Kapitel 1

Einleitung

Die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Halbleitergrenzflächen sind bei der Herstellung moderner elektronischer Bauteile von wesentlicher Bedeutung. Das Verständnis der Prozeßschritte wie Oxidation, Diffusion, Ätzen und Metallisation bedarf einer exzellenten Kenntnis der Vorgänge, welche das Verhalten der reinen Halbleiteroberflächen und der Grenzflächen zwischen Halbleitern und anderen Materialien wie Metallen und anderen Halbleitern bestimmen. Forschung in dieser Richtung sollte auf dem grundlegenden Niveau, nämlich mit der Beschreibung der atomaren Struktur der Oberflächen und Grenzflächen beginnen. Die Entdeckung, daß die Höhe der Schottky-Barriere stark von der Rekonstruktion der Grenzfläche abhängig ist, unterstreicht die Notwendigkeit, detaillierte Kenntnisse über die atomare Anordnung an der Grenzfläche zu erlangen. Die Grenzfläche selbst ist vielen Methoden der Oberflächenphysik nicht zugänglich. Oftmals bilden die Grenzflächen im Anfangsstadium des Wachstums jedoch eine Art Schablone für das Wachstum dickerer Schichten und die Struktur der ursprünglichen Grenzfläche bleibt erhalten. Durch ein sorgfältiges Studium der Anfangsstadien des Wachstums kann deshalb viel über die Bildung der Grenzfläche gelernt werden.

Darüberhinaus sind einzelne und periodische Strukturen auf Festkörperoberflächen mit Ausdehnungen im Nanometerbereich in den letzten Jahren auf großes Interesse gestoßen. Von diesen Nanostrukturen werden interessante physikalische und chemische Eigenschaften erwartet. Nachdem konventionelle lithographische Methoden im Größenbereich von wenigen Nanometern nicht anwendbar sind, existieren zwei prinzipiell komplementäre Methoden zur kontrollierten Herstellung der Nanostrukturen, nämlich direkte Methoden wie die Manipulation einzelner Atome mittels Rastertunnelmikroskopie und Methoden unter Ausnutzung der Selbstorganisation der Oberflächenstrukturen während des Wachstums oder Abtrags. Die Selbstorganisation besitzt gegenüber den direkten Methoden den für die Silizium-Technologie unverzichtbaren Vorteil, gleichzeitig über die gesamte Ausdehnung des Wafers wirken zu können. Die selbstorganisierten Nanostrukturen können wie im Fall der InAs/GaAs-Quantenpunkte bereits selbst die angestrebten Eigenschaften aufweisen oder als Schablone für das Wachstum der gewünschten Strukturen dienen.

In dieser Arbeit wurde als Instrument zur Untersuchung der Oberflächen hauptsächlich die Rastertunnelmikroskopie (*scanning tunneling microscopy*, STM) eingesetzt. STM wurde Anfang der 80'er Jahre entwickelt und hat in kurzer Zeit wegen seiner hervorragenden Möglichkeiten den Zugang zur Untersuchung von Festkörperoberflächen revolutioniert. Im Gegensatz zu Beugungsexperimenten, die traditionell zur Strukturaufklärung genutzt werden, ermöglicht STM *lokale* Informationen bei einer Auflösung bis hinunter zu atomaren Abständen direkt im *Ortsraum* zu erhalten. Die Ortsrauminformation ist besonders wichtig für die Untersuchung nicht-periodischer Oberflächenstrukturen und Defekte. STM liefert eine Karte der lokalen Zustandsdichteverteilung von Valenz- und Leitungselektronen der Oberflächenatome. Die Topographie der Karte ist nicht allein durch die geometrische Anordnung der Atome an der Oberfläche, sondern auch durch lokale elektronische Eigenschaften der Oberfläche bestimmt. Der elektronische Anteil birgt ein großes Informationspotential, erschwert aber die Zuordnung der Maxima in der Elektronendichtekarte zu Atompositionen.

STM ist in der Regel wie alle übrigen oberflächenempfindlichen Meßverfahren allein für eine eindeutige Strukturaufklärung nicht ausreichend. Sofern möglich, wurden deshalb zur Strukturaufklärung zusätzlich die Ergebnisse von Oberflächenröntgenbeugungsmessungen (*surface X-ray diffraction*, SXRD) herangezogen. SXRD wird in unserer Arbeitsgruppe in Zusammenarbeit mit Gruppen aus Risø und München bereits seit einigen Jahren erfolgreich am Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB betrieben. In der Kombination der zueinander komplementären Untersuchungsmethoden STM und SXRD dienen die STM-Messungen zum einen zur Untersuchung aller lokalen, nicht-periodischen Eigenschaften wie Stufenfolge, Fehlordnung, Defekte und Domänengrenzen, die für die Beschreibung des Wachstums von großer Bedeutung sein können. Zum anderen sind hochaufgelöste STM-Topographien hilfreich auf der Suche nach einem Anfangsmodell für die anschließende Strukturverfeinerung durch die Anpassung des Modells an die SXRD-Daten.

Die in dieser Arbeit dokumentierten Experimente behandeln drei Themenschwerpunkte: Erstens die Struktur der Ge(001)-Oberfläche nach Adsorption von Elementen der Gruppe III, IV und V, zweitens die In-induzierte Facettierung von Ge(001)-Oberflächen und drittens reine und adsorbat-bedeckte hochindizierte Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen. Die Auswahl der Systeme soll kurz begründet werden.

In der Vergangenheit wurden Ge(001)-Oberflächen und ihren Adsorbatsystemen im Vergleich zu Si-Oberflächen wegen ihrer geringeren technologischen Relevanz wenig Beachtung geschenkt. Die Erweiterung der Experimente auf die eng verwandte Ge-Oberfläche ermöglicht die Suche nach einer Systematik im Vergleich der Ergebnisse an beiden Flächen und fördert so ein tieferes Verständnis der Elementarprozesse der Grenzflächenbildung. Im einzelnen wird von dem System Pb/Ge(001) wegen der geringen chemischen Reaktivität und verschwindenden Volumenlöslichkeit der Komponenten erwartet, daß es ein Modellsystem für eine nichtreaktive Metall-Halbleiter-Grenzfläche darstellt. Die Adsorption von In und Sb auf (001)-Oberflächen von Elementhalbleitern ist u. a. in Hinblick auf die Integration von III-V-Halbleitern in die Si-Technologie interessant.

Unsere Untersuchungen zur In-induzierten Facettierung der Ge(001)-Oberfläche zeigen erstmals verschiedene Stadien der Ausbreitung der Facettierung auf atomarem Niveau und weisen einen neuen eleganten Weg, wie auf Halbleiter-Substraten durch Selbstorganisation regelmäßige Nanostrukturen erzeugt werden können.

Das Studium von hochindizierten Oberflächen – hier Si(103) und Ge(103) – dient ebenfalls der Suche nach den Grundprinzipien der Rekonstruktion von Halbleiteroberflächen. Darüber hinaus bieten hochindizierte Oberflächen ein reiches Potential in Hinblick auf die Suche nach neuen Substraten für heteroepitaktisches Wachstum und selbstorganisierte Nanostrukturierung.

Die Relevanz der aufgeführten Systeme wird durch die Tatsache unterstrichen, daß zeitgleich und unabhängig von uns eine chinesische Gruppe um W. S. Yang STM-Messungen am Adsorbatsystem Pb/Ge(001), an der nach In-Adsorption facettierten Ge(001)-Oberfläche und an der reinen (4×1)-rekonstruierten Ge(103)-Oberfläche durchgeführt haben. Trotz ähnlicher STM-Beobachtungen leiten sie in der Regel Strukturvorschläge ab, die grundsätzlich von unseren Modellen abweichen und der Prüfung durch die Analyse der SXRD-Daten nicht standhalten. Der Vergleich der Untersuchungen unterstreicht die Notwendigkeit zur Kombination mehrerer komplementärer Meßverfahren zur Strukturaufklärung im allgemeinen und die Leistungsfähigkeit der Kombination von STM und SXRD im besonderen.

Die Arbeit ist in folgende Abschnitte gegliedert:

- In Kapitel 2 wird eine kurze Einführung zur theoretischen Beschreibung von rekonstruierten und facettierten Oberflächen gegeben.
- Kapitel 3 beschäftigt sich mit den theoretischen Grundlagen und dem Informationsgehalt der verwendeten Meßverfahren.
- In Kapitel 4 wird der Aufbau des Experiments vorgestellt.
- In Kapitel 5 folgt eine Zusammenstellung der grundlegenden Eigenschaften der Ge(001)- und Si(001)-Oberfläche aus der Sicht der Tunnelmikroskopie.
- In den Kapiteln 6-10 werden die Ergebnisse unserer Experimente dargestellt und diskutiert. Im einzelnen behandelt Kap. 6 die Adsorbatsysteme Pb auf Ge(001) und Si(001), Kap. 7 die Systeme In auf Ge(001) und Si(001), Kap. 8 das System Sb auf Ge(001), Kap. 9 die facettierten Oberflächen der Systeme Ge auf Si(001) und In auf Ge(001) und Kap. 10 die reinen und adsorbatbedeckten Ge(103)- und Si(103)-Oberflächen.
- Kapitel 11 faßt die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und zeigt Perspektiven für eine Fortführung der Experimente auf.