen und Löcher entlang dieser metallischen Zustände als senkrecht zu den Stufen, die ähnlich wie bei Pb/Si(557) als effektive Streuer agieren. Die Elektronen- und Löcherdichte ist isotrop verteilt, also in beiden Richtungen gleich groß. So ist die gefundene Anisotropie der Leitfähigkeit auf strukturelle und nicht auf elektronische Einflüsse zurück zu führen.

Ob es dennoch topologisch geschützte Zustände auf dieser Oberfläche gibt, können nur SARPES-Messungen klären. Qualitativ hochwertigere Filme, mit nur einer Domäne und homogenerer Stufenfolge, sind dafür von hohem Interesse. So könnte die Auswahl eines anderen Substrats, z.B. Si(335), zu einer besser geordneten Stufenstruktur der Filme führen.

Im Bezug auf das Pb-Kettensystem wäre eine Untersuchung mit einer Mikrosondenmethode sehr interessant, um die elektronischen Transporteigenschaften einzelner Drähte zu vermessen. Hierzu stehen in der Zukunft Versuche am Vierspitzen-STM an, die eine Kontaktierung nur weniger, bis einzelner Ketten ermöglichen. Zudem wäre es interessant die Spin-Struktur der Pb-Ketten im Realraum aufzulösen, mit Hilfe eines spinpolarisierten STM (SP-STM) [194, 195, 196].

Komplementär zu Gleichstrom-Leitfähigkeitsmessungen wie sie hier vorgestellt wurden, liefern optische Leitfähigkeitsmessungen zusätzliche Informationen über die elektronische Struktur. Mit der Reflectance Anisotropy Spectroscopy (RAS) [197] lassen sich berührungslos Anisotropien der dielektrischen Funktion auch in Monolagenschichten bestimmen und so auf die Leitfähigkeitseigenschaften zurück schließen. Hierzu wurden bereits Messungen in Zusammenarbeit mit dem ISAS-Institut¹, am Pb/Si(557)-System durchgeführt, deren Ergebnisse in Kürze veröffentlicht werden.

Bei Bi-Filmen bleibt die Frage offen, in wie weit die magnetischen Verunreinigungen die Bandstruktur durch Hybridisierung mit den Oberflächenzuständen verändern. Dementsprechend könnte man ARPES-Messungen an diesen Oberflächen in Abhängigkeit der Fe-, Co- oder Tb-Konzentration durchführen. Dies dürfte auch Erkenntnisse über die Änderung der Ladungsträgerdichten bringen. Damit ließe sich überprüfen, in wie weit der, aus Hall-Messungen bestimmten, Ladungsaustausch realistisch ist.

¹Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften – ISAS – e.V.

beteiligte Personen: Eugen Speiser, Jochen Räthel und Norbert Esser

Weiterführend ist es auch von Interesse, im Vergleich zum nun gut verstandenen Bi(111)-System, Antimon-Filme zu untersuchen, da es ähnliche elektronische Eigenschaften wie Bi aufweist. Darüber hinaus sind natürlich Untersuchungen an epitaktisch gewachsenen Topologischen Isolatoren von hoher Aktualität, da sie die Modellsysteme für zukünftige spintronische Anwendungen darstellen. Bi_2Se_3 lässt sich epitaktisch auf Si(111)-Oberflächen, in beliebiger Schichtdicke, aufwachsen [198, 199, 200]. Somit ist eine Adaption an den hier verwendeten Versuchsaufbau ohne Schwierigkeiten möglich.

Anhang

A.1 Winkelberechnung im rhomboedrigen Kristallsystem

Nach [25] sind die drei rhomboedrigen Basisvektoren des Bi-Kristallgitters in kartesischen Koordinaten definiert als:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} -a/2 \\ -\sqrt{3}a/6 \\ c/3 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} a/2 \\ -\sqrt{3}a/6 \\ c/3 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3}a/3 \\ c/3 \end{pmatrix},$$

mit $a=4.53 \text{ \AA}$ und $c=11.797 \text{ \AA}$.

Betrachtet man das Kristallgitterschema in Abb. 2.20 oder auch 6.6 d), so sieht man leicht ein, dass der (unnormierte) Vektor der senkrecht auf der $(110)_{\text{rhom}}\text{-Ebene}$ steht, gegeben ist durch das Kreuzprodukt:

$$\vec{v}_1 = \vec{e}_x \times \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3}a/3 \\ c/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -c/3 \\ a/\sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

Ein in Richtung der y-Achse dazu beliebig verkippter (unnormierter) Vektor, kann durch die folgende Vorschrift aufgespannt werden:

$$\vec{v}_2 = \vec{e}_x \times \left[-\frac{\vec{a}_1 + \vec{a}_2}{2} + m \cdot \vec{a}_3 \right],$$

mit m einer beliebigen reellen Zahl größer Null. Diese Ebene schneidet die Basisvektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 bei 1 und den Vektor \vec{a}_3 bei m . Durch Variation der Zahl m kann man also beliebige Winkel relativ zur Senkrechten der $(110)\text{-Ebene}$ einstellen. Der Winkel zwischen den beiden Ebenen berechnet sich über das Skalarprodukt zu:

$$\gamma = \arccos \left(\frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{v_1 v_2} \right).$$

Für den Winkel zwischen der $(110)\text{-}$ und $(111)\text{-Ebene}$ findet man beispielsweise: $\gamma = 56.4^\circ$. Die uns interessierende Richtung, die zur $(110)\text{-Ebene}$ nach Abb.6.6 b) und e) einen Winkel von 24.7° hat, entspricht einem $m=2$ und damit einer $(221)_{\text{rhom}}\text{-Ebene}$. Der (unnormierte) Normalenvektor auf dieser Ebene hat in kartesischen Koordinaten die Form:

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -c/3 \\ 5\sqrt{3}a/6 \end{pmatrix}.$$

A.2 Auslöschung von Bragg-Reflexen im rhomboedrigen Bi-Kristallsystem

Der Strukturfaktor ist definiert als [39]:

$$S_{hkl} = \sum_j f_j \cdot \exp [2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)].$$

Darin sind x_j, y_j und z_j die Vektorkomponenten des j -ten Basisatoms im Realraum und h, k, l die Millerschen Indizes eines Bragg-Reflexes. Der Formfaktor f_j ist für beide Bi-Atome der Basis gleich. In der rhomboedrigen Basis befinden sich die Bi-Atome bei $(0,0,0)$ sowie $0.468 \cdot (1,1,1)$. Für den Strukturfaktor ergibt sich damit:

$$S_{hkl} = f_{\text{Bi}} \cdot [\exp(-2\pi i) + \exp(-2\pi i \cdot 0.468(h + k + l))].$$

Somit wird $S_{hkl}=0$, wenn für h, k und l gilt:

$$h + k + l = \frac{2n + 1}{2 \cdot 0.468} = 1.068 \cdot (2n + 1), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Dabei findet man die Bedingung für Auslöschung, wenn: $h+k+l=16, 31, 63$, usw. Es findet also keine systematische Auslöschung von Bragg-Reflexen statt. Sätze das zweite Atom der Einheitszelle bei $0.5(1,1,1)$, was einem kubischen Kristall entspräche, so ergäbe sich Auslöschung für alle ungeraden Summen $h+k+l$.

Abbildungsverzeichnis

2.1. Elektronenbeugung an Oberflächen	6
2.2. Linienprofil des (00)-Reflexes in Abhängigkeit der Streuphase	8
2.3. $k_{ }$ - k_{\perp} -Plot einer regelmäßig gestuften und facettierten Oberfläche	10
2.4. Klassischer Magnetotransport	14
2.5. Klassischer Magnetotransport - $G(B)$ und $\rho_{Hall}(B)$	16
2.6. Schwache Lokalisierung - Prinzip	17
2.7. Schwache Lokalisierung - $\Delta G(B)$ als Funktion der Streuzeiten $\tau_0, \tau_i, \tau_{so}$	20
2.8. Schema der 2-Punkt- und 4-Punktmessung	21
2.9. 4-Punkt Van der Pauw Messung	23
2.10. Peierls-Übergang in einer atomaren 1D Kette	24
2.11. Rashba Effekt	26
2.12. Vergleich QHE – QSHE, Bandstruktur Topologischer Isolator	27
2.13. LEED-Muster einer Si(111) 7×7 Oberfläche	29
2.14. Struktur von Si(557) und Pb/Si(557)	31
2.15. LEED-Muster einer Si(557)-Fläche	32
2.16. Si(557) – Heringplot	33
2.17. SPA-LEED von 1.31 ML Pb/Si(557)	35
2.18. Der Phasenübergang in der Leitfähigkeit von 1.31 ML Pb/Si(557)	35
2.19. Bandstruktur von 1.3 ML Pb/Si(557)	36
2.20. Kristallstruktur von Bismut	38
2.21. Volumen-Bandstruktur von Bismut	39
2.22. Brillouin-Zone von Volumen Bismut	40
2.23. Fermi-Fläche von Bi(111)	42
2.24. Querschnitt dünner Bismutfilm	44
3.1. Aufbau der Vakuumapparatur	46
3.2. Aufbau des Probenhalters	48
3.3. Schemaskizze der Silizium-Probe	49
3.4. Aufbau des Metallverdampfers	50
3.5. Die SPA-LEED Apparatur	53
3.6. Ewaldkonstruktion beim LEED und SPA-LEED	54
3.7. Messanordnung 4-Punkt-Messung	55
3.8. Messanordnung stromsymmetrisierte 8-Punkt-Messung	56
3.9. Aufbau des SARPES Spektrometers	58
4.1. LEED-Muster 3 und 6 ML Pb/Si(557)	62

4.2. $G(\Theta)$ Oszillationen – Vergleich Si(557)/Si(111)	63
4.3. $G(\Theta)$ bei diversen Temperaturen	64
4.4. QSE + CSE Oszillationen des Leitwertes	66
4.5. $G(T)$ verschiedener Pb-Schichtdicken	68
4.6. LEED-Bilder diverser Pb-Monolagen Präparationen	69
4.7. LEED-Bild und Heringplot von 1.3 ML Pb/Si(557)	71
4.8. $G(T)$ verschiedener Pb-Monolagen-Präparationen	71
4.9. Aktivierungsenergien refacettierter Pb/Si(557)-Flächen	73
4.10. $G(B)$ von Pb-Multilagen	74
4.11. $G(B)$ bei verschiedenen Bedeckungen und Temperaturen	75
4.12. $G(B)$ von 1.3 und 1.5 ML Pb/Si(557)	76
4.13. Streuzeiten in Abhängigkeit von Θ_{Pb}	77
4.14. Spin-integriertes ARPES an 1.31 ML Pb/Si(557)	78
4.15. SARPES-Messungen an 1.31 ML Pb/Si(557)	79
4.16. Schema Rashba-Aufspaltung und Stufenperiodizität	80
4.17. SARPES an 1.2 ML Pb/Si(557)	82
4.18. Modell einer linearen SDW	83
4.19. LEED-Bilder der mit XPS untersuchten Pb-Phasen	85
4.20. XPS-Messungen am Pb 5d-Peak	86
4.21. XPS-Messungen am Si 2p-Peak	88
4.22. XPS-Messungen am Pb-Si Oberflächenzustand	89
4.23. Spinpolarisierte Fermi-Fläche und 1D-Transport	91
5.1. LEED-Bilder Bi-Wachstumsphasen	94
5.2. Ausheileffekt auf die Kristallstruktur mit LEED	96
5.3. Ausheileffekt in Leitwert und Struktur eines Bi-Films	97
5.4. Ausheileffekt im Magnetoleitwert eines 36 BL Bi-Films	98
5.5. $H(S)$ und $G(S)$ -Analyse eines 20 BL Bi-Films	98
5.6. Schichtdikeneichung durch Lage-für-Lage Wachstums	99
5.7. Leitwertoszillationen beim Wachstum von Bi auf 20 BL Bi	101
5.8. $G(T)$ von Bismutfilmen verschiedener Dicke d	102
5.9. Position des $G(T)$ -Minimums als Funktion der Bi-Schichtdicke	103
5.10. $G(B)$ eines 15 BL Bi-Films - Klassischer und WAL-Beitrag	105
5.11. Magnetoleitwert von Bi-Filmen in Abhängigkeit der Schichtdicke	106
5.12. Spezifischer Hall-Widerstand von Bi-Filmen in Abhängigkeit der Schichtdicke	107
5.13. Einfluss von Pb-Adsorption auf $G(B)$	109
5.14. $G(B)$ von Bi-Filmen ohne ausgeprägten Oberflächenzustand	110
5.15. Streuprozesse innerhalb der Fermifläche von Bi(111)	111
5.16. $G(\delta\Theta)$ für Bi, Fe und Co auf 20 BL Bi-Filmen	114
5.17. Magnetotransportverhalten bei Deposition von Bi auf Bi	116
5.18. Magnetotransportverhalten bei Fe und Co Adsorption auf Bi-Filmen	118
5.19. $\mu_{n,p}$, n , p als Funktion von $\delta\Theta$ für Fe und Co auf Bi	119
5.20. WAL-Beitrag bei Bi, Co und Fe-Adsorption auf Bi-Filmen	120
5.21. Adsorptionsplätze von Bi, Fe und Co berechnet mit DFT	122
5.22. $G(\delta\Theta_{Tb})$ und Einfluss der Temperatur	124

5.23. (00)-Linienprofil während Tb-Deposition	125
5.24. LEED-Bilder 20 BL Bi bei steigender Tb-Bedeckung	126
5.25. Tb-Depositions-Annealing-Experiment auf 20 BL Bi	127
5.26. Diffusion von Tb-Atomen - Simulation des Leitwertes	128
5.27. Simulation von G bei geschlossenem Shutter	129
5.28. Korrektur des Nukleationsbeitrages während Magnetoleitwertmessungen	130
5.29. $G(B)$, $\rho_{\text{Hall}}(B)$ und WAL-Beitrag unter Variation von $\delta\Theta_{\text{Tb}}$	131
5.30. Beweglichkeiten, Konzentrationen und Streuzeiten als Funktion von $\delta\Theta_{\text{Tb}}$	132
6.1. Strukturmodell der $\sqrt{3}$ α - und β -Phase	136
6.2. LEED-Bilder der Bi-Benetzungsschichten	137
6.3. k_{\perp} - k_{\parallel} -Plots der Mix und α -Phase	138
6.4. Stufenstrukturmodell von $\text{Bi}\sqrt{3} \times \sqrt{3}/\text{Si}(557)$	139
6.5. Bi(110) Wachstum auf Benetzungsschichten	140
6.6. 30 ML Bi(110)-Film präpariert auf Mix-Phase auf Si(557)	142
6.7. LEED-Bild 30 ML Bi auf Alpha Phase	143
6.8. STM-Messung an einem 30 ML Bi(110)-Film	144
6.9. $G(\Theta)$ eines 29 ML Bi(110)-Films	146
6.10. $G(T)$ gestufter Bi(110)-Film	147
6.11. $\Delta G(T)$ von 22 ML und 22+0.15 ML Bi	148
6.12. $G(B)$ und Hall-Widerstand 23 ML gestufter Bi(110)-Film	149
6.13. Magnetoleitwert und Hall-Widerstand nach Adsorption von Bi auf Bi(110)	150

Symbolverzeichnis

Symbol Erklärung

a'_{Si}	Gitterkonstante von Si(111), $a'_{Si}=3.84 \text{ \AA}$
a_{Si}	Reihenabstand von Si(111), $a_{Si} = \cos(30^\circ) \cdot a'_{Si}$
α_{RB}	Rashba-Parameter, $\alpha_{RB} = \frac{\hbar^2 k_0}{m^*}$
\vec{B}	Magnetfeld
Bi	Bismut (auch Wismut), Ordnungszahl 83
BL	Bilage, $1BL_{Bi(111)} = 1.14 \times 10^{15} \text{ Atome/cm}^2$
c	Verhältnis der Elektronen- und Löcherdichte, $c = \frac{p}{n}$
CDW	Charge Density Wave, Ladungsdichtewelle
Co	Cobalt, Ordnungszahl 27
d	atomare Stufenhöhe: $d_{Si}=3.14 \text{ \AA}$, $d_{Bi(111)}=3.94 \text{ \AA}$, $d_{Bi(110)}=3.27 \text{ \AA}$ auch: (223)-Stufenperiodizität von Pb/Si(557) oder Abstand der Pb-Drähte
Δ	mittlere Rautiefe einer Oberfläche, bestimmbar mit G(S)-Analyse
Fe	Eisen, Ordnungszahl 26
g	reziproker Gittervektor der (223)-Stufenperiodizität, $g = \frac{2\pi}{d}$
G	Leitwert, $G = \frac{I}{U}$, Einheit: Ω^{-1}
ΔG	$\Delta G = G(B) - G(0 \text{ T})$
G(S)	Gitterfaktor als Funktion der Streuphase, $G(S) = \frac{I_{\text{Gauss}}}{I_{\text{Gauss}} + I_{\text{Lorentz}}}$
Γ	Inselbreite, Terrassenbreite
H(S)	Volle Halbwertsbreite des Lorentzprofils eines Beugungsreflexes als Funktion der Streuphase, Bestimmung der Inselbreite Γ
I	elektrische Stromstärke, Einheit: Ampère (A)
\vec{j}	elektrische Stromdichte, Einheit: $\frac{A}{m^2}$
$\vec{k}_{ }$	Wellenvektorkomponente parallel zur Oberfläche
\vec{k}_{\perp}	Wellenvektorkomponente senkrecht zur Oberfläche
k_0	Rashba-Verschiebung relativ zum Γ -Punkt
Δk	Rashba-Aufspaltung, $\Delta k = 2k_0$
\vec{k}_F	Fermi-Wellenvektor
LEED	Low Energy Electron Diffraction
ML	Monolage
μ	Ladungsträgerbeweglichkeit, Einheit: cm^2/Vs
μ_n, μ_p	Elektronen- und Löcherbeweglichkeit bei System mit zwei Ladungsträgern
n	2D-Elektronendichte im Oberflächenzustand, Einheit: cm^{-2}

Symbol	Erklärung
p	2D-Löcherdichte im Oberflächenzustand, Einheit: cm^{-2}
Pb	Blei, Ordnungszahl 82
QHE	Quanten-Hall-Effekt
QSHE	Quanten-Spin-Hall-Effekt
ρ	spezifischer Widerstand
S	Streuphase, einheitenlos, beschreibt die Interferenz von Elektronenwellen bei LEED/SPA-LEED, konstruktiv bei S ganzzahlig, destruktiv bei S halbzahlig
SDW	Spin Density Wave, Spindichtewelle
Si	Silizium, Ordnungszahl 14
σ	elektrische Leitfähigkeit, Einheit: $(\Omega m)^{-1} = S m^{-1}$
SMSC	Semimetal-Semiconductor transition, Halbmetal-Halbleiter-Übergang
SPA-LEED	Spot Profile Analysing LEED
τ	Relaxationszeit der Drude-Theorie
τ_0	elastische Streuzzeit, Streuung an Defekten
τ_i	inelastische Streuzzeit, Streuung an Phononen
τ_{so}	Spin-Bahn Streuzzeit, Hikami-Theorie
τ_{is}	Streuung an Inseln, in Zusammenhang mit Nukleationstheorie
T	Zeitinversonsoperator, anti-unitär, $T^2 = -1$
Tb	Terbium, Ordnungszahl 65
ϑ	Einfallswinkel der Elektronen bei SPA-LEED
Θ	Bedeckung bzw. Schichtdicke
$\delta\Theta$	Zusatzbedeckung, Differenzbedeckung
TI	Topologischer Isolator
TR-Symmetrie	Time-reversal symmetry, Zeitinversionssymmetrie
U	elektrische Spannung, Einheit: Volt (V)
WAL	Weak Anti-Localization, Schwache Anti-Lokalisierung
WL	Weak Localization, Schwache Lokalisierung

Literaturverzeichnis

- [1] S. Datta and B. Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 56:665, 1990.
- [2] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.L. Qi, and S.C. Zhang. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.
- [3] J. Voit. One-Dimensional Fermi Liquids. *arXiv:cond-mat/*, 1:9510014, 1995.
- [4] S.I. Tomonaga. Elementary Theory of Quantum-Mechanical Collective Motion of Particles, I. *Progress of Theoretical Physics*, 13(5):467–481, 1955.
- [5] J. M. Luttinger. Analytic Properties of Single-Particle Propagators for Many-Fermion Systems. *Phys. Rev.*, 121:942–949, Feb 1961.
- [6] A. Schwartz, M. Dressel, G. Grüner, V. Vescoli, L. Degiorgi, and T. Giamarchi. On-chain electrodynamic of metallic $(\text{TMTSF})_2X$ salts: Observation of Tomonaga-Luttinger liquid response. *Phys. Rev. B*, 58:1261–1271, Jul 1998.
- [7] M. Bockrath, D.H. Cobden, J. Lu, A.G. Rinzler, R.E. Smalley, L. Balents, and P.L. McEuen. Luttinger-liquid behaviour in carbon nanotubes. *Nature*, 397(6720):598–601, 1999.
- [8] C. Blumenstein, J. Schäfer, S. Mietke, S. Meyer, A. Dollinger, M. Lochner, X.Y. Cui, L. Patthey, R. Matzdorf, and R. Claessen. Atomically controlled quantum chains hosting a Tomonaga-Luttinger liquid. *Nature Physics Letters*, pages 1–5, 2011.
- [9] F. Pedreschi, JD O’Mahony, P. Weightman, and JR Power. Evidence of electron confinement in the single-domain (4×1) -In superstructure on vicinal Si (111). *Applied Physics Letters*, 73:2152, 1998.
- [10] J. Schäfer, S. Meyer, C. Blumenstein, K. Roensch, R. Claessen, S. Mietke, M. Klink, T. Podlich, R. Matzdorf, A.A. Stekolnikov, S. Sauer, and F. Bechstedt. Self-organized atomic nanowires of noble metals on ge(001): atomic structure and electronic properties. *New Journal of Physics*, 11(12):125011, 2009.
- [11] A. van Houselt, T. Gnielka, J. M.J. Aan de Brugh, N. Oncel, D. Kockmann, R. Heid, K.P. Bohnen, B. Poelsema, and H.J.W. Zandvliet. Peierls instability in Pt chains on Ge(001). *Surface Science*, 602(10):1731 – 1735, 2008.
- [12] F. J. Himpsel, A. Kirakosian, J. N. Crain, J. L. Lin, and D. Y. Petrovykh. Self-assembly of one-dimensional nanostructures at Silicon surfaces. *Solid State Communications*, 117(3):149 – 157, 2001.

- [13] S. C. Erwin and F.J. Himpsel. Intrinsic magnetism at silicon surfaces. *Nature Communications*, 1:58:1–6, 2010.
- [14] C. Tegenkamp, Z. Kallassy, H. Pfnür, H.-L. Günter, V. Zielasek, and M. Henzler. Switching Between One and Two Dimensions: Conductivity of Pb-Induced Chain Structures on Si(557). *Phys. Rev. Lett.*, 95:176804, Oct 2005.
- [15] AJ Berlinsky. One-dimensional metals and charge density wave effects in these materials. *Rep. Prog. Phys.*, 42:1243, 1979.
- [16] G. Grüner. The dynamics of charge-density waves. *Rev. Mod. Phys.*, 60:1129–1181, Oct 1988.
- [17] G. Grüner. *Density waves in solids - Frontiers in physics*. Westview Press, 1994.
- [18] C. Zeng, PRC Kent, T.H. Kim, A.P. Li, and H.H. Weitering. Charge-order fluctuations in one-dimensional silicides. *Nature Materials*, 7(7):539–542, 2008.
- [19] H. W. Yeom, S. Takeda, E. Rotenberg, I. Matsuda, K. Horikoshi, J. Schaefer, C. M. Lee, S. D. Kevan, T. Ohta, T. Nagao, and S. Hasegawa. Instability and charge density wave of metallic quantum chains on a silicon surface. *Phys. Rev. Lett.*, 82:4898–4901, Jun 1999.
- [20] J.M. Carpinelli, H.H. Weitering, E.W. Plummer, and R. Stumpf. Direct observation of a surface charge density wave. *Nature*, 381(6581):398–400, 1996.
- [21] C. Tegenkamp, T. Ohta, J. L. McChesney, H. Dil, E. Rotenberg, H. Pfnür, and K. Horn. Coupled Pb Chains on Si(557): Origin of One-Dimensional Conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 100(7):076802, Feb 2008.
- [22] É. I. Rashba. Properties of semiconductors with an extremum loop i. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop. *Soviet Journal of Physics - Solit State Physics*, 2:1109, 1960.
- [23] J.H. Dil, F. Meier, J. Lobo-Checa, L. Patthey, G. Bihlmayer, and J. Osterwalder. Rashba-Type Spin-Orbit Splitting of Quantum Well States in Ultrathin Pb Films. *Physical Review Letters*, 101(26):266802, 2008.
- [24] J.E. Moore. The birth of topological insulators. *Nature*, 464(7286):194–198, 2010.
- [25] Ph. Hofmann. The surfaces of Bismuth: Structural and electronic properties. *Progress in Surface Science*, 81(5):191 – 245, 2006.
- [26] Yu. M. Koroteev, G. Bihlmayer, J. E. Gayone, E. V. Chulkov, S. Blügel, P. M. Echenique, and Ph. Hofmann. Strong Spin-Orbit Splitting on Bi Surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 93(4):046403, Jul 2004.
- [27] T. Hirahara, K. Miyamoto, I. Matsuda, T. Kadono, A. Kimura, T. Nagao, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov, S. Qiao, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, and S. Hasegawa. Direct observation of Spin splitting in Bismuth surface states. *Phys. Rev. B*, 76(15):153305, Oct 2007.

-
- [28] J. W. Wells, J. H. Dil, F. Meier, J. Lobo-Checa, V. N. Petrov, J. Osterwalder, M. M. Ugeda, I. Fernandez-Torrente, J. I. Pascual, E. D. L. Rienks, M. F. Jensen, and Ph. Hofmann. Nondegenerate Metallic States on Bi(114): A One-Dimensional Topological Metal. *Phys. Rev. Lett.*, 102(9):096802, Mar 2009.
- [29] T. Hirahara, I. Matsuda, S. Yamazaki, N. Miyata, S. Hasegawa, and T. Nagao. Large surface-state conductivity in ultrathin Bi films. *Applied Physics Letters*, 91:202106, 2007.
- [30] G. Jnawali, T. Wagner, H. Hattab, R. Möller, A. Lorke, and M. Horn-von Hoegen. Two-Dimensional Electron Transport and Scattering in Bi (111) Surface States. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, 8:27–31, 2010.
- [31] MP Seah and WA Dench. Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard data base for electron inelastic mean free paths in solids. *Surface and Interface Analysis*, 1(1):2–11, 1979.
- [32] M. Horn von Hoegen. Growth of semiconductor layers studied by Spot Profile Analysing Low Energy Electron Diffraction. *Zeitschrift für Kristallographie*, 214:591–629, 1999.
- [33] C. Davisson and L.H. Germer. Diffraction of electrons by a crystal of nickel. *Physical Review*, 30, 1927.
- [34] R.L. Park and J.E. Houston. The effect of registry degeneracy on LEED beam profiles. *Surface Science*, 18(2):213 – 227, 1969.
- [35] J. Wollschläger, E.Z. Luo, and M. Henzler. Thermal roughness of the homogeneous and inhomogeneous Cu(311) surface studied by high-resolution LEED. *Physical Review B*, 44:13031–13041, 1991.
- [36] J. Wollschläger, J. Falta, and M. Henzler. Electron diffraction at stepped homogeneous and inhomogeneous surfaces. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 50:57–68, 1990. 10.1007/BF00323955.
- [37] C. Klein, T. Nabbefeld, H. Hattab, D. Meyer, G. Jnawali, M. Kammler, F.J.M. Zu Heringdorf, A. Golla-Franz, BH Müller, T. Schmidt, et al. Lost in reciprocal space? Determination of the scattering condition in spot profile analysis low-energy electron diffraction. *Review of Scientific Instruments*, 82:035111, 2011.
- [38] N. W. Ashcroft and D.N. Mermin. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 3 edition, 2007.
- [39] Ch. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 14. edition, 2005.
- [40] S. Hunklinger. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2. edition, 2009.
- [41] A. B. Pippard. *Magnetoresistance in Metals*. Cambridge University Press, 1989.
- [42] D.K.C. MacDonald and K. Sarginson. Size effect variation of the electrical conductivity of metals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 203(1073):223–240, 1950.

- [43] G. Bergmann. Weak Localization in thin films : A time-of-flight experiment with conduction electrons. *Physics Reports*, 107(1):1 – 58, 1984.
- [44] P. W. Anderson, E. Abrahams, and T. V. Ramakrishnan. Possible Explanation of Nonlinear Conductivity in Thin-Film Metal Wires. *Phys. Rev. Lett.*, 43:718–720, Sep 1979.
- [45] S.-I. Kobayashi, F. Komori, Y. Ootuka, and W. Sasaki. $\ln(T)$ Dependence of Resistivity in Two-Dimensionally Coupled Fine Particles of Cu. *Journal of the Physical Society of Japan*, 49(4):1635–1636, 1980.
- [46] G. J. Dolan and D. D. Osheroff. Nonmetallic Conduction in Thin Metal Films at Low Temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 43:721–724, Sep 1979.
- [47] L. Van den Dries, C. Van Haesendonck, Y. Bruynseraede, and G. Deutscher. Two-Dimensional Localization in Thin Copper Films. *Phys. Rev. Lett.*, 46:565–568, Feb 1981.
- [48] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, and P. A. Lee. Interaction Effects in Disordered Fermi Systems in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 44:1288–1291, May 1980.
- [49] G. Bergmann. Weak anti-localization – An experimental proof for the destructive interference of rotated spin $1/2$. *Solid State Communications*, 42(11):815 – 817, 1982.
- [50] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito. Berry’s Phase and Absence of Back Scattering in Carbon Nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(8):2857–2862, 1998.
- [51] G. Bergmann. Influence of Spin-Orbit Coupling on Weak Localization. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1046–1049, Apr 1982.
- [52] S. Hikami, A. I. Larkin, and Y. Nagaoka. Spin-Orbit Interaction and Magnetoresistance in the Two Dimensional Random System. *Progress of Theoretical Physics*, 63(2):707–710, 1980.
- [53] O. Pfennigstorf. *Quantisierter Elektronischer Transport in ultradünnen Bleischichten*. PhD thesis, Universität Hannover, Fakultät für Mathematik und Physik, 2002.
- [54] P. Hofmann and JW Wells. Surface-sensitive conductance measurements. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21:013003, 2009.
- [55] M. Gombotz. Untersuchungen an dünnen Molybdän/Wolfram-und Chromschichten am computerunterstützten Vier-Spitzen-Messplatz. Master’s thesis, Universität Wien, 2002.
- [56] J.W. Wells, J.F. Kallehauge, and Ph. Hofmann. Surface-sensitive conductance measurements on clean and stepped semiconductor surfaces: Numerical simulations of four point probe measurements. *Surface Science*, 602(10):1742 – 1749, 2008.
- [57] F.M. Smits. Measurement of sheet resistivity with the four-point probe. *Bell Syst. Tech. Journal*, 37, 1958.
- [58] L.J. Van der Pauw. A method of measuring the resistivity and Hall coefficient on lamellae of arbitrary shape. *Philips Technical Review*, 20(8):220–224, 1958.

-
- [59] R. Winkler. *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*. Springer Verlag, 2003.
- [60] G. Dresselhaus. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures. *Phys. Rev.*, 100:580–586, Oct 1955.
- [61] Y.A. Bychkov and E.I. Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of physics C: Solid state physics*, 17:6039, 1984.
- [62] J.H. Dil. Spin and angle resolved photoemission on non-magnetic low-dimensional systems. *J. Phys.: Condens. Matter*, 21(403001):403001, 2009.
- [63] F. Meier, H. Dil, J. Lobo-Checa, L. Patthey, and J. Osterwalder. Quantitative vectorial spin analysis in angle-resolved photoemission: Bi/Ag(111) and Pb/Ag(111). *Phys. Rev. B*, 77:165431, Apr 2008.
- [64] M. Büttiker. Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors. *Phys. Rev. B*, 38:9375–9389, Nov 1988.
- [65] F. D. M. Haldane. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the Parity Anomaly. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.
- [66] J.C. Budich, F. Dolcini, P. Recher, and B. Trauzettel. Phonon-Induced Backscattering in Helical Edge States. *Phys. Rev. Lett.*, 108:086602, Feb 2012.
- [67] J. E. Moore and L. Balents. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, 75:121306, Mar 2007.
- [68] L. Petersen and P. Hedegård. A simple tight-binding model of spin-orbit splitting of sp-derived surface states. *Surface Science*, 459(1–2):49 – 56, 2000.
- [69] P. Roushan, J. Seo, C.V. Parker, YS Hor, D. Hsieh, D. Qian, A. Richardella, M.Z. Hasan, RJ Cava, and A. Yazdani. Topological surface states protected from backscattering by chiral spin texture. *Nature*, 460(7259):1106–1109, 2009.
- [70] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi, and M. Takahashi. Structure analysis of Si(111)-7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction. *Surface Science*, 164(2–3):367 – 392, 1985.
- [71] H. Ibach. *Physics of Surfaces and Interfaces*. Springer, 2006.
- [72] A. Kirakosian, R. Bennewitz, J. N. Crain, Th. Fauster, J.-L. Lin, D. Y. Petrovykh, and F. J. Himpsel. Atomically accurate Si grating with 5.73 nm period. *Applied Physics Letters*, 79(11):1608–1610, 2001.
- [73] C. Tegenkamp and H. Pfner. Switching between one-and two-dimensional conductance: Coupled chains in the monolayer of Pb on Si (557). *Surface science*, 601(13):2641–2646, 2007.

- [74] M. Henzler and R. Zhachuk. The step structure of the Si(557) surface. *Thin Solid Films*, 428(1-2):129 – 132, 2003. Proceedings of Symposium J on Growth and Evolution of Ultrathin Films: Surface and Interface Geometric and Electronic Structure, of the E-MRS Spring Conference.
- [75] O. Pfennigstorf, A. Petkova, Z. Kallassy, and M. Henzler. Conductivity of ultrathin Pb films during growth on Si (111) at low temperatures. *Eur. Phys. J. B*, 30:111–115, 2002.
- [76] O. Pfennigstorf, A. Petkova, H. L. Guenter, and M. Henzler. Conduction mechanism in ultrathin metallic films. *Phys. Rev. B*, 65(4):045412, Jan 2002.
- [77] I. Vilfan, M. Henzler, O. Pfennigstorf, and H. Pfnür. Anomalous thickness dependence of the Hall effect in ultrathin Pb layers on Si(111). *Phys. Rev. B*, 66(24):241306, Dec 2002.
- [78] K. Budde, E. Abram, V. Yeh, and M. C. Tringides. Uniform, self-organized, seven-step height Pb/Si(111) – (7 × 7) islands at low temperatures. *Phys. Rev. B*, 61:R10602–R10605, Apr 2000.
- [79] M. Hupalo and M. C. Tringides. Ultrafast kinetics in Pb/Si(111) from the collective spreading of the wetting layer. *Phys. Rev. B*, 75:235443, Jun 2007.
- [80] I. P. Hong. *Quantum Size Effects in Ultrathin Metallic Islands: a Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy Study*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2009.
- [81] C. Tegenkamp, Z. Kallassy, H.L. Günter, V. Zielasek, and H. Pfnür. Anisotropic conductance of Pb-induced chain structures on Si (557) in the monolayer regime. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 43(4):557–564, 2005.
- [82] M. Czubanowski, A. Schuster, S. Akbari, H. Pfnür, and C. Tegenkamp. Adsorbate induced refacetting: Pb chains on Si (557). *New Journal of Physics*, 9:338, 2007.
- [83] M. Yakes, V. Yeh, M. Hupalo, and M. C. Tringides. Self-organization at finite temperatures of the devil’s staircase in Pb/Si(111). *Phys. Rev. B*, 69(22):224103, Jun 2004.
- [84] K.S. Kim, H. Morikawa, W.H. Choi, and H.W. Yeom. Strong Lateral Electron Coupling of Pb Nanowires on Stepped Si(111): Angle-Resolved Photoemission Studies. *Phys. Rev. Lett.*, 99:196804, Nov 2007.
- [85] M. Czubanowski, A. Schuster, H. Pfnür, and C. Tegenkamp. Temperature-driven refacetting phase transition in Pb chains on Si(557). *Phys. Rev. B*, 77:174108, May 2008.
- [86] Y.F. Ogrin, VN Lutskii, and MI Elinson. Observation of quantum size effects in thin bismuth films. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 3:71, 1966.
- [87] F. Jona. Low-energy electron diffraction study of surfaces of Antimony and Bismuth. *Surface Science*, 8(1-2):57–76, 1967.
- [88] R. A. Hoffman and D. R. Frankl. Electrical Transport Properties of Thin Bismuth Films. *Phys. Rev. B*, 3(6):1825–1833, Mar 1971.

-
- [89] A. Kawazu, Y. Saito, H. Asahi, and G. Tominaga. Structure and electrical properties of thin bismuth films. *Thin Solid Films*, 37(2):261 – 266, 1976.
- [90] V. N. Lutsikii. Quantum size effect—present state and perspectives of experimental investigations. *physica status solidi (a)*, 1(2):199–220, 1970.
- [91] F. Laves. Kristallographie der Legierungen. *Naturwissenschaften*, 27:65–73, 1939. 10.1007/BF01493214.
- [92] A. Marx R. Gross. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 1 edition, 2012.
- [93] P. Cucka and CS Barrett. The crystal structure of Bi and of solid solutions of Pb, Sn, Sb and Te in Bi. *Acta Crystallographica*, 15(9):865–872, 1962.
- [94] J.-P. Issi. Low temperature transport properties of the Group V semimetals. *Australian Journal of Physics*, 32:585–628, 1979.
- [95] W. Setyawan and S. Curtarolo. High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools. *Computational Materials Science*, 49(2):299 – 312, 2010.
- [96] V.B. Sandomirkii. Quantum Size Effect in a Semimetal Film. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 25:101, 1967.
- [97] BA Tavger and V.Y. Demikhovskii. Quantum size effects in semiconducting and semimetallic films. *Soviet Physics Uspekhi*, 11:644, 1969.
- [98] C. A. Hoffman, J. R. Meyer, F. J. Bartoli, A. Di Venere, X. J. Yi, C. L. Hou, H. C. Wang, J. B. Ketterson, and G. K. Wong. Semimetal-to-Semiconductor transition in Bismuth thin films. *Phys. Rev. B*, 48(15):11431–11434, Oct 1993.
- [99] H. T. Chu. Comment on “Semimetal-to-semiconductor transition in bismuth thin films”. *Phys. Rev. B*, 51(8):5532–5534, Feb 1995.
- [100] C. A. Hoffman, J. R. Meyer, F. J. Bartoli, A. Di Venere, X. J. Yi, C. L. Hou, H. C. Wang, J. B. Ketterson, and G. K. Wong. Reply to “Comment on ‘Semimetal-to-Semiconductor transition in Bismuth thin films’“. *Phys. Rev. B*, 51(8):5535–5537, Feb 1995.
- [101] E.I. Rogacheva, S.G. Lyubchenko, and M.S. Dresselhaus. Semimetal-semiconductor transition in thin Bi films. *Thin Solid Films*, 516(10):3411 – 3415, 2008.
- [102] S. Xiao, D. Wei, and X. Jin. Bi (111) thin film with insulating interior but metallic surfaces. *Arxiv preprint arXiv:1201.1480*, 2012.
- [103] S. Yaginuma, T. Nagao, J.T. Sadowski, M. Saito, K. Nagaoka, Y. Fujikawa, T. Sakurai, and T. Nakayama. Origin of flat morphology and high crystallinity of ultrathin bismuth films. *Surface Science*, 601(17):3593 – 3600, 2007.
- [104] T. Nagao, J. T. Sadowski, M. Saito, S. Yaginuma, Y. Fujikawa, T. Kogure, T. Ohno, Y. Hasegawa, S. Hasegawa, and T. Sakurai. Nanofilm Allotrope and Phase Transformation of Ultrathin Bi Film on *Si(111) – 7 × 7*. *Phys. Rev. Lett.*, 93(10):105501, Aug 2004.

- [105] T. Nagao, S. Yaginuma, M. Saito, T. Kogure, JT Sadowski, T. Ohno, S. Hasegawa, and T. Sakurai. Strong lateral growth and crystallization via two-dimensional allotropic transformation of semi-metal Bi film. *Surface Science*, 590(1):247–252, 2005.
- [106] M. Kammler and M. Horn von Hoegen. Low energy electron diffraction of epitaxial growth of bismuth on Si(111). *Surface Science*, 576(1-3):56 – 60, 2005.
- [107] D. L. Partin, J. Heremans, D. T. Morelli, C. M. Thrush, C. H. Olk, and T. A. Perry. Growth and characterization of epitaxial bismuth films. *Phys. Rev. B*, 38(6):3818–3824, Aug 1988.
- [108] J. A. van Hulst. *Mesoscopic phenomena in single crystalline Bismuth systems*. PhD thesis, Universität Delft, 1995.
- [109] J. A. van Hulst, H. M. Jaeger, and S. Radelaar. Epitaxial growth of Bismuth films and Bismuth-Antimony heterostructures. *Phys. Rev. B*, 52(8):5953–5961, Aug 1995.
- [110] G. Jnawali, H. Hattab, B. Krenzer, and M. Horn von Hoegen. Lattice accommodation of epitaxial Bi(111) films on Si(001) studied with SPA-LEED and AFM. *Phys. Rev. B*, 74(19):195340, Nov 2006.
- [111] C. R. Ast and H. Höchst. Fermi Surface of Bi(111) Measured by Photoemission Spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 87(17):177602, Oct 2001.
- [112] M.C. Cottin, C.A. Bobisch, J. Schaffert, G. Jnawali, A. Sonntag, G. Bihlmayer, and R. Möller. Anisotropic scattering of surface state electrons at a point defect on Bi(111). *Applied Physics Letters*, 98:022108, 2011.
- [113] T. Hirahara, T. Nagao, I. Matsuda, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov, Yu. M. Koroteev, P. M. Echenique, M. Saito, and S. Hasegawa. Role of Spin-Orbit Coupling and Hybridization Effects in the Electronic Structure of Ultrathin Bi Films. *Phys. Rev. Lett.*, 97(14):146803, Oct 2006.
- [114] S. Agergaard, C. Søndergaard, H. Li, MB Nielsen, SV Hoffmann, Z. Li, and P. Hofmann. The effect of reduced dimensionality on a semimetal: the electronic structure of the Bi (110) surface. *New Journal of Physics*, 3:15, 2001.
- [115] J.I. Pascual, G. Bihlmayer, Y.M. Koroteev, H.P. Rust, G. Ceballos, M. Hansmann, K. Horn, E.V. Chulkov, S. Blügel, P.M. Echenique, et al. Role of spin in quasiparticle interference. *Physical review letters*, 93(19):196802, 2004.
- [116] Yu. M. Koroteev, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov, and S. Blügel. First-principles investigation of structural and electronic properties of ultrathin Bi films. *Phys. Rev. B*, 77:045428, Jan 2008.
- [117] G. Jnawali, C. Klein, Th. Wagner, H. Hattab, P. Zahl, D. P. Acharya, P. Sutter, A. Lorke, and M. Horn-von Hoegen. Manipulation of Electronic Transport in the Bi(111) Surface State. *Phys. Rev. Lett.*, 108:266804, Jun 2012.
- [118] R. N. Bhargava. De Haas-van Alphen and Galvanomagnetic Effect in Bi and Bi-Pb alloys. *Phys. Rev.*, 156:785–797, Apr 1967.

-
- [119] N. Marcano, S. Sangiao, C. Magén, L. Morellón, M. R. Ibarra, M. Plaza, L. Pérez, and J. M. De Teresa. Role of the surface states in the magnetotransport properties of ultrathin bismuth films. *Phys. Rev. B*, 82(12):125326, Sep 2010.
- [120] D. Lükermann, S. Sologub, H. Pfnür, and C. Tegenkamp. Sensing surface states of Bi films by magnetotransport. *Phys. Rev. B*, 83(24):245425, Jun 2011.
- [121] H. Pfnür, D. Lükermann, and C. Tegenkamp. The dominance of surfaces and interfaces: A view to magnetoconductance and structure in low-dimensional crystalline films. *physica status solidi (a)*, 209(4):627–635, 2012.
- [122] R. E. Honig. A Fairy Tale: Vapor pressure data of the elements. *RCA Review*, 1958.
- [123] G. Sauerbrey. Verwendung von Schwingquarzen zur Wägung dünner Schichten und zur Mikrowägung. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 155(2):206–222, 1959.
- [124] U. Scheithauer, G. Meyer, and M. Henzler. A new LEED instrument for quantitative spot profile analysis. *Surface Science*, 178(1–3):441 – 451, 1986.
- [125] M. Henzler. Defects at semiconductor surfaces. *Surface Science*, 152-153, Part 2:963–975, 1985.
- [126] K.D. Gronwald and M. Henzler. Epitaxy of Si(111) as studied with a new high resolving LEED system. *Surface Science*, 117(1–3):180 – 187, 1982.
- [127] M. Hoesch, T. Greber, VN Petrov, M. Muntwiler, M. Hengsberger, W. Auwarter, and J. Osterwalder. Spin-polarized Fermi surface mapping. *Journal of electron spectroscopy and related phenomena*, 124(2-3):263–279, 2002.
- [128] M. Hoesch. *Spin-resolved Fermi Surface Mapping*. PhD thesis, Universität Zürich, 2002.
- [129] N.F. Mott. The scattering of fast electrons by atomic nuclei. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 124(794):425–442, 1929.
- [130] N. Sherman. Coulomb Scattering of Relativistic Electrons by Point Nuclei. *Phys. Rev.*, 103:1601–1607, Sep 1956.
- [131] F. Meier, JH Dil, and J. Osterwalder. Measuring spin polarization vectors in Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. *New Journal of Physics*, 11:125008, 2009.
- [132] H. Morikawa, K.S. Kim, Y. Kitaoka, T. Hirahara, S. Hasegawa, and H.W. Yeom. Conductance transition and interwire ordering of Pb nanowires on Si(557). *Phys. Rev. B*, 82(4):045423, Jul 2010.
- [133] A. Petkova, J. Wollschläger, H.-L. Günter, and M. Henzler. Order and disorder in ultrathin Pb films grown on Si(1 1 1) 7×7 substrates at low temperatures. *Surface Science*, 482–485, Part 2(0):922 – 927, 2001.
- [134] D. Lükermann, H. Pfnür, and C. Tegenkamp. Anisotropic conductance oscillations in Pb films on Si(557). *Phys. Rev. B*, 82(4):045401, Jul 2010.

- [135] D. Lükermann, M. Gauch, M. Czubanowski, H. Pfnür, and C. Tegenkamp. Magnetotransport in anisotropic Pb films and monolayers. *Phys. Rev. B*, 81(12):125429, Mar 2010.
- [136] C. Tegenkamp, D. Lükermann, S. Akbari, M. Czubanowski, A. Schuster, and H. Pfnür. Pb nanowires on vicinal Si(111) surfaces: Effects of refacetting on transport. *Phys. Rev. B*, 82:205413, Nov 2010.
- [137] C. Tegenkamp, D. Lükermann, H. Pfnür, B. Slomski, G. Landolt, and J.H. Dil. Fermi nesting between atomic wires with strong spin-orbit coupling. *Phys. Rev. Lett.*, accepted, 2012.
- [138] K. Fuchs and N.F. Mott. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 34:100–108, 1938.
- [139] E.H. Sondheimer. The influence of a transverse magnetic field on the conductivity of thin metallic films. *Physical Review*, 80(3):401–406, 1950.
- [140] M. Jalochowski, E. Bauer, H. Knoppe, and G. Lilienkamp. Experimental evidence for quantum-size-effect fine structures in the resistivity of ultrathin Pb and Pb-In films. *Phys. Rev. B*, 45(23):13607–13613, Jun 1992.
- [141] M. Jalochowski, M. Hoffmann, and E. Bauer. Pb layer-by-layer growth at very low temperatures. *Phys. Rev. B*, 51(11):7231–7238, Mar 1995.
- [142] N. Miyata, K. Horikoshi, T. Hirahara, S. Hasegawa, CM Wei, and I. Matsuda. Electronic transport properties of quantum-well states in ultrathin Pb(111) films. *Physical Review B Condensed Matter And Materials Physics*, 78(24):245405, 2008.
- [143] O. Pfennigstorf, K. Lang, H.-L. Günter, and M. Henzler. Electronic transport in ultrathin epitaxial Pb films on Si(111) surfaces. *Applied Surface Science*, 162–163(0):537 – 546, 2000.
- [144] J.H. Dil, T.U. Kampen, B. Hülsen, T. Seyller, and K. Horn. Quantum size effects in quasi-free-standing Pb layers. *Physical Review B*, 75(16):161401, 2007.
- [145] N. Trivedi and N.W. Ashcroft. Quantum size effects in transport properties of metallic films. *Phys. Rev. B*, 38(17):12298–12309, Dec 1988.
- [146] D. Calecki and G. Fishman. Surface-limited resistivity in 2D-semiconductors and 2D-metals: Influence of roughness modeling. *Surface Science*, 229(1-3):110–112, 1990.
- [147] J.P. Rönspies, S. Wießell, and H. Pfnür. The resistance of single atomic steps in ultrathin Pb nanowires on Si (557). *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 100(4):1007–1012, 2010.
- [148] M. Czubanowski, H. Pfnür, and C. Tegenkamp. Atomic chain ordering with ultra-long periods: Pb/Si(557). *Surface Science*, 603(19):L121 – L124, 2009.
- [149] J. W. Wells, J. F. Kallehauge, T. M. Hansen, and Ph. Hofmann. Disentangling Surface, Bulk, and Space-Charge-Layer Conductivity in Si(111)-(7×7). *Phys. Rev. Lett.*, 97:206803, Nov 2006.

-
- [150] D. Pacilé, C. R. Ast, M. Papagno, C. Da Silva, L. Moreschini, M. Falub, Ari P. Seitsonen, and M. Grioni. Electronic structure of an ordered Pb/Ag(111) surface alloy: Theory and experiment. *Phys. Rev. B*, 73:245429, Jun 2006.
- [151] T. Okuda, K. Miyamaoto, Y. Takeichi, H. Miyahara, M. Ogawa, A. Harasawa, A. Kimura, I. Matsuda, A. Kakizaki, T. Shishidou, and T. Oguchi. Large out-of-plane spin polarization in a spin-splitting one-dimensional metallic surface state on Si(557)-Au. *Phys. Rev. B*, 82:161410, Oct 2010.
- [152] T. Block, C. Tegenkamp, J. Baringhaus, H. Pfnür, and T. Inaoka. Plasmons in pb nanowire arrays on si(557): Between one and two dimensions. *Phys. Rev. B*, 84:205402, Nov 2011.
- [153] C.R. Ast, J. Henk, A. Ernst, L. Moreschini, M. C. Falub, D. Pacilé, P. Bruno, K. Kern, and M. Grioni. Giant spin splitting through surface alloying. *Phys. Rev. Lett.*, 98:186807, May 2007.
- [154] K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, and T. Aruga. Large Rashba spin splitting of a metallic surface-state band on a semiconductor surface. *Nature Communications*, 1:17, 2010.
- [155] W. Tremel and E.W. Finckh. Ladungsdichtewellen. *Chemie in unserer Zeit*, pages 326–339, 2004.
- [156] E. Fawcett. Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium. *Rev. Mod. Phys.*, 60:209–283, Jan 1988.
- [157] A. W. Overhauser. Spin density waves in an electron gas. *Phys. Rev.*, 128:1437–1452, Nov 1962.
- [158] A. Schuster. Strukturelle Eigenschaften von Pb-Ketten auf Si(557). Master’s thesis, Universität Hannover, 2008.
- [159] M. Jalochowski, M. Strożak, and R. Zdyb. Gold-induced ordering on vicinal Si(111). *Surface Science*, 375(2–3):203 – 209, 1997.
- [160] P. Segovia, D. Purdie, M. Hengsberger, and Y. Baer. Observation of spin and charge collective modes in one-dimensional metallic chains. *Nature*, 402(6761):504–507, 1999.
- [161] R. Losio, K. N. Altmann, A. Kirakosian, J.-L. Lin, D. Y. Petrovykh, and F. J. Himpsel. Band splitting for si(557)-au: Is it spin-charge separation? *Phys. Rev. Lett.*, 86:4632–4635, May 2001.
- [162] J. R. Ahn, H. W. Yeom, H. S. Yoon, and I.-W. Lyo. Metal-Insulator Transition in Au Atomic Chains on Si with Two Proximal Bands. *Phys. Rev. Lett.*, 91:196403, Nov 2003.
- [163] K. S. Kim, W. H. Choi, and H. W. Yeom. Photoemission study of the anisotropic phase formation of Pb on Si(557). *Phys. Rev. B*, 75:195324, May 2007.
- [164] D. A. Shirley. High-resolution x-ray photoemission spectrum of the valence bands of gold. *Phys. Rev. B*, 5:4709–4714, Jun 1972.

- [165] S. Hüfner and G.K. Wertheim. Systematics of core line asymmetries in XPS spectra of Ni. *Physics Letters A*, 51(5):301 – 303, 1975.
- [166] V. Dudr, N. Tsud, S. Fabík, B. Ressel, M. Vondráček, K.C. Prince, V. Matolín, and V. Cháb. Photoemission study of two dimensional phase transitions on the Pb/Si(111) surface. *Surface Science*, 566–568, Part 2(0):804 – 809, 2004. Proceedings of the 22nd European Conference on Surface Science.
- [167] C. J. Karlsson, E. Landemark, Y.-C. Chao, and R. I. G. Uhrberg. Atomic origins of the surface components in the Si 2 *p* core-level spectra of the Si(111)7×7 surface. *Phys. Rev. B*, 50:5767–5770, Aug 1994.
- [168] D. Lükermann, S. Sologub, H. Pfnür, C. Klein, M. Horn-von Hoegen, and C. Tegenkamp. Scattering at magnetic and nonmagnetic impurities on surfaces with strong spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, 86:195432, Nov 2012.
- [169] G. Jnawali, H. Hattab, C. A. Bobisch, A. Bernhart, E. Zubkov, R. Möller, and M. Horn-von Hoegen. Homoepitaxial growth of Bi(111). *Phys. Rev. B*, 78:035321, Jul 2008.
- [170] F. Komori, S.I. Kobayachi, and W. Sasaki. The Anti-Localization Effect in Bi Thin Films. *Journal of the Physical Society of Japan*, 52(2):368–371, 1983.
- [171] Y.F. Komnik, IB Berkutov, and VV Andrievskii. Spin-orbit interaction in thin bismuth films. *Low Temperature Physics*, 31:326, 2005.
- [172] J. Chen, H. J. Qin, F. Yang, J. Liu, T. Guan, F. M. Qu, G. H. Zhang, J. R. Shi, X. C. Xie, C. L. Yang, K. H. Wu, Y. Q. Li, and L. Lu. Gate-Voltage Control of Chemical Potential and Weak Antilocalization in Bi₂Se₃. *Phys. Rev. Lett.*, 105:176602, Oct 2010.
- [173] H. Lu, J. Shi, and S. Shen. Competition between Weak Localization and Antilocalization in Topological Surface States. *Phys. Rev. Lett.*, 107:076801, Aug 2011.
- [174] M. Liu, J. Zhang, C.Z. Chang, Z. Zhang, X. Feng, K. Li, K. He, L.L. Wang, X. Chen, X. Dai, Z. Fang, Q.K. Xue, X. Ma, and Y. Wang. Crossover between Weak Antilocalization and Weak Localization in a Magnetically Doped Topological Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 108:036805, Jan 2012.
- [175] Y. Y. Proskuryakov, A. K. Savchenko, S. S. Safonov, M. Pepper, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie. Fermi-Liquid Behavior of the Low-Density 2D Hole Gas in a GaAs/AlGaAs Heterostructure at Large Values of r_s . *Phys. Rev. Lett.*, 86:4895–4898, May 2001.
- [176] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, JH Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, JG Checkelsky, NP Ong, et al. A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime. *Nature*, 460(7259):1101–1105, 2009.
- [177] L.A. Wray, S.Y. Xu, Y. Xia, D. Hsieh, A.V. Fedorov, Y. San Hor, R.J. Cava, A. Bansil, H. Lin, and M.Z. Hasan. A topological insulator surface under strong Coulomb, magnetic and disorder perturbations. *Nature Physics*, 7(1):32–37, 2010.

- [178] Y. Okada, C. Dhital, W. Zhou, E. D. Huemiller, H. Lin, S. Basak, A. Bansil, Y.-B. Huang, H. Ding, Z. Wang, S. D. Wilson, and V. Madhavan. Direct Observation of Broken Time-Reversal Symmetry on the Surface of a Magnetically Doped Topological Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 106:206805, May 2011.
- [179] Z.H. Pan, DR Gardner, S. Chu, YS Lee, and T. Valla. Scattering on Magnetic and Non-magnetic Impurities on the Surface of a Topological Insulator. *Arxiv preprint arXiv:1104.0966*, 2011.
- [180] T. Valla, Z.-H. Pan, D. Gardner, Y. S. Lee, and S. Chu. Photoemission Spectroscopy of magnetic and nonmagnetic Impurities on the Surface of the Bi_2Se_3 Topological Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 108:117601, Mar 2012.
- [181] M. Ye, S. V. Eremeev, K. Kuroda, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, Y. Takeda, Y. Saitoh, K. Okamoto, S. Y. Zhu, K. Miyamoto, M. Arita, M. Nakatake, T. Okuda, Y. Ueda, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, and A. Kimura. Quasiparticle interference on the surface of Bi_2Se_3 induced by cobalt adatom in the absence of ferromagnetic ordering. *Phys. Rev. B*, 85:205317, May 2012.
- [182] M. R. Scholz, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Varykhalov, A. Volykhov, L. V. Yashina, and O. Rader. Tolerance of Topological Surface States towards Magnetic Moments: Fe on Bi_2Se_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 108:256810, Jun 2012.
- [183] K.N.R. Taylor and M.I. Darby. *Physics of Rare Earth Solids*. Chapman and Hall LTD, 1974.
- [184] J.A. Venables, G.D.T. Spiller, and M. Hanbucken. Nucleation and growth of thin films. *Reports on Progress in Physics*, 47(4):399, 1984.
- [185] Harald Brune. Microscopic view of epitaxial metal growth: nucleation and aggregation. *Surface Science Reports*, 31(4–6):125 – 229, 1998.
- [186] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146802, Sep 2005.
- [187] B. Andrei Bernevig and Shou-Cheng Zhang. Quantum Spin Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.*, 96:106802, Mar 2006.
- [188] T. Kuzumaki, T. Shirasawa, S. Mizuno, N. Ueno, H. Tochihara, and K. Sakamoto. Re-investigation of the Bi-induced Si (111)-(1 \times 1) surfaces by low-energy electron diffraction. *Surface Science*, 604(11-12):1044–1048, 2010.
- [189] Y. Saito, A. Kawazu, and G. Tominaga. An influence of the first adlayer structure on the sticking coefficient of the successive adsorption in a system of bismuth on silicon (111) surface. *Surface Science*, 103(2–3):563 – 575, 1981.
- [190] Toshio Takahashi, Shinichiro Nakatani, Tetsuya Ishikawa, and Seishi Kikuta. Surface structure analysis of $\text{Si}(111)-\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$ by X-ray diffraction — Approach to the solution of the phase problem. *Surface Science*, 191(3):L825 – L834, 1987.

- [191] T. Abukawa, C.Y. Park, and S. Kono. Photoelectron diffraction study of the atomic geometry of the Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sb surface. *Surface Science*, 201(3):L513 – L518, 1988.
- [192] K. J. Wan, T. Guo, W. K. Ford, and J. C. Hermanson. Initial growth of Bi films on a Si(111) substrate: Two phases of $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ low-energy-electron-diffraction pattern and their geometric structures. *Phys. Rev. B*, 44(7):3471–3474, Aug 1991.
- [193] J. Sun, A. Mikkelsen, M. Fuglsang Jensen, Y. M. Koroteev, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov, D. L. Adams, Ph. Hofmann, and K. Pohl. Structural determination of the Bi(110) semi-metal surface by LEED analysis and *ab initio* calculations. *Phys. Rev. B*, 74:245406, Dec 2006.
- [194] R. Wiesendanger, H.-J. Güntherodt, G. Güntherodt, R. J. Gambino, and R. Ruf. Observation of vacuum tunneling of spin-polarized electrons with the scanning tunneling microscope. *Phys. Rev. Lett.*, 65:247–250, Jul 1990.
- [195] R. Wiesendanger, IV Shvets, D. Bürgler, G. Tarrach, HJ Güntherodt, JM Coey, S. Gräser, et al. Topographic and magnetic-sensitive scanning tunneling microscope study of magnetite. *Science (New York, NY)*, 255(5044):583, 1992.
- [196] S. Heinze, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, S. Blügel, and R. Wiesendanger. Real-Space Imaging of Two-Dimensional Antiferromagnetism on the Atomic Scale. *Science*, 288(5472):1805–1808, 2000.
- [197] K. Fleischer. *Optical anisotropy and vibrational properties of Sn, In, and Cs nanowires*. PhD thesis, TU Berlin, 2005.
- [198] G. Zhang, H. Qin, J. Teng, J. Guo, Q. Guo, X. Dai, Z. Fang, and K. Wu. Quintuple-layer epitaxy of thin films of topological insulator Bi₂Se₃. *Applied Physics Letters*, 95(5):053114–053114–3, Aug 2009.
- [199] H D Li, Z Y Wang, X Kan, X Guo, H T He, Z Wang, J N Wang, T L Wong, N Wang, and M H Xie. The van der Waals epitaxy of Bi₂Se₃ on the vicinal Si(111) surface: an approach for preparing high-quality thin films of a topological insulator. *New Journal of Physics*, 12(10):103038, 2010.
- [200] L. He, F. Xiu, Y. Wang, A.V. Fedorov, G. Huang, X. Kou, M. Lang, W.P. Beyermann, J. Zou, and K.L. Wang. Epitaxial growth of Bi₂Se₃ topological insulator thin films on Si (111). *Journal of Applied Physics*, 109(10):103702, 2011.

Lebenslauf

Persönliche Angaben

- Geboren: 20.03.1983, in Detmold
- Familienstand: ledig
- Nationalität: Deutsch

Ausbildung

- **1993-2002:** Gymnasium in Lage
- **Jun. 2002:** Abitur
- **2003-2009:** Physikstudium, Universität Bielefeld
- **2006:** Auslandssemester an der Universität Helsinki, Finnland
- **seit Feb. 2009:** Vorbereitung der Promotion am Institut für Festkörperphysik der Leibniz Universität Hannover

Akademische Abschlüsse

- **Aug. 2006:** Bachelor of Science, *Untersuchung von Dünnschichtsolarzellen hinsichtlich Morphologie, Topologie und chemischer Zusammensetzung*
- **Jan. 2009:** Master of Science, *Herstellung von für CIGS-Dünnschichtsolarzellen relevanten Metall-Einzelschichten mit dem MOCVD Verfahren*

Wehrdienst

- **2002-2003:** Panzerartilleriebataillon 215 in Augustdorf

Publikationsliste

Abgedruckte Veröffentlichungen

1. H. Pfnür, C. Tegenkamp, M. Czubanowski, D. Lükermann, J. Rönspies and S. Wießell
Correlation of geometrical and electronic properties in metallic nanowires
Phys. Status solidi B 247, No. 10, 2509-2521 (2010)
2. D. Lükermann, M. Gauch, M. Czubanowski, H. Pfnür, and C. Tegenkamp
Magneto transport in anisotropic Pb films and monolayers
Phys. Rev. B 81, 125429 (2010)
3. D. Lükermann, H. Pfnür, and C. Tegenkamp
Anisotropic conductance oscillations in Pb films on Si(557)
Phys. Rev. B 82, 045401 (2010)
4. C. Tegenkamp, D. Lükermann, S. Akbari, M. Czubanowski, A. Schuster, and H. Pfnür
Pb nanowires on vicinal Si(111) surfaces: effects of refacetting on transport
Phys. Rev. B 82, 205413 (2010)
5. D. Lükermann, S. Sologub, H. Pfnür and C. Tegenkamp
Sensing surface states of Bi films by magneto transport
Phys. Rev. B 83, 245425 (2011)
6. H. Pfnür, D. Lükermann and C. Tegenkamp
The dominance of surfaces and interfaces: A view to magnetoconductance and structure
in low-dimensional crystalline films
Phys. Stat. Solidi 209, 627-635 (2012)
7. D. Lükermann, S. Sologub, H. Pfnür, C. Klein, M. Horn-von Hoegen and C. Tegenkamp
Scattering at magnetic and non-magnetic impurities on surfaces with strong spin-orbit
coupling
Phys. Rev. B 86, 195432 (2012)
8. C. Tegenkamp, D. Lükermann, H. Pfnür, G. Landolt, B. Slomski, J.H. Dil
Fermi nesting between atomic wires with strong spin-orbit coupling
Phys. Rev. Lett. 109, 266401 (2012)

Danksagung

Abschließend möchte ich mich bei denjenigen bedanken, ohne die ich den Weg der Promotion nicht hätte gehen können.

An erster Stelle gilt mein Dank Herrn apl. Prof. Dr. Christoph Tegenkamp, der die Arbeit betreut hat. Durch sein Interesse am Fortschritt meiner Experimente trägt er einen großen Anteil am Gelingen der Arbeit. In unzähligen wissenschaftlichen Diskussionen gab er mir immer wieder neue Denkanstöße, die die Ergebnisauswertung qualitativ verbesserte. Gerne denke ich an die gemeinsamen Experimente an der Swiss Light Source in Villigen zurück. Prof. Dr. Herbert Pfnür danke ich für die Möglichkeit an seinem Lehrstuhl die Promotion durchzuführen, sowie für die vielen fruchtbaren wissenschaftlichen Diskussionen mit ihm.

Prof. Dr. Rolf Haug und Prof. Dr. Michael Horn-von Hoegen danke ich für die Übernahme des Koreferats meiner Dissertation, Prof. Dr. Eric Jeckelmann für den Vorsitz des Prüfungskollegiums bei der Disputation.

Dr. Sergii Sologub danke ich für die gemeinsamen Messungen, sowie für die wissenschaftlichen Diskussionen, während seiner Aufenthalte am Institut für Festkörperphysik in 2010 und 2011. Es war mir immer eine Freude mit ihm zusammen zu arbeiten. (I would like to thank Dr. Sergii Sologub for the measurements in my laboratory as well as for a lot of fruitful discussions during his stays in Hanover in 2010 and 2011. Moreover it was always a pleasure for me, to work with him together.)

Den Kooperationspartnern anderer Universitäten und Institute, mit denen wir gemeinsame Veröffentlichungen realisiert haben, danke ich für ihr Engagement und die immer gute Zusammenarbeit. An dieser Stelle zu nennen ist das Team vom Paul Scherrer Institut an der Swiss Light Source: Dr. J. Hugo Dil, Bartosz Slomski und Gabriel Landolt; von der Universität Duisburg-Essen: Prof. Dr. Michael Horn-von Hoegen und Claudius Klein; von der Universität Paderborn: Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt, Dr. Uwe Gerstmann und Dr. Eva Rauls.

Den Bachelor-, Master- und Diplomstudenten, die während meiner Zeit als Doktorand ihre Abschlussarbeiten in meinem Labor anfertigten gilt ein besonderer Dank. Diese sind: Saddam Banyoudeh, Melanie Gauch, Malte Halbauer und Christopher Krich. Meinem Nachfolger Phillip Kröger wünsche ich alles Gute für seine Promotion und Durchhaltevermögen bei den kommenden Experimenten.

Allen Mitarbeitern des Instituts für Festkörperphysik, Abteilung ATMOS möchte ich mich für die angenehme Arbeitsatmosphäre und das sehr kollegiale Miteinander in den letzten vier Jahren bedanken. Ebenso haben die Mitarbeiter der Mechanik- und Elektronikwerkstatt mich bei technischen Problemen und Umbauarbeiten stets tatkräftig unterstützt. Frau Klara Wernecke gelang es immer, mir die gewünschten Mengen flüssigen Heliums für die Magnet-Messungen

bereit zu stellen. Christian Brand danke ich für die Bereitstellung von STM-Messungen, die in der Arbeit verwendet wurden.

Ich bin sehr froh sagen zu können, in der Arbeitsgruppe auch echte Freunde gewonnen zu haben. Daher danke ich Jens Baringhaus, Tammo Block, Ulrich Krieg und Thomas Langer für die gemeinsame Zeit, in der wir viel gelacht haben und das ein oder andere Feierabendbier genossen haben. Was wäre die Promotion nur ohne das Extrakt gewesen. Und wo würde das Extrakt heute stehen, wenn sie uns nicht als Stammgäste gehabt hätten.

Meinen Eltern Helga und Rudolf Lükermann danke ich für ihre Unterstützung und den Rückhalt während meines Studiums. Meinem Zwillingsbruder Florian Lükermann danke ich für seine Unterstützung während des Studiums und dafür, dass er immer ein offenes Ohr für mich hat.

Meiner Freundin Wiebke Rötsch danke ich für ihre unglaublich liebevolle Unterstützung und ihr Verständnis für die wenige gemeinsame Freizeit in den letzten Wochen und Monaten.