# Kapitel 8

# Sb auf Ge(001)-Oberflächen

## 8.1 Einleitung

Antimon gehört zur V. Hauptgruppe des Periodensystems und besitzt als freies Atom im Grundzustand die Elektronenkonfiguration $[Kr]4d^{10}4s^2 4p^3$. Das freie Atom hat somit drei Elektronen in einer nicht vollständig gefüllten Unterschale. In seinen Verbindungen ist Antimon vorwiegend dreiwertig und weist selten die Wertigkeit 5 auf. Die III-V Halbleiter GaSb und InSb haben Zinksulfidstruktur und jedes Sb-Atom ist in ihren Volumen unter Tetraederwinkeln an vier Ga- bzw. In-Atome gebunden. Auf den meisten Oberflächen von III-V- und Elementhalbleitern bevorzugen die Sb-Atome eine dreifache Koordination und Bindungswinkel von 90°, also die Geometrie der ungestörten $p_x, p_y, p_z$-Orbitale. Die übrigen zwei Elektronen bilden ein vollständig besetztes *lone pair*-Orbital. Die verringerten Bindungswinkel von näherungsweise 90° gegenüber den angestrebten Winkeln von 120° für die Gruppe-III Elemente können auf die abstoßende Coulomb-Wechselwirkung der Gruppe-V Atome zum Substrat durch die zwei zusätzlichen Valenzelektronen zurückgeführt werden. Diese Bindungsgeometrie gilt gleichermaßen auch für die Gruppe-V Elemente P, As und Bi.

| | P | As | Sb | Bi | Si | Ge |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Kovalenter Radius / Å [83] | 1,10 | 1,18 | 1,36 | 1,46 [211] | 1,17 | 1,22 |
| Ionenradius (metal.) / Å [83] | | 1,39 | 1,59 | 1,70 | 1,32 | 1,37 |
| Elektronegativität [18] | 2,1 | 2,0 | 1,9 | 1,9 | 1,8 | 1,8 |

Tabelle 8.1: Gegenüberstellung der kovalenten Radien in tetraedrischen Bindungen, Ionenradien in 12-fach koordinierten Metallen und Elektronegativitäten der Gruppe-V Elemente P, As, Sb und Bi sowie der Elemente Si und Ge.

Die geometrische und elektronische Struktur der Adsorbatsysteme der Gruppe-V Elemente auf Si- und Ge-Oberflächen ist von großem fundamentalen Interesse und — in noch stärkerem Maße als die Gruppe-III Elemente —von bedeutender technologischer Relevanz, insbesondere in Hinblick auf das Wachstum von III-V Halbleitern auf Si. P, As und Sb dienen zur n-Dotierung von Elementhalbleitern und passivieren ihre Oberflächen bei vollständiger Bedeckung. Darüber hinaus werden As, Sb und Bi als Surfactants für das heteroepitaktische Wachstum von Ge auf Si eingesetzt.

### 8.1.1 (As,Sb,Bi)/Si(111) und (As,Sb,Bi)/Ge(111)

Die Adsorption von **As auf Si(111) und Ge(111)** wurde bereits mit einer Vielzahl oberflächensensitiver Methoden untersucht, darunter STM [212, 213, 214], Streuung mittelenergetischer Ionen (MEIS) [215], XSW [216, 217] und ARUPS [218]. Danach bewirkt die Wechselwirkung des Arsens mit den Si(111)- und Ge(111)-Oberflächen neben einer Verdrängung der Adatome eine vollständige Substitution der Si(Ge)-Atome der ersten Lage durch As-Atome. Durch den Austausch der dreifach-koordinierten Si(Ge)-Atome durch As-Atome werden die Dangling Bonds der Oberfläche durch vollständig besetzte *lone pair*-Orbitale ersetzt, die die Oberfläche effektiv passivieren. Die resultierende $(1 \times 1)$-Struktur gleicht einem ideal terminierten Kristall, in dem die Si(Ge)-Atome vierfach-koordiniert sind und die As-Atome wie im As-Volumen dreifache Koordination aufweisen.

Abweichend von dieser idealen Beschreibung beobachten Becker et al. auf der Si(111)-$(1\times1)$-As Oberfläche Punktdefekte [212] und auf der Ge(111)$(1\times1)$-As-Oberfläche Liniendefekte [212, 214], die auf Verspannungen in der Oberfläche zurückgeführt werden. Obwohl As- und Si-Atome den gleichen kovalenten Radius aufweisen, ist die Si(111)$(1\times1)$-As Oberfläche und mehr noch die Ge(111)$(1\times1)$-As Oberfläche unter hoher Zugspannung [219]. Während die As-Atome die obersten Atome der Si(Ge)-Doppellage substituieren, relaxieren die As-Atome nach außen und ziehen die gebundenen Substratatome zu sich heran. Diese Relaxation kommt für beide Systeme dem p-artigen Charakter der As-Bindungen mit Bindungswinkeln von 90° entgegen.

Für das System **Sb/Ge(111)** beobachten Wan et al. in einer LEED I-V Studie ebenfalls eine $(1 \times 1)$-Rekonstruktion [220]. Sie kommen zu dem Schluß, daß diese Struktur durch das Modell der Ge(111)$(1 \times 1)$-As Rekonstruktion beschrieben werden kann. SXRD-Messungen [221] und First Principles Rechnungen [222] am System Sb/Ge(111) sowie LEED [223, 224], STM- [224, 225, 226]-, XSW [228]- und SXRD [229, 230]-Untersuchungen an **Sb/Si(111)** zeigen dagegen, daß Sb-Atome für Bedeckungen nahe 1 ML nicht die erste Substratlage substituieren, sondern nahe $T_1$-Plätzen *über* den Atomen der erster Lage adsorbiert werden. Diese Abweichung wird auf den größeren kovalenten Radius von Sb gegenüber As zurückgeführt [221]. Auf der Ge(111)-Fläche sind die Sb-Atome bei einer Bedeckung von 1 ML in Zickzackketten angeordnet und bilden eine $(2 \times 1)$-Rekonstruktion. Für das System Sb/Si(111) wurden in Abhängigkeit von der Bedeckung und der Temperatur eine Reihe von Rekonstruktionen beobachtet. Bei geringer Bedeckung substituieren die Sb-Atome die Si-Adatome der $(7 \times 7)$-Rekonstruktion [226] und bilden nahe $\frac{1}{3}$ ML eine $\sqrt{3}$-Phase, die durch Adatom-Monomere auf $T_4$-Plätzen in Koexistenz mit Si-Adatomen charakterisiert ist. Diese $\sqrt{3}$-Phase besitzt im wesentlichen die gleiche Struktur wie die $\sqrt{3}$-Mosaikphasen der Gruppe-III und Gruppe-IV Elemente auf Si(111) und Ge(111) (siehe Abschnitte 6.1.1 und 7.1.1). Weitere Deposition bis zu 1 ML auf dem heißen Substrat (600 °C) führt zu einer zweiten $\sqrt{3}$-Rekonstruktion, in der die Sb-Atome in Trimeren angeordnet sind [224, 226]. RT-Deposition von 1 ML und Nachtempern bei 600 °C läßt die Si(111)-Oberfläche dagegen $(2\times1)$-rekonstruieren. Darüber hinaus wurden $(5\sqrt{3} \times 5\sqrt{3})$- und $(7\sqrt{3} \times 7\sqrt{3})$-Rekonstruktionen beobachtet [223, 227].

Das System **Bi/Si(111)** zeigt mindestens zwei verschiedene $\sqrt{3}$-Rekonstruktionen. [231, 232, 235]. Unterhalb $\frac{1}{3}$ ML adsorbieren die Bi-Atome als Adatom-Monomere auf $T_4$-Plätzen in Koexistenz mit Si-Adatomen [231, 232, 233]. Nahe 1 ML ordnen sich die Bi-Atome zu Trimeren an. Die Bi-Atome in den Trimeren binden jeweils an die beiden anderen Atome des Trimers und an ein darunterliegendes Si-Atom [231, 232, 233, 234, 235]. Diese sogenannte Melkschemel-Struktur ist identisch mit der $\sqrt{3}$-Struktur von Sb/Si(111). Darüber hinaus wird von einer $\sqrt{3}$-Honigwabenstruktur berichtet, für die zwei verschiedene Strukturen vorgeschlagen wurden [234, 235, 236]. Kürzlich veröffentlichte *ab initio* Rechnungen favorisieren die Melkschemelstruktur gegenüber der Honigwabenstruktur [237].

Für das System **Bi/Ge(111)** wurde bei einer Bedeckung von $\frac{1}{3}$ ML eine $\sqrt{3}$-Monomer-Rekonstruktion beobachtet [238].

### 8.1.2 (P, As, Sb, Bi) auf Si(001)-Oberflächen

Die Gruppe-V Elemente P, As, Sb und Bi induzieren auf der Si(001)-Oberfläche bei einer Sättigungsbedeckung nahe 1 ML eine $(2 \times 1)$-Rekonstruktion. Die Struktur der $(2 \times 1)$-Rekonstruktionen kann durch symmetrische Adsorbatdimere auf einem nahezu ideal terminierten Si(001)$(1 \times 1)$-Substrat beschrieben werden. Die *lone pair*-Orbitale der Dimere treten in Wechselwirkung und bilden vollständig besetzte $\pi_g$- und $\pi_u$-Orbitale [239]. Im Gegensatz zur $(2 \times 2)$-Rekonstruktion der Gruppe-III Elemente auf den Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen ist die Dimerisierung des Substrates in der $(2 \times 1)$-Rekonstruktion aufgehoben und die Orientierung der Adsorbatdimere ist zu den (aufgelösten) Substratdimeren orthogonal. Darüber hinaus wurden einige Beobachtungen bezüglich der Morphologie der Oberflächen gemacht, die überwiegend auf verschiedene Mechanismen zum Abbau der durch die Bindung an die Adsorbatdimere induzierten Verspannung im Substrat zurückgeführt werden.

Die Adsorption von **As auf Si(001)** ist aus technologischer Sicht besonders auf vizinalen Oberflächen interessant. Um das Wachstum von GaAs auf Si(001)-Substraten zu optimieren und Versetzungen in der GaAs-Schicht in Folge der wechselnden Orientierung der Rekonstruktion auf der *double domain* Substratoberfläche zu vermeiden, werden GaAs-Filme auf *single domain* Si(001)-Substraten gewachsen. Für epitaktisch auf *single domain* Si(001)-Oberflächen gewachsene GaAs-Filme wurden zwei verschiedene Orientierungen zum Substrat beobachtet. STM-Studien von Becker et al. [212] und Bringans et al. [241] zeigten, daß die Orientierung im wesentlichen von der Wachstumstemperatur bestimmt wird. Bei niedriger Temperatur ($T \leq 400\ °C$) wächst das As, welches immer die Grenzschicht vom Si-Substrat zum GaAs-Film bildet, direkt *on top* auf der Si-Oberfläche auf, während bei höheren Temperaturen ($400\ °C \leq T \leq 700\ °C$) die Substratoberfläche umgeordnet wird und Arsen die oberste Si-Lage *substituiert*. Alerhand et al. [242] erklären dieses Verhalten mit Hilfe von First Principles Rechnungen dahingehend, daß eine parallele Orientierung der As-Dimere zu den Stufenkanten die Relaxation der Verspannungen an den Doppelstufen begünstigt und somit die Oberflächenenergie absenkt. Der Einfluß der Temperatur auf die Anordnung der Stufen wurde kürzlich auch auf vizinalen *double domain* Si(001)-Oberflächen untersucht [243].

Das Wachstum von As auf ebenen Si(001)-Substraten wurde zunächst als einfaches Hinzufügen einer Monolage symmetrischer As-As Dimere auf das Substrat unter Aufbrechen der Substratdimere beschrieben [212]. LEEM- und STM-Messungen von Tromp et al. [244] zeigen, daß Substratatome bei der Adsorption von As bei 630 °C im Submonolagenbereich auch auf ebenen stufenfreien Terrassen verdrängt werden. Sie führen diese Beobachtungen ebenfalls auf das Verspannungsfeld im Substrat zurück. Die reine Si(001)$(2 \times 1)$Oberfläche steht in Dimerreihenrichtung unter Kompressionsspannung [245], während die As-terminierte Oberfläche unter Zugspannung steht [246]. Durch eine Abfolge von As- und Si-Dimeren in den Dimerreihen können sich die Verspannungen kompensieren. Erst jenseits einer kritischen Bedeckung wächst das Adsorbat *on top* in Form 2-dimensionaler Inseln bis zur Sättigungsbedeckung von 1 ML. Yu et al. errechnen einen Energiegewinn während aller Reaktionsschritte des Einbaus *einzelner* As-Dimere in die Si-Oberfläche und stellen die Bedeutung des Stresses für die substitutionelle Adsorption von As auf Si(001) in Frage [247]. Jusko et al. zeigten mit

STM, daß die zunächst ebene Si(001)-Oberfläche nach Deposition von 1 ML As bei 500 °C über zwei Lagen aufrauht, wobei beide Lagen As-terminiert sind. Jackson et al. [249] beobachten mit STM auf ebenen As-bedeckten Si(001)-Oberflächen eine Grabenstruktur, die sie als Reihen fehlender As-Dimere (*missing dimer rows*) interpretieren. Sie vermuten, daß die Missing Dimer Rows zum Abbau von Verspannungen auf der vollständig As-terminierten Oberfläche dienen.

Auch für das System **Sb/Si(001)** liegen eine Reihe experimenteller Untersuchungen vor, unter anderem mit LEED [250, 251, 252, 253, 254], RHEED [255, 256], STM [250, 251, 256, 257, 258, 259], SEXAFS [250], Photoelektronenspektroskopie (PES) [255, 256], MEIS [252], Transmissionsionenchanneling [253] und XSW [254]. Daneben wurden First Principles- und Dichtefunktional- Rechnungen zur Bindungsgeometrie [260, 239, 261] und zum Reaktionsweg der Sb-Dimere nach der Fragmentierung der $Sb_4$-Moleküle [262] durchgeführt. Erste Untersuchungen von Rich et al. mit RHEED, PES und STM deuteten bereits an, daß eine einfache und vollständige Terminierung der Si(001)-Oberfläche mit Sb-Dimeren nicht möglich ist [256]. SEXAFS-Messungen von Richter et al. [250] und ausführliche Untersuchungen mit STM von Nogami et al. [251] zeigen, daß die Sb-terminierte Oberfläche eine ähnliche Dimerstruktur wie die As-terminierte Si(001)-Oberfläche aufweist, die langreichweitige Ordnung jedoch durch eine hohe Dichte an Fehlstellen und Antiphasengrenzen sowie kleinen 2-dimensionalen Inseln gestört ist. Sie vermuten, daß die Fehlstellen und Antiphasengrenzen auf Verspannungen der Oberfläche zurückzuführen sind. Auf vizinalen *single domain* Oberflächen beobachten sie ausschließlich *on top* Adsorption. Elswijk et al. und Mo führten unabhängig voneinander STM-Messungen zur Dissoziation von $Sb_4$-Molekülen und zur Diffusion von Sb-Dimeren auf der Si(001)-Oberfläche durch [257, 258, 259].

Für **Bi auf Si(001)** berichten Hanada et al. in einer RHEED-Studie von einer $(n \times 2)$-Rekonstruktion nach Deposition von etwa 1 ML. Abhängig von der Bedeckung beträgt n zwischen 5 und 13. Sie schlagen ein *missing dimer row*-Modell vor, nach dem die Si-Atome unter den fehlenden Dimeren dimerisiert bleiben [263]. Spätere Untersuchungen mit LEED- und STM von Park et al. bestätigen dieses Modell. Sie vermuten, daß die langreichweitige Ordnung der Missing Dimer Rows auf eine elastische Wechselwirkung infolge eines starken Verspannungsfeldes zurückzuführen ist [264]. Noh et al. beobachten darüber hinaus eine $(2 \times 2)$-Rekonstruktion bis 0,5 ML mit orthogonal-orientierten Bi-Dimeren auf Bridge-Positionen und unter Beibehaltung der Si-Dimerbindung [265]. First Principles Rechnungen von Tang und Freeman bestätigen dieses Modell [266]. STM-Messungen von Naitoh et al.[267] zeigen nach Deposition von mehr als 2 ML Bi bei 400 °C eine über drei Lagen rauhe Oberfläche, deren Terrassen die Missing Dimer Row Struktur zeigen. Sie interpretieren ihre Beobachtungen dahingehend, daß die Bi-Atome die Diamantstruktur des Substrates über mehrere Lagen fortführen. Die elektronische Struktur der Bi-induzierten $(n \times 2)$-Rekonstruktion untersuchten Gavioli et al. mit UPS und HREELS [268]. Sie finden, daß die Bi-terminierte Oberfläche eine breite Bandlücke aufweist (1,3 eV) und die Dimerbindung zwischen den Si-Atomen unter der Bi-Lage aufgebrochen ist.

Wasserfall und Ranke untersuchten die Abhängigkeit der Stufenverteilung vom Vizinalwinkel mit LEED und AES auf sphärisch geschliffenen Si-Proben und nach Adsorption von **As**, **Sb** und **Bi**. Sie beobachteten 4-fach-Stufen, {115}-Facettierungen und nach teilweiser bzw. kompletter Desorption des Adsorbates die Ausbildung von Si(001)c$(4 \times 4)$-Rekonstruktionen [269].

**Phosphor-terminierte Si(001)**-Oberflächen können durch Adsorption und Dissoziation von Phosphin erzeugt werden [270]. STM-Messungen von Wang et al. zeigen, daß im Submonolagenbereich bevorzugt Si-P Heterodimere gebildet werden. Der substitutionelle Einbau der P-Atome bewirkt einen Massentransport des Substrates und die Morphologie der Oberfläche ist durch Inseln und einem extrem rauhen Stufenkantenverlauf geprägt. Die vollständig mit P-P Dimeren terminierte Oberfläche zeigt spannungsinduzierte Liniendefekte [271]. In einer späteren STM-Arbeit in Verbindung mit Totalenergierechnungen interpretieren Kipp et al. die Liniendefekte als P-terminierte Si(111)-Mikrofacetten [272].

### 8.1.3 (As,Sb,Bi)/Ge(001)

Die Adsorption von **As auf Ge(001)** untersuchten Morar et al.[273]. Sie beobachten nach der Deposition bei 450 °C ein scharfes $(2 \times 1)$-LEED-Bild und die Ergebnisse ihrer ARPES-Messungen stimmen weitgehend mit denen am System As/Si(001) überein. Sie schließen deshalb auf eine vollständige Terminierung der Ge(001)-Oberfläche mit symmetrischen As-As Dimeren.

Für das Adsorbatsystem **Sb/Ge(001)** liegen Untersuchungen mit RHEED [198, 274], LEED [275, 276], XPS [198, 275], ARUPS [275, 276], SXRD[274] und XSW [276] sowie First Principles Totalenergierechnungen vor [261, 277, 278]. Alle Studien kommen zu dem Ergebnis, daß die Ge(001)-Oberfläche nach der Deposition von 1 ML Sb analog zu den Gruppe-V Elementen auf Si(001) und As auf Ge(001) vollständig durch Sb-Dimeren abgeschlossen und $(2 \times 1)$-rekonstruiert ist. Im Gegensatz zur Sb-terminierten Si(001)-Oberfläche ist die Sb-terminierte Ge(001)-Oberfläche bei geeigneter Präparation gut geordnet und es können mittlere Domänengrößen von 600 Å erreicht werden [274]. Die Positionen der Sb-Dimere über dem Substrat und damit die Bindungslängen und -Winkel sind umstritten. Nach den Ergebnissen der SXRD-Studie ist der Sb-Dimer asymmetrisch. Der Dimer ist lateral gegenüber der Mitte der Einheitszelle um ~0,16 Å verschoben und vertikal um 0,04 Å gebuckelt. Die Abweichungen der vertikalen Positionen der Sb-Atome und der Atome der ersten Ge-Lage von den Positionen der Ge-Atome im Volumen ist gering [274]. Die XSW-Experimente lassen dagegen auf einen erheblich größeren vertikalen Abstand (2,0 Å) zwischen Sb-Lage und der ersten Ge-Lage schließen [276]. Kürzlich veröffentlichten Totalenergierechnungen zufolge ist der Sb-Dimer symmetrisch. Die Relaxation der Ge-Atome der ersten Lage in Richtung des Volumens und die vertikale Verschiebung der Sb-Dimerlage in Richtung des Vakuums wurden qualitativ bestätigt. Im Vergleich zu dem ebenfalls berechneten Si(001)$(2\times1)$-Sb Rekonstruktion sind die Verschiebungen der Sb-Lage zu den fortgeführten Volumenpositionen kleiner, die Relaxationen innerhalb der Substratlagen jedoch deutlich größer [277].

**Bi auf Ge(001)**-Oberflächen adsorbiert nach einer kürzlich veröffentlichten STM-Arbeit [279] im unteren Submonolagenbereich bei RT als einzelne Bi-Dimere über den Dimerreihen des Substrates. Getemperte Oberflächen im Bedeckungsbereich einer Monolage zeigen eine Missing Dimer Row Struktur und nach Deposition von mehr als zwei Monolagen zusätzlich größere {111}- und {113}-facettierte Strukturen.

Im folgenden werden die ersten STM-Messungen am System Sb/Ge(001) vorgestellt. Es wird gezeigt, daß die Topographie der Oberfläche empfindlich von der Präparation abhängig ist und es wird vorgeschlagen, die unterschiedlichen Angaben bezüglich des Abstands der Lagen in Ref.[274] und Ref.[276] auf Unterschiede in der Präparation zurückzuführen. Ein Teil der Resultate wurde bereits in Ref. [280] veröffentlicht.

## 8.2 Probenpräparation

Für unsere Untersuchungen am Adsorbatsystem Sb/Ge(001) verwendeten wir Proben von polierten Ge(001)-Wafern mit einer Fehlorientierungen unter 0,1° gegen die (001)-Richtung.

Die reinen Ge(001)$(2\times1)$-Oberflächen wurden wie in Abschn. 5.5 beschrieben durch Sputter-Anneal-Zyklen präpariert. Vor dem Aufdampfen des Adsorbates wurden die Qualität der Substratoberflächen eingehend mit LEED, RHEED und STM geprüft. Das Sb wurde in einer kommerziell erhältlichen Knudsen-Zelle mit PBN-Tiegel und Wasserkühlung (WA Technology) verdampft. Um die Kontamination der MBE-Kammer mit Sb zu vermeiden, wurde der Verdampfer in die Schleusenkammer eingebaut (siehe Abb. 4.1). Der Einbau an dieser Position erlaubt es, die bedampften Flächen der Kammer mit geringem Aufwand zu reinigen. Eine Bestimmung der Aufdampfrate mit einem Schwingquarz waren an dieser Position nicht möglich. Die Aufdampfrate wurde durch Auszählen von Sb-Dimeren und $Sb_4$-Molekülen in STM-Bildern nach RT-Deposition im unteren Submonolagenbereich bestimmt und lag bei der durchgehend verwendeten Ofentemperatur von nominell 460 °C bei $1,0 \times 10^{-3}$ ML/s.

Da das Heizen der Probe in der Schleusenkammer zu der Zeit, als diese Experimente durchgeführt wurden, noch nicht möglich war, wurde die Sb-Deposition ausschließlich bei RT vorgenommen. Im Anschluß an die Deposition wurde die Präparation mit LEED charakterisiert. Temperprozesse wurden in der MBE-Kammer durchgeführt und *in situ* mit RHEED überwacht. Der Druck in der Kammer betrug während der Deposition weniger als $1 \times 10^{-9}$ mbar. Eine Beeinträchtigung der Qualität der Oberfläche durch Restgas-Kontamination während des Aufdampfens wurde anschließend in den STM-Bildern nicht beobachtet. Die Sb-bedeckten Ge-Substrate konnten durch Sputter-Anneal-Zyklen oder durch einfaches Aufheizen auf $\sim$ 750 $^\circ C$ weitgehend gereinigt werden, es blieb aber eine geringe Dichte charakteristischer Defekte an der Oberfläche zurück. Ferner ist die Diffusion von Sb in das Volumen der Probe nicht auszuschließen. Proben, die mit Sb bedampft waren, wurden nach ihrer Reinigung nicht weiter für die Untersuchung anderer Adsorbatsysteme verwendet.

## 8.3 Messungen an Sb auf Ge(001) und Diskussion

Die Darstellung der Untersuchungen am System Sb/Ge(001) gliedert sich in vier Abschnitte. Zunächst werden die Ergebnisse zur Adsorption und Dissoziation von Sb-Molekülen auf Ge(001)-Oberflächen bei RT und geringen Bedeckungen (0,1-0,25 ML) vorgestellt. Es folgt die Beschreibung der Veränderungen der Oberflächen durch einen Temperungsvorgang. Daran schließen sich die Experimente zur Deposition im Submonolagenbereich (0,7 ML) an, deren bedeutendstes Ergebnis der Einbau von Sb-Dimeren in die Ge-Dimerreihen nach dem Tempern ist. Der vierte Teil umfaßt die Untersuchungen nach Deposition jenseits der Sättigungsbedeckung und mehreren anschließenden Temperungsschritten. Die Veränderungen der Morphologie der Oberfläche werden unter dem Aspekt des Ausgleichs von Verspannungen durch die Ausbildung von Streß-Domänen diskutiert.

### 8.3.1 Adsorption und Dissoziation von $Sb_4$-Molekülen

Es ist bekannt, daß Antimon bei Temperaturen unterhalb 800K ausschließlich in Form von $Sb_4$-Molekülen verdampft [281]. Im folgenden soll untersucht werden, ob und wie die $Sb_4$-Moleküle bei der Adsorption auf der Ge(001)-Oberfläche dissoziieren und Zwischenzustände (*precursor states*) vor der Anordnung der Sb-Atome in der $(2 \times 1)$-Dimerstruktur ausgebildet werden. Die Existenz und die Rolle von Precursoren bei dissoziativer Adsorption ist in Hinblick auf das Verständnis der Wechselwirkung von Molekülen mit Festkörperoberflächen von großer Bedeutung. Bei der Gasphasenepitaxie von Halbleiterfilmen werden die Dotierungsmaterialien Sb, As, P und B häufig in molekularer Form deponiert. Ihre Einbaurate in den Festkörper hängt von den Zwischenzuständen der Moleküle nach der Adsorption auf der Oberfläche ab.

Mo untersuchte die Adsorption von $Sb_4$-Molekülen auf Si(001) bei RT und einer Sb-Bedeckung von 0,02 ML [258]. Er konnte vier verschiedene Typen von Precursoren unterscheiden, nämlich runde Cluster (*ball cluster*), Cluster in der Form von Hanteln und rotierter Hanteln (*dumbbells* und *rotated dumbbells*) sowie Paare von Sb-Dimeren, deren Dimerbindungen parallel zu den Dimeren des Substrats orientiert sind (*rotated dimers*). Alle vier Arten von Precursors zerfallen durch Tempern (50–230 °C) oder Tunneln bei hohen Tunnelspannungen ($U \geq \pm 3,0\ V$) in einen Endzustand (*final state*), welcher durch ein einzelnes Paar von Sb-Dimeren (4 Sb-Atomen) mit orthogonaler Orientierung der Sb-Dimere zu den Dimeren des Substrates beschrieben wird. Vor der Anregung beträgt die relative Häufigkeit des Endzustandes etwa $\frac{1}{4}$.

Die Ge(001)-Oberfläche nach Deposition von 0,1 ML Sb (bzw. 0,025 ML $Sb_4$) bei RT zeigt Abb. 8.1 (a). Neben der ungestörten Dimerreihen der reinen Ge(001)-Oberfläche sind drei Typen von Sb-Clustern zu erkennen, und zwar quadratische ("A"," B"), ovale ("C") und runde ("D") Einheiten. Die quadratischen Einheiten besitzen eine Unterstruktur, die darauf schließen läßt, daß die Einheiten aus jeweils zwei Dimeren aufgebaut sind. Die Dimere sind orthogonal zu den Dimeren des Substrates orientiert. Die Sb-Dimerpaare entsprechen den von Mo beobachteten *final states* der Dissoziation von $Sb_4$-Molekülen auf Si(001)-Oberflächen. Werden die Positionen der Erhöhungen mit denen der zugrundeliegenden Atome gleichgesetzt, befinden sich die Atome des einen der beiden Dimere auf Bridge-Positionen und die des anderen auf Cave-Positionen. Eine Ausnahme bildet der quadratische Cluster, der mit "B" gekennzeichnet ist. Hier befinden sich alle vier Erhöhungen auf *on top*-Positionen. Dieser Unterschied in der lateralen Position geht mit einer Differenz in der gemessenen Höhe der Cluster über den Ge-Dimerreihen einher. Während die Höhe der Cluster mit pseudomorpher Anordnung "A" in dieser Abbildung $\sim 1,4$ Å beträgt, ist der Cluster "B" um 1,8 Å erhöht. Im Gegensatz zur Beobachtung von Mo grenzen die *final state*-Cluster bereits zum Teil aneinander und bilden 2-dimensionale Inseln. Die Anzahl der Sb-Atome pro Insel beträgt in der Regel Vielfache von vier, was auf ihren Ursprung, nämlich der Fragmentierung von $Sb_4$-Molekülen, und auf eine geringe Beweglichkeit der Sb-Atome hinweist. Es werden jedoch auch ungeradzahlige Vielfache von zwei und von eins beobachtet.

Die ovalen ("C") und runden ("D") Erhebungen werden ebenfalls auf Cluster von Sb-Atomen zurückgeführt, denn sie werden nach einem Tempern der Probe oberhalb 200 °C nicht mehr beobachtet, was eine Interpretation als Fremdkontamination unwahrscheinlich macht. Die Cluster beiden Typs sind stets mittig über den Ge-Dimerreihen angeordnet. Ihre Korrugation über den Dimerreihen beträgt in diesem Bild 2,5 Å für die ovalen Cluster und 3,0 Å für die runden Cluster. Die Abbildung 8.1 (b) zeigt eine Ge(001)-Oberfläche nach Deposition von 0,25 ML bei RT. Es sind die gleichen drei Clustertypen zu erkennen. Die *final state*-Cluster bilden überwiegend kleine zusammenhängende Bereiche. Das Verhältnis der Anzahl der ovalen Erhebungen zur Anzahl der *final state*-Cluster (bzw. vier Erhebungen) beträgt unverändert 1:3, während das Verhältnis der runden Cluster zu den ovalen Clustern von 1:2 auf 1:5 gesunken ist. Darüber hinaus wird beobachtet, daß die ovalen Cluster bevorzugt paarweise angeordnet sind.

Über die atomare Struktur der ovalen und runden Cluster geben die STM-Bilder allein keinen eindeutigen Aufschluß. Die runden Cluster sind vermutlich identisch mit den *ball clusters* auf der Si(001)-Oberfläche, für die Mo zeigen konnte, daß sie in vier Sb-Atome zerfallen können. Ähnliche runde Cluster, und zwar ausschließlich runde Cluster, wurden ebenfalls nach der RT-Adsorption von $Sb_4$-Molekülen auf Si(113)-Oberflächen beobachtet [282]. Die ovalen Cluster wurden von Mo auf Si(001) nach RT-Deposition jedoch nicht gesehen, dagegen wurden von uns keine der drei weiteren Mo'schen Precursoren beobachtet. Die Dissoziation von $Sb_4$-Molekülen auf Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen bei RT scheint sich also qualitativ zu unterscheiden.

Bezüglich der Natur der ovalen Cluster sind folgende zwei Alternativen denkbar. Die ovalen Cluster könnten neben den runden Clustern eine weitere Manifestation der $Sb_4$-Moleküle sein, deren Struktur unbekannt ist. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, daß es sich bei den ovalen Clustern um einzelne Sb-Dimere handelt. Totalenergierechnungen von Tang und Freeman [266] zur Adsorption von Bi auf Si(001) ergeben, daß die Dimerisierung des Substrates bei der Adsorption eines einzelnen Adsorbatdimers mit Atomen auf Bridge-Positionen erhalten bleibt und erst in Folge der Adsorption eines weiteren Dimers mit Atomen auf einer Cave-Positionen gebrochen wird. Im Analogieschluß zu dieser Rechnung sollte die Dimerisierung des Ge(001)-Substrates unter den Sb-Dimeren (ovalen Clustern) ebenfalls erhalten bleiben. Die Bindungsgeometrie der Sb-Dimere der ovalen Cluster unterscheidet sich dadurch von der Bindungsgeometrie der Sb-Dimere der *final state*-Cluster, was ihre unterschiedliche Abbildung erklären kann.

Tatsächlich berichtet auch Mo von Sb-Dimeren, die sich ausschließlich *auf* den Substratdimerreihen befinden [259] und deren Abbildung unseren ovalen Cluster gleicht. Mo beobachtet die Sb-Dimere allerdings nicht direkt im Anschluß an die RT-Deposition, sondern nach einem Temperungsvorgang im Temperaturbereich 150–320 °C. Er gibt an, daß alle *final state*-Cluster und Precursoren durch das Tempern in isolierte Sb-Dimere zerfallen. Diese Beobachtung legt nahe, daß zwei isolierte Sb-Dimere mit Atomen auf Bridge-Positionen gegenüber einem Dimerpaar mit Atomen auf Bridge- und Cave-Positionen energetisch begünstigt sind. Mo gibt jedoch an, daß die Sb-Dimere oberhalb 320 °C Inseln mit geschlossenen Dimerreihen, also Dimeren mit Atomen auf Bridge- und Cave-Positionen, bilden.

Elswijk und van Loenen studierten ebenfalls die Adsorption von $Sb_4$-Molekülen auf Si(001)-Oberflächen bei RT mit STM [257]. Ihre Beobachtungen weichen jedoch in wesentlichen Punkten von den Beobachtungen von Mo ab. Sie beobachten bereits direkt im Anschluß an die RT-Deposition überwiegend ovale Erhebungen auf den Si-Dimerreihen, von denen jeweils zwei dicht benachbart sind. Sie interpretieren diese Cluster ebenfalls als $Sb_2$-Moleküle (Dimere), die unter Wahrung der Dimerisierung des Substrats chemisorbieren. Von *ball clusters* oder anderen von Mo beschriebene Precursoren berichten sie nicht. Nach anschließenden Temperungszyklen wurde mit steigender Temperatur bis 500 °C eine Beweglichkeit der Sb-Dimere und schließlich ihre Anordnung in kompakten $(2 \times 1)$-rekonstruierten Inseln beobachtet. Sie folgern daraus, daß geschlossene Dimerreihen mit Dimeratomen in Bridge- und Cave-Positionen energetisch günstiger sind. Ihre Bildung ist aber kinetisch behindert, da sie eine Dissoziation der Substratdimere erfordert.

Die Beobachtungen von Mo und von Elswijk et al. sind miteinander kompatibel, wenn angenommen wird, daß die Substrattemperatur der Proben von Elswijk et al. während der Deposition nicht bei RT, sondern deutlich darüber lag. Als mögliche Ursachen kommen dafür Wärmestrahlung durch den Sb-Ofen oder unvollständiges Abkühlen der Probe nach dem Flashen in Betracht. Die Reihenfolge der Sb-Strukturen mit abnehmender Oberflächenenergie lautet demnach:

Precursoren $\rightarrow$ isolierte *final state*-Cluster
$\rightarrow$ isolierte Sb-Dimere (Bridge-Position) $\rightarrow$ Domänen geschlossender Sb-Dimerreihen.

Es bleibt jedoch unklar, welcher Mechanismus die große Energiedifferenz zwischen isolierten *final state*-Clustern und geschlossender Sb-Dimerreihen bewirkt. Nach dem Modell liegt

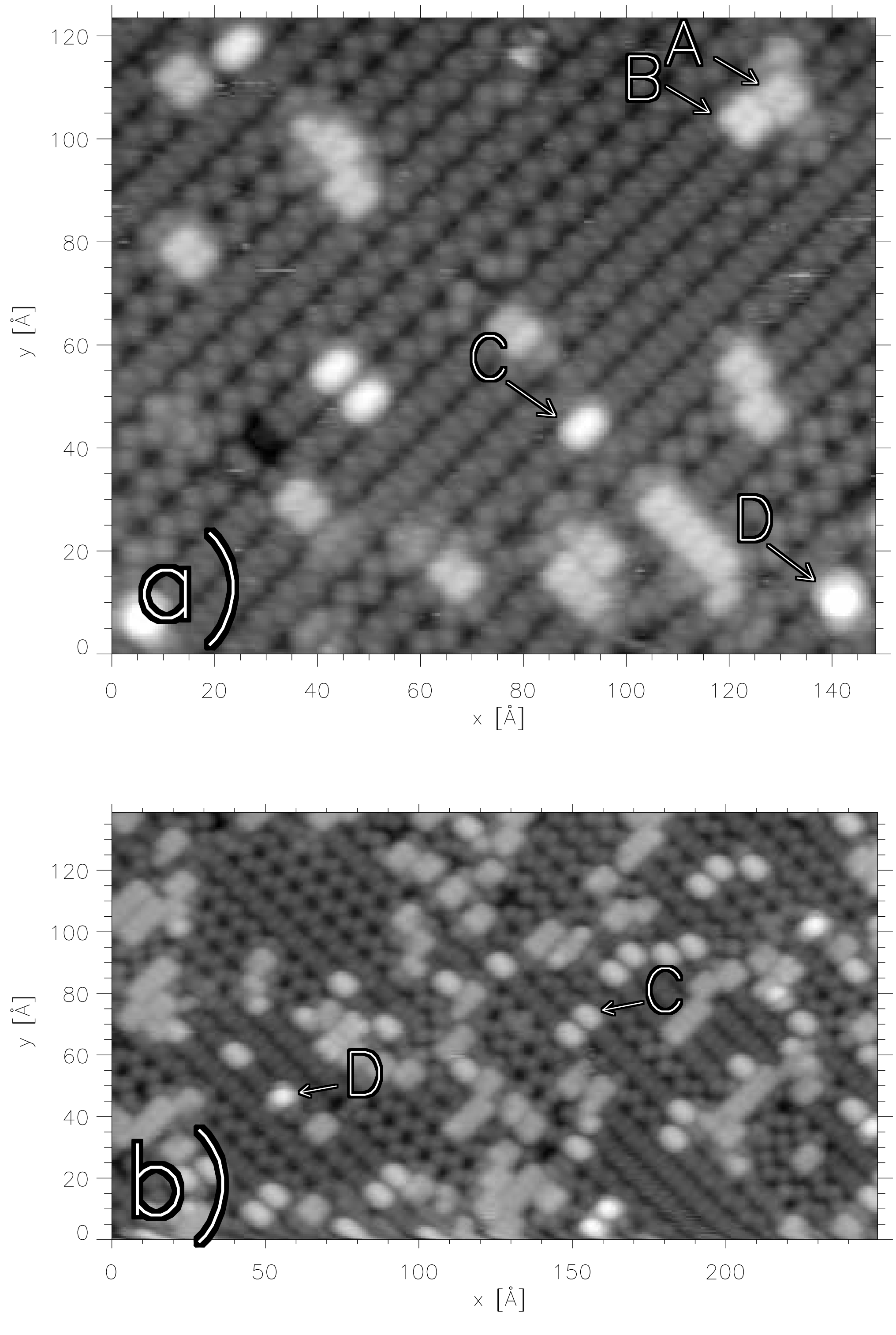


Abbildung 8.1: STM-Topographien zweier Ge(001)-Oberflächen nach der Aufdampfen von 0,1 ML (a) bzw. 0,25 ML (b) Sb bei RT. Markiert sind Sb-Dimerpaare auf Bridge- und Cave-Plätzen ("A") und *on top*-Plätzen ("B") sowie ovale ("C") und runde Cluster ("D") (a: $U = -1,9\ V,\ I = 1,8\ nA$, b: $U = -1,1\ V,\ I = 0,9\ nA$).

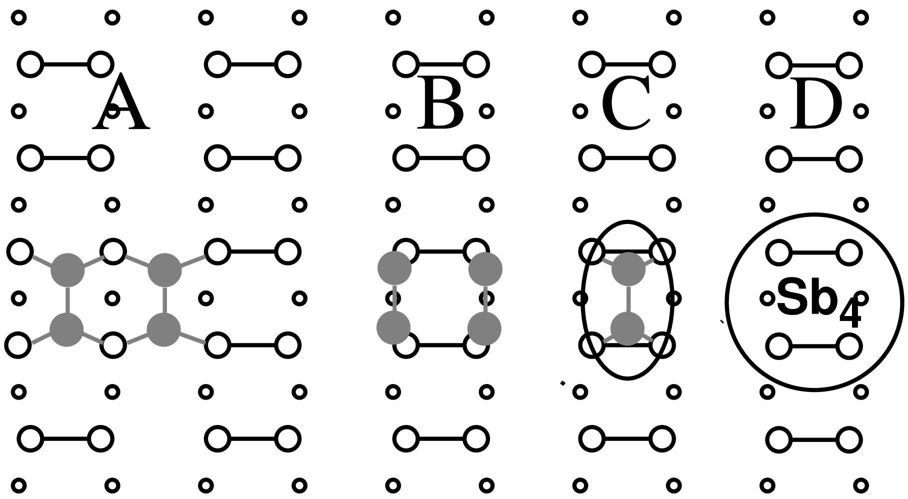


Abbildung 8.2: Schematisches Modell der in Abb. 8.1 bezeichneten Sb-Cluster unter Berücksichtigung ihres Adsorptionsplatzes. Die gefüllten Kreise bedeuten Sb-Atome und die offenen Kreise Ge-Atome.

beiden Formen die gleiche lokale Struktur zugrunde und sie unterscheiden sich nur in ihrer Anordnung (Länge der Domänengrenzen).

Unsere Beobachtungen zur Adsorption von $Sb_4$-Molekülen auf Ge(001)-Oberflächen bei RT stimmen mit den beschriebenen Beobachtungen zur Adsorption auf der Si(001)-Oberfläche gut überein, sofern angenommen wird, daß die Beweglichkeit der Molekül-Fragmente bei RT auf der Ge(001)-Oberfläche höher ist als auf der Si(001)-Oberfläche. Alle Fragmente der $Sb_4$-Moleküle können bereits bei RT die energetisch günstige Konfiguration als *final state* Cluster (“A”) oder als Bridge-Position Dimer (“C”) einnehmen und müssen nicht als Precursor verharren. Ist eine der beiden günstigen Anordnungen erreicht, bewegen sich die Einheiten nicht mehr. Dieser Interpretation folgend, sollten diese Precursors auf der Ge(001)-Fläche bei Depositionstemperaturen unterhalb RT zu beobachten sein. Eine Kühlung der Probe vor dem Sb-Verdampfer ist zur Zeit jedoch noch nicht möglich. Die Zerfallswahrscheinlichkeit der runden Cluster ist abhängig von der Temperatur, aber unabhängig von der Beweglichkeit der Fragmente und somit für beide Oberflächen gleich. Eine Dekomposition von *final state*-Clustern in isolierte Sb-Dimere und die Anordnung der Sb-Dimeren in kompakte $(2 \times 1)$-Domänen durch thermische Behandlung konnte von uns auf der Ge(001)-Oberfläche nicht nachvollzogen werden, da bereits bei der niedrigsten verwendeten Temperatur (200 °C) unerwartete Effekte auftraten, die im folgenden Abschnitt auf eine Durchmischung von Adsorbat- und Substratlagen zurückgeführt werden.

Die angenommene Anordnung der Sb-Dimere auf der Ge(001)-Oberfläche nach RT-Deposition ist schematisch in Abb. 8.2 wiedergegeben.

### 8.3.2 Durchmischung von Sb- und Ge-Lagen

Im Anschluß an die STM-Messungen wurden die im vorherigen Abschn. 8.3.1 dargestellte Oberflächen in mehreren Schritten bei Temperaturen zwischen 200 °C und 420 °C getempert. Wie erwartet werden die runden Cluster, welche auf nicht-fragmentierte $Sb_4$-Moleküle zurückzuführen sind, nicht mehr beobachtet. Auch die ovalen Cluster, die vermutlich Sb-Addimere darstellen, sind nicht mehr nachzuweisen. Die Veränderungen an der Oberfläche

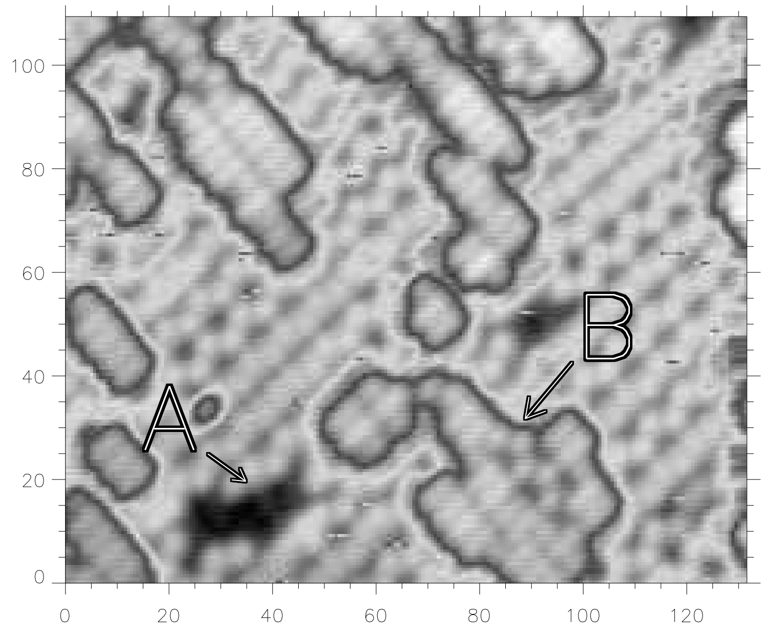


Abbildung 8.3: STM-Topographie einer Ge(001)-Oberfläche nach dem Aufdampfen von 0,25 ML (b) Sb bei RT und Nachtempern bei $\sim 200$ °C. Die Pfeile deuten auf eine Fehlstelleninsel (A) und eine gebuckelte Dimerreihe auf einer Insel (B). Zur Darstellung der Dimerstruktur auf beiden Ebenen wurde die Grauwerttabelle verdoppelt ($U = -2,0\ V,\ I = 1,1\ nA$).

nach dem Tempern gehen allerdings über die vollständige Fragmentierung der Sb-Moleküle und den pseudomorphen Einbau von Sb-Dimeren *auf* der Ge(001)-Oberfläche in Form von $(2 \times 1)$-Domänen hinaus.

Abbildung 8.3 zeigt die höher bedeckte Oberfläche (0,25 ML Sb bei RT) aus Abb. 8.1 (b) nach einem fünfminütigen Tempern bei 200 °C. Im Vergleich zur ungetemperten Probe hat die Größe der Inseln zugenommen. Die Inseln bestehen überwiegend aus Reihen symmetrischer Dimere. Darüber hinaus sind innerhalb der Reihen und bevorzugt am Ende der Reihen einzelne Erhöhungen zu erkennen. An einigen Stellen sind die einzelnen Erhöhungen wie bei “B” in den Reihen alternierend angeordnet und gleichen in ihrer Abbildung den gebuckelten Dimerreihen der reinen Ge(001)-Oberfläche. Die Inseln sind von der reinen Ge(001)-Oberfläche umgeben. Sie erscheint weitgehend ungestört, weist aber kleine, für diese Präparation charakteristische Fehlstelleninseln auf (A).

Nach einem zweiten Temperungsschritt bei $\sim 280$ °C für 10 min zeigt die Oberfläche weitere Veränderungen (Abb. 8.4). Sowohl die Flächen der einzelnen Inseln und Fehlstelleninseln als auch ihre Gesamtfläche haben sich vergrößert. Die Inseln zeigen nun die gleiche Struktur wie die sie umgebende Hauptterrasse und die Fehlstelleninseln, nämlich zu gleichen Teilen Erhöhungen in zickzackförmiger Anordnung und hintereinander angeordnete Erhöhungen. Einzelne kleine Gruppen hintereinander angeordneter Erhöhungen erscheinen gegenüber den übrigen um $\sim 0,3$ Å erhöht.

Die Interpretation dieser Beobachtungen ist nicht einfach, da die Erhöhungen *a priori* nicht eindeutig einer Atomsorte, also Sb- oder Ge-Atomen zugeordnet werden können. Von den Atomen beider Elemente wird erwartet, daß sie nach der Adsorption auf der Ge(001)-Oberfläche Dimerreihen mit übereinstimmenden Adsorptionsplatz bilden.

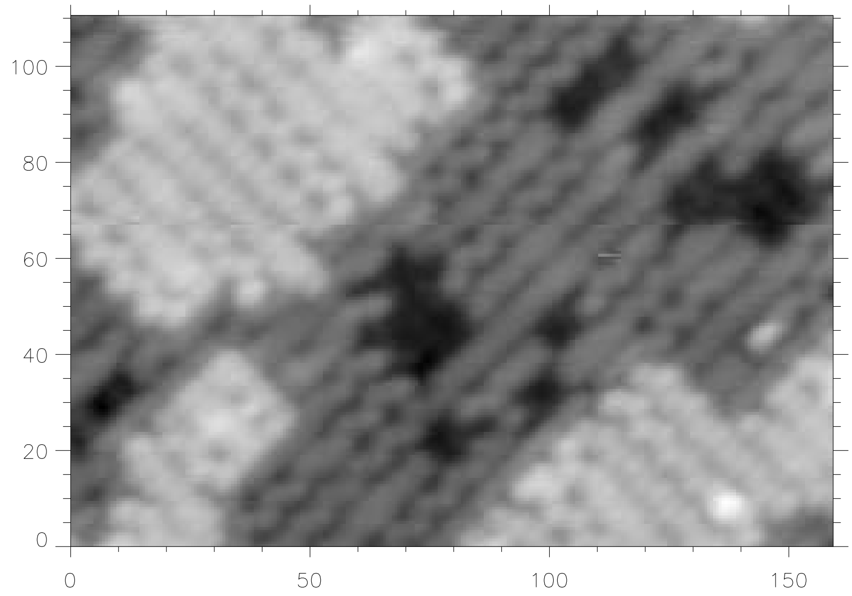


Abbildung 8.4: STM-Topographie der gleichen Oberfläche nach weiterem Tempern bei $\sim$ 280 °C. Die Fläche der Inseln und Fehlstelleninseln hat zugenommen ($U = -1,8\ V,\ I = 1,5\ nA$).

Bei RT sollte die Beweglichkeit der Ge-Atome des Volumens und der Oberfläche so gering sein, daß die Atome ihre Position nicht verlassen können. Es darf deshalb angenommen werden, das die Erhöhungen auf der ebenen Oberfläche nach RT-Deposition ausschließlich aus Adsorbatatomen aufgebaut sind. Die Unversehrtheit der Ge(001)-Oberfläche in den STM-Aufnahmen unterstützt diese Annahme. Nach dem Tempern zeigt die Existenz der Fehlstelleninseln in der obersten Ge(001)-Lage, daß sich Substratatome aus ihrer Position im Gitter fortbewegt haben müssen. Eine Unterscheidung von Adsorbat- und Substratatomen auf der Grundlage ihrer Position ist somit nicht mehr möglich. Substratatome können in die Inseln eingebaut sein, wie auch Adsorbatatome in die Ge-Oberfläche oder das Ge-Volumen diffundiert sein können. Deshalb müssen zur Identifizierung der Erhöhungen weitere Details der Abbildung herangezogen werden.

In Kapitel 5 wurde dargestellt, daß die Abbildung der reinen Ge(001)-Oberfläche durch die Koexistenz gebuckelter und nicht-gebuckelter Dimerreihen gekennzeichnet ist. Die asymmetrischen Dimere erscheinen als runde Erhöhungen, die entlang der Reihen alternierend versetzt angeordnet sind, während die symmetrischen Dimere in ovaler Form abgebildet werden. Diese Eigenschaften weisen auch die Dimerreihen der Hauptterrasse in Abb.8.3 auf. Die symmetrischen Dimere auf den Inseln in Abb. 8.3 sind gegenüber den typischen symmetrischen Ge-Dimeren länglicher bis hin zur Auflösung zweier Maxima pro Dimer. Diese länglichen Erhöhungen werden deshalb als Sb-Dimere identifiziert. Die runden Erhöhungen in zickzackförmigen Anordnung gleichen in ihrer Abbildung vollständig den gebuckelten Ge-Dimerreihen. Die Natur der einzelnen runden Erhöhungen in den Dimerreihen der Inseln bleibt unklar.

In Abbildung 8.4, die dieselbe Oberfläche nach einem weiteren Temperungsvorgang darstellt, werden die symmetrischen Dimere auf den Inseln trotz ähnlicher Tunnelparameter nicht mehr länglich oder als zwei getrennte Maxima abgebildet, sondern oval. Die Abbildung der symmetrischen Dimere auf den Inseln und der sie umgebenden Terrasse ist jetzt identisch. Auf beiden Ebenen lassen sich die symmetrischen Dimere jedoch über ihre Korrugation in zwei Gruppen einteilen. Es ist wahrscheinlich, daß die unterschiedliche Korrugation durch die Atomsorte hervorgerufen wird (chemischer Kontrast). Die zickzackförmigen Dimerreihen werden wiederum auf Substratatome zurückgeführt.

Im folgenden Abschnitt 8.3.3 wird gezeigt, daß bei höherer Sb-Bedeckung in der Abbildung der unbesetzten Probenzustände leicht zwischen Sb- und Ge-Dimeren unterschieden werden kann. Bei der hier dargestellten niedrigen Bedeckung sind uns bei positiver Probenspannung leider keine Abbildungen in ausreichender Auflösung gelungen. Das ist bedauerlich und zugleich bemerkenswert, denn bei höher bedeckten Oberflächen hat die Abbildung der unbesetzten Zustände keine größeren Schwierigkeiten bereitet.

Unter Berücksichtigung der obigen Überlegungen zur chemischen Identität der Dimere in den Abbildungen sind folgende zwei Szenarien denkbar. Durch das Tempern der Probe bei $\sim 200$ °C zerfallen die restlichen $Sb_4$-Moleküle. Die Sb-Dimere ordnen sich in größeren $(2 \times 1)$-rekonstruierten Domänen auf der Ge(001)-Oberfläche an. Darüber hinaus diffundiert ein kleiner Teil der Sb-Atome über einen Austauschmechanismus [283] in das Ge-Volumen. Die dabei verdrängten Substratatome lagern sich an die Adsorbatinseln an und bilden gebuckelte Ge-Dimerreihen. Auf der Hauptterrasse bleiben kleine, durch die Umordnungsprozesse erzeugte Fehlstelleninseln zurück. Durch weiteres Tempern bei $\sim 280$ °C wächst die Fläche der Fehlstelleninseln, so daß auf fortgesetzte Diffusion von Sb-Atomen in das Ge-Volumen geschlossen werden kann. Die Inseln nehmen an Fläche zu und setzen sich nun überwiegend aus Substratatomen zusammen, die durch die Diffusion der Sb-Atome verdrängt wurden. Auf verbliebene Sb-Dimere deuten nur noch die helleren, symmetrischen (Defekt-) Dimere hin, die mit gleicher Dichte auch auf den die Inseln umgebenden Ge(001)-Terrassen beobachtet werden.

Gegen diesen Erklärungsversuch mit der Diffusion des Antimons in das Ge-Volumen als treibende Kraft sprechen die bekannten Werte für die Volumenlöslichkeit von Sb in Ge und die Oberflächenspannungen der Elemente. Bei hohen Temperaturen wird ein Gleichgewicht der an die Oberfläche segregierten Menge Sb und der im Ge-Volumen gelösten Konzentration an Sb-Atomen erwartet. Die Löslichkeit ist abhängig von der Temperatur und nimmt bis an den Schmelzpunkt des Germaniums zu [286]. Quantitative Angaben über die Löslichkeit von Sb in Ge sind nur für hohe Temperaturen erhältlich und schwanken zwischen 2,4% (540 °C) [284] und 0,00009% (580 °C) [285], wobei der jüngste uns bekannte Wert 0,01% bei 600 °C beträgt [286]. Wegen der Abnahme der Löslichkeit mit der Temperatur erwarten Rich et al. unterhalb 400 °C keinen signifikanten Einbau von Sb in des Ge-Volumen und setzen die aufgedampfte Menge Sb mit der Menge an der Oberfläche nach der Temperaturbehandlung gleich [198]. Darüber hinaus besitzt Sb relativ zu Ge die kleinere Oberflächenspannung, so daß die Volumenlöslichkeit nahe der Oberfläche für Submonolagenbedeckungen noch weiter gesenkt wird.

Der zweite Erklärungsversuch unterstellt statt einer 3D-Löslichkeit eine 2D-Löslichkeit des Sb in der Ge(001)-Oberfläche. Für die Adsorption von As auf Si(001)-Oberflächen wurde diskutiert, daß die As-Atome nicht *on top* eine Adsorbatlage bilden, sondern die As-Atome Si-Atome in der ersten Substratlage substituieren [212, 241, 242, 244, 247] und auf ebenen Substraten durch eine Mischung von Adsorbat- und Substratatomen innerhalb einer Lage die Verspannungen der Oberfläche minimiert werden können [244]. Diese Interpretation kann auf unsere Beobachtungen übertragen werden. Die durch die Substitution verdrängten Substratatome werden jedoch nicht an Stufenkanten des Substrates eingebaut, sondern in den verbleibenden Sb-Inseln, was auf eine geringere freie Weglänge der Substratatome bei den von uns verwendeten niedrigen Temperaturen zurückgeführt werden kann. Das Auftreten von Fehlstelleninseln zeigt jedoch, daß es über die Substitution hinaus eine treibende Kraft für die Substratatome geben muß, die oberste Substratlage zu verlassen und in die Inseln eingebaut zu werden.

Prinzipiell kann zwischen den beiden vorgestellten Modellen leicht durch eine Bestimmung der Sb-Bedeckung nach dem Temperungsschritten unterschieden werden. Leider läßt der geringe Kontrast zwischen den Abbildungen der Sb-Dimere und der symmetrischen Ge-Dimere in diesen Aufnahmen eine Zuordnung mit ausreichender Genauigkeit nicht zu.

### 8.3.3 Chemischer Kontrast auf Ge(001)$(2 \times 1)$-Sb

In diesem Abschnitt werden STM-Messungen an der Ge(001)-Oberfläche nach RT-Deposition von Sb im oberen Submonolagenbereich (0,7 ML) und anschließendem Tempern dargestellt, welche insbesondere unter dem Aspekt der tunnelspannungabhängigen Abbildungseigenschaften der Sb- und Ge-Dimere diskutiert werden. STM-Aufnahmen der Oberfläche direkt nach der RT-Deposition (ohne Abbildung) zeigen im Vergleich zu Abb. 8.1 (b) (0,25 ML) im wesentlichen eine Zunahme der Größe der Sb-Dimerdomänen. Die Domänen weisen durch eine hohen Dichte an Antiphasengrenzen und Fehlstellen nur eine kurzreichweitige $(2 \times 1)$-Periodizität auf. Gleichzeitig hat die Größe der Domänen der unbedeckten Ge(001)$(2 \times 1)$-Oberfläche stark abgenommen, so daß die halbzahligen Reflexe in zugehörigen LEED-Bild schwach und aufgeweitet sind. Helle Erhebungen in den STM-Bildern, welche auf Sb-Cluster zurückgeführt werden, werden in der Regel nicht auf der unbedeckten Ge-Oberfläche, sondern auf den Sb-Dimerdomänen beobachtet.

Die Reaktion der Oberfläche auf ein Tempern der Probe bei 350 °C für 10 min veranschaulicht Abb 8.5. Die zuvor ebene Ge(001)-Oberfläche ist aufgebrochen und ist aus Terrassen von vier aufeinanderfolgenden Ge(001)-Lagen zusammengesetzt. Die Struktur der Terrassen aller vier Lagen ist identisch und besteht mit Ausnahme weniger Defekte aus in Reihen angeordneten, symmetrischen Dimeren. Die Topographie dieser Oberfläche und der in Abb. 8.4 dargestellten Oberfläche (0,25 ML Sb, 280 °C) ist somit ähnlich, sie unterscheiden sich aber substantiell in der Struktur auf den Terrassen. Die Dimere sind symmetrisch auf der höher bedeckten Probe und überwiegend asymmetrisch auf der niedriger bedeckten Probe.

Die Abbildung 8.6 zeigt einen weiteren Ausschnitt dieser Oberfläche im Detail. Die Bilder wurden simultan bei -1,0 V (a) und +1,0 V (b) Probenspannung aufgenommen und geben die besetzten bzw. unbesetzten Zustände der Oberfläche wieder. In der Abbildung der besetzten Zustände (a) erscheinen die Dimere auf allen Terrassen symmetrisch. Wie für die Sb-Dimere in Abb. 8.1 (a) und Abb. 8.3 sind für jeden Dimer zwei getrennte Maxima zu erkennen. Darüber hinaus werden an wenigen Stellen einzelne Erhöhungen in zickzackförmiger Anordnung beobachtet. Es liegt nahe, alle symmetrischen Dimere wegen ihrer Abbildungseigenschaften als Sb-Dimere zu identifizieren. Diese Interpretation führt allerdings zu einem Widerspruch bezüglich der Sb-Bedeckung. Die Sb-Bedeckung betrüge danach $\sim 0,9$ ML, wohingegen nur 0,7 ML deponiert wurden. Daß diese Diskrepanz nicht auf eine unzureichende Abschätzung der ursprünglichen Bedeckung zurückzuführen ist, zeigt ein Vergleich mit der Abbildung der unbesetzten Zustände in Abb. 8.6 (b). Die im linken Bild einheitlich erscheinenden symmetrischen Dimere können im rechten Bild leicht in zwei unterschiedliche Spezies unterschieden werden, und zwar in dunklere ovale Erhebungen und in helle Erhebungen mit unregelmäßiger Gestalt. Die wenigen, im linken Bild zickzackförmig angeordneten Erhebungen erscheinen im rechten Bild in gespiegelter Anordnung und ausschließlich hell. Sie werden als asymmetrische Ge-Dimere identifiziert. Dementsprechend werden die weiteren hellen Erhebungen symmetri-

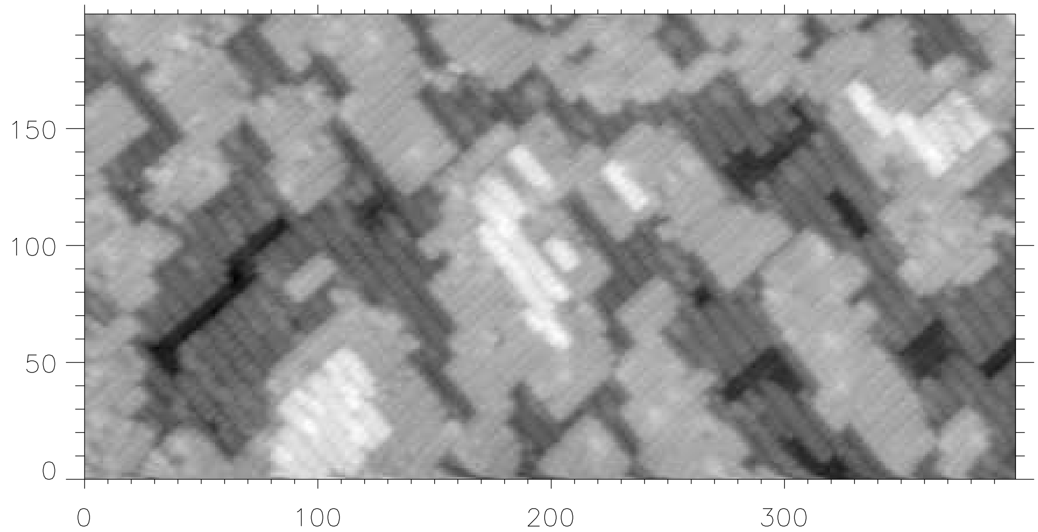


Abbildung 8.5: STM-Topographie einer Ge(001)-Oberfläche nach Aufdampfen von 0,7 ML Sb bei RT und Nachtempern bei 350 °C. Die Oberfläche umfaßt Terrassen aus vier Ge(001)-Lagen. Die Terrassen aller vier Lagen sind (2 × 1)-rekonstruiert ($U = -1,3\ V,\ I = 1,1\ nA$).

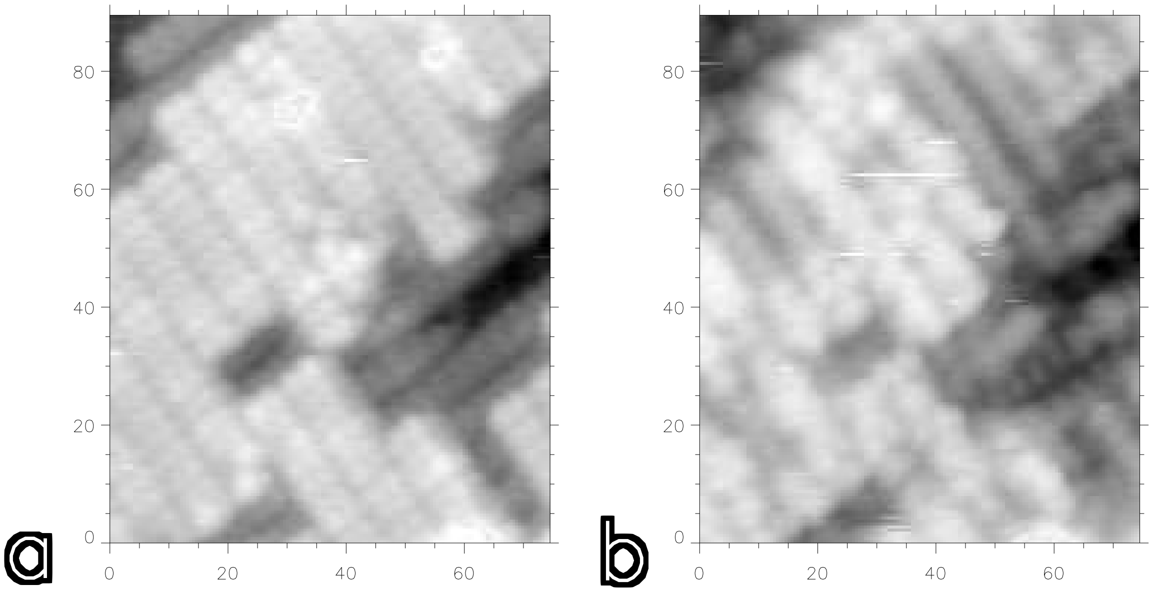


Abbildung 8.6: Doppelspannungs-Topographie eines Ausschnitts der gleichen Oberfläche wie Abb. 8.5. Während die Dimere jeder Terrasse in der Abbildung der besetzten Zustände (a) nahezu einheitlich abgebildet werden, ist in der Abbildung der unbesetzten Zustände (b) ein deutlicher Kontrast zwischen den Ge-Dimeren (hell) und den Sb-Dimeren (dunkel) zu erkennen (a: $U = -1,0\ V,\ I = 0,5\ nA$, b: $U = +1,0\ V,\ I = 0,5\ nA$).

schen Ge-Dimeren und nur die dunkleren ovalen Erhebungen Sb-Dimeren zugeordnet. Diese Interpretation wird durch die Abbildungseigenschaften der vollständig Sb-terminierten Oberfläche gestützt (Abb. 8.10) und stimmt mit dem einfachen Valenzbild überein, nach dem die *lone pair*-Orbitale bzw. $\pi$-Orbitale der Sb-Dimeratome im Gegensatz zu den Dangling Bonds der Ge-Dimeratome vollständig gefüllt sind und deshalb in der Abbildung der unbesetzten Zustände dunkler erwartet werden.

Die Abbildung der besetzten Zustände der Sb-Dimere in zwei getrennte Maxima ist mit dem Verlauf der berechneten Valenzladungsdichte über den Sb-Dimeren [277] konsistent. Auf vollständig bedeckten Si(001)-Oberflächen werden Sb- [251] und As-Dimere [241] in hochaufgelösten STM-Topographien ebenfalls als getrennte Erhöhungen dargestellt, während in der Abbildung der unbesetzten Zustände As-Dimere als ovale Maxima abgebildet werden [212]. Im Submonolagenbereich beobachteten Tromp et al. einen Helligkeitskontrast zwischen zwischen As-Dimeren und Si-Dimeren innerhalb der gleichen Terrasse für mäßige negative Probenspannungen (-1,5 V), der für höhere Spannungen verschwindet [244]. Ide bestätigen diese Beobachtung [243]. Über die Eigenschaften von STM-Messungen der unbesetzten Probenzustände berichten beide Gruppe jedoch nicht.

Für die symmetrischen Ge-Dimere ist die Abbildung in zwei getrennte Maxima erstaunlich. Eine Abbildung der symmetrischen Dimere in zwei getrennte Maxima wurde weder auf der reinen Ge(001)-Oberfläche noch unter dem Einfluß der untersuchten Adsorbate In und Pb beobachtet. STM-Aufnahmen der reinen Si(001)-Oberfläche zeigen für positive Probenspannungen getrennte Maxima, nicht jedoch für negative.

Es ist bekannt, daß Adsorbatatome und Defekte auf Si(001)- und Ge(001)- Oberflächen eine asymmetrische Ausrichtung der Substratdimere induzieren können [65, 75] (siehe auch Abschn. 6.3.4). Darüber hinaus konnte in Abschn. 7.3.2 gezeigt werden, daß angrenzende Domänen symmetrischer Adsorbatdimere bevorzug symmetrisch erscheinende Ge-Dimere induzieren können. Die Wechselwirkung der Sb-Dimere mit den Ge-Dimere nach ihrem Einbau in die Ge-Dimerreihen geht offensichtlich über die Induzierung einer der beiden energetisch eng beieinanderliegenden Erscheinungsformen der Ge-Dimere hinaus, indem auch die Abbildungseigenschaften des (symmetrischen) Ge-Dimers und somit der Verlauf der lokalen Zustandsdichte in der Nähe des Ferminiveaus drastisch modifiziert wird.

### 8.3.4 Morphologie der vollständig Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche: Antiphasen- und Stressdomänen

Gegenstand des folgenden Abschnittes ist die Untersuchung der Struktur und Morphologie der vollständig Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche in Abhängigkeit von der Temperatur. Eine vollständig Sb-terminierte Oberfläche wurde erzeugt, indem Sb bei RT weit über die Sättigungsbedeckung der $(2 \times 1)$-Rekonstruktion aufgedampft wurde (3 ML) und anschließend unter Sb-Desorption nachgetempert wurde. Die Präparationsvorschrift basiert auf der Beobachtung von Rich et al., wonach die Sb-Bedeckung bei Deposition bei einer Substrattemperatur von 400 °C jenseits 1 ML nicht weiter zunimmt, da bei dieser Bedeckung alle Bindungsplätze des Substrates abgesättigt sind und nachfolgend aufgedampftes Deposit bei dieser Temperatur reevaporiert wird [255]. Umgekehrt sollte deshalb eine vollständige 2-dimensionale Sb-Bedeckung (1 ML) leicht durch Desorption von höheren Bedeckungen erreicht werden können, da die Desorptionsgeschwindigkeit in diesem Temperaturbereich unterhalb 1 ML erheblich geringer ist. So deponierten Lessmann et al. [276] ebenfalls zunächst 3 ML Sb bei RT und temperten anschließend bei 400 °C unter LEED-Beobachtung nach. Das Beugungsbild wechselte dabei von $(1 \times 1)$ nach $(2 \times 1)$. Die Sb-Bedeckung nach der Tem-

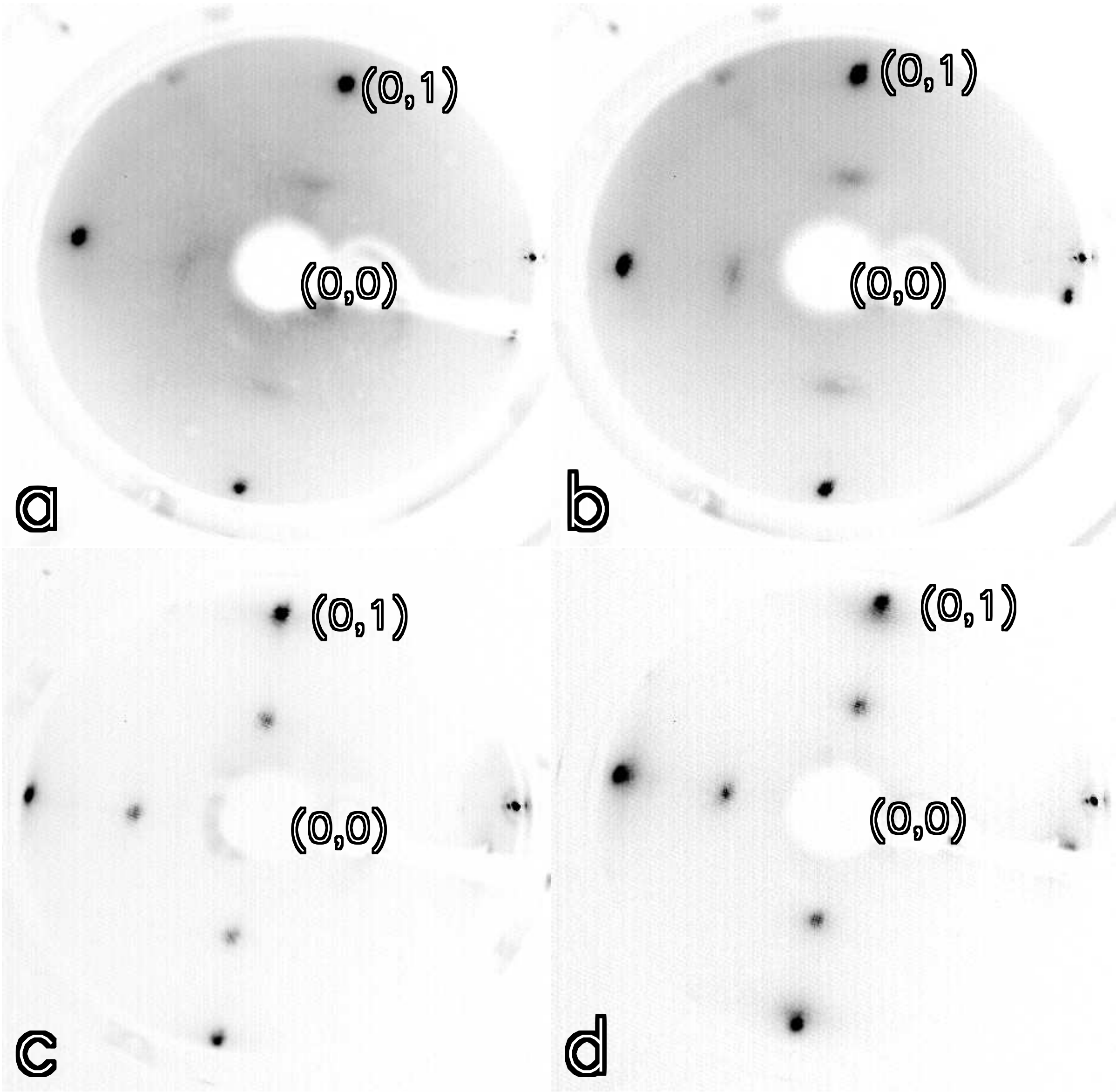


Abbildung 8.7: LEED-Bilder einer Ge(001)-Oberfläche nach Deposition von ~3 ML Sb bei RT (a) und anschließenden Temperungsschritten bei 300 °C (b), 490 °C (c) und 590 °C (d). Man beachte die anisotrope Form der halbzahligen Reflexe in (a) und (b) sowie die diffuse Ausschmierung der ganzzahligen Reflexe in (d). Die Elektronenenergie beträgt jeweils 23,3 eV.

peraturbehandlung bestimmten sie auf der Grundlage des Fluoreszenzsignals zu 0,8-1,0 ML. Sb-Desorption von der Sb-Monolage beobachteten Lessmann et al. oberhalb 500 °C und Lohmeier et al. oberhalb 600 °C [274, 276].

Nach der Deposition von 3 ML Sb bei RT auf die saubere Ge(001)-Oberfläche wurde die Probe in mehreren Zyklen bei steigenden Temperaturen (300 °C, 400 °C, 490 °C, 510 °C, 590 °C, 650 °C und 710 °C) getempert und mit LEED und STM eingehend untersucht. Wegen der passivierenden Eigenschaft der Sb-Lage gegenüber Kontamination der Oberfläche durch Restgas war es möglich, die gesamte siebentägige Meßreihe an einer Probe ohne Unterbrechungen durch Reinigungsschritte durchzuführen.

Bereits die in Abb. 8.7 gezeigte Sequenz der vier LEED-Bilder läßt erkennen, daß die Struktur der Sb-bedeckten Ge(001)-Oberfläche in Abhängigkeit von der Temperatur nicht ausreichend durch ein einfaches zweiphasiges Modell (ungeordnete 3D-Lage Sb nach RT-Deposition und ideale, $(2\times1)$-rekonstruierte Monolage nach dem Tempern) beschrieben werden kann. Nach der RT-Deposition weist das LEED-Bild im Vergleich zur reinen Ge(001)-Oberfläche einen hohen Untergrund auf. Die ganzzahligen Reflexe sind scharf und dominieren. Die halbzahligen Reflexe sind schwach und anisotrop in die "$\times1$"-Richtung aufgeweitet (Abb. 8.7 (a)). Durch ein Tempern der Probe bei 300 °C für einige Minuten gewinnen die halbzahligen Reflexe bei reduziertem Hintergrund an Intensität, sie bleiben aber anisotrop verbreitert (Abb. 8.7 (b)). Das LEED-Bild ändert sich durch längeres Tempern (1 h) bei 400 °C nicht. Nach einem weiteren Tempern bei 490 °C für einige Minuten sind die halbzahligen Reflexe scharf und rund (Abb. 8.7 (c)). Diese Abbildung bleibt auch nach dem Tempern bei 510 °C für 30 min erhalten. Nach 5 minütigem Tempern bei 590 °C sind die ganzzahligen Reflexe diffus aufgeweitet (Abb. 8.7 (d)) und nach weiterem Tempern bei 650 °C für 5 min konnten neben den halbzahligen Reflexen auch wieder die für die reine Ge(001)-Oberfläche typischen halbzahligen Streaks beobachtet werden (o. Abb.).

Auf STM-Messungen direkt nach der RT-Deposition wurde verzichtet, da das schwache LEED-Bild keine geordnete Oberfläche vermuten läßt und auf ungetemperten Proben im oberen Submonolagenbereich nur schwer stabile Tunnelbedingungen erreicht werden konnten. Die Störungen werden auf Wechselwirkungen der schwächer gebundenen $Sb_4$-Moleküle mit der Tunnelspitze zurückgeführt. Die Abbildung 8.8 zeigt STM-Topographien der Probenoberfläche nach dem ersten Temperungsschritt bei 300 °C für negative (a) und positive (b) Probenspannungen. Die Oberfläche ist in den STM-Abbildungen durch kleine flache Inseln auf weiten ebenen Terrassen gekennzeichnet. Die Terrassen sind $(2 \times 1)$-rekonstruiert. Offenbar ist der überwiegende Teil des 3-dimensionalen Sb-Films desorbiert. Diese Beobachtung stimmt mit Ergebnissen aus Thermisch Stimulierter Desorption (TSD)-Messungen an Sb/Si(001) überein, wonach thermische Desorption von $Sb_4$-Molekülen für Bedeckungen $>$ 1 ML bereits ab 200 °C beobachtet wird [281]. Durch Verfolgen der Dimerreihen (eingezeichnete Linien) wird deutlich, daß die langreichweitige Ordnung der $(2 \times 1)$-Struktur im Gegensatz zur reinen Ge(001)-Oberfläche durch ein enges Netzwerk von Antiphasengrenzen gestört ist. Die Domänen sind in Form und Größe uneinheitlich ($\sim$ 8–80 Å) und im Mittel in Dimerreihenrichtung ("$\times1$"-Richtung) kürzer als senkrecht dazu. Die mittels STM ermittelten Abmessungen der Domänen sind unter Berücksichtigung der Transferweite unseres LEED-Systems (120 Å) konsistent mit der Beobachtung von anisotrop aufgeweiteten halbzahligen LEED-Reflexen. Auf den flachen Inseln kann in den Abbildungen der besetzten Zustände (Abb.8.8 (a)) ebenfalls eine $(2 \times 1)$-Struktur aufgelöst werden, die in ihrer Abbildung den Dimeren auf den Hauptterrassen ähnlich ist. Ihre länglichen (bzw. doppelten) Erhebungen sind orthogonal zu den Dimeren auf der Terrasse orientiert und bilden Paare in quadratischer Anordnung (*final state*-Cluster?) oder kurze Reihen.

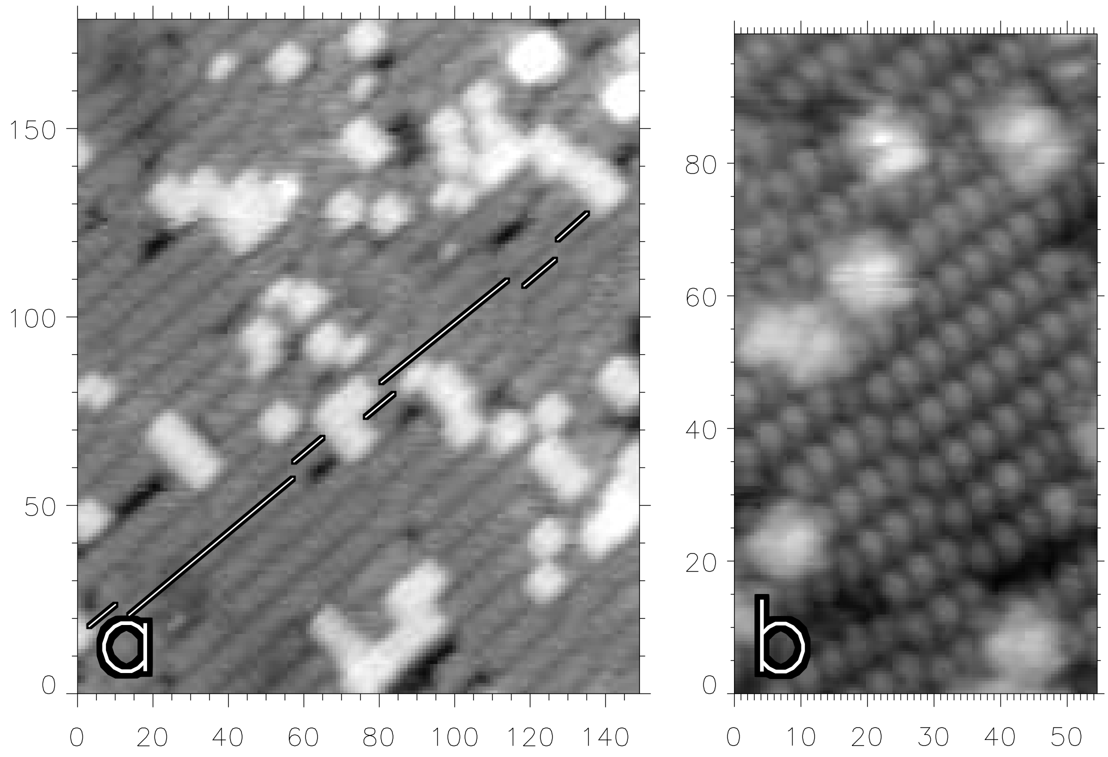


Abbildung 8.8: STM-Topographien einer Ge(001)-Oberfläche nach Deposition von $\sim 3$ ML Sb bei RT und anschließendem Tempern bei 300 °C. Die $(2\times1)$-Rekonstruktion ist geprägt durch ein dichtes Netzwerk an Antiphasengrenzen . Die Linien in (a) verdeutlichen beispielhaft die Versetzungen der Dimerreihen. In der Abbildung der unbesetzten Zustände (b) unterscheiden sich die Inseln durch ihre verwaschenes Aussehen von der sie umgebenden Fläche (a: $U = -2,3\ V,\ I = 1,5\ nA$, b: $U = +1,0\ V,\ I = 1,5\ nA$)

Die Abbildungen der vollständig Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche nach dem Tempern bei 300 °C gleichen damit qualitativ den STM-Bildern der Sb-terminierten Si(001)-Oberfläche von Nogami et al. [251]. Die mittlere Domänengröße ist auf der Sb-terminierten Si(001)-Oberfläche mit $25\times16$ Å$^2$ geringer als auf der Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche. Bezüglich der Struktur der Inseln lassen Nogami et al. offen, ob es sich um Sb-Dimere auf Substratinseln oder um Sb-Dimere der zweiten Lage oberhalb der ersten Sb-Lage handelt. Die Höhe der Inseln über der Terrasse von (1,2±0,2) Å und ihre Struktur in den Abbildungen der besetzten Zustände sind vollständig mit der Interpretation als Sb-terminierte Substratinseln vereinbar. Die verwaschene Darstellung der Inseln in der Abbildung der unbesetzten Zustände bei gleichzeitiger guter Auflösung der Terrassendimere (siehe Abb. 8.8 (b)) deutet jedoch darauf hin, daß ein grundsätzlich Unterschied in der Struktur und der Zustandsdichteverteilung der Sb-Dimere auf den Inseln und denen auf der Terrasse besteht. Wir vermuten deshalb, das die Inseln aus Sb-Dimeren der zweiten Sb-Lage aufgebaut sind.

Nach weiterem Tempern der Probe bei $\sim 400$ °C für 3 Minuten wird keine substantielle Änderung der Strukturen auf der Oberfläche beobachtet. Der Anteil der Inseln an der Oberfläche sinkt um einen Faktor 2–3 und die Größe der $(2\times1)$-Domänen nimmt unwesentlich zu (o. Abb.).

Grundlegende Veränderungen der Oberflächentopographie treten jedoch durch das Tempern der Probe bei 490 °C für einige Minuten auf. Die STM-Übersichtstopographie in Abb.8.9 zeigt auf weiten $(2 \times 1)$-rekonstruierten Terrassen Inseln und Fehlstelleninseln stark anisotroper Form. Die Längsrichtung der Inseln (Fehlstelleninseln) verläuft orthogonal (parallel) zu den Dimerreihen der Haupttterrasse. Die Inseln und Fehlstelleninseln haben in der Regel eine Breite von $2a$ oder $4a$. Die Breite unterscheidet die Fehlstelleninseln von den $1a$ weiten Lücken in der Sb-Lage in Abb.8.8, die durch Antiphasengrenzen hervorgerufen werden. Der Anteil der Inseln und der Fehlstelleninseln an der Oberfläche ist im Rahmen der Meßgenauigkeit gleich groß und beträgt relativ zur gesamten Oberfläche etwa 10%. Die Antiphasengrenzen zwischen den $(2 \times 1)$-Domänen sind fast vollständig ausgeheilt. Typische Werte für die Domänengröße sind 200 Å in Dimerreihenrichtung und etwa 400 Å senkrecht dazu.

Die Abbildung 8.10 zeigt die gleiche Oberfläche noch einmal im Detail. Die beiden Bilder wurden nacheinander aufgenommen, wobei die Polarität der Tunnelspannung jeweils in der unteren Bildhälfte umgeschaltet wurde. Die Struktur der Oberfläche der Inseln, Fehlstelleninseln und der Hauptterrasse ist den Abbildungen zufolge identisch und besteht aus Dimeren, deren Orientierung mit der Abfolge der Terrassen alterniert. In der Abbildung der besetzten Zustände (in Abb. 8.10 (a) oben und in Abb. 8.10 (b) unten) werden die Dimere ausschließlich als zwei getrennte Erhöhungen dargestellt und es ist nirgends ein Anzeichen von Buckling zu erkennen. Nach diesem Temperungsschritt ist eine scharfe Abbildung der Inseln auch bei positiver Probenspannung möglich. Mit Ausnahme einiger $S_B$-Stufen der Inseln sind die Maxima auf allen Terrassen bei positiver Probenspannung oval. Wir schließen daraus, daß auch nach dem Temperungsvorgang bei 490 °C die gesamte Oberfläche, also Inseln, Fehlstelleninseln und Hauptterrassen, vollständig Sb-terminiert ist. Sb-Inseln der zweiten Lage, die sich durch verwaschen Abbildung bei positiver Probenspannung auszeichnen, wurden nicht mehr beobachtet.

Das Umschalten der Polarität während der Aufnahme und die hohe Auflösung der Bilder ermöglicht auf einfache Weise die Bestimmung der relativen Position der Erhöhungen bei positiver und negativer Tunnelspannung. Dazu wurde in Abb. 8.10 (a) entlang den Dimerreihen eine Linie gezogen und an der Mitte der Erhöhungen in der Abbildung der besetzten Zustände ausgerichtet. Die Fortsetzung dieser Linie bleibt auch in der Abbildung der unbesetzten Zustände über den Erhöhungen zentriert. Die dazu senkrecht verlaufende Linie zeigt jedoch eine Verschiebung der Erhöhungen zueinander um $\frac{1}{2}a$ an. Die Erhöhungen in den Abbildungen der besetzten und unbesetzten Zustände liegen also nicht auf der gleiche Position. Zu diesem Ergebnis kommt man auch auf einem weiteren, vom ersten unabhängigen Weg, und zwar durch Abzählen der Erhöhungen auf den Inseln. In der Abbildung der besetzten Zustände wird stets ein Erhöhungspaar mehr dargestellt als in der Abbildung der unbesetzten Zustände.

Es ist anzunehmen, daß in der Abbildung der besetzten Zustände die Position der zu $\pi_g$-und $\pi_u$-Orbitalen gekoppelten [239] *lone pair orbitals* der Sb-Dimeratome wiedergegeben wird. Die von Takeuchi berechnete Ladungsdichteverteilung von Sb-Dimeren auf Ge(001) unterstützt die Annahme, daß die Erhöhungen in etwa den Positionen der Sb-Atome entsprechen [277]. In der Abbildung der unbesetzten Zustände zeigen die Topographien über den Sb-Dimeren dagegen in Richtung der Reihen ein Minimum und ein Maximum zwischen den Dimeren. Diese Beobachtung steht wegen der vollständigen Besetzung der $\pi$-Orbitale bzw. *lone pair*-Orbitale nicht im Widerspruch zur einfachen *dangling bond*-Interpretation der STM-Bilder. Nach Berechnungen von Jenkins et al. [239] sind die unbesetzten Oberflächenzustände auf der Sb-terminierten Si(001)-Oberfläche nicht über den Sb-Dimeren lokalisiert, sondern zwischen der ersten und zweiten Si-Lage.

Die hohe Auflösung der Bilder in Verbindung mit der Interpretation der Abbildungen

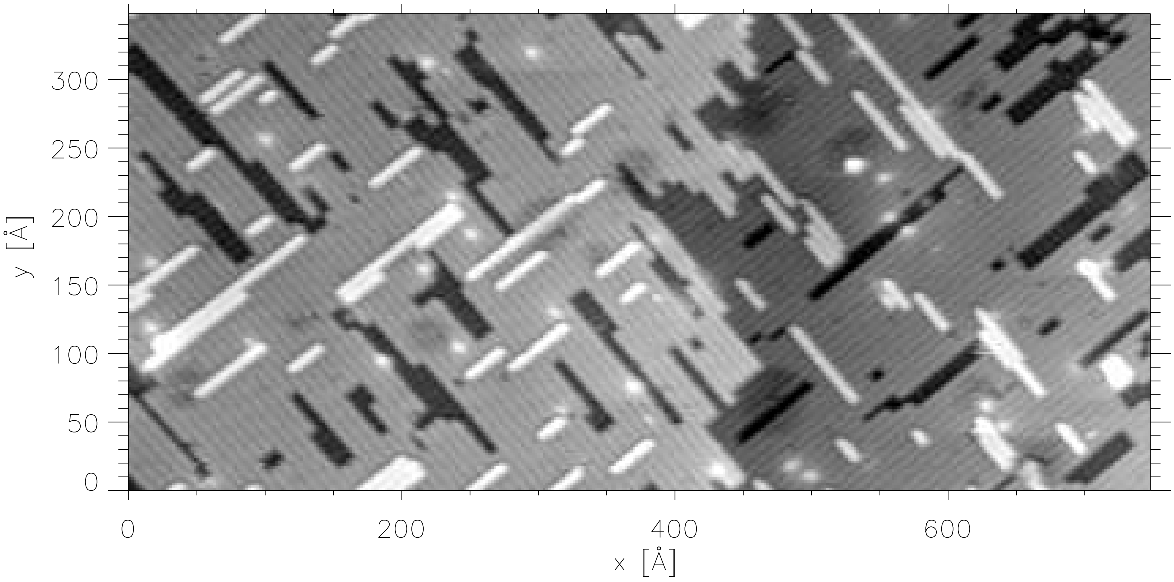


Abbildung 8.9: STM-Topograpie der Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche aus Abb. 8.8 nach weiterem Tempern bei 490 °C. Die Antiphasengrenzen sind weitgehend ausgeheilt und es haben sich Inseln und Fehlstelleninseln gebildet ($U = -1,7\ V,\ I = 0,5\ nA$).

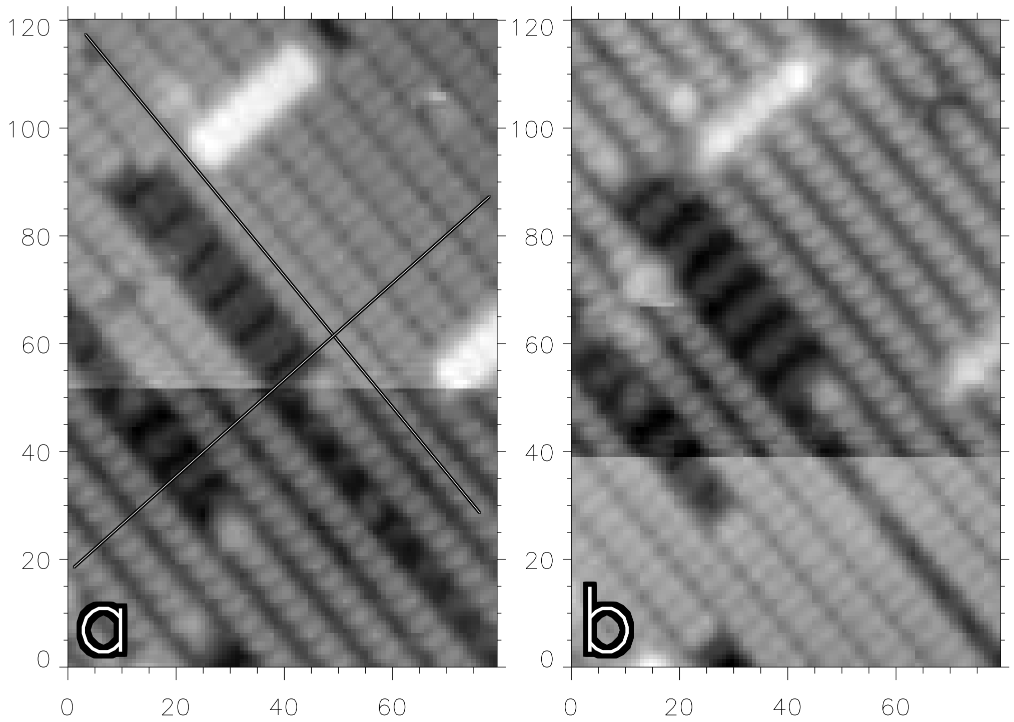


Abbildung 8.10: Detail der Oberfläche aus Abb. 8.9. Die Bilder wurden nacheinander aufgenommen und die Polarität der Tunnelspannung jeweils in der unteren Hälfte des Bildes gewechselt. Die Linien in (a) deuten an, daß die Position der Erhebungen nach dem Polaritätswechsel um $\frac{1}{2}a$ entlang den Dimerreihen verschoben ist (a: $U_{unten} = +1,6\ V,\ U_{oben} = -1,6\ V, I = 0,5\ nA$ b: $U_{unten} = -1,6\ V,\ U_{oben} = +1,6\ V, I = 0,5\ nA$).

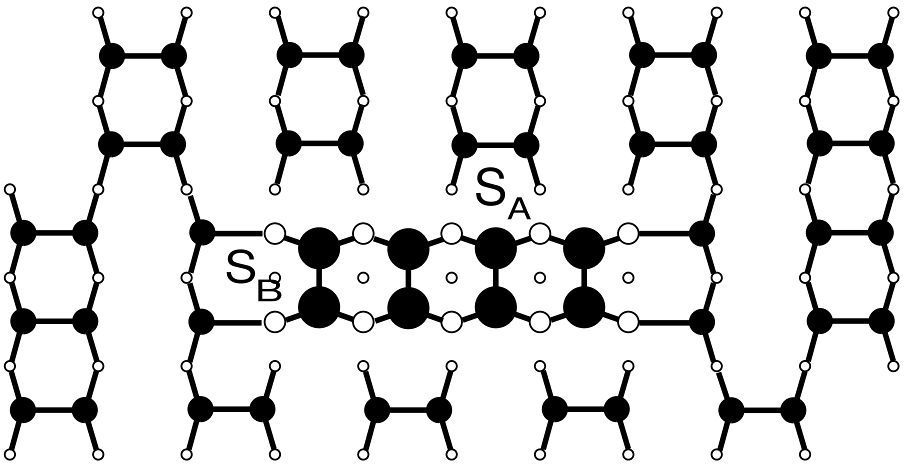


Abbildung 8.11: Schematische Darstellung von $S_A$- und $S_B$-Stufen auf einer Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche unter Einbeziehung einer Antiphasengrenze. Offene Kreise bedeuten Ge-Atome und gefüllte Kreise Sb-Atome. Zur besseren Übersicht wurden nur Bindungen an Sb-Atome eingezeichnet.

erlaubt Aussagen über den Verlauf und die Struktur der Stufenkanten der Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche. Die Inseln und Fehlstelleninseln werden fast ausschließlich von sogenannten $S_A$-Stufen begrenzt, bei denen die Stufen parallel zu den Sb-Dimerreihen der höheren Terrasse verlaufen. Wie für die reine Si(001)-Oberfläche und — weniger ausgeprägt — für die reine Ge(001)-Oberfläche verlaufen die $S_A$-Stufen bevorzugt über längere Strecken geradlinig. Die zu den $S_A$-Stufen senkrecht verlaufenden $S_B$-Stufen sind wegen der Form der Inseln und Fehlstellen in der Regel kurz, an breiteren (Fehlstellen-)Inseln ist jedoch im Gegensatz zur reinen Fläche eine Tendenz zu kinkenfreien $S_B$-Stufen festzustellen (siehe auch Abb.8.12). Der Verlauf der Stufen zwischen den Hauptterrassen meandriert und es werden auch hier bevorzugt kinkenfreie $S_A$- und $S_B$-Stufenabschnitte beobachtet (Abb. 8.9).

Die Struktur der $S_A$- und $S_B$-Stufen kann direkt aus den STM-Bildern negativer Tunnelspannung entnommen werden. Die oberen Terrassen schließen an den $S_A$-Stufen stets mit einer vollständigen Dimerreihe ab. An den $S_B$-Stufen grenzen die Dimerreihen der oberen Terrasse stets unmittelbar an die untere Dimerreihe an. Ein um $1a$ weiterer Abstand an den $S_B$-Stufen wurde nicht beobachtet. Diese Beobachtungen wurden auf das Modell in Abb. 8.11 übertragen. Die Anordnung der Atome an der $S_B$-Stufe entspricht der einer *rebonded step edge* (im Gegensatz zur *nonbonded step edge*) der reinen Flächen [80] und die Ge-Atome an der oberen Stufenkante binden an einzelne Sb-Atome der unteren Terrasse. Nach der Einführung von Stufen auf einer idealen Ge(001)$(2\times1)$-Sb Oberfläche bleiben alle Dangling Bonds des Substrates durch Bindungen an Sb-Atome abgesättigt und die Sb-Bedeckung verringert sich um $\frac{1}{2}$ Sb-Atome pro $S_B$-Kantenatom. Die Bedingung der Rückbindung der $S_B$-Stufen beschränkt die mögliche Länge von Inseln auf ungeradzahlige Vielfache von $a$ und die Länge von Kinken auf geradzahlige Vielfache von $a$, sofern die untere Terrasse nicht wie in den Abbildungen 8.10 und 8.11 eine Antiphasengrenze aufweist. Die Aussagen über die Struktur der Stufenkanten sind nicht auf diese Präparation beschränkt, sondern nach unseren Beobachtungen für alle Sb-terminierten Ge(001)-Oberflächen gültig. Die Form und Größe der Inseln und Fehlstelleninseln zeigte sich dagegen empfindlich abhängig von der weiteren Temperaturbehandlung.

Für den nächsten Temperungsschritt wurde eine nur geringfügig höhere Temperatur und

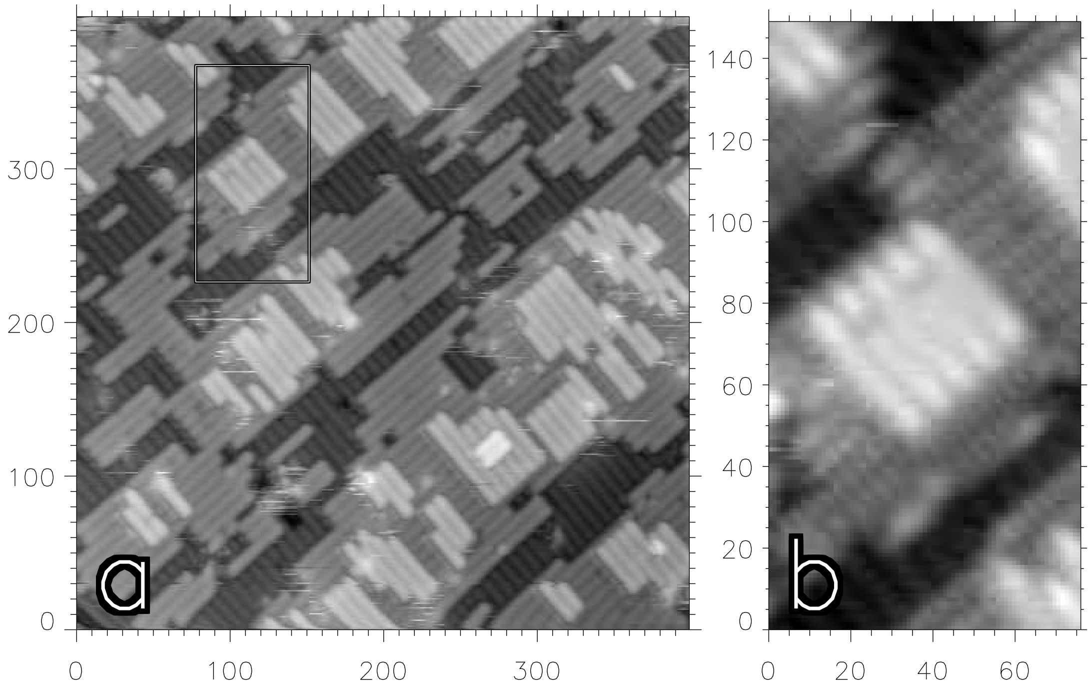


Abbildung 8.12: STM-Topograpie der Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche aus Abb. 8.8 nach dem vierten Temperungsschritt bei 510 °C. Die Fläche der Inseln und Fehlstelleninseln hat zugenommen und ihre Form ist weniger anisotrop (a). Die Enden der Dimerreihen erscheinen in der Abbildung der unbesetzten Zustände (b) in der Regel heller (a: $U = -1,3\ V,\ I = 1,1nA$, b: $U = +1,3\ V,\ I = 1,1\ nA$)

ein längerer Zeitraum gewählt (510 °C, 1 h), um dem thermodynamischen Gleichgewichtszustand der Morphologie der vollständig Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche möglichst nahe zu kommen. Die STM-Messungen nach dem Abkühlen der Probe zeigen, daß die Inseln und Fehlstelleninseln weiter gewachsen sind (siehe Abb. 8.12). Der Anteil ihrer Flächen zur Fläche der Hauptterrasse beträgt näherungsweise 1:1:3. Die Fehlstelleninseln haben an Breite gewonnen und sind zum Teil koalesziert. Die Inseln weisen nun eine kompaktere Form auf, so daß die Länge der $S_A$-Stufen und der $S_B$-Stufen der Inseln annähernd gleich ist. Die Fläche der Hauptterrasse wird durch die Inseln und Fehlstellen derart unterbrochen, daß die typischen Abmessungen vor dem Auftreten einer Stufenkante in jeder Richtung etwa 30–100 Å betragen und nur selten 200 Å übersteigen. Die Abbildung der mikroskopischen Struktur bleibt mit symmetrischen doppelten Erhöhungen bei negativer Probenspannung und ovalen Erhöhungen bei positiver Probenspannung weitgehend unverändert. Die Kanten der $S_B$-Stufen erscheinen allerdings in der Abbildung der unbesetzten Zustände überwiegend erhöht (siehe Abb. 8.12 (b)), was vor dem letzten Temperungsschritt nicht beobachtet wurde. Auf der Grundlage der Abbildungseigenschaften schließen wir, daß die Oberfläche weiterhin vollständig Sb-terminiert ist. Eine Ausnahme bilden möglicherweise die $S_B$-Stufenkanten, für die ein Abschluß mit Ge-Dimeren nicht ausgeschlossen werden kann.

Im folgenden wird der Frage nach der Ursache für die Aufrauhung der vollständig Sb-terminierten Ge(001)-Oberfläche infolge des Temperns nachgegangen. In Abschn. 8.3.2 wurde für den Submonolagenbereich diskutiert, ob die Diffusion von Sb in das Probenvolumen eine Ursache für die Aufrauhung der Oberfläche dargestellt. Volumendiffusion kann hier jedoch als Ursache ausgeschlossen werden, da die Sb-Bedeckung der Oberfläche durch Tempern im Temperaturbereich 400–510 °C, innerhalb dessen die Rauhigkeit ausgebildet wird, nicht oder nur unwesentlich abnimmt.

Nogami et al. berichten in ihrer STM-Studie am Adsorbatsystem Sb/Si(001) ebenfalls von einer Zunahme der Rauhigkeit der Oberfläche nach dem Tempern bei erhöhter Temperatur (700 °C) und bemerken in diesem Zusammenhang, daß von anderen Gruppen eine Aufrauhung von Oberflächen vorgeschlagen wurde, um die Beobachtung der Adsorption von mehr als 1 ML Sb auf der Oberfläche in anderen Experimenten zu erklären [251]. Durch die Prozeßführung in unserem Experiment kann die zusätzliche Akkumulation von Sb als Ursache für die Aufrauhung ausgeschlossen werden, da in der Phase der Aufrauhung kein Sb aufgedampft wird und auch keine 3-dimensionalen Sb-Inseln beobachtet werden, welche ein Reservoir für den weiteren Einbau von Sb auf der Oberfläche darstellen könnten.

Folgt man dem obigen Modell, wonach die $S_B$-Stufen durch einzelne Sb-Atome rückgebunden werden, nimmt die Sb-Bedeckung auf der Oberfläche durch das Auftreten der $S_B$-Stufen geringfügig ab. Die Bildung von Stufen könnte demnach dazu dienen, trotz einsetzender Desorption von Sb unter die Sättigungsbedeckung der $(2 \times 1)$-Rekonstruktion auf der ebenen Fläche von 1,0 ML weiterhin die Bedingung nach Absättigung aller Dangling Bonds der Ge-Oberfläche durch Bindung an Sb-Atome erfüllen zu können. Damit wäre die Rauhigkeit eine Folge der Desorption.

Es ist jedoch auch möglich, daß die Desorption des freigesetzten Antimons nur eine Folge der Rauhigkeit ist und die Ausbildung der Stufen eine andere Ursache hat. Neben der Anzahl und Art der Bindungen bestimmen die Abweichungen von den angestrebten Bindungslängen und Bindungswinkeln, also die Verspannungen des Kristalls, die Oberflächenenergie.

Es ist bekannt, daß die Dimerisierung der reinen Ge(001)-$(2 \times 1)$-Oberfläche durch die Verschiebung der Dimeratome aus ihrer Volumenposition eine Relaxation der Atompositionen der darunterliegende Lagen hervorruft, die bis in die sechste Lage nachgewiesen werden konnte [62]. Die Verschiebung der Atome aus ihrer Volumenposition bewirkt eine Verspannung der Oberfläche, die auf Grund der Symmetrie der (001)-Fläche im allgemeinen nicht isotrop ist. Meade und Vanderbilt berechneten den Streßtensor der reinen und der As-terminierten Si(001)$(2 \times 1)$-Oberfläche und kamen zu dem Ergebnis, daß die reine Oberfläche entlang der Dimerrichtung unter Zugspannung und senkrecht dazu in Dimerreihenrichtung unter Kompressionsspannung steht ($\sigma_{\|} = 1,56$ und $\sigma_{\perp} = -0,88$) [219]. Die Terminierung der Si(001)-Oberfläche mit As-Dimeren bewirkt wegen des kleineren kovalenten Radiuses der As-Atome und dem angestrebten Bindungswinkel der Gruppe-V Elemente von 90° in beide Richtungen Zugspannungen ($\sigma_{\|} = 2,41$ und $\sigma_{\perp} = 2,35$) [219] (siehe Abb. 8.13).

Tromp et al. beobachteten nach As-Deposition auf die heiße Si(001)-Oberfläche im Submonolagenbereich mit STM und LEEM einen substitutionellen Einbau von As-Dimeren in die Si-Dimerreihen und nicht, wie man zunächst erwarten könnte, eine *on top*-Adsorption auf den Dimerreihen [244]. Unter Verweis auf die Rechnungen von Meade und Vanderbilt führen sie als treibende Kraft für die Substitution die Kompensation der Verspannungen der Oberfläche in Dimerreihenrichtung an, d. h. die Kompressionsspannung durch die Si-Dimere wird durch die Zugspannung durch die As-Dimere ausgeglichen. Wie bereits erwähnt, könnte dieser Mechanismus gleichermaßen auch für die von uns beobachtete Koexistenz von Sb- und Ge-Dimeren auf den Terrassen der getemperten Proben im Submonolagenbereich verantwortlich sein (Abschn. 8.3.2 und 8.3.3).

Berechnungen des Streßtensors der mit Sb-Dimeren terminierten Ge(001)-Oberflächen sind uns nicht bekannt und es ist wegen der abweichenden kovalenten Radien sowohl der Adsorbat- als auch der Substratatome nicht *a priori* davon auszugehen, daß sich die Streß-

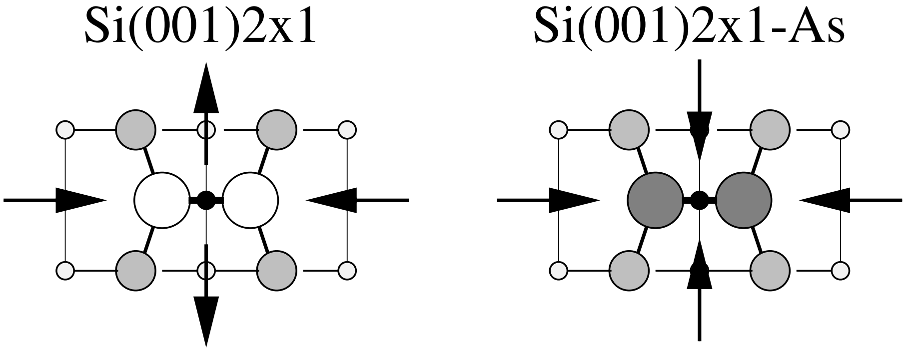


Abbildung 8.13: Richtungen der Verspannungen in den Strukturen Si(001)(2 × 1) und Si(001)(2 × 1)-As.

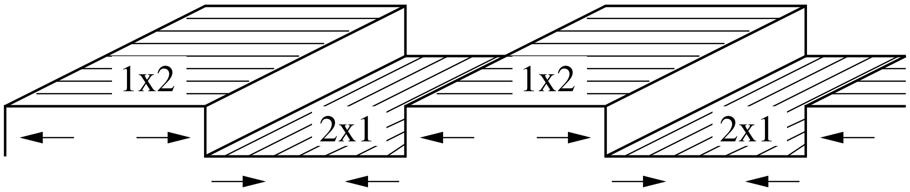


Abbildung 8.14: Ausgleich anisotroper Verspannungen durch die Ausbildung von Streßdomänen mit gegeneinander rotierter Struktur (nach [245]).

tensoren von As/Si(001) und Sb/Ge(001) gleichen. Aus den Totalenergierechnungen von Takeuchi [277] und den SXRD-Messungen von Lohmeier et al. [274] an der Ge(001)(2 × 1)-Sb Struktur lassen sich zumindest für eine Richtung Informationen zur Verspannung der Oberfläche ableiten. Beide Untersuchungen gehen von einer vollständig erhaltenen (2 × 1)-Periodizität der Struktur aus, so daß die Koordinaten der Substratatome an den Schmalseiten der Elementarzelle in Dimerrichtung und aller Substratatome in Dimerreihenrichtung von den Volumenpositionen übernommen wurden. Die Positionen der Atome der ersten Substratlage sind in beiden Studien durch die Bindung an die Sb-Dimere entlang der Dimerachse in Richtung der Dimere verschoben. Die Länge der Bindungen zu den äußeren Substratatomen der zweiten Lage ist gegenüber der Bindungslänge im Volumen vergrößert, so daß die Struktur in Dimerrichtung unter Zugspannung stehen sollte. Aussagen über die Verspannung in Dimerreihenrichtung lassen sich aus den Strukturbestimmungen jedoch nur schwer ableiten, da keine Relaxation in dieser Richtung zugelassen wurde.

Für die Systeme Bi/Si(001) und Ge/Si(001), die ebenfalls Dimerstrukturen mit lokaler (2 × 1)-Periodizität ausbilden, werden in regelmäßigen Abständen fehlende Dimere (*missing dimer rows*) beobachtet. Die fehlenden Dimere werden als Mechanismus zum Abbau von Verspannungen interpretiert [264, 287, 288]. Beide Systeme stehen in Dimerrichtung — im Gegensatz zu As/Si(001) — unter Kompressionsspannung.

Es ist deshalb denkbar, daß die Sb-terminierte Ge(001)-Oberfläche wie die reine Si(001)-Oberfläche einen anisotropen Streßtensor aufweist und in Dimerrichtung unter Zugspannung und in Dimerreihenrichtung unter Kompressionsspannung steht. Alerhand [245] berechnete, das die Energie von Oberflächen mit anisotropem Streßtensor durch die Ausbildung von Streßdomänen reduziert werden kann. Am Beispiel der Si(001)(2 × 1)-Struktur zeigte er auf, daß die Abfolge von gegeneinander orthogonal orientierten Domänen die anisotrope Verspannung der Strukturen gegenseitig kompensiert. Die Domänenwände werden durch Einfachstufen gebildet. Dem Energiegewinn $C_2 \ln(l/\pi a)$ durch die Kompensation der Verspannungen steht der Energieverlust $C_1$ durch die Ausbildung der Stufen pro Einheitslänge $a$ entgegen, der auf der reinen Fläche relativ hoch ist. Die Domänenwandenergie

$$E_{Wall} = C_1 - C_2 \ln(l/\pi a)$$

wird deshalb erst für Domänengrößen $l > 0{,}5\ \mu m$ negativ und wurden deshalb auf der reinen, von außen nicht verspannten Oberfläche nicht beobachtet [289]. Das Konzept der Streßdomänen kann unverändert auf die Ge(001)$(2 \times 1)$-Sb Struktur übertragen werden. Die beobachteten Domänengrößen $L$ sind gegenüber denen, die für die reine Si(001)-Oberfläche berechnet wurden, um 2–3 Größenordnungen kleiner. Dieser Unterschied ist vermutlich auf eine geringere Energie für die Bildung der Stufen zurückzuführen, zumal die Domänengröße $l_0$, die sich im Minimum der Domänenwandenergie einstellt, exponentiell von der Bildungsenergie der Stufen $C_1$ abhängig ist. Weitere Systeme, deren morphologische Eigenschaften auf die Ausbildung von Streßdomänen zurückgeführt werden, sind $Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}$, hoch Bor-dotierte Si(001)-Oberflächen, die Au(111)-*herring bone*-Struktur und O/Cu(110) im Submonolagenbereich [289].

An dieser Stelle soll nicht unerwähnt bleiben, daß die Morphologie der vollständig As-terminierten Si(001)-Oberfläche, wie die STM-Messungen von Jusko et al. zeigen, ebenfalls rauh ist [248]. Die Oberfläche weist längliche Terrassen zweier aufeinander folgender Lagen in nahezu gleichem Verhältnis auf und einen geringen Anteil von Inseln der dritten Lage. Unter Vernachlässigung der Flächenanteile der Terrassen ist die Morphologie mit einem Zwischenstadium der Sb-terminierten Oberfläche nach dem Tempern bei 490 °C und 510 °C vergleichbar. Die Rauhigkeit kann jedoch nicht auf die Ausbildung von Streßdomänen auf der vollständig As-terminierten Oberfläche zurückgeführt werden, denn der Streßtensor ist annähern isotrop. Der Argumentation von Tromp folgend, ist die Rauhigkeit in diesem Fall durch die Prozeßführung bedingt und eine Eigenschaft der Oberfläche *im Submonolagenbereich.* Die Probentemperatur wurde während des Aufdampfens bei 500 °C gehalten, so daß die As-Atome im Submonolagenbereich zur Kompensation der Verspannung in Richtung der Dimerreihen substitutionell in die Si(001)-Dimerstruktur eingebaut werden. Die verdrängten Substratatome diffundieren auf größeren Terrassen nicht vollständig an die Stufenkanten des Substrates, sondern bilden Inseln, die auch bei fortgesetzter Deposition bis zur vollständigen Terminierung erhalten bleiben. Bei unserer Präparation war die Ge(001)-Oberfläche jedoch bereits vollständig Sb-terminiert, bevor in Folge des Temperns die Rauhigkeit entstand. Der Mechanismus zur Ausbildung der rauhen Morphologie ist trotz ähnlichen Endzustands auf vollständig terminierten As/Si(001)- und Sb/Ge(001)-Oberflächen also grundsätzlich verschieden.

Für die vollständig Sb-terminierte Ge(001)-Oberfläche beobachten wir zwei komplementäre morphologische Eigenschaften, die beide zum Ausgleich von Verspannungen in der Oberfläche dienen können, nämlich Antiphasendomänen im unteren Temperaturbereich bis 400 °C und Streßdomänen im oberen Temperaturbereich. Es ist zu erwarten, daß die Mechanismen unterschiedlich effektiv sind und sich die $(2 \times 1)$-Dimerstrukturen der beiden Präparationen in der Relaxation unterscheiden. Sofern die angegebenen Temperaturen mit den von uns gemessenen vergleichbar sind, präparierten Lessmann et al.[276] für ihre XSW-Messungen bei 400 °C die Antiphasendomänenphase und Lohmeier et al.[274] für die SXRD-Messungen bei 500 °C die Streßdomänenphase. Die Abweichungen ihrer Ergebnisse bezüglich der Relaxation des Substrates sind also möglicherweise auf die unterschiedlichen Präparationstemperaturen zurückzuführen.

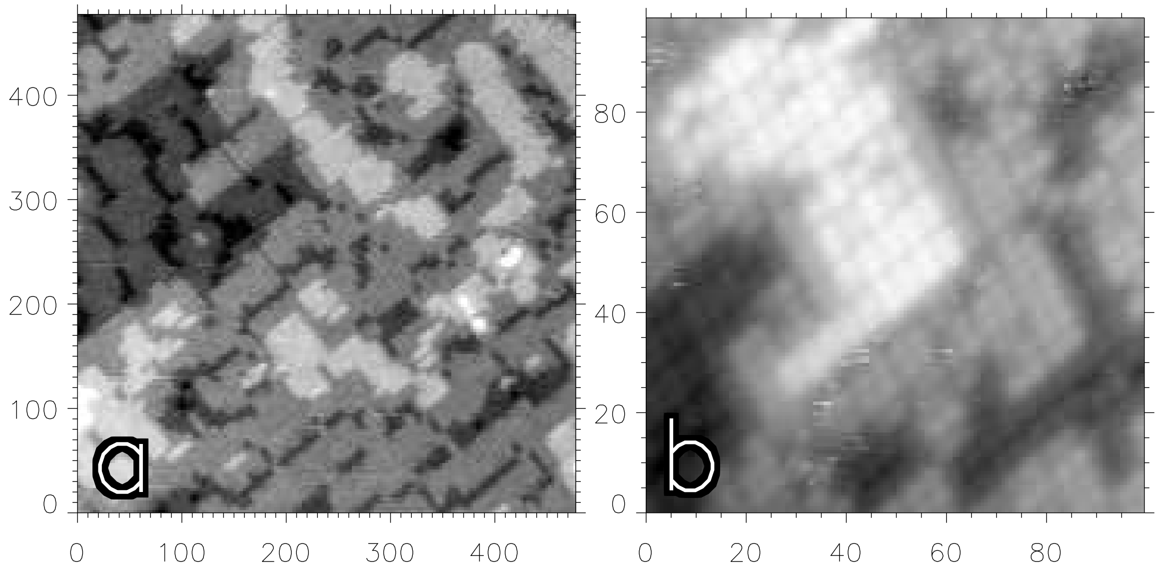


Abbildung 8.15: STM-Topographien der Ge(001)-Oberfläche aus Abb. 8.8 nach dem fünften Temperungsschritt bei 590 °C. (a) Die länglichen Fehlstelleninseln verlaufen nun senkrecht zu den Dimerreihen der Hauptterrasse. (b) Auf den Terrassen sind neben den Sb-typischen hellen Erhebungspaaren dunklere Einzelerhebungen und Erhebungspaare zu erkennen (a: $U = -1,8\ V,\ I = 1,2nA$, b: $U = -1,7\ V,\ I = 0,5\ nA$).

### 8.3.5 Sb-Verarmung

Im fünften Temperungsschritt wurde die vollständig Sb-terminierte Probe für etwa 5 min bei 590 °C getempert. Die Morphologie und Struktur der Oberfläche nach diesen Temperungsschritt zeigen die beiden STM-Bilder in Abb. 8.15. Die Inseln, die nach dem Tempern bei 510 °C eine eher quadratische Form angenommen hatten, sind nun wieder länglich. Ihre Orientierung ist gegenüber den anisotropen Inseln, die nach dem Tempern bei 490 °C beobachtet wurden, um 90° gedreht und die Längsachse der Inseln verläuft senkrecht zu den Dimerreihen auf den Inseln.

Die Hauptterrassen sind unterbrochen von schmalen Fehlstelleninseln, die ebenfalls ihre Orientierung gewechselt haben und nun wie die *missing dimer rows* auf Si(001)-Oberflächen [290, 291] senkrecht zu den Dimerreihen der Hauptterrassen orientiert sind. Der Abstand der Fehlstelleninseln ist weniger periodisch als der Abstand der *missing dimer rows* und ruft eine starke Aufweitung der ganzzahligen Reflexen in LEED-Bild hervor (Abb. 8.7 (d)).

Die Abbildung der mikroskopischen Struktur auf den Terrassen hat sich ebenfalls verändert. In Gegensatz zu allen zuvor gezeigten Abbildungen der vollständig Sb-terminierten Oberfläche können in Abb. 8.15 die doppelten Erhebungen durch einen leichten Helligkeitskontrast in zwei Gruppen unterschieden werden. Daneben treten Einzelerhebungen in zickzackförmiger Anordnung entlang der Dimerreihen auf, die in ihrer Helligkeit den dunkleren Doppelerhöhungen gleichen. Doppelerhebungen unterschiedlicher Helligkeit und Einzelerhebungen werden auf den Terrassen aller Niveaus (Inseln, Hauptterrassen und Fehlstelleninseln) beobachtet.

Leider sind uns keine aussagefähigen Abbildungen bei positiver Probenspannung für diese Präparation gelungen, anhand derer Sb- und Ge-Dimere zuverlässig unterscheidbar wären. Der Kontrast zwischen den Doppelerhebungen und insbesondere die Beobachtung von Einzelerhebungen lassen vermuten, daß die Oberfläche nicht mehr vollständig Sb-terminiert ist, sondern bereits teilweise Ge-Atome bzw. -Dimere an die Oberfläche getreten sind. Wegen ihrer Abbildungseigenschaften werden die helleren, durchweg symmetrischen Doppelerhebungen als Sb-Dimere und die dunkleren doppelten und einzelnen Erhebungen als ungebuckelte und gebuckelte Ge-Dimere identifiziert.

Offensichtlich bewirkte der Temperungsschritt bei 590 °C eine Sb-Verarmung der Oberfläche unter die Sättigungsbedeckung von 1 ML. Das Einsetzen der Verarmung können bereits die hellen Begrenzungen der $S_B$-Stufen in Abb. 8.12 (b) nach dem Tempern bei 510 °C markieren, die möglicherweise an die Stufenkanten angelagerte Ge-Dimere bedeuten. Für die Verarmung können zwei verschiedene Prozesse verantwortlich sein, und zwar Desorption und Diffusion in das Ge-Volumen. Lessmann et al. [276] und Lohmeier et al. [274] beobachten Sb-Verarmung unter die Sättigungsbedeckung oberhalb 500 °C bzw. 600 °C und führen sie auf Desorption zurück. Messungen Thermisch Stimulierter Desorption (TSP) zeigen, daß auf der nahezu vollständig bedeckten Si(001)-Oberfläche die Sb-Desorption bei etwa 800 °C einsetzt [281]. Eine höhere Desorptionstemperatur wird wegen der gegenüber der Sb-Ge-Bindung um 0,1 eV stärkeren Sb-Si-Bindung [261] auch erwartet. Die Diffusion von Sb-Atomen in des Probenvolumen kann bei diesen Temperaturen jedoch nicht mehr ausgeschlossen werden [286].

Der Präparationszyklus wurde mit einem sechsten Temperungsschritt bei 650 °C (5 min) fortgesetzt. Im LEED-Bild waren danach erstmals wieder $c(4 \times 2)$-Streaks zu erkennen, die typisch für die Struktur der reinen Ge(001)-Oberfläche sind. STM-Bilder nach diesen Präparationsschritt sind in Abb. 8.16 dargestellt. Die Terrassenverteilung hat sich der reinen Ge(001)-Oberfläche angenähert. Die wenigen verbliebenen Inseln weisen wieder eine kompakte Form auf. Daneben werden auf den Hauptterrassen wenige große und viele kleine Fehlstelleninseln beobachtet. In der Ausschnittsvergrößerung (Abb. 8.16 (b)) sind Details der Struktur auf den Terrassen zu erkennen. Die Abbildung der Dimerreihen unterscheidet sich von der Abbildung der reinen Oberfläche durch die hohe Dichte an hellen Punktdefekten. Die Defekte nehmen in der Abbildung der besetzten Zustände die Position von Dimeratomen ein und zeigen einen besonders hohen Kontrast für negative Tunnelspannungen unter -1,0 V. Bei positiver Probenspannung ist die Abbildung an der Position der Defekte undeutlich und dunkler als für die umgebenden Ge-Dimere. Weniger häufig werden fehlende Dimere und weitere Defekttypen wie benachbarte Dimeratome mit Buckling zur gleichen Seite und einzelne symmetrische Dimere innerhalb gebuckelter Dimerreihen beobachtet. Die atomare Struktur der Defekte ist nicht bekannt. Für die hellen Defekte ist auf der Grundlage ihrer Abbildungseigenschaften eine Interpretation als Sb-Ge Dimer denkbar. Die Defekte wurde auch für andere Präparationen Sb-bedeckter Oberflächen beobachtet und sind somit nicht auf die Dauer des Präparationszykluses und Restgaskontamination zurückzuführen.

In einem letzten Temperungsschritt konnte durch 15 minütiges Tempern bei 730 °C die typische Terrassenfolge der reinen Ge(001)-Oberfläche vollständig wiederhergestellt werden. Auch die atomare Struktur der Oberfläche ist in den Abbildungen nur durch eine geringe Dichte ($< 0,3\%$) charakteristischer Defekte von der reinen Oberfläche zu unterscheiden. So zeigt die Abbildung 5.2, anhand derer die Spannungsabhängigkeit der Abbildung der reinen $Ge(001)(2 \times 1)$-Oberfläche demonstriert wird, tatsächliche eine Oberfläche nach vollständiger Sb-Desorption.

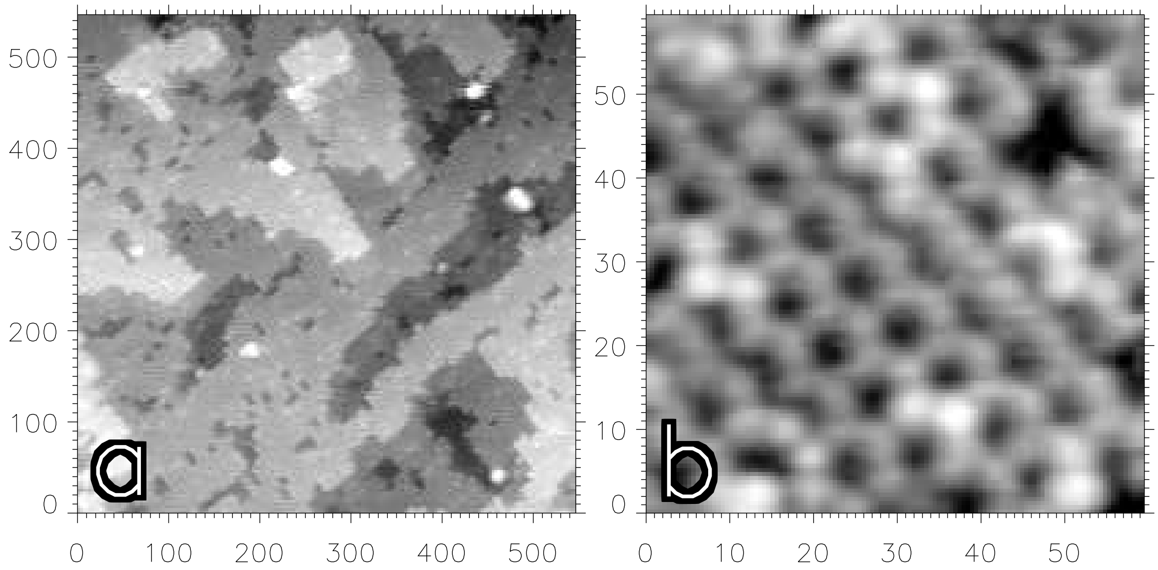


Abbildung 8.16: STM-Topographien der Ge(001)-Oberfläche aus Abb. 8.8 nach dem sechsten Temperungsschritt bei 650 °C (Desorption). Die mesoskopische Morphologie der Oberfläche ist weiterhin geprägt durch das Auftreten von Inseln und Fehlstelleninseln. Die Terrassen zeigen auf den gebuckelten Dimerreihen eine hohe Defektdichte, insbesondere hellere Erhöhungen und Fehlstellen (a: $U = -1,0\ V,\ I = 0,8\ nA$, b: $U = -0,9\ V,\ I = 1,2\ nA$).