Kapitel 5

Die Ge(001)- und Si(001)-Oberflächen im Vergleich

Der größte Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit STM-Messungen von adsorbat-bedeckten Ge(001)-Oberflächen und vergleichenden Messungen an der Si(001)-Oberfläche. Um das Verständnis der Messungen an den Adsorbatsystemen zu erleichtern, werden im folgenden einige wichtige Eigenschaften der reinen Substratoberflächen erläutert und mit Hilfe eigener Messungen illustriert. Dabei wird besonders auf die Unterschiede zwischen der Ge(001)-Oberfläche und der weitaus bekannteren Si(001)-Oberfläche eingegangen. Ausgezeichnete Übersichtsartikel zu diesem Thema aus der Sicht der Rastertunnelmikroskopie wurden u. a. von Becker und Wolkow [49], Griffith und Kochanski [50], Neddermeyer [51] sowie Kubby und Boland [52] veröffentlicht. Im Anschluß wird die Präparation der reinen Substratoberflächen beschrieben.

5.1 Volumeneigenschaften

Germanium befindet sich in der IV. Hauptgruppe des Periodensystem direkt unterhalb von Kohlenstoff und Silizium. Ge ist wie Silizium ein intrinsischer Halbleiter mit indirekter Bandlücke. Ge und Si weisen im Festkörper tetraedrische sp_3-Bindungen auf und kristallisieren in einem kubisch flächenzentrierten Gitter mit einer Basis aus zwei identischen Atomen, der sogenannten Diamantstruktur.

	Germanium	Silizium
Elektronenkonfiguration	$1s^2 2s^2 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$	$1s^2 2s^2 3s^2 3p^2$
Bandlücke (indirekt)	0,7 eV	1,17 eV
Volumengitterkonstante a_0	5,66 Å	5,43 Å
Kovalenter Atomradius	1,22 Å	1,17 Å
Schmelzpunkt	937°C	1410°C

Tabelle 5.1: Gegenüberstellung einiger Eigenschaften von Germanium und Silizium.

Der niedrigere Schmelzpunkt von Germanium gegenüber Silizium spiegelt sich in einer höheren Mobilität der Ge-Atome und niedrigeren Temperaturen für vergleichbare Phasenübergänge wider. Als Richtwert für die kritische Temperatur, unterhalb derer die Mobilität der Oberflächenatome eingefroren wird, gilt die Hälfte der Schmelzpunkttemperatur.

Ein technologisch bedeutsamer Unterschied zwischen Germanium und Silizium besteht darin, daß Germaniumoxid im Gegensatz zu Siliziumoxid wasserlöslich ist. Da isolierende

Oxidschichten mit guten mechanischen und elektronischen Eigenschaften für moderne Halbleiterelemente unerläßlich sind, sind dem Einsatz von Germanium in der Halbleiterindustrie enge Grenzen gesetzt.

5.2 Das Dimer-Modell

Die (001)-Oberflächen von Ge und Si sind in ihrer Struktur sehr ähnlich. Beide Oberflächen weisen bei RT eine (2×1) Rekonstruktion auf, welche durch eine Dimerisierung benachbarter Oberflächenatome hervorgerufen wird. Durch die σ-Bindung der Dimeratome halbiert sich die Anzahl der ungesättigten Bindungen (*dangling bonds*) und die freie Energie der Oberfläche wird herabgesetzt. Diese Anordnung ergibt eine ungerade Anzahl Elektronen pro Oberflächeatom. Es wird ein halb gefülltes Oberflächenband hervorgerufen und die Oberfläche ist metallisch. Frühe Energieminimierungsrechnungen von Chadi für die Si(001)(2×1)-Oberfläche ergaben, daß die Oberflächenenergie weiter sinkt, wenn man die symmetrischen Dimere durch asymmetrische Dimere ersetzt [53]. Die Verzerrung des Gitters (*buckling*), bei der jeweils ein Atom des Dimers in Richtung des Substrates nach unten und das andere von Substrat weg nach oben verkippt ist, ist mit einem Ladungstransfer vom Dangling Bond des niedrigeren Dimeratoms zu dem des höheren Dimeratoms verbunden. Der Dimer bekommt so einen ionischen Charakter und es öffnet sich eine Lücke zwischen dem gefülltem und dem leerem Oberflächenband. Die Rechnungen sind in qualitativer Übereinstimmung mit winkelaufgelösten Photoemissionsmessungen an Si(001)(2×1)- [54, 55] und Ge(001)(2×1)- [56] Oberflächen, die zeigen, daß die Oberflächen halbleitend ist. Die Verzerrung des Gitters zusammen mit dem Ladungstransfer kann auch als Rehybridisierung der Oberflächenatome verstanden werden. Das niedrigere Atom nähert sich in seiner Bindungsgeometrie und der Ladungsverteilung den Verhältnissen für sp^2-Hybridisierung, d. h. planarer Geometrie mit Bindungswinkeln von 120° und vollständig unbesetztem p_z-Orbital. Das höhere Atom dagegen weist kleinere Bindungswinkel auf und nähert sich der Bindungsgeometrie einer p^3-Konfiguration mit orthogonal zueinander gerichteten p_x-, p_y- und p_z-Orbitalen an. Es besitzt ein gefülltes *lone pair*-Orbital. Ein schematisches Modell der Si(001)- und Ge(001)-Dimerrekonstruktionen ist in Abb. 5.1 wiedergegeben.

Ob die Dimere der (2×1)-Strukturen der Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen tatsächlich symmetrisch oder asymmetrisch sind, wird bis heute kontrovers diskutiert und ist Gegenstand vieler theoretischer [53, 57, 58, 59] und experimenteller [60, 61, 62] Arbeiten. In STM-Messungen bei Raumtemperatur erscheinen die Dimere auf sauberen Si(001)(2×1)-Oberflächen symmetrisch. Lediglich in der Umgebung von Punktdefekten und Stufenkanten sind die Dimere gebuckelt [63, 64, 65]. Die Richtung der Verkippung der Dimere wechselt dabei entlang der Dimerreihen alternierend. Ist die Verkippung der Dimere benachbarter Dimerreihen in Phase, bildet sich lokal eine (2×2)-Rekonstruktion aus; verkippen die Dimere in Antiphase, entsteht lokal eine c(4×2)-Rekonstruktion (siehe Abb. 5.1). Die Amplitude des Bucklings der Dimere nimmt mit zunehmender Entfernung vom Defekt ab, so daß die Dimere in einem Abstand von 6-10 Dimeren wieder symmetrisch erscheinen.

Bei der Interpretation der STM-Bilder ist zu bedenken, daß der STM-Meßprozeß vergleichsweise langsam ist ($\sim$ 1 ms pro Meßpunkt). So schlug Hamers vor, daß die symmetrisch erscheinenden Dimere tatsächlich asymmetrischer Natur sind und mit hoher Frequenz (10^{12} Hz [66]) zwischen den gebuckelten Konfigurationen hin und her *flippen*. Im über die Zeit gemittelten Bild erscheinen die dynamisch umklappenden asymmetrischen Dimere symmetrisch [64]. Asymmetrische Defekte stabilisieren den Dimer in einer Verkippungsrichtung [65]. Das resultierende Verspannungsfeld der Oberfläche führt zu einer alternierenden Verkippung

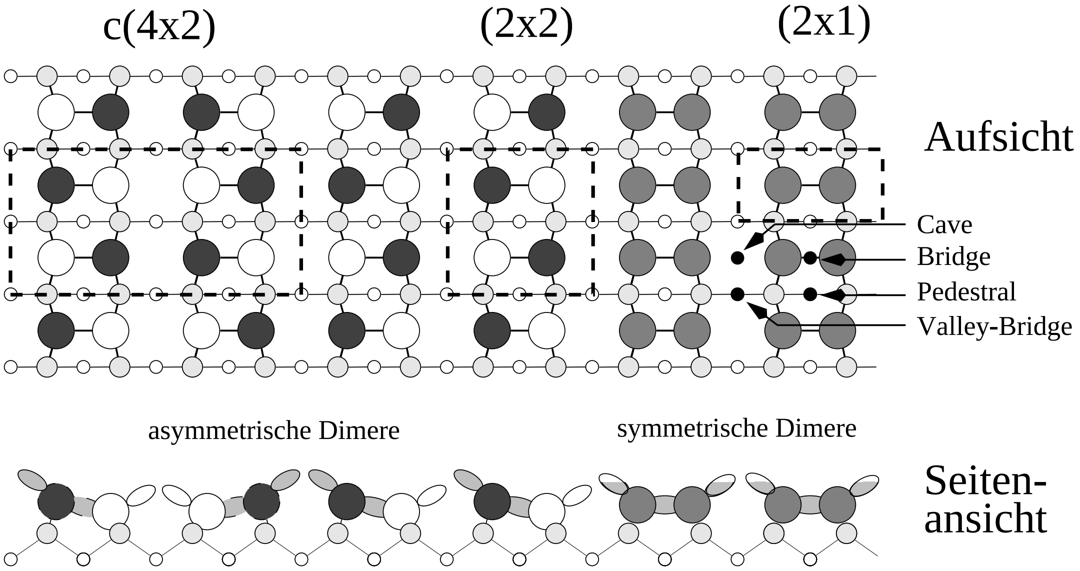


Abbildung 5.1: Schematisches Modell der Dimer-Rekonstruktionen der Si(001)- und Ge(001)-Oberfläche mit Angabe hochsymmetrischer Positionen. Die Grauwerte der Dangling Bonds deuten den Ladungstransfer vom *down*-Atom Dangling Bond zum *up*-Atom Dangling Bond für die asymmetrischen Dimere an. Die Dangling Bond Zustände des statisch symmetrischen Dimers sind halbgefüllt.

benachbarter Dimere innerhalb der Reihen [67].

Eine kürzlich veröffentlichte Untersuchung an der Ge(001)(2×1)-Oberfläche mittels Oberflächenröntgenbeugung von Torrelles et al. [68] favorisiert ein statisches *disordered dimer* Modell gegenüber einem *dynamical dimer* Modell. Die Dimere sind demnach um 15,6° verkippt, wobei die Verkippungsrichtung benachbarter Dimere nicht korreliert ist. Bedenkt man die Zeitskalen der Meßprozesse, steht dieses Modell keineswegs im Widerspruch zu der dynamischen Interpretation der STM-Messungen. Die Wechselwirkungszeit eines Wellenpakets des verwendeten Röntgenstrahls beträgt 5×10^{-16} s, was dem 10^4-ten Teil eines Dimer-Flip Intervalls entspricht. Die Röntgenbeugungsmessung ist somit relativ zur Frequenz des Dimer-Flips ein schneller Meßprozeß und liefert quasi eine Momentaufnahme des Dimers in seiner Bewegung, während die STM-Topographie den über ca. 10^9 Perioden gemittelt Ort der Dimeratome abbildet. Neueste SXRD-Messungen von Felici et al. [69] und LEED-I-V-Messungen von Over et al. [70] bestätigen dieses Modell auch für die Si(001)(2×1)-Oberfläche.

Das Modell des dynamisch asymmetrischen Dimers wird durch STM-Messungen von Wolkow an der Si(001)-Oberfläche bei tiefen Temperaturen (120 K) unterstützt [71]. Es zeigte sich, daß bei tiefen Temperaturen die Anzahl gebuckelter Dimere auf Kosten der symmetrischen Dimere zunimmt. Im Gegensatz zu den Messungen bei Raumtemperatur ist ein Abklingen das Bucklings entlang der Reihen nicht erkennbar. Es bilden sich ausgedehnte c(4×2)-Domänen aus, so daß auch auf eine Wechselwirkung senkrecht zu den Dimerreihen geschlossen werden kann. Das temperaturabhängige Wachstum von Domänen gebuckelter Dimere ist auf natürliche Weise nur durch bistabile asymmetrische Dimere zu erklären, die thermisch aktiviert werden können. Spätere Messungen über einen weiteren Bereich tiefer Temperaturen von Badt et al. [72] sowie Smith et al. [73] bestätigen die Resultate von Wolkow.

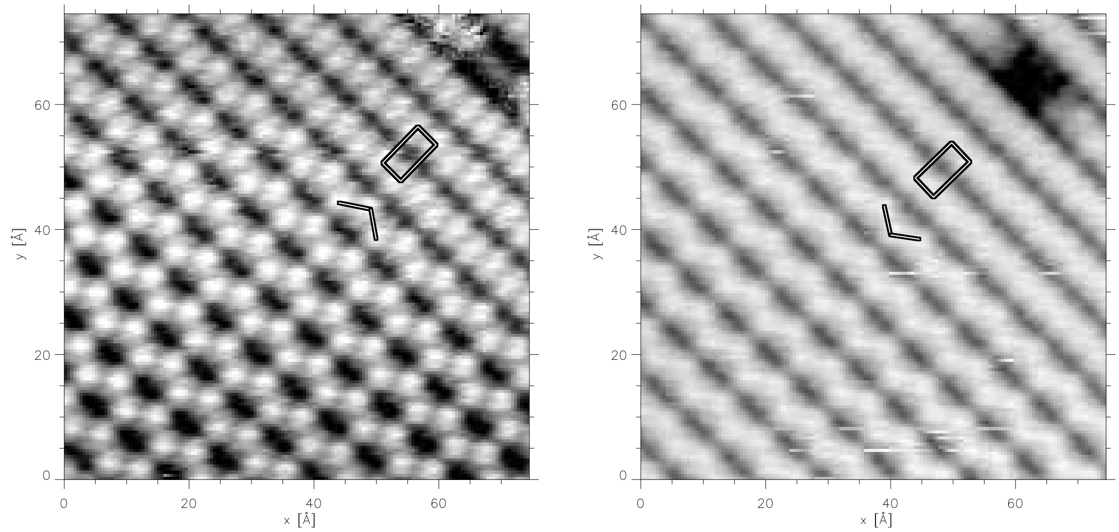
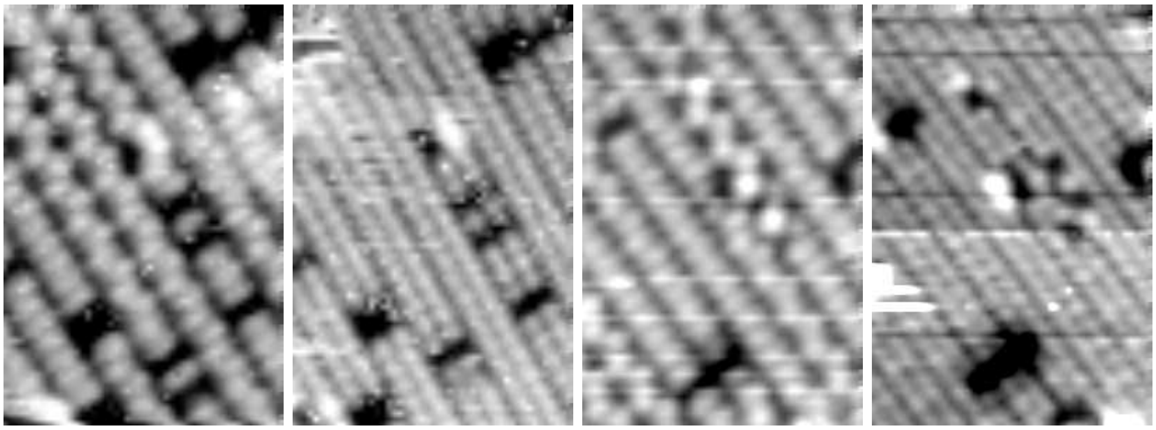


Abbildung 5.2: STM-Topographien besetzter Zustände (links) und unbesetzter Zustände (rechts) des gleichen Bereichs einer Ge(001)(2×1)-Oberfläche. Der Helligkeitskontrast zwischen den asymmetrischen Dimeratomen kehrt sich beim Wechsel der Polarität der Tunnelspannung um (siehe Orientierung des Pfeilkopfes). Die (2×1)Einheitszelle markiert in beiden Bildern den gleichen Ort. (links: $U=-1{,}7\ V,\ I=2{,}4\ nA$, rechts: $U=+0{,}8\ V,\ I=2.4\ nA$).

5.3 Abbildungseigenschaften von Ge- und Si-Dimeren im STM

Die ersten STM-Messungen an der Ge(001)-Oberfläche wurden von Kubby et al. veröffentlicht [74]. In weiteren Arbeiten gehen Murray et al. näher auf die Rolle der Defekte bei der Stabilisierung asymmetrischer Dimere ein [75], während sich Kersten et al. [77] und Tochihara [78] et al. auf die Struktur der Stufen konzentrieren. STM-Messungen der Ge(001)-Oberfläche gleichen denen an der Si(001)-Oberfläche weitgehend, unterscheiden sich aber im Detail. Die Abbildung 5.2 zeigt jeweils denselben Ausschnitt einer Ge(001)(2×1)-Oberfläche für negative (links) und positive Probenspannung (rechts). Die Dimerreihen verlaufen von links oben nach rechts unter. Die Dimere im rechten Teil der Bilder erscheinen für beide Polaritäten symmetrisch und bilden eine (2×1)-Domäne. Die symmetrischen Dimere haben eine bohnenförmige Gestalt und die einzelnen Atome des Dimers werden nicht aufgelöst. Auf der linken Hälfte jedes Bildes erscheinen die Dimere deutlich asymmetrisch, d. h. jeweils eine Hälfte des Dimers erscheint höher als die andere. Der Kontrast zwischen den Dimeratomen ist für negative Probenspannung größer und kehrt sich mit dem Wechsel der Polarität um, wie die eingezeichneten Pfeilköpfe verdeutlichen.

Die Invertierung des Kontrastes bei Umkehr der Tunnelspannung ist leicht zu verstehen, wenn man bedenkt, daß der Kontrast in STM-Topographien sowohl von geometrischen als auch elektronischen Eigenschaften der Probe bestimmt wird. Wie bereits erwähnt, wird ein partieller Ladungstransfer zwischen den Dangling Bond Zuständen des asymmetrischen Dimers angenommen (0,4 e für Si(001) [53]), wodurch der Dimer einen ionischen Charakter erhält (siehe Abb. 5.1). Beim Tunneln aus den besetzten Zuständen der Probe ist der Tunnelwiderstand über den stärker besetzten Dangling Bonds der up-Dimeratome geringer. Die Spitze zieht sich zurück und dieser Ort erscheint in der Topographie als Maximum. Beim Tun-



Ia Ib IIa IIb

Abbildung 5.3: Zwei Doppelspannungsbilder der Si(001)(2×1)-Oberfläche. Die Eigenschaften der Dimere in den Abbildungen der besetzten Zustände (Ia und IIa) sind mit denen der Ge-Dimere vergleichbar. In den Abbildungen der unbesetzten Zustände (Ib und IIb) erscheinen alle Si-Dimere als zwei getrennte und symmetrische Erhöhungen. Der Abstand der Erhöhungen ist kleiner $1a$ in (Ib) und größer $1a$ in (IIb) (man vergleiche die Position der Defekte). (Größe jeweils (50×75) Å^2, Ia: $U = -2,1\ V,\ I = 1,2\ nA$, Ib: $U = +2,1\ V,\ I = 1,2\ nA$, IIa: $U = -2,2\ V,\ I = 1,2\ nA$, IIb: $U = +2,1\ V,\ I = 1,2\ nA$).

neln in die unbesetzten Zustände ist dagegen der Widerstand über den schwächer besetzten Dangling Bonds der down-Dimeratome größer. Der elektronische Beitrag zur Kontrastbildung übersteigt hier offensichtlich den geometrischen Beitrag.

In Abb. 5.3 sind zwei Doppelspannungsbilder von Si(001)-Oberflächen dargestellt. Bei negativer Tunnelspannung (besetzte Zustände) gleicht die Abbildung der Si-Dimere der Abbildung der Ge-Dimere in Abb. 5.2 und zwar sowohl für die symmetrischen als auch für die asymmetrischen Dimere. Die Topographie der zugänglichen unbesetzten Zustände zeigt dagegen bei ausreichender Auflösung zwei getrennte Erhöhungen pro Si-Dimer. Beide Erhöhungen sind in der Regel gleich hoch, so daß in der Abbildung unbesetzter Zustände nicht zwischen symmetrischen und asymmetrischen Dimeren unterschieden werden kann.

Wie ein Vergleich der Topographien Ib und IIb zeigt, hängt der Abstand zwischen den Erhöhungen wesentlich vom Zustand der Tunnelspitze ab. Beide Bilder wurden bei vergleichbaren Werten für die Tunnelspannung und den Tunnelstrom aufgenommen. Werden benachbarte Ketten von Erhöhungen zu Doppelreihen zusammengefaßt, liegen die Defekte im Abb. Ib auf den hellen Doppelreihen und in Abb. IIb zwischen den Doppelreihen. Tatsächlich sind in den Abbildungen der Si(001)-Oberfläche bei positiven Tunnelspannungen in der Regel wie in Abb. IIb nicht die dichtest benachbarten Erhöhungen den Dimeren zuzuordnen, sondern jeweils die gegenüberliegenden Erhöhungen mit größerem Abstand. Bei der Bestimmung der Adsorptionsplätze von Adsorbaten relativ zum Substrat ist für Si(001) diese scheinbare Verschiebung der Dimerreihen zu beachten. In den Abbildungen der Ge(001)-Oberfläche stimmt die Position der hellen Reihen für beide Tunnelspannungspolaritäten stets mit der Position der Dimerreihen überein. Die Unterschiede in der Abbildung von Si- und Ge-Dimeren sind noch nicht vollständig verstanden, werden aber auf die Unterschiede in der elektronischen Struktur der Si- und Ge-Atomrümpfe zurückzuführen sein [49].

Ein weiter Unterschied zwischen Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen besteht in den typischen Defektdichten, die sorgfältig präparierten Proben aufweisen. Der häufigste Defekt auf der Si(001)-Oberfläche ist der *missing dimer defect*, der unabhängig von der Tunnelspannung als Vertiefung abgebildet wird. Neben dem Fehlen eines Dimers werden für diese Vertiefung auch Metallverunreinigungen (insbesondere Nickel) unter der Oberfläche oder Adsorbate (insbesondere O_2) auf der Oberfläche als Ursache genannt. Weitere häufige Defekte sind sogenannte C-Defekte, die auf Adsorption von H_2O-Molekülen zurückgeführt werden. Die Defektdichte auf Si(001)-Oberflächen beträgt im allgemeinen 5–10% und kann durch besondere Präparation auf $\sim$ 1% herabgesetzt werden [79]. Wie Abb. 5.4 zeigt, ist die Defektdichte auf Ge(001)-Oberflächen weitaus geringer. Im abgebildeten Bereich sind nur zwei Defekte (Missing Dimers) zu erkennen und die Defektdichte beträgt unter 0.1%.

5.4 Terrassen- und Domänenstruktur

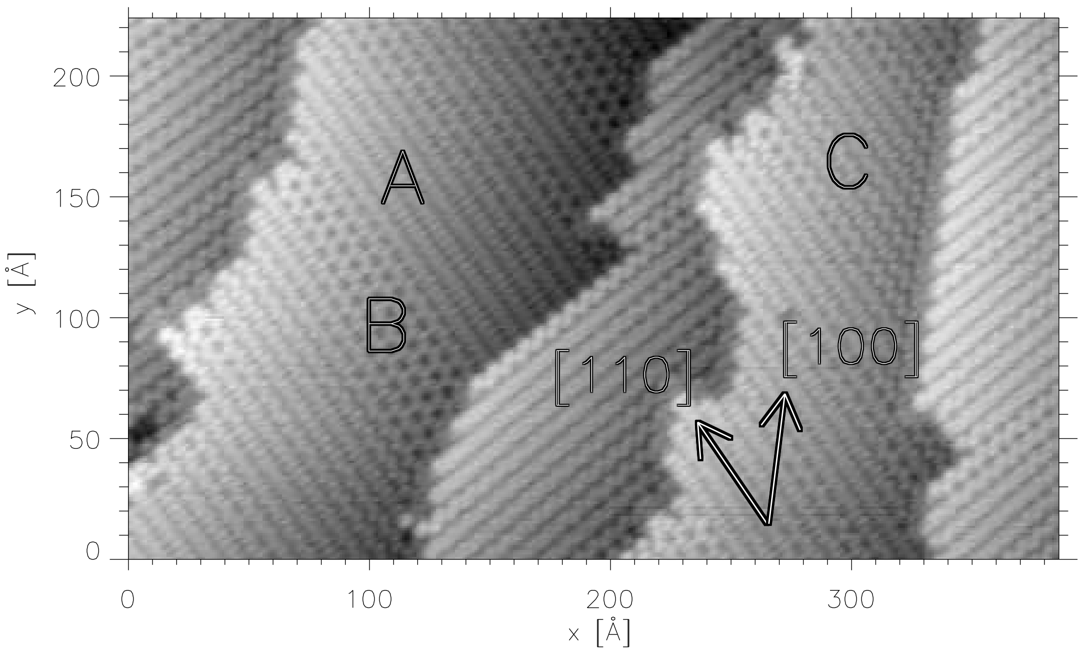


Abbildung 5.4: STM-Topographie einer vizinalen Ge(001)-Oberfläche. Bereits bei RT sind neben (2×1)-Domänen (A) Bereiche mit $c(4 \times 2)$- und (2×2)-Rekonstruktion zu erkennen ((B) bzw. (C))($U = -2,4\ V,\ I = 0,4\ nA$).

Auf realen Oberflächen liegen — bedingt durch die Fehlneigung der mittleren Probenoberfläche zur idealen Oberfläche oder durch die Rauhigkeit der realen Oberfläche — stets mehr als eine Atomlage offen und ebene Terrassen werden durch Stufen voneinander getrennt. Auf reinen Si(001)- und Ge(001)- Oberflächen mit Fehlneigung kleiner 3° werden ausschließlich Einzelstufen beobachtet, d. h. die Stufenhöhe h entspricht einem einfachen Abstand zweier (001)-Netzebenen ($\frac{1}{4}a_0$), also 1,36 Å für Si(001)- und 1,42 Å für Ge(001)-Oberflächen. Wegen der Symmetrie des Volumens (Diamantstruktur) wechselt beim Übergang von einer Terrasse zur nächsten die Orientierung der Bindungen und damit jeder Überstruktur der Oberfläche um 90°.

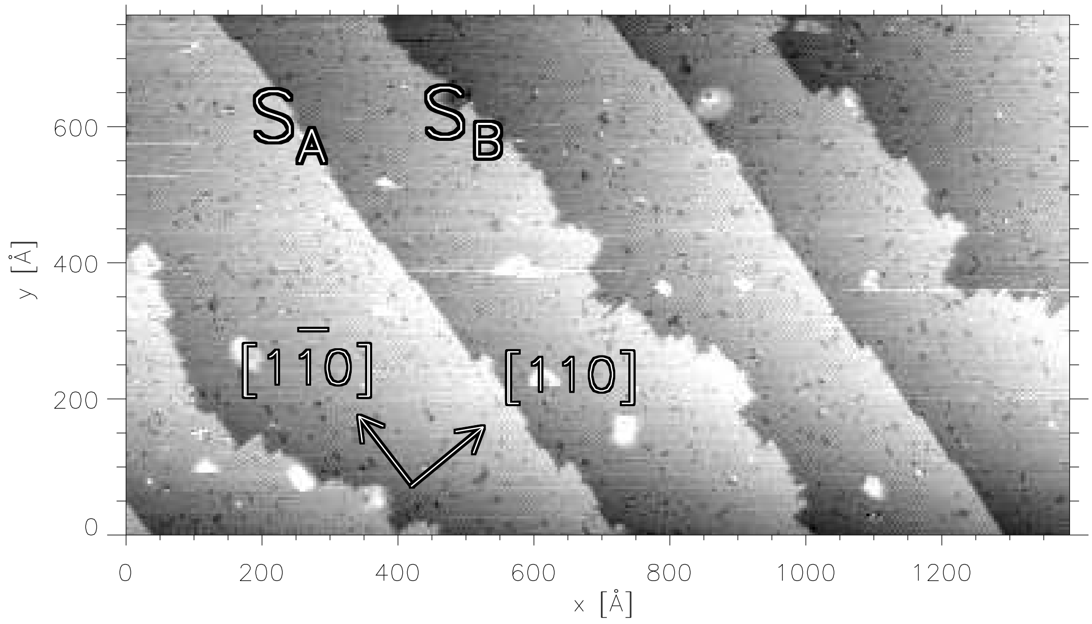


Abbildung 5.5: STM-Topographie einer vizinalen Si(001)-Oberfläche mit $0,3°$ Fehlorientierung in [110]-Richtung. Die S_A-Stufen verlaufen nahezu gerade, während die S_B-Stufen meandrieren ($U = -2,1\ V,\ I = 0,5\ nA$).

Für Fehlorientierungen in [1$\bar{1}$0]- oder [110]-Richtungen sind qualitativ zwei Arten von Stufen zu unterscheiden, nämlich S_A-Stufen, die parallel zu den Dimerreihen auf der oberen Terrasse verlaufen und S_B-Stufen, die senkrecht zu den Dimerreihen der oberen Terrasse verlaufen [80]. S_A-Stufen sind im allgemeinen wie in Abb. 5.5 geradlinig, während S_B-Stufen stark meandrieren und somit eine hohe Dichte an Kinken aufweisen. Die hier verwendeten Ge(001) Proben waren dagegen um 0,8° bzw. 0,1° in [010]-Richtung gegen die (001)-Ebene fehlorientiert. Der Stufenkantenverlauf ist auf diesen Proben weitgehend rund und meandrierend. Nur auf kurzen Abschnitten werden S_A-Stufen in [110]-Richtungen, aber auch geradlinige Stufen in [010]-Richtung beobachtet (siehe Abb. 5.4). Übersteigt die Fehlneigung der Ge(001)- und Si(001)-Oberflächen einen Wert von $\sim 3\%$ in [1$\bar{1}$0]- oder [110]-Richtung, laufen S_A- und S_B-Stufen zu D_B-Doppelstufen zusammen, und die Oberfläche weist überwiegend eine Richtungsdomäne auf (*single domain*) [76]. Dieser Effekt ist stark ausgeprägt für Si-Oberflächen und schwächer für Ge-Oberflächen.

Auf vizinalen Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen verlaufen die Stufen entlang einer Richtung stets ausschließlich aufwärts oder ausschließlich abwärts. Beide Oberflächen sind also nicht rauh und die Stufen gleichen im wesentlichen den Fehlschnitt der Probenoberfläche zur (001)-Orientierung aus. Inselbildung wurde nur gelegentlich an Karbid-Verunreinigungen beobachtet und ist weder für Ge(001) noch für Si(001) typisch für wohlpräparierte Proben.

Im Zusammenhang mit der Beschreibung der asymmetrischen Natur des Dimers wurde bereits darauf hingewiesen, daß die Dimere der Si(001)-Oberfläche bei RT nur in der Nähe von Defekten asymmetrisch erscheinen. Im Gegensatz dazu zeigt Abb. 5.4, daß auf der Ge(001)-Oberfläche bei RT $\sim 50\%$ der Dimere gebuckelt erscheinen, obwohl die Oberfläche nur wenige Defekte aufweist. Ein Abklingen des Bucklings innerhalb einer Dimerreihe wird selten beobachtet. Offensichtlich besteht nicht nur entlang der Dimerreihen, sondern auch senkrecht zu den Dimerreihen eine Wechselwirkung zwischen den asymmetrischen Dimeren, so daß sich neben (2×1)-Domänen mit symmetrischen Dimeren (z. B. bei A) auch $c(4 \times 2)$-Domänen (B) und (2×2)-Domänen (C) mit asymmetrischen Dimeren ausbilden. Das Auftreten größerer $c(4 \times 2)$-rekonstruierter Domänen bei RT ist ebenfalls in den Beugungsbildern der Ge(001)-Oberfläche zu erkennen (siehe Abb 9.2.b). Diese Differenz der Dimereigenschaften der Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen ist jedoch nicht grundsätzlicher Art, sondern offenbar eine Frage der Temperatur. STM-Messungen an Si(001)-Oberflächen bei 200 K von Badt et al. [72] zeigen bezüglich der Koexistenz von (2×1)- und $c(4\times2)$-rekonstruierten Domänen eine verblüffende Ähnlichkeit mit unseren Messungen an der Ge(001)-Oberfläche bei RT. Analog zu den STM-Beobachtungen von Wolkow et al. [71], Badt et al. [72] und Smith et al. [73] an Si(001)-Oberflächen unterhalb 120 K beobachten Röttger et al. [82] an Ge(001)-Oberflächen, daß für tiefe Temperaturen (80 K) die Oberfläche vollständig $c(4\times2)$-rekonstruiert ist und die Flipp-Bewegung der Dimere eingefroren ist. Zusammengenommen können die STM-Messungen dahingehend interpretiert werden, daß sich die Ge(001)-Oberfläche bei RT — ähnlich der Si(001)-Oberfläche bei 200 K — im Temperaturbereich des $(2 \times 1) \Leftrightarrow c(4 \times 2)$ Phasenübergangs befindet.

5.5 Die Probenpräparation

Die Vorbereitung außerhalb des Vakuums ist für Si(001)- und Ge(001)-Proben identisch. Zunächst werden die Proben mit einem Diamantschneider auf die gewünschte Größe von (8×5) mm^2 für Germanium bzw. $(8 \times 3,5)$ mm^2 für Silizium geschnitten. Die Si-Proben werden schmaler gewählt, um ausreichend hohe Temperaturen durch direkten Stromfluß erreichen zu können. An solchen Proben, die für Röntgenbeugungsmessungen vorgesehen sind, werden die Kanten angeschliffen (siehe Abschn. 4.2). Anschließend werden die Proben im Ultraschallbad in Methanol gereinigt und mit N_2 trockengeblasen. Auf ein Ätzen der Proben oder andere chemische Behandlungen wird verzichtet. Zuletzt werden sie auf einem Probenplättchen festgeklemmt und in einen Probenhalter eingesetzt. Nach dem Einschleusen ins Vakuum unterscheidet sich die Präparation der Ge(001)- und Si(001)-Proben.

Si(001): Die hohe Reaktivität der Si(001)(2×1) Oberfläche bedingt ein möglichst gutes UHV während der gesamten Präparation. Die Proben werden bei steigenden Probentemperaturen bis 750 °C, also unterhalb der Desorptionstemperatur der natürlichen Oxidschicht, und bei 900 °C entgast, bis sich jeweils ein Druck unter 2×10^{-10}mbar einstellt ($\sim$ 36 h bzw. $\sim$ 3 h). Anschließend wird die Probe für ein kurzes Abdampfen der obersten Substratlage (*flash evaporation*, im folgenden Flashen genannt) für wenige 10 s auf 1150–1200 °C hochgeheizt und zügig wieder auf 900 °C abgekühlt. Dieser Vorgang wird einige Male wiederholt, wobei der Druck während des Flashens 5×10^{-10}mbar nicht übersteigen sollte. Abschließend wird die Probe über einen Zeitraum von $\sim$ 3 h auf Raumtemperatur abgekühlt.

Ge(001): Die Ge(001)-Proben werden zunächst einige Stunden bei steigenden Temperaturen bis zu 650 °C entgast, bis der Basisdruck der Kammer wieder annähernd erreicht ist. Im Vergleich zur Si(001)-Fläche zeigt sich die Qualität der Ge(001)-Oberfläche weniger empfindlich für den Druck während des Heizens der Probe. Ein Flashen der Ge-Proben ist nicht möglich, da Germanium nicht in ausreichendem Maße sublimiert. Statt dessen werden die Proben mehreren Zyklen von Argonionenbeschuß (*sputtering*) und anschließendem Ausheilen (*annealing*) unterworfen. Die entsprechenden Parameter der Präparation sind in Tabelle 5.2

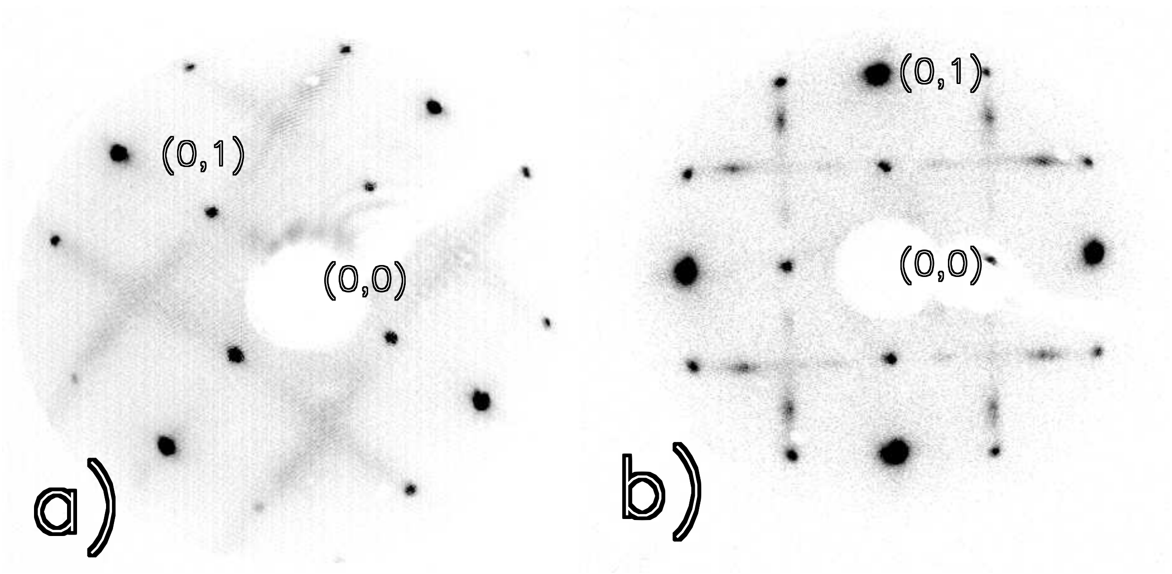


Abbildung 5.6: LEED-Beugungsbilder (a) der Si(001)(2 × 1)- und (b) der Ge(001)(2 × 1)-Rekonstruktion. Die Streifen in beiden Bildern deuten auf (2×2)- bzw. c(4×2)-rekonstruierte Domänen hin. Die Elektronenenergie beträgt in (a) 30,0 eV und in (b) 33,0 eV.

zusammengestellt.

Sputtern		Heizen	
Temperatur	350–450 °C	Temperatur	600–650 °C
Dauer	30–60 min	Dauer	15 min
Ar-Partialdruck	5×10^{-5}mbar	Restgasdruck	$< 4 \times 10^{-10}$mbar
Ionenenergie	500 eV	Abkühlen	10 Ks^{-1}

Tabelle 5.2: Parameter für die Präparation von Ge(001)-Oberflächen.

Die Qualität der Präparation der Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen werden mit RHEED, LEED und STM kontrolliert, bevor weitere Aufdampfexperimente begonnen werden. Die Schärfe der Reflexe und ein hohes Signal-zu-Untergrund Verhältnis ist ein erstes schnell auszuwertendes Kriterium für die Qualität der Oberfläche. Neben den Reflexen der (2 × 1)-Rekonstruktion sind in den LEED-Bildern der Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen bei diskreten Energien zusätzlich Streifen zu beobachten (Abb. 5.6). Diese Streifen werden auf (2 × 2)- und c(4 × 2)- rekonstruierte Domänen zurückgeführt, deren Schmalseite deutlich kürzer als die Kohärenzlänge des LEED-Systems von ca. 120 Å ist. Wie in Abschnitt 5.2 gezeigt wurde, sind (2 × 2)- und c(4 × 2)- Domänen auf der Si(001)-Oberfläche bei RT auf Defekte zurückzuführen, während sie auf der Ge(001)-Oberfläche bei RT eine intrinsische Eigenschaft der sauberen (gestuften) Oberfläche sind. Folglich sind deutlich ausgeprägte, modulierte Streifen auf der Ge(001)-Oberfläche Anzeichen für eine saubere, wohlgeordnete Oberfläche, während die Streifen auf der Si(001)-Oberfläche auf Verunreinigungen schließen lassen. Mit RHEED kann leicht eine schnelle Beurteilung der Morphologie der Oberfläche gewonnen werden. Die Abwesenheit von Durchstrahlungsreflexen deutet auf eine geringe Rauhigkeit der Oberfläche hin.

Zufriedenstellende Resultate werden gewöhnlich für die Si(001)-Proben erst nach mehrmaligem Flashen und für die Ge(001) Proben nach mehreren Sputter-Anneal-Zyklen mit einer gesamten Sputterdauer von 2-4 h erreicht. Durch Restgas kontaminierte Proben können problemlos mehrmals durch erneutes Flashen bzw. Sputtern und Annealen gereinigt werden. Wenige Ge(001)-Proben wiesen eine hohe Dichte an Verunreinigungen auf, die durch Sputtern nicht beseitigt werden konnten und die wir auf GeC-Kontamination zurückführen (siehe Abb. 5.7.a). Da die Defekte die STM-Messungen durch Doppelspitzeneffekte stören, wurden die Defekte durch Deposition von einigen zehn Monolagen Germanium überwachsen (500 °C Substrattemperatur während des Aufdampfens, 1 h Nachtempern bei 650 °C). Die Oberflächen waren nach dem Überwachsen frei von GeC-Verunreinigungen und zeigten statt dessen kraterartige Vertiefungen, die die STM-Messungen aber weniger behindern. Messungen an solchen Proben wurden in dieser Arbeit nicht verwendet.

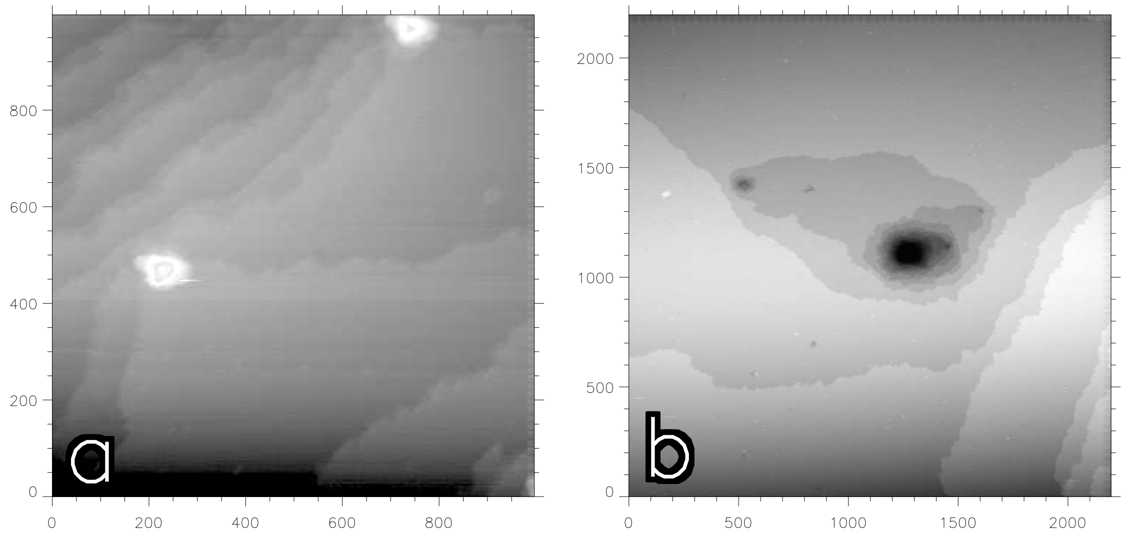


Abbildung 5.7: (a): STM-Topographie einer Ge(001)-Oberfläche mit Defekten (hell), die auf GeC-Cluster zurück geführt werden. Die Korrugation der Cluster beträgt 20 Å. (b): Nach dem Aufwachsen von $\sim$ 100 ML Ge sind anstelle der Erhöhungen Krater in der Oberfläche zu beobachten (Tiefe >15 Å).