Kapitel 10

Ge(103)- und Si(103)-Oberflächen

10.1 Einleitung: hochindizierte Halbleiteroberflächen

Die ebenen (001)- und (111)-Oberflächen und ihrer Vizinalflächen sind heute wie in der Vergangenheit die mit weitem Abstand am intensivsten untersuchten Oberflächen der "klassischen" Elementhalbleiter Si und Ge. Die (001)-Oberfläche ist die bevorzugte Wachstumsfläche. Aus der Sicht der Anwendung in der Halbleiterindustrie ist die Si(001)-Oberfläche das mit Abstand wichtigste Substrat und wird in der digitalen Elektronik u. a. in der CMOS-Technologie eingesetzt. Die (111)-Oberfläche ist die Spaltfläche für beide Elemente und ist wegen der komplexen Struktur der reinen Oberfläche sowie ihrer Adsorbatsysteme von grundlegendem Interesse. In der Halbleitertechnologie dienen (111)-Oberflächen als Substrat für bipolare Bauelemente in der analogen Elektronik. Die Si(110)-Oberfläche besitzt Vorteile für das Ätzen senkrecht zur Oberfläche entlang {111}-Ebenen und bietet als Alternative zur Si(001)-Oberfläche beim Wachstum von $Si_{1-x}Ge_x$ weitere Freiheiten für ein *band gap engineering* [359].

Obwohl den hochindizierten Halbleiteroberflächen erst in den letzten Jahren größere Beachtung entgegengebracht wurde, sind sie von großem wissenschaftlichem Interesse und potentiell technologisch relevant. Sie unterscheiden sich von den hochsymmetrischen Oberflächen und eröffnen so vielfältige neue Möglichkeiten. Es treten Bindungsgeometrien auf, die in diesen Kombinationen auf den niedrig-indizierten Oberflächen nicht vorkommen. So weist die ideale (113)-Oberfläche eine gleich große Dichte an dreifach- und zweifach-koordinierten Oberflächenatomen auf und ist für III-V-Halbleitermaterialien im Gegensatz zu den (001)- und (111)-Flächen unpolar. Die hochindizierten Oberflächen bieten Alternativen und neue Möglichkeiten auf dem Weg zur Verbesserung des heteroepitaktischen Lagenwachstums und zur Modifikation der elektronischen Eigenschaften. So wächst Ge auf Si(105) ohne Unterstützung von Surfactants bis zu einer Schichtdicke von 10 ML perfekt Lage für Lage auf [360]. Nicht zuletzt stellen die hochindizierten Oberflächen ein reiches Reservoir bei der Suche nach Substraten dar, die unter dem Einfluß von Adsorbaten Nanostrukturen mit interessanten Eigenschaften ausbilden können.

Einen vollständigen Überblick über die Morphologie von Si- und Ge-Oberflächen aller Orientierungen längs der Seiten des Stereographischen Dreiecks in Abhängigkeit von der Temperatur bieten die LEED-Arbeiten von Olshanetsky et al. [361, 362]. Ihre Ergebnisse bezüglich der Struktur der Si- und Ge-Oberflächen bei RT sind in den Abbildungen 10.1 (rechts) und 10.2 zusammengefaßt. Für Silizium finden sie in der $[01\bar{1}]$-Zone zwischen den Polen (001) und (111) drei stabile rekonstruierte Oberflächen, nämlich (115), (113) und (112), in der $[1\bar{1}0]$-Zone zwischen den Polen (111) und (101) mit der (313)-Oberfläche eine stabile rekonstruierte

Oberfläche und in der [001]-Zone zwischen den Polen (001) und (101) drei stabile rekonstruierte Oberflächen, nämlich (105), (102) und (302). Die Oberflächen in der Nähe der Pole (001) und (111) (durchgestrichene Linien) werden als gestufte (001)- bzw. (111)-Oberflächen beschrieben. Die Oberflächen nahe dem (101)-Pol facettieren in hochindizierte Flächen, die innerhalb des Dreiecks liegen. Alle übrigen Oberflächen der Zonen $[01\bar{1}]$ und $[1\bar{1}0]$ mit Orientierungen zwischen (117) und (335) bzw. (212) und (101) facettieren in eine "Berg und Tal"-Struktur aus zwei benachbarten stabilen Orientierungen. Über die Morphologie der instabilen Oberflächen der [001]-Zone zwischen (105) und (302) wird keine Aussage gemacht. Die Ge-Oberflächen verhalten sich bezüglich ihrer Stabilität weitgehend analog zu den Si-Oberflächen. In der $[1\bar{1}0]$-Zone wurde zusätzlich eine stabile rekonstruierte (515)-Oberfläche beobachtet, während in der [001]-Zone die (302)-Oberfläche facettiert.

Spätere Arbeiten behandeln überwiegend **Si-Oberflächen** mit Orientierungen zwischen den Polen (001) und (111). Die größte Aufmerksamkeit erregte auf Grund ihrer hohen thermischen Stabilität und weiterer interessanter Eigenschaften die Si(113)-Oberfläche [10, 11, 353, 363, 364, 365, 366, 367, 368, 369, 370]. Die Si(113)-Oberfläche bildet eine (3×2)-Rekonstruktion, für die Dabrowski et al. auf der Grundlage von kombinierten STM-Messungen und First-Principles-Rechnungen bereits ein Strukturmodell etablieren konnten [366]. Die Struktur der Si(113)(3×2)-Rekonstruktion ist danach aus den gleichen Elementen wie die der vizinalen Si(001)-Oberflächen aufgebaut, nämlich aus Dimeren und zurückgebundenen und nicht-zurückgebundenen D_B-Doppelstufen sowie als neuem Element aus Zwischenatomen (*interstitials*). Die Si(113)-Oberfläche wurde bereits für einige Adsorptionsexperimente genutzt [282, 309, 339, 369]. LEED-Messungen von Ji et al. zeigen, daß die Si(113)-Oberfläche nach Adsorption von Al und Ga in nanoskopische (102)-, (115)-, (103)- und (013)-Facetten zerfällt, während durch In-Adsorption auf der ebenen Si(113)-Oberfläche eine (1×2)-Rekonstruktion induziert wird [339]. Für die reinen Si(115)- [371] und Si(112)-Oberflächen [361, 372, 373, 374, 375] ist dagegen bereits die Existenz einer stabilen rekonstruierten Oberfläche umstritten.

Baski und Mitarbeiter untersuchten kürzlich mit STM systematisch die Si-Oberflächen mit Orientierungen zwischen (001) und (111) [375, 376, 377, 378, 379]. Durch die Kombination von hochaufgelösten STM-Bildern und First-Principles Totalenergierechnungen ist es ihnen gelungen, ein geschlossenes Bild der Entwicklung der Struktur und Morphologie der Si-Oberflächen als Funktion der Orientierung zu entwickeln. Ihre Ergebnisse sind in Abb. 10.1 (links) skizziert. Ausgehend vom (001)-Pol des Stereographischen Dreiecks werden die Oberflächen als zunehmend gestufte (001)-Oberflächen interpretiert [379, 380]. Die erste rekonstruierte Oberfläche mit langreichweitiger Periodizität ist die Si(114)-Oberfläche. Ihre Struktur läßt sich als Abfolge kurzer dimerisierter (001)-Terrassen beschreiben, die alternierend durch zurückgebundene und nicht-zurückgebundene D_B-Doppelstufen getrennt sind [376]. Die Si(115)-Oberfläche besitzt lediglich eine "$5\times$"-Quasiperiodizität [379], was im Widerspruch zu den LEED-Beobachtungen von Olshanetsky et al. [361] und Ranke et al. [371] steht. Weitere stabile Orientierungen sind (113) und (5 5 12). Die rekonstruierte Si(5 5 12)-Oberfläche besitzt neben den genannten Strukturelementen π-gebundene Ketten (*π-bonded chains*) [377], die vertikal ringförmige Anordnungen aus sechs und sieben Atomen bilden und die in ähnlicher Form in der metastabile Si(111)(2×1)-Rekonstruktion [381] auftreten. Die thermische Stabilität der Si(5 5 12)-Oberfläche wurde in REM [382, 383]- und LEED [371]-Studien bestätigt. Zwischen den Orientierungen (114) und (113) sowie (113) und (5 5 12) facettiert die Oberfläche in die benachbarten stabilen Orientierungen. Die Facettenbreite liegt in der Größenordnung von 1000 Å (*mesofacets*). Jenseits der (5 5 12)-Orientierung bis zur (223)-Orientierung bilden die Oberflächen (5 5 12)-artige Facetten und Si(111)(7×7)- bzw. (5×5)-Nanoterrassen [378].

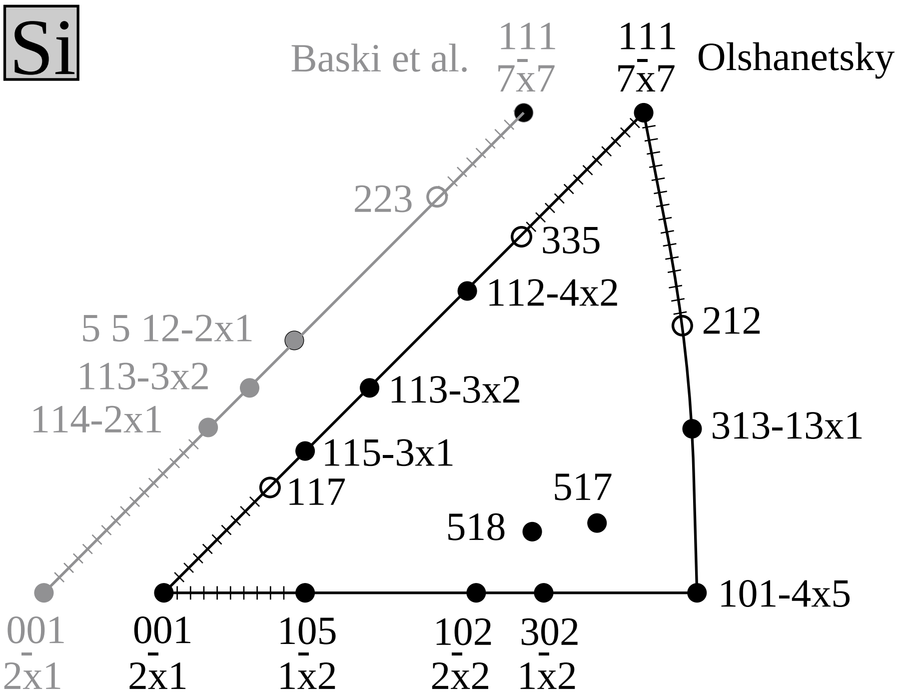

Abbildung 10.1: Stereographisches Dreieck der Siliziumoberflächen nach Olshanetsky et al. [361] (rechts) und Teil des Dreiecks nach Baski et al. [379]. Ausgefüllte Kreise markieren Orientierungen, deren Oberflächen stabil und rekonstruiert sind.

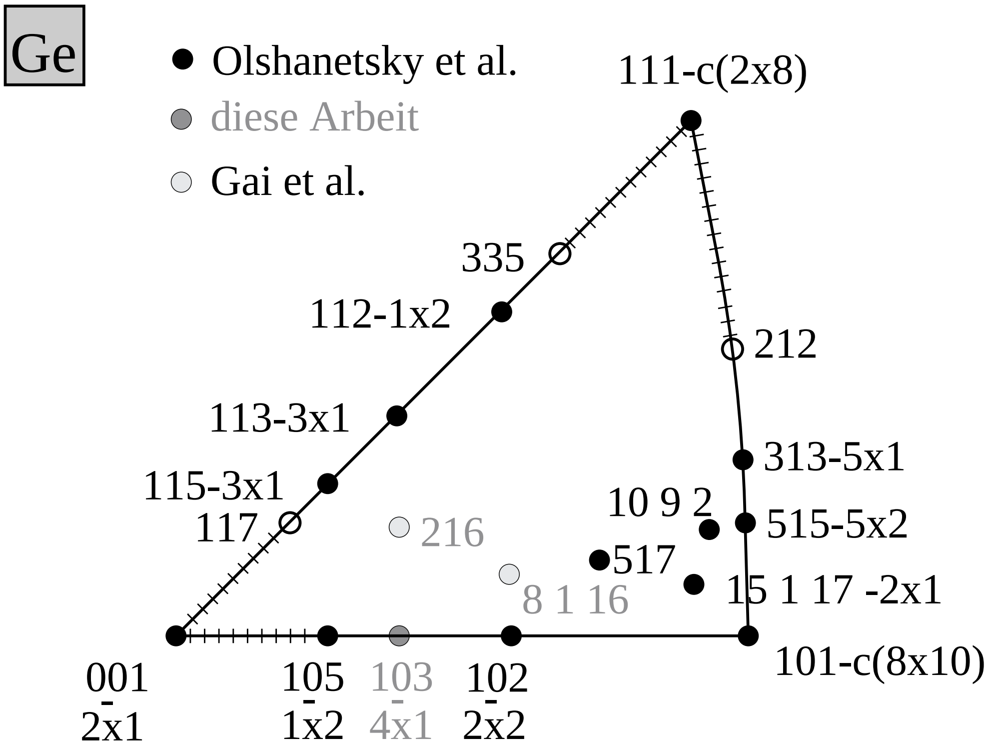

Abbildung 10.2: Stereographisches Dreieck der Germaniumoberflächen nach Olshanetsky et al. [362]) (schwarze Kreise) sowie Falkenberg et al. und Gai et al. [393] (helle Kreise). Ausgefüllte Kreise markieren Orientierungen, deren Oberflächen stabil und rekonstruiert sind.

Von der (223)-Orientierung bis zum (111)-Pol werden (7×7)-rekonstruierte Terrassen und Dreifach- bzw. Einfachstufen beobachtet [384]. Die Si(112)-Oberfläche liegt demnach im nanofacettierten Bereich. Eine ebene rekonstruierte Si(112)-Oberfläche kann jedoch durch Adsorption von Ga induziert werden [372, 375].

Zu den übrigen hochindizierten Orientierungen der Si-Oberflächen liegen uns nur Untersuchungen zu Si(313)-, Si(105)- und Si(103)-Oberflächen vor [201, 341, 360, 386, 387]. Tanaka zeigte in einer STM-Untersuchung, daß die Stufen der um 4° gegen die $[11\overline{2}]$-Richtung fehlgeneigte Si(111)(7×7)-Oberfläche in Stufenbündel zusammengefaßt sind. Die Stufenbündel bilden (313)-Facetten und sind (6×3)-rekonstruiert [385]. Die ebene (313)-Oberfläche ist dagegen nach einer LEED-Studie von Wei et al. (12×1)-rekonstruiert [386]. SXRD-Experimente von Noh et al. zeigten, daß die (313)-Facette im *equilibrium crystal shape* (ECS) durch eine scharfe Kante von den umgebenden runden Bereichen getrennt ist [387]. Die Si(105)-Oberfläche beschreiben Tomitori et al. auf der Grundlage ihrer STM-Messungen als schmale, dimerisierte Si(001)-Terrassen mit S_A- und nicht-rückgebundenen S_B-Einzelstufen [360]. Die Qualität der Oberfläche kann durch Deposition mehrere Monolagen Si oder Ge gesteigert werden. Angeregt durch die Möglichkeit der {103}-Facettierung von Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen durch Al und In führten Ji et al. zeitgleich zu unseren Experimenten LEED-Untersuchungen zur Rekonstruktion und thermischen Stabilität von Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen nach Adsorption von Al, Ga und In durch [201, 341]. Für die reine Si(103)-Oberfläche beobachten sie ein nur mäßiges LEED-Bild mit scharfen, aber schwachen und nur für diskrete Energien sichbaren ganzzahligen Reflexen, jedoch keinerlei Facettenreflexen [341]. Nach Deposition von Al, Ga und In verbessert sich das LEED-Bild drastisch und die Oberfläche ist (1×1)-rekonstruiert [201]. Durch Vergleich der I–V Profile der In-induzierten (1×1)-Rekonstruktion mit quasi-kinematischen LEED-Rechnungen schließen sie, daß das Strukturmodell für die Ge{103}(1×1)-In Facettenoberflächen von Gai et al. [205] auf die ebene Si(103)(1×1)-In Oberfläche übertragen werden kann [341].

Zu den hochindizierten **Ge-Oberflächen** sind uns neben der Arbeit von Olshanetsky et al. nur Arbeiten zur Ge(113)- [339, 368, 388, 389, 390, 391, 392] und zur Ge(103)-Oberfläche [201, 393] bekannt. Die Ge(113)-Oberfläche verhält sich bezüglich ihres Hochtemperaturphasenübergangs [368] und nach H-Adsorption [388] ähnlich wie die Si(113)-Oberfläche. Sie ist wie die Si(113)-Oberfläche (3×1)- bzw. (3×2)-rekonstruiert und das Strukturmodell der Si(113)-Oberfläche [366] ist nach einer STM-Arbeit von Gai et al [389] teilweise und nach SXRD-Messungen von Vogler et al.[390] vollständig auf die Ge(113)-Oberfläche übertragbar. LEED-Untersuchungen von Ji et al. [339] zeigen, daß die Ge(113)-Oberfläche nach Adsorption von Al und Ga (1×2)-rekonstruiert, während sie nach der Adsorption von In überwiegend in (112)-,(115)-,(103)- und (013)-Nanofacetten zerfällt. Die Ge(113)-Oberfläche reagiert auf die Adsorption der Gruppe-III-Elemente also genau entgegengesetzt zur Si(113)-Oberfläche. Gai et al. beobachteten mit STM für das System Ga/Ge(113) neben der (1×2)-Struktur eine weitere Rekonstruktion bei höherer Bedeckung und facettierte Stufenbündel [392]. Ji et al. machten im Zuge ihrer LEED-Studie zur Adsorption der Gruppe-III Adsorbate auf Si- und Ge(103)-Oberflächen unabhängig von uns die gleiche Entdeckung wie wir, nämlich, daß die Ge(103)-Oberfläche stabil und (4×1)-rekonstruiert ist. Nach In-Adsorption rekonstruiert die Ge(103)-Oberfläche in eine (1×1)-Struktur, während sie nach Al-Adsorption in (105)-Facetten und nach Ga-Adsorption in (104)-Facetten zerfällt [201]. Gai et al. untersuchten anschließend die reine Ge(103)(4×1)-Oberfläche im STM [393]. Ihre Beobachtungen und Modellvorschläge werden in Abschn. 10.4 zusammen mit unseren Ergebnissen diskutiert.

Im folgenden werden unsere LEED- und STM-Experimente an reinen sowie In- und Sb-bedeckten Ge(103)-Oberflächen und an reinen sowie In- und Bi-bedeckten Si(103)-Oberflächen beschrieben. Die Motivation für die Experimente an den (103)-Oberflächen bestand anfänglich darin, durch SXRD-Messungen an der ebenen, In-terminierten Ge(103)-Oberfläche unser Modell für die In-induzierten Ge{103}-Facetten zu stützen und eine vollständige Strukturbestimmung vornehmen zu können. Wie erwähnt zeigte es sich, daß nicht nur die In-terminierte Ge(103)-Oberfläche stabil ist, sondern auch die reine Ge(103)-Oberfläche, deren (4×1)-Struktur mittels STM und SXRD aufgeklärt werden konnte. Nach Adsorption von Sb zerfällt die Ge(103)-Oberfläche in gestufte {113}-Facetten. Die In-bedeckten und Bi-bedeckten Si(103)(1×1)-Oberflächen verhalten sich analog zur Ge(103)(1×1)-In Oberfläche. Die reine Si(103)-Oberfläche ist jedoch nicht stabil und zerfällt nach unseren Beobachtungen in kleine (105)-Facetten und unregelmäßige stark gestufte Bereiche. Unsere Untersuchungen an der reinen und In-terminierten Ge(103)-Oberfläche sind in Ref.[394] und Ref.[395] veröffentlicht.

10.2 Die ideale (103)-Oberfläche

Um das Verständnis der experimentellen Beobachtungen an den ebenen Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen zu erleichtern, wird im folgenden kurz auf die Geometrie der idealen (103)-Oberfläche und auf einige daraus folgende Eigenschaften eingegangen. In Abschnitt 9.2.6 wurde die (103)-Oberfläche zur Erläuterung des Modells der facettierten Ge(001)-Oberfläche als stark gestufte (001)-Oberfläche beschrieben und in Projektion auf die (001)-Ebene dargestellt. Abbildung 10.3 zeigt dagegen eine Aufsicht senkrecht auf die unrekonstruierte ideale (103)-Oberfläche. Es sind Atome aus vier verschiedenen Lagen abgebildet. Die Atome der ersten Lage tragen zwei Dangling Bonds und die Atome der zweiten Lage ein Dangling Bond. Jedes Atom im Volumen bindet an vier Nachbaratome aus vier verschiedenen (103)-Atomlagen. Die Atomlagen sind äquidistant und ihr Abstand beträgt 0,86 Å für Si und 0,89 Å für Ge. Die Größe der (1×1)-Einheitszelle beträgt $(1 \times \sqrt{10}/2)a_0{}^2$, also $(5,43 \times 8,59)$ Å^2 für Si und $(5,66 \times 8,95)$ Å^2 für Ge. Die beiden Atome je Einheitszelle derselben Höhe sind bis auf eine Rotation der Bindungen um 90° äquivalent. Die Kristallstruktur der Oberfläche hat (pg)-Symmetrie, d. h. sie kann durch eine Gleitspiegeloperation ineinander überführt werden. Eine Gleitspiegelebene ist in Abb. 10.3 eingezeichnet.

Im Gegensatz zur rekonstruierten (001)-Oberfläche ändert sich die Orientierung der Einheitszelle beim Übergang zur nächst tieferen Atomlage nicht. Auf der (103)-Oberfläche eines binären Verbindungshalbleiters sind die zwei Atome pro Einheitszelle derselben Lage verschiedenen Elementen zuzuordnen, so daß die Oberfläche unpolar ist. Die interessanten Eigenschaften der elektrischen Neutralität der Oberfläche und das Auftreten von zwei sehr verschieden koordinierten Oberflächenatomen (erster und zweiter Lage) sind der (103)-Oberfläche und der (113)-Oberfläche gemeinsam [363] und machen sie zu einem vielversprechenden Kandidaten für das epitaktische Wachstum von Verbindungshalbleitern auf Si und Ge.

10.3 Probenpräparation

Die Si(103)- und Ge(103)-Proben der Größe $(8 \times 4 \times 0,5)$ mm^3 wurden in der Kristallwerkstatt des HASYLAB aus größeren Kristallen geschnitten und mit Syton und NaOCl poliert. Die Si-Proben sind p-dotiert (B) und ihr spezifischer Widerstand beträgt 5000 Ωcm^{-1}. Die Ge-Proben sind n-dotiert (Sb) und haben einen spezifischen Widerstand von 0,1 Ωcm^{-1}. Die Vorbereitung der Proben außerhalb des Vakuums und die Präparation der reinen Si(103)-

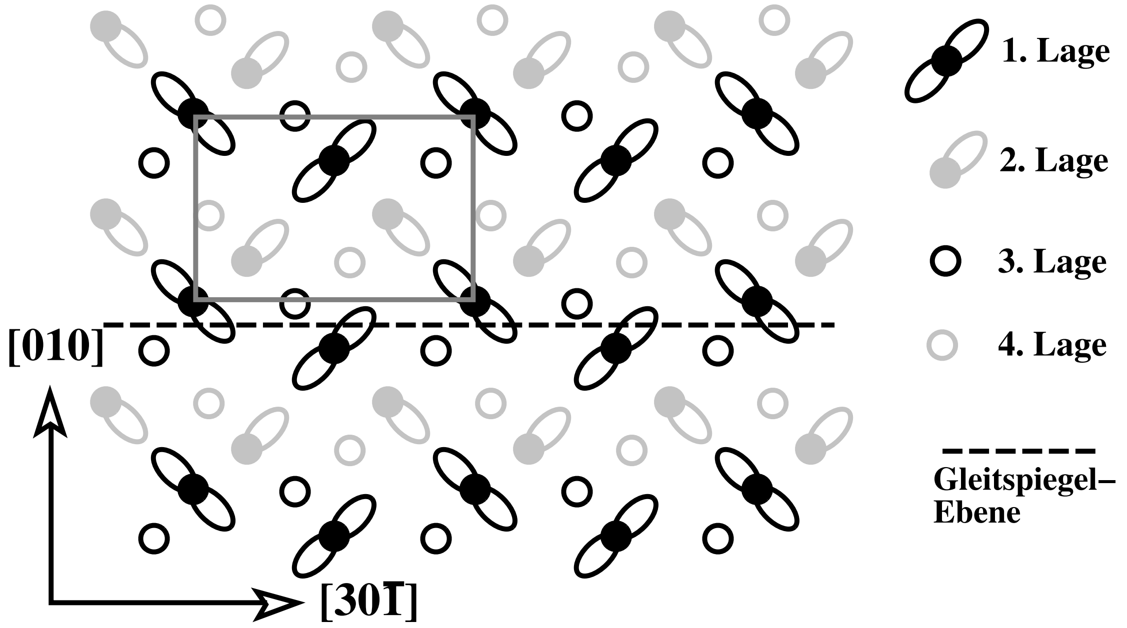

Abbildung 10.3: Schematisches Modell einer unrekonstruierten idealen Si(103)- bzw. Ge(103)-Oberfläche. Es sind vier Atomlagen dargestellt. Die Atome der ersten (zweiten) Atomlage tragen zwei (ein) Dangling Bond(s). Eine (1×1)-Elementarzelle und eine Gleitspiegelebene sind eingezeichnet.

bzw. Ge(103)-Oberflächen *in situ* ist identisch mit der Präparation der Si(001)- bzw. Ge(001)-Oberflächen, die ausführlich in Abschn. 5.5 beschrieben wurde. Die Temperaturen der Ge(103)-Proben während des Sputterns wurde zwischen RT und 400 °C und während des Nachtemperns zwischen 300 °C und 680 °C variiert. Unabhängig von der verwendeten Temperaturen zeigten die Ge(103)-Oberflächen stets ein helles und scharfes (4×1)-LEED-Bild. Für die Si(103)-Proben wurden unabhängig von der Zeitdauer des Abkühlvorgangs nach dem Flashen kein Beugungsbild einer ebenen (103)-Oberfläche beobachtet.

Die Präparation der In-bedeckten Ge(103)- und Si(103)-Oberflächen sowie der Bi-bedeckten Si(103)-Oberflächen erfolgte analog zur Präparation der (001)-Oberflächen in der MBE unter RHEED-Beobachtung (siehe Abschn. 7.2). Zur Ausbildung der Ge(103)(1×1)-Überstruktur wurden auf die saubere Ge(103)(4×1)-Oberfläche im Überschuß 6 ML_{103} In bei RT aufgedampft und anschließend bei Temperaturen zwischen 200 °C und 525 °C nachgetempert. Dabei ist 1 ML_{103} definiert als ein Atom pro (103)-(1×1) Einheitszelle, was für Ge $1{,}97 \times 10^{14}$ Atomen/ cm^2 und für Si $2{,}13 \times 10^{14}$ Atomen/ cm^2 entspricht. Die Aufdampfrate der In-Zelle betrug für die Experimente an den Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen 0,03 ML_{103}/s. Wegen der inhärenten Rauhigkeit der sauberen Si(103)-Oberfläche wurde zur Präparation der In-induzierten Si(103)(1×1)-Überstruktur das In im Desorptionsgleichgewicht bei 520 °C aufgebracht, bis ein scharfes (103)(1×1)-Beugungsbild beobachtet wurde und anschließend bei gleicher Temperatur 1 min nachgetempert. Eine Bi-induzierte Si(103)(1×1)-Rekonstruktion konnte durch langsames (10 min) Abkühlen des Substrates von 600 °C auf RT im Bi-Fluß und anschließendem Nachtempern mit steigenden Temperaturen bis 520 °C erzielt werden. Das Bi wurde aus einer Knudsenzelle mit PBN-Tiegel bei einer nominellen Ofentemperatur von 465 °C und einer Aufdampfrate von $0{,}6 \times 10^{-2}$ ML_{103}/s verdampft.

Die Deposition des Sb auf die Ge(103)-Oberfläche erfolgte bei RT und aus einer Knudsenzelle in der Sputterkammer (siehe Abschn. 8.2). Es wurde im Überschuß Sb aufgedampft (ca. 10 ML_{103}) und unter RHEED-Beobachtung bei verschiedenen Temperaturen (525–600 °C) nachgetempert.

10.4 Ge(103)(4×1)

Die reine Ge(103)-Oberfläche wurde von uns ausführlich mit LEED, RHEED, STM und SXRD untersucht. Unabhängig von der verwendeten Temperaturen während des Sputterns (RT–400 °C) und während des Nachtemperns (300–680 °C) zeigten die Ge(103)-Oberflächen im Anschluß an die Präparation bei RT stets ein helles und scharfes LEED-Bild wie in Abb. 10.4 (a). Bei der Variation der Elektronenenergie unterscheiden sich die ganzzahligen Reflexe von den gebrochenzahligen Reflexen in ihrer Intensität kaum. Durch einen Vergleich mit einem LEED-Bild einer nach In-Adsorption (1×1)-rekonstruierten Ge(103)-Oberfläche (siehe Abb. 10.11) kann die (4×1)-Periodizität der Überstruktur leicht bestimmt werden. Bei der Benennung der Überstruktur folgen wir der Konvention, nach der derjenige Vektor der Überstruktur zuerst genannt wird, der parallel zum kürzeren Basisvektor der idealen (1×1)-Oberfläche orientiert ist.

Die Abhängigkeit des Beugungsbildes von der Temperatur wurde mit RHEED verfolgt. Dabei wurde ein reversibler $(4 \times 1) \leftrightarrow$“$(1 \times 1)$”-Phasenübergang beobachtet. Die Abbildungen 10.4 (c) und (d) zeigen die Ge(103)-Oberfläche bei RT und bei 430 °C. Die Richtung des einfallenden Elektronenstrahls zur Probe wurde so gewählt, daß bei RT auf dem 0. Lauering jeweils drei gebrochenzahlige Reflexe zwischen den ganzzahligen Reflexe beobachtet werden ($\langle 010 \rangle$-Azimut). Mit steigender Temperatur bleibt die Intensität der Reflexe weitgehend konstant, bis die gebrochenzahligen Reflexe und jeder zweite ganzzahlige Reflex innerhalb eines schmalen Temperaturbereichs (wenige zehn °C) rapide schwächer werden und oberhalb $\sim$ 430 °C nicht mehr beobachtet werden können. Folgt man jenseits des Phasenübergangs den reziproken Gitterstäben durch Neigen der Probenoberfläche relativ zum Elektronenstrahl (*rocking curve*), erscheint alternativ die andere Hälfte der Schar ganzzahliger Reflexe einer (103)-Oberfläche. Die Intensität der ganzzahligen Reflexe ist offenbar um die Position der Bragg-Reflexe konzentriert, was auf eine hohe mikroskopische Rauhigkeit der Oberfläche hindeutet. Wir interpretieren den $(4 \times 1) \leftrightarrow$“$(1 \times 1)$”-Phasenübergang dementsprechend nicht als Übergang zwischen zwei Rekonstruktionen der ebenen (103)-Oberfläche oder als zweidimensionalen Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang, sondern als dreidimensionalen Rauhigkeitsübergang (*roughening transition*). Ein Rauhigkeitsübergang einer Kristalloberfläche wird makroskopisch durch das Verschwinden der Facette der gegebenen Orientierung aus der Kristallgestalt im Gleichgewichtszustand (ECS, siehe Abschn. 2.3) beschrieben. Mikroskopisch bedeutet ein Rauhigkeitsübergang, das die freie Energie für die Bildung einer Stufe auf dieser Facette null wird. Olshanetsky et al. beobachteten für alle untersuchten Ge-Oberflächen mit Ausnahme der (001)- und (313)-Oberflächen ebenfalls Hochtemperaturphasenübergänge und interpretieren sie als Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergänge [362]. Die Temperatur dieser Übergänge liegt für alle hochindizierten Ge-Oberflächen im Bereich 500–630 °C und damit deutlich höher als der von uns beobachtete Übergang auf der Ge(103)-Oberfläche.

Die STM- und SXRD-Messungen wurden ausschließlich bei RT durchgeführt. Die Abbildung 10.5 zeigt eine STM-Überblicktopographie einer Ge(103)-Oberfläche. Die Oberfläche ist aus großen, nahezu defektfreien (103)-Terrassen zusammengesetzt, die sich typischerweise über einige hundert Å erstrecken. Bei niedriger Auflösung wird die (4×1)-Rekonstruktion als paralleles Netzwerk heller Linien mit Abstand $4a_0$ abgebildet. Dabei bedeutet a_0 die Gitterkonstante des Ge-Volumens und entspricht der Länge des kürzeren der beiden Basisvektoren

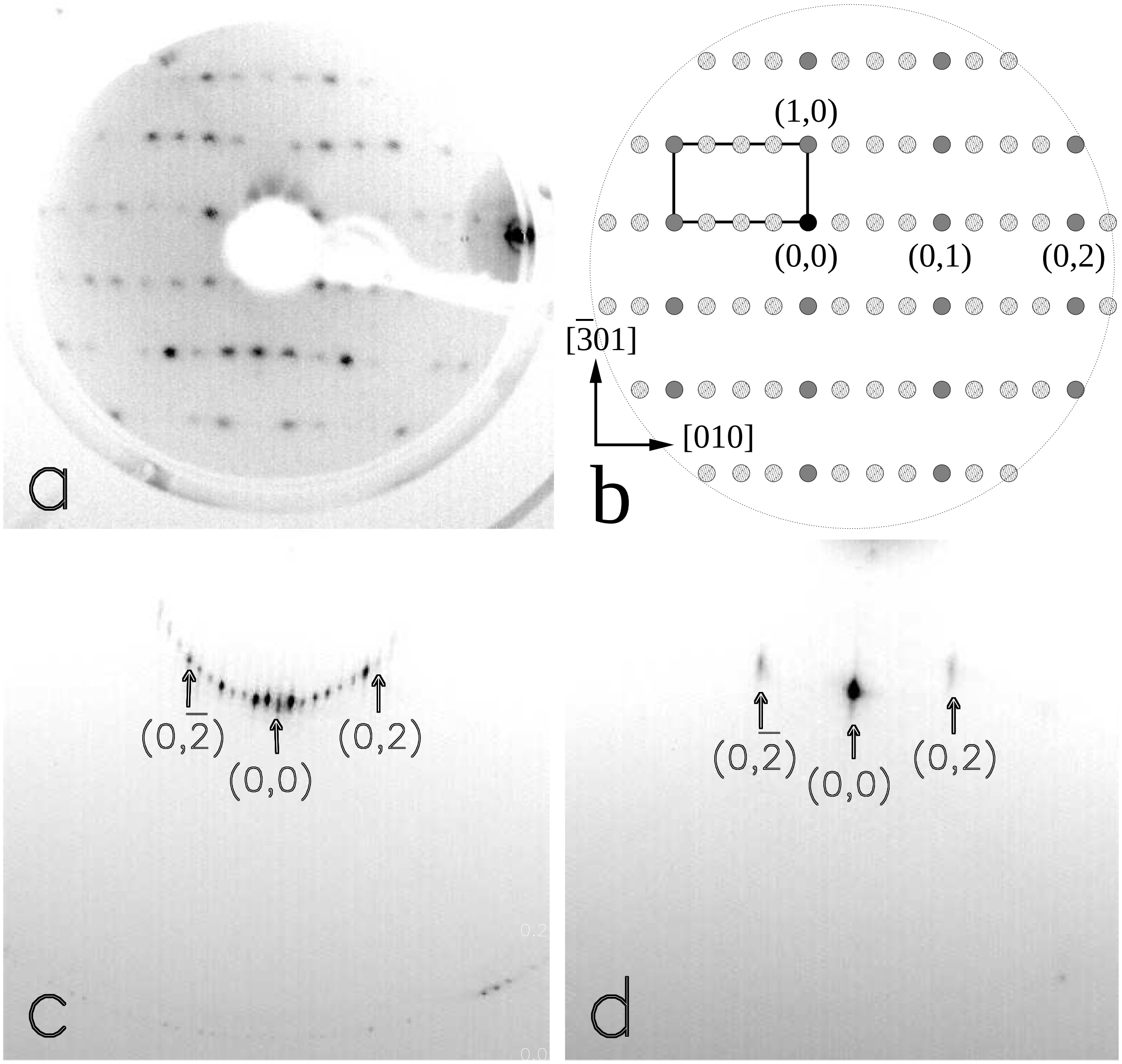

Abbildung 10.4: Beugungsbilder der reinen Ge(103)-Oberfläche: (a) LEED-Bild der Ge(103)(4×1)-Struktur bei einer Elektronenenergie von 40 eV. (b) Schematische Darstellung des LEED-Bildes. Gebrochenzahlige Reflexe sind als helle Kreise, ganzzahlige Reflexe als dunklere Kreise dargestellt. (c) RHEED-Bild der (4×1)-Phase bei RT und (d) RHEED-Bild der Hochtemperatur-"(1×1)"-Phase. Beide Messungen wurden im ⟨010⟩-Azimut und bei einer Elektronenenergie von 25 keV durchgeführt.

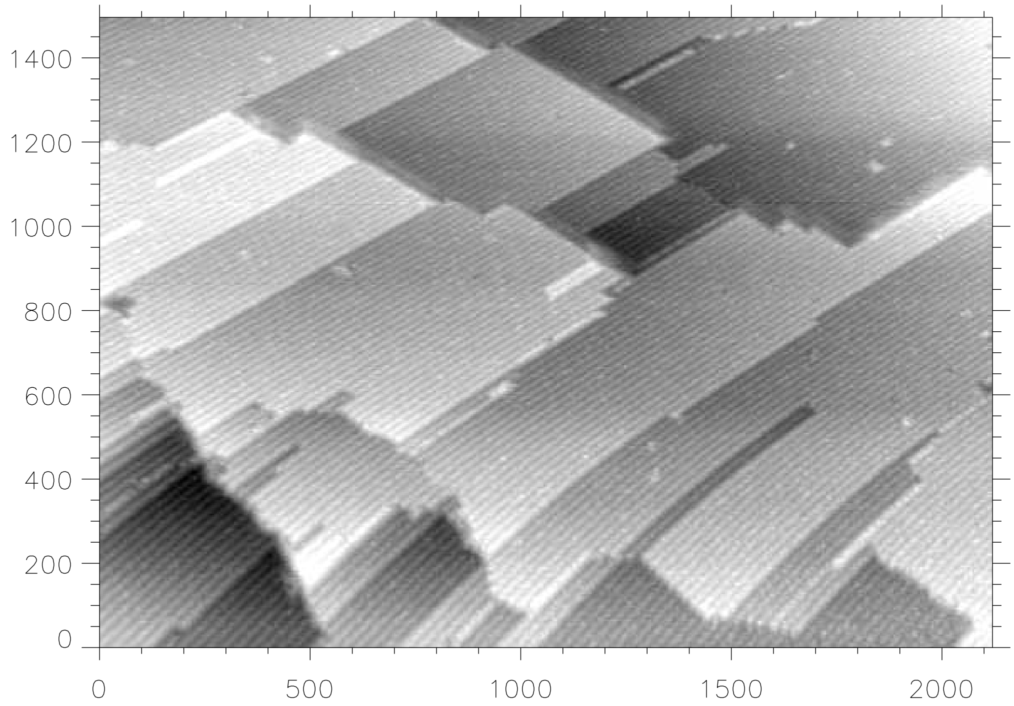

Abbildung 10.5: Überblickstopographie einer Ge(103)(4 × 1)-Oberfläche. Die Oberfläche zeigt große, atomar ebene Terrassen, die durch Einzel- und Mehrfachstufen voneinander getrennt sind. Im Vergleich zu den (001)-Oberflächen von Si und Ge ist die Ge(103)-Oberfläche rauh ($U = -1,7\ V,\ I = 1,9\ nA$).

der Ge(103)(1 × 1)-Oberfläche. In der Regel erstreckt sich eine einzige (4 × 1)-Domäne ohne Antiphasengrenzen über die gesamte Terrasse.

Die Stufen zwischen den Terrassen verlaufen in [$\bar{3}$01]-Richtung geradlinig und parallel zu den Streifen. Ihre Höhe beträgt bevorzugt 1,8 Å, was dem zweifachen Abstand zwischen (103)-Netzebenen im Volumen entspricht. Dagegen sind die Stufen in [0$\bar{1}$0]-Richtung senkrecht zu den Streifen häufig rauh und erscheinen undefiniert. In dieser Richtung werden Einzel- und Mehrfachstufen beobachtet. Eine bevorzugte Stufenhöhe existiert nicht.

Obwohl die einzelnen Terrassen der Ge(103)-Oberfläche ausgedehnt sind, muß die Ge(103)-Oberfläche, wie sie sich in Abb. 10.5 darstellt, über größere Abstände gesehen prinzipiell als rauh angesehen werden. Im Gegensatz zu den (001)- und (111)-Oberflächen von Si und Ge, für die die Stufen entlang einer gegebenen Richtung in der Regel monoton abwärts oder monoton aufwärts führen, ist die Stufendichte auf unseren Ge(103)-Proben nicht allein durch den Vizinalwinkel der Probenoberfläche zur (103)-Ebene gegeben. Ihre mesoskopische Morphologie ähnelt der einer III-V-Halbleiteroberfläche, welche nach dem Sputtern nicht vollständig ausheilen konnte. Die Ge(103)-Probe wurde für 30 min bei 570 °C getempert und ähnlich präparierte Ge(001)-Proben zeigten diese Rauhigkeit nicht. Möglicherweise steht die Rauhigkeit im Zusammenhang mit dem beobachteten Rauhigkeitsphasenübergang. Zur Ausbildung einer ebenen Oberfläche steht nur der Temperaturbereich zwischen dem Rauhigkeitsphasenübergang und dem Einfrieren der Atome auf Gitterpositionen zur Verfügung. Das Einfrieren der Atompositionen wird in etwa bei der Hälfte der Schmelzpunkttemperatur (in Kelvin) erwartet. Dieser enge Temperaturbereich zwischen 430–330 °C wurde bei unserer Präparation innerhalb weniger Minuten durchschritten, was bei dem geringen absoluten Wert der Temperatur möglicherweise nicht ausreichend war, um den energetisch günstigen Zustand minimaler

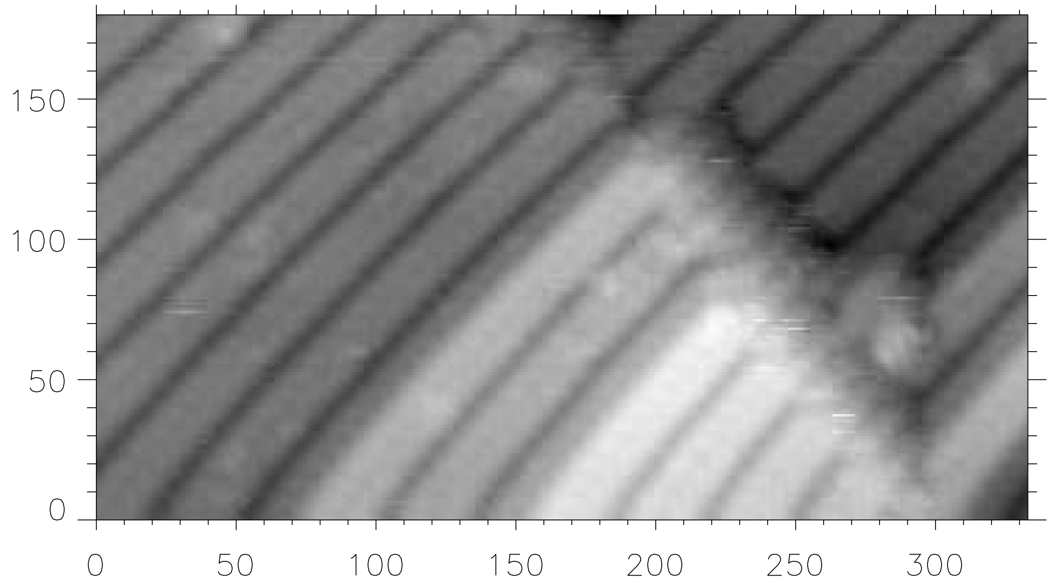

Abbildung 10.6: Ge(103)-Oberfläche mit rekonstruierter (105)-Facette im Bereich von Mehrfachstufen zwischen Ge(103)-Terrassen ($U = +2,0\ V,\ I = 1,4\ nA$).

Stufendichte zu erreichen.

Eine weitere interessante Eigenschaft der Ge(103)-Oberfläche zeigt sich im Bereichen hoher Stufendichte. Dort werden anstatt unregelmäßiger Stufenbündel oder steil abfallender Mehrfachstufen häufig flache Facetten beobachtet. Eine Facette mit der am häufigsten auftretenden Orientierung ist in Abb. 10.6 gezeigt. Sie ist um $8° \pm 1°$ in [$\bar{3}$01]-Richtung gegen die (103)-Ebene geneigt und kann einer (105)-Oberfläche zugeordnet werden. Die Periodizität und Anordnung der Erhöhungen auf der Facettenfläche ist mit dieser Zuordnung vereinbar. Facettierungen der Ge(103)-Oberfläche in Bereichen hoher Stufendichte wurden auch von Gai et al. beobachtet [393]. Ihre STM-Übersichtstopographien zeigen neben ausgedehnten (103)-Terrassen eine hohe Dichte größerer fünfseitiger Inseln, deren Spitze durch einen Defekt dekoriert ist. Die Inseln sind vermutlich auf einen verminderten Sputter-Abtrag in der Umgebung der Defekte zurückzuführen. Die Oberfläche der Inseln ist bis auf den zentralen runden Defekt in rekonstruierte (105)-, (216)-, (2$\bar{1}$6)-, (8 1 16)- und (8 $\bar{1}$ 16)-Flächen facettiert. Diese Flächen sind offenbar die nächsten stabilen Ge-Oberflächen in der Nachbarschaft zur Ge(103)-Oberfläche. Die Ge(105)-Oberfläche wurde bereits von Olshanetsky als stabil identifiziert. Das Auftreten der {8 1 16}-Facetten ist in Bezug auf die Beobachtungen von Olshanetsky et al. überraschend, da die {8 1 16}-Flächen zur (103)-Fläche um den gleichen Winkel (8,1°) in Richtung auf den (101)-Pol geneigt ist wie die nach Olshanetsky et al. stabile Ge(102)-Fläche.

Informationen über die atomare Struktur der (4×1)-Rekonstruktion können aus den Abbildungen 10.7 und 10.8 gewonnen werden. In Abbildung 10.7 sind die hellen Streifen der (4×1)-Rekonstruktion aus Abb. 10.5 als einzelne Erhöhungen in zickzackförmiger Anordnung aufgelöst. (A) markiert eine geradlinig in Streifenrichtung verlaufende Doppelstufe und (B) eine rauhe Dreifachstufe. Bei (C) weist die Terrasse einen interessanten Defekt auf, der als dunkler Graben mit einer zusätzlichen Unterstruktur abgebildet wird. Die Anordnung der Unterstruktur zur benachbarten Terrasse, ihre Höhe und ihre Gestalt sind identisch zur Unterstruktur auf der tieferen Terrasse nahe der Stufenkante (A). Diese Übereinstimmungen

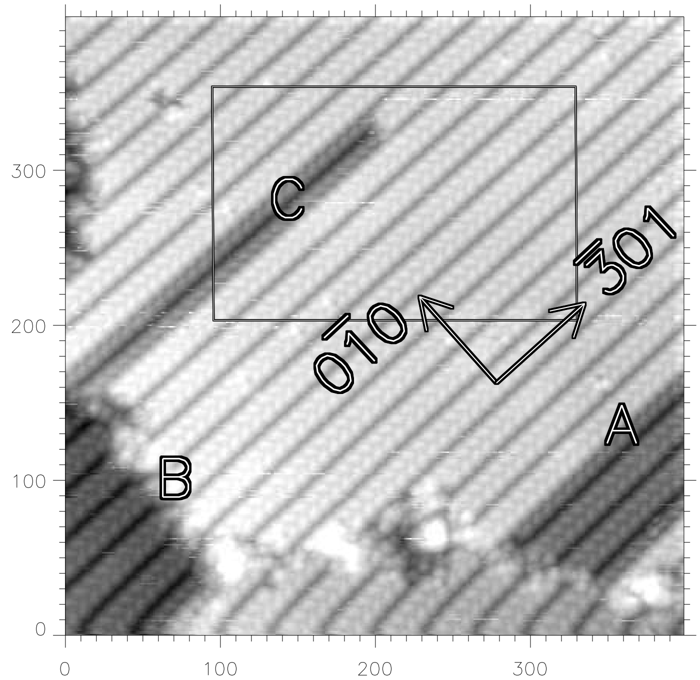

Abbildung 10.7: Hochaufgelöste STM-Topographie einer Ge(103)(4×1)-Oberfläche. Die Terrassenstufen in [$\overline{3}$01]-Richtung (A,C) verlaufen gerade und sind in [0$\overline{1}$0]-Richtung rauh (B) ($U = -1,3\ V,\ I = 1,5\ nA$).

deuten darauf hin, daß der Defekt (C) aus zwei (103) Doppelstufen besteht, und zwar einer abwärts führenden und einer aufwärts führenden.

Die Abbildung 10.8 zeigt noch einmal den umrandeten Bereich aus Abb. 10.7. In der Mitte des Bildes wurde die Tunnelspannung gewechselt, so daß in der unteren Bildhälfte unbesetzte Zustände und in der oberen Bildhälfte besetzte Zustände abgebildet werden. In der Abbildung der besetzten Zustände stellt sich die (4×1)-Rekonstruktion als Doppelreihen-Struktur dar. Die Erhöhungen haben eine ovale Form und sind zickzackförmig entlang der Streifen angeordnet. Wie bereits erwähnt, haben die Erhöhungen auf den Terrassen (D) die gleiche Größe und Gestalt wie die Maxima (E) in den Gräben.

Die auffälligste Eigenschaft der (4×1)-Rekonstruktion in der Abbildung der unbesetzten Zustände sind ebenfalls Doppelreihen von Erhöhungen in zickzackförmiger Anordnung. Die Doppelreihen (F) sind schmaler und ihre Erhöhungen werden im Gegensatz zu den Erhöhungen (D) rund abgebildet. Die hellen Doppelreihen (F) liegen in Verlängerung der Doppelreihen der besetzten Zustände. In der Mitte zwischen diesen Doppelreihen verlaufen auf tieferem Niveau ebenfalls Doppelreihen (G) wie auch an den Stufenkanten des Defekts (H) und auf dem Grund des dunkleren Grabens (I). Die Höhendifferenz zwischen H und I ist identisch mit der Differenz zwischen H und F bzw. G und F und entspricht einer Ge(103)-Doppelstufe.

Zusammengenommen lassen sich aus diesen STM-Beobachtungen folgende Eigenschaften der atomaren Struktur der Ge(103)(4×1)-Rekonstruktion ableiten. Die (4×1)-Rekonstruktion beinhaltet einen Streifen von Ge-Atomen in volumenähnlichen Positionen, welcher parallel zur [$\overline{3}$01] -Richtung orientiert ist. Dieser Streifen ist eine Ge(103)-Doppellage hoch und $\sim 2a_0$ breit. Auf diesem Streifen befindet sich eine Kette einheitliche Strukturelemente in zickzackförmiger Anordnung (F). Eine identische Kette (H) befindet sich eine Doppellage tiefer in der Mitte zwischen den Streifen.

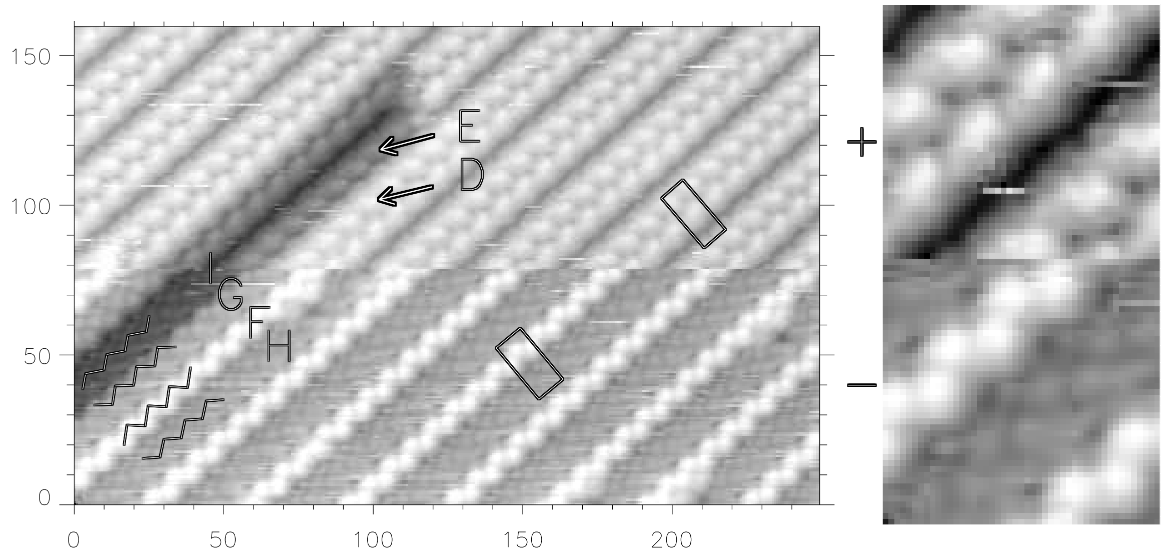

Abbildung 10.8: Details der Ge(103)(4×1)-Oberfläche aus Abb.10.7. Die Polarität der Tunnelspannung wurde in der Mitte der Bilder von $+1,0\ V$ (unten) nach $-1,0\ V$ (oben) umgeschaltet. Die Pfeile in der Abbildung der besetzten Zustände deuten auf Erhöhungen charakteristischer Form (D,E). Die hellen Linien (F,G,H,I) weisen auf die zickzackförmige Anordnung der Erhöhungen in der Abbildung der unbesetzten Zustände hin. In beiden Bildhälften sind (4×1)-Einheitszellen eingezeichnet ($U = \mp 2,0\ V,\ I = 1,5\ nA$).

Ein Strukturmodell der Ge(103)(4×1)-Rekonstruktion, welches mit den STM-Beobachtungen vereinbar ist, zeigt Abb. 10.9 in der Seitenansicht (a) und in der Aufsicht (b). Die Grundlage des Modells bildet eine vollständige Ge(103)-Doppellage, welche durch kleine graue Kreise dargestellt ist. Die schwarzen kleinen Kreise entsprechen dem nahezu $2a_0$ breiten Doppellagenstreifen mit Ge-Atomen in volumenähnlichen Positionen. Auf diesem Streifen sitzen in dreifach koordinierten Positionen jeweils zwei Ge-Adatome pro (4×1)-Elementarzelle, die im Modell als große gefüllte Kreise abgebildet werden. Die zwei Adatome, die sich in einer ähnlichen lokalen Umgebung in der Mitte zwischen den Doppellagenstreifen befinden, sind ebenfalls als gefüllte Kreise dargestellt. Die sich daraus ergebende Struktur erklärt die meisten Eigenschaften unserer STM-Bilder. Um die Anzahl der Dangling Bonds der Oberfläche weiter zu reduzieren, werden zwei weitere Ge-Adatome pro Einheitszelle zwischen den Doppellagenstreifen eingefügt (offenen große Kreise). Das resultierende Strukturmodel der Ge(103)(4×1)-Rekonstruktion weist 12 Dangling Bonds pro Einheitszelle auf. Eine unrekonstruierte (4×1)-Zelle besitzt 24 Dangling Bonds. Sechs der Dangling Bonds in unserem Modell sind Dangling Bonds der Adatome, während die anderen sechs Dangling Bonds zu Atomen in volumenähnlichen Positionen gehören, welche “Restatome” genannt werden.

Die Abhängigkeit der STM-Bilder von der Tunnelspannung deutet auf einen Ladungstransfer von den Dangling Bonds der Restatome zu den Dangling Bonds der Adatome hin. Die Restatome, die sich an den Seiten der Doppellagenstreifen befinden, verursachen demnach die breiteren Erhöhungen in den Abbildungen der unbesetzten Zustände und die Adatome verursachen die Erhöhungen in der Abbildungen der besetzten Zustände. Bei genauerer Betrachtung sind in der unteren Bildhälfte der Abb. 10.8 zwischen den hellen Streifen nicht nur die durch die gefüllten Kreise symbolisierten Adatome als Erhöhungen zu erkennen, son-

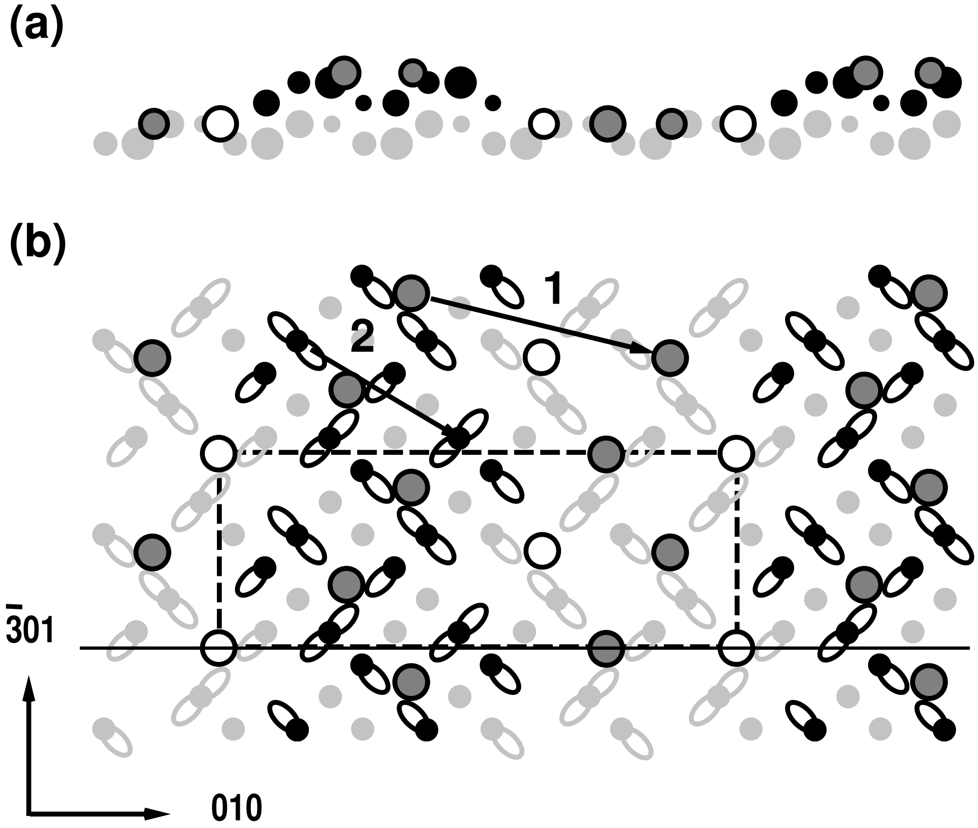

Abbildung 10.9: Schematisches Modell der Ge(103)(4 × 1)-Oberfläche in der Seitenansicht (a) und in der Aufsicht (b). Die kleinen grauen Kreise geben eine komplette (103)-Doppellage wieder. Die kleinen schwarzen Kreise bezeichnen Ge-Atome in volumen-ähnlichen Positionen und die offenen und gefüllten großen Kreise stellen dreifach-koordinierte Ge-Adatome dar. Die Pfeile entsprechen zwei charakteristischen interatomaren Vektoren.

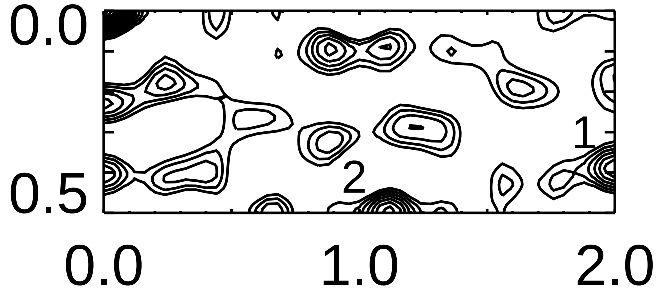

Abbildung 10.10: Pattersonfunktion der Ge(103)(4 × 1) Oberfläche auf der Grundlage der gemessenen gebrochenzahligen *in-plane*-Daten. Die Darstellung ist auf den irreduzieblen Teil der (4 × 1)-Zelle beschränkt. Der Ursprung des Koordinatensystems befindet sich links oben.

dern auch etwas schwächer die als offenen Kreise dargestellten Adatome. Das Auftreten eines Ladungstransfers zwischen Adatomen und Restatomen ist für die Si(111)(7 $\times$ 7)- und die Ge(111)c(2 $\times$ 8)-Rekonstruktionen bereits seit längerem etabliert [398, 399]. Auf den (111)-Oberflächen wird die Ladung jedoch von den Adatom Dangling Bonds auf die Restatom Dangling Bonds übertragen.

Für eine vollständige Strukturbestimmung der Ge(103)(4 $\times$ 1)-Rekonstruktion wurden SXRD-Messungen vorgenommen. Die Proben wurden in unserer Apparatur präpariert und die Qualität der Oberfläche mit STM überprüft. Anschließend wurde die Probe in einer transportablen UHV-Kammer mit sphärischem Be-Fenster zum HASYLAB transferiert, wo am Diffraktometer des Strahls BW2 SXRD-Messungen durchgeführt wurden. Die Analyse der Meßdaten wurde von O. Bunk ausgeführt und ist noch nicht vollständig abgeschlossen. Wesentliche Informationen liefert bereits die in Abb. 10.10 dargestellte Pattersonfunktion. Sie basiert auf 77 Symmetrie-inequivalenten *in-plane*-Reflexen und zeigt neben einem Maximum am Ursprung zwei Hauptmaxima. Die Lage der beiden Maxima unterstützt die grundlegenden Merkmale unseres Modells. Maximum 1 befindet sich auf Position $(0.4, 2)$ und entspricht genau einem durch eine Doppelstufe hervorgerufenen interatomaren Vektor, wie er im Modell als Pfeil 1 markiert ist. Das Maximum 1 ist nicht nur ein deutliches Indiz für die Existenz eine Doppelstufenstreifens, sondern auch für die Annahme, daß die Strukturelemente in der Mitte *zwischen* den Streifen identisch mit den Elementen *auf* den Streifen sind. Maximum 2 mit der Position $(0.5, 1.14)$ gehört zu einem interatomaren Vektor, welcher im Modell durch den Pfeil 2 wiedergegeben wird. Für Atome auf Volumenpositionen würde der Vektor $(0.5, 1.25)$ betragen. Auf der Oberfläche relaxieren die Restatome durch die Bindung an die Restatome und dem Fehlen eines Bindungspartners in gegenüberliegender Richtung, so daß sich ihr Abstand in $[0\bar{1}0]$ -Richtung verringert. Die Verschiebung von Maximum 2 unterstützt somit das Auftreten von Adatomen auf der Oberfläche.

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, daß die Bezeichnung dieser Atome als Adatome mißverstanden werden kann, denn sie besetzen im Gegensatz zu den Adatomen auf (111)-Oberflächen nicht prinzipiell andersartige Plätze, sondern lediglich stark relaxierte Volumenpositionen. Die Adatome können deshalb zusammen mit einem der benachbarten Restatome auch alternativ als Dimere verstanden werden. Die vier Substratatome, an die die Dimeratome binden, spannen lokal eine (001)-Ebene auf. Die vorläufigen Ergebnisse der SXRD-Messungen deuten darauf hin, daß die "Adatom"-Dimeratome relativ zur (001)-Ebene nach oben und die "Restatom"-Dimeratome nach unten verschoben sind, es sich also nicht um symmetrische, sondern um gebuckelte Dimere handelt. Die Richtungen von Ladungstransfer und Buckling lassen auf eine sp^2- bzw. p^3-Rehybridisierung der Dimeratome schließen, welche ein wesentliches Element des asymmetrischen Dimermodells der ebenen Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen ist.

Makroskopisch (bzw. nanoskopisch) stellt die vorgeschlagene Doppelstufenstruktur eine regelmäßige Abfolge von (216)- und $(2\bar{1}6)$-Nanofacetten dar. Die Doppelstufenstruktur läßt sich problemlos auf ausgedehnte {216}-Facetten übertragen, sofern die Breite ein ganzzahliges Vielfaches von $2a_0$ beträgt. Gai et al. interpretieren die Ge(103)(4 $\times$ 1)-Rekonstruktion ebenfalls als regelmäßige Abfolge von (216)- und $(2\bar{1}6)$-Nanofacetten, zumal in ihren hochaufgelösten STM-Bildern die Struktur der ausgedehnten {216}-Facetten und der (4 $\times$ 1)-Rekonstruktion gleich erscheint [393]. Trotz der weitgehenden Übereinstimmung der Eigenschaften ihrer STM-Bilder mit unseren, schlagen sie ein vollständig anderes Strukturmodell der Ge(103)(4 $\times$ 1)-Rekonstruktion vor. Sie fassen die Struktur der {216}-Nanofacetten als gestufte {113}-Oberflächen auf. Es ist schwer, der von Gai et al. getroffenen Zuordnung der Erhöhungen in den STM-Bildern zu den Atomen ihres Modells zu folgen, insbesondere unter Berücksichtigung der geometrischen Höhe der Atome im Modell. Nach der Prüfung ihres Modells mit dem SXRD-Datensatz muß ihre Strukturvorschlag verworfen werden, da ihre Struktur erheblich schlechter an die SXRD-Daten angepaßt werden kann und nicht die charakteristischen interatomaren Vektoren der Pattersonfunktion beinhaltet.

Die Ge(103)(4 × 1)-Oberfläche weist nach unserem Modell interessante Parallelen zur reinen (16 × 2)-rekonstruierten Si(101)-Oberfläche auf. Sie zeigt ebenfalls eine Stufenstruktur und läßt sich als alternierende Abfolge von {15 17 1}-Nanofacetten beschreiben [396]. Ausgedehnte {15 17 1}-Facetten werden auf vizinalen Si(101)-Oberflächen beobachtet.

Abschließend soll über die treibende Kraft zur Ausbildung der komplexen Struktur der Ge(103)(4 × 1)-Rekonstruktion spekuliert werden. Dazu wird zunächst eine sehr einfache Struktur betrachtet, nach der alle Dangling Bonds der idealen ebenen (103)-Oberfläche durch dreifach-koordinierte Adatome abgesättigt werden. Diese simple Adatom-Struktur ist u. a. für die Ge(103)(1 × 1)-In Rekonstruktion realisiert, die im folgenden Abschn.10.5 ausführlich behandelt wird. Die Adatome nehmen die gleiche Position ein wie die Ge-Adatome (bzw. Dimeratome) im Modell der (4 × 1)-Struktur. Da die Ge-Atome im Vergleich zu den In-Atomen bei einer höheren Anzahl von Valenzelektronen einen erheblich kleineren kovalenten Radius aufweisen, steht die simple Adatom-Struktur für Ge-Adatome unter hoher Zugspannung (vgl. Abschn.10.10). Die Einführung des Doppellagenstreifens in die Struktur kann dazu dienen, die Verspannungen an der Doppelstufe abzubauen. Darüber hinaus bieten erst die Kantenatome des Doppellagenstreifens die Möglichkeit zur Rehybridisierung der Adatome. Die Ge(103)(4 × 1)-Rekonstruktion stellt sich somit als Kompromiß zwischen der Minimierung der Anzahl an Dangling Bonds, dem Energiegewinn durch Ladungstransfer und dem Ausgleich von Verspannungen dar, welches ebenfalls die grundlegenden treibenden Kräfte für die Rekonstruktionen der niedrig-indizierten Oberflächen der Elementhalbleiter sind.

10.5 Ge(103)(1 × 1)-In

Zur Präparation der In-induzierten (1 × 1)-Rekonstruktion wurde auf die saubere Ge(103)-Oberfläche ~ 5 ML_{103} In bei RT aufgedampft. Anschließend wurde bei verschiedenen Temperaturen nachgetempert. Bereits bei 200 °C entwickelt sich ein (1 × 1)-RHEED, welches mit zunehmender Temperatur an Schärfe gewinnt. Nach dem Tempern bei 380 °C ist die Oberfläche vollständig und nahezu defektfrei (1 × 1)-rekonstruiert. Charakteristische Punktdefekte werden durch Tempern bei 525 °C erzeugt. Auf die Resultate beider Präparationsschritte wird im folgenden anhand von LEED- und STM-Bildern ausführlich eingegangen. Durch ein halbstündiges Tempern bei 570 °C kann das aufgedampfte In vollständig desorbiert und die reine (4 × 1)-rekonstruierte Ge(103)-Oberfläche wiederhergestellt werden.

Die Abbildung 10.11 zeigt LEED-Bilder der Ge(103)(1 × 1)-In Rekonstruktion nach dem Tempern bei 380 °C. Bei niedriger Energie (a) wird das LEED-Bild durch Reflexe in nahezu hexagonaler Anordnung dominiert. Die übrigen Reflexe eines reziproken (103)-(1 × 1)-Gitters sind nur schwach oder gar nicht zu erkennen. Bei höherer Energie (b) gleichen sich die Intensitäten der Reflexe an. Jeder zweite Reflex entlang einer Linie in [$\bar{3}$01]-Richtung durch den Spekularreflex bleibt jedoch bei allen Energien um ein vielfaches schwächer als die übrigen Reflexe. Diese Eigenschaft wird durch die Symmetrie der rekonstruierten Oberfläche hervorgerufen und wird bei der Diskussion des Strukturmodells von Bedeutung sein.

In der Übersichtstopographie in Abb. 10.12 sind große ebene (103)-Terrassen zu erkennen. Die Terrassen erstrecken sich ähnlich wie auf der reinen Ge(103)(4 × 1)-Oberfläche über mehrere hundert Å und sind nahezu defektfrei. Die Stufenhöhe zwischen den Terrassen beträgt zwischen 0,9 Å und ~ 10 Å. Es besteht also wie für die reine Fläche eine Tendenz

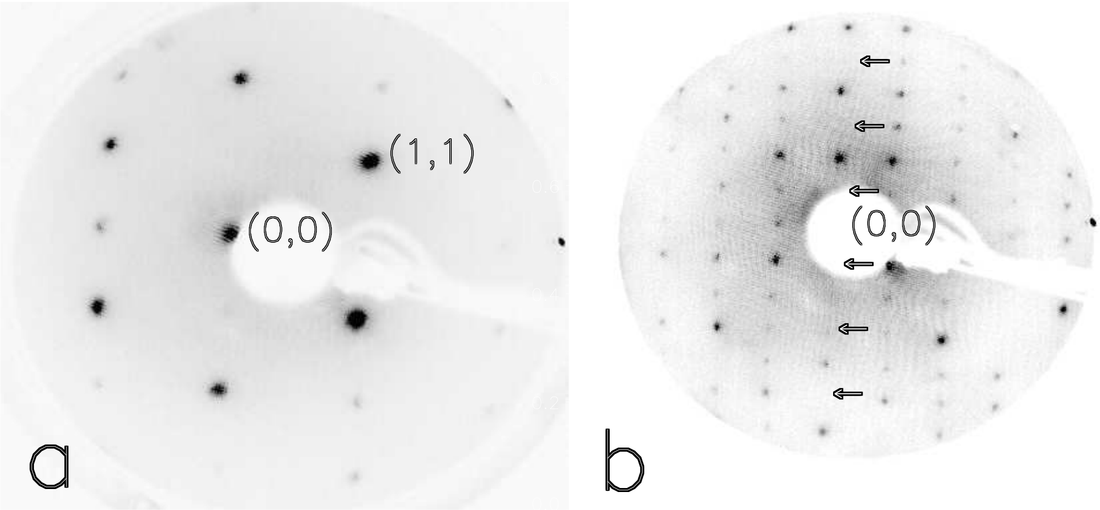

Abbildung 10.11: LEED-Bilder der In-induzierten Ge(103)(1 × 1)-Rekonstruktion. Die Elektronenenergie beträgt in (a) 40 eV und in (b) 154 eV. Die Pfeile in (b) markieren die Positionen der Reflexe, die für eine Struktur mit Gleitspiegelsymmetrie nach kinematischer Theorie verboten sind.

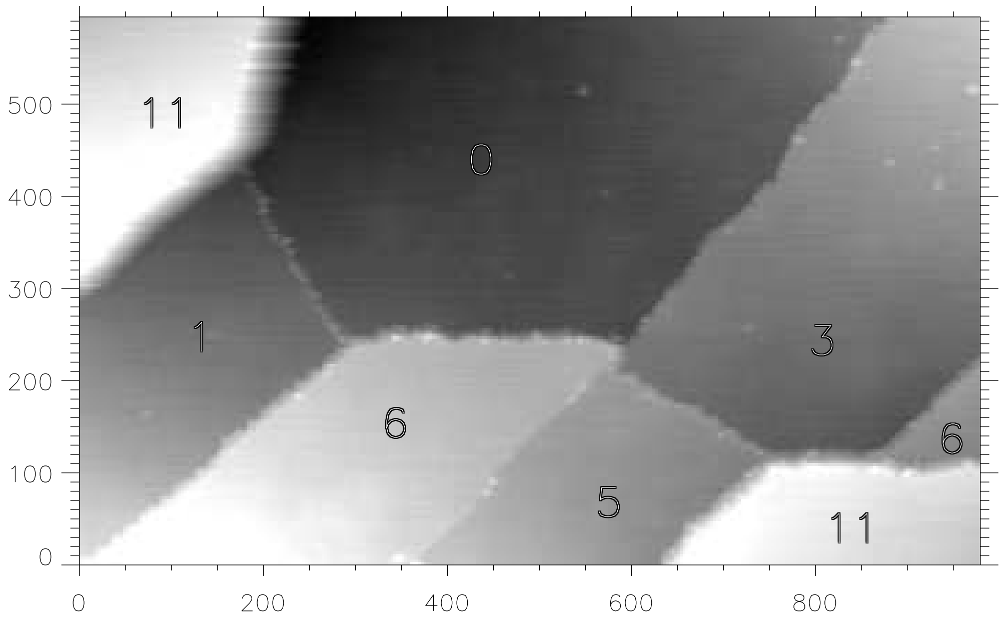

Abbildung 10.12: Überblickstopographie einer vollständig In-terminierten Ge(103)-Oberfläche. Es wurden 5 ML_{103} In bei RT aufgedampft und bei 380 °C nachgetempert. Die Terrassen sind (1 × 1)-rekonstruiert und durch Einzel- und Mehrfachstufen voneinander getrennt. Die Ziffern geben das Höhenniveau der Terrassen in Einheiten eine Ge(103)-Einfachstufe (0,89 Å) an ($U = -1,6\ V,\ I = 1,3\ nA$).

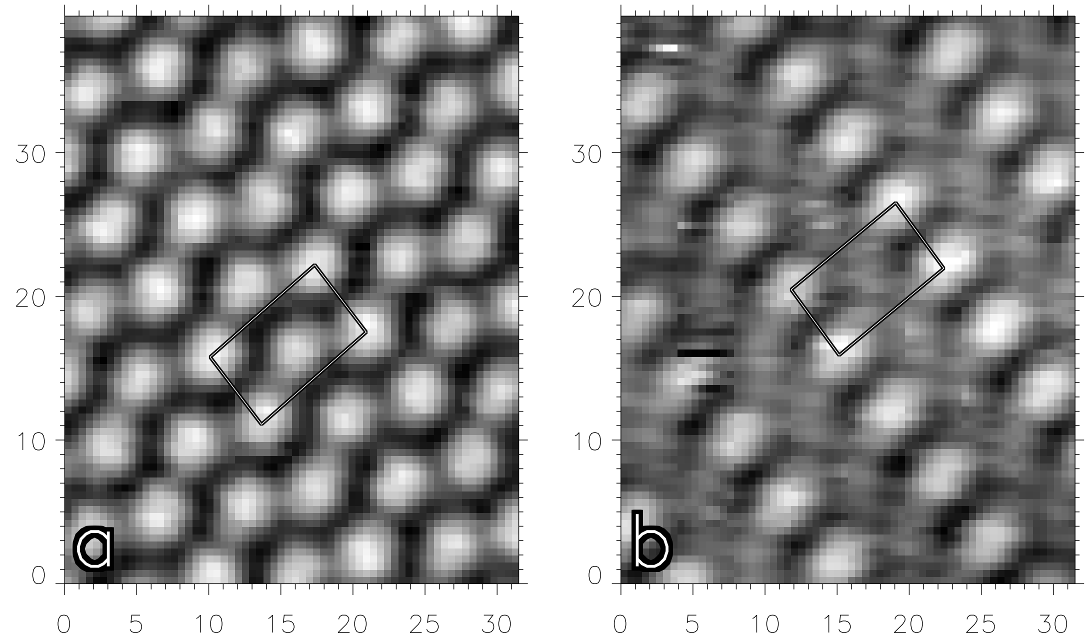

Abbildung 10.13: Hochaufgelöste STM-Topographien der Ge(103)(1 × 1)In Rekonstruktion mit identischer Abbildung (a) und ungleicher Abbildung (b) der beiden Erhöhungen pro (1 × 1)-Elementarzelle. Die ungleiche Abbildung in (b) wird auf eine Asymmetrie der Tunnelspitze zurückgeführt ($a:\ U = +1,5\ V,\ I = 2,0\ nA,\ b:\ U = +1,1\ V,\ I = 1,4\ nA$).

zur Mehrfachstufenbildung. Eine bevorzugte Stufenhöhe wurde jedoch nicht beobachtet. Die Stufen verlaufen häufig wie in Abb. 10.12 über längere Strecken gemittelt geradlinig und kreuzen sich unter Winkeln nahe 120° und 90°. Darüberhinaus wurden auch Bereiche mit abgerundetem oder meandrierendem Stufenkantenverlauf gefunden. Mikroskopisch sind die Stufenkanten für alle Orientierungen rauh.

Die atomare Struktur der Ge(103)(1 × 1)-In Rekonstruktion und ihre Abbildung im STM sollen anhand der Abbildungen 10.13 und 10.14 diskutiert werden. Alle atomar aufgelösten Bilder zeigen zwei Erhöhungen pro (1 × 1)-Elementarzelle. Die Erhöhungen sind in [0$\bar{1}$0]-Richtung hintereinander und in [$\bar{3}$01]-Richtung zickzackförmig angeordnet. Sie folgen damit der Anordnung der Atome einer idealen Ge(103)-Einzellage. Es lassen sich prinzipiell zwei Klassen von Abbildungen unterscheiden, und zwar solche, für die die beiden Erhöhungen pro Elementarzelle ununterscheidbar sind (Abb. 10.13 (a)) und solche, für die ein Helligkeitskontrast zwischen den Erhöhungen erkennbar ist (Abb. 10.13 (b)). Sofern ein Kontrast in der Abbildung vorhanden ist, ist die Periodizität in der Anordnung der hellen und dunklen Erhebungen absolut. Abweichungen von der Periodizität durch Antiphasengrenzen oder Punktdefekte wurden nicht beobachtet. Eine eindeutige Abhängigkeit des Kontrastes von den Tunnelparametern wurde nicht festgestellt. Bildet die Tunnelspitze beide Erhebungen bei positiver Tunnelspannung mit gleicher Helligkeit ab, bleibt ihre Ununterscheidbarkeit bei Variation der Tunnelparameter erhalten.

Die Abbildung 10.14 zeigt eine Aufnahme, in der die Polarität der Tunnelspannung in der Mitte des Bildes von +0,9 V (unten) auf -0,9 V (oben) umgeschaltet wurde. In beiden Bildhälften werden die Erhöhungen ununterscheidbar abgebildet. Wie mit Hilfe des darübergelegten (1 × 1)-Gitters leicht zu erkennen ist, tritt jedoch mit dem Wechsel der Polarität eine Verschiebung in der Position der Erhebungen auf. Diese Verschiebung in der Position der

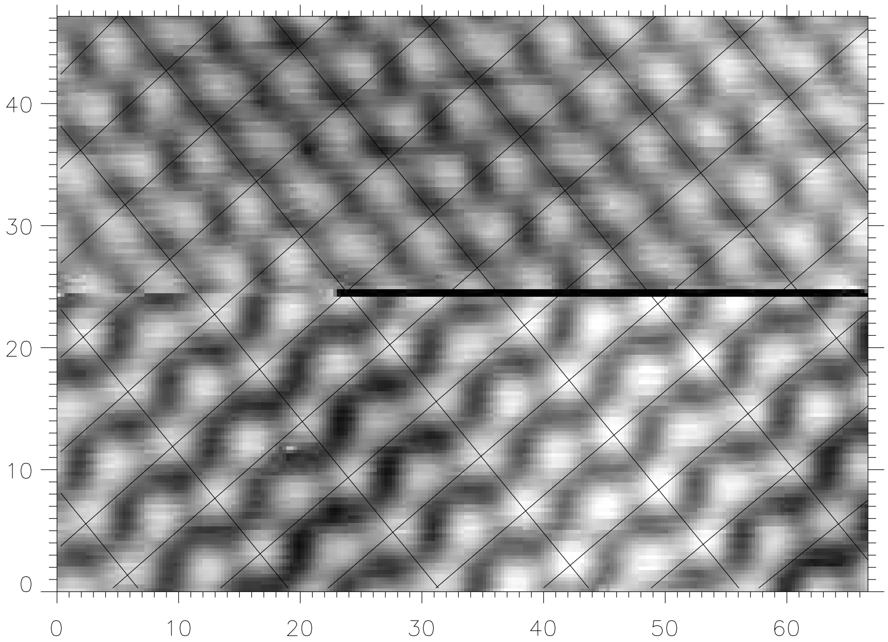

Abbildung 10.14: STM-Bild der Ge(103)(1×1)In Rekonstruktion. Die Polarität der Tunnelspannung wurde in der Mitte des Bildes von +0,9 V (unten) nach -0,9 V (oben) umgeschaltet. Die dunklen Linien markieren ein (1×1)-Gitter und verdeutlichen den Versatz des Anordnung der Erhöhungen beim Wechsel der Tunnelspannung ($U = \mp 0,9\ V,\ I = 1,8\ nA$).

Erhebungen wurde in allen Doppelspannungsbildern im Bereich zwischen 0,5 V und 2,5 V beobachtet.

Unser Modell der Ge(103)(1×1)-In Rekonstruktion ist in Abb. 10.15 dargestellt. Die ideale Ge(103)-Oberfläche ist vollständig durch 2 ML_{103} In-Atome abgeschlossen. Jedes In-Atom ist dreifach koordiniert und bindet an zwei Ge-Atome der ersten Lage und an ein Ge-Atom der zweiten Lage, so daß alle Dangling Bonds des Substrates abgesättigt werden. Die Bindungswinkel betragen annähernd 120° und die Bindungsgeometrie der sp^2-hybridisierten In-Atome ist planar. Die Struktur läßt sich durch eine Gleitspiegeloperation (pg) ineinander überführen. Man beachte jedoch, daß die (114)-Ebene, welche durch die drei bindenden Ge-Atome aufgespannt wird, zur (103)-Ebene um 14,3° geneigt ist. Die Neigung weist für die beiden Adsorptionsplätze pro Elementarzelle in unterschiedliche Richtungen. Die beiden In-Atome pro Einheitszelle sind deshalb trotz Erhaltung der pg-Symmetrie im Prinzip unterscheidbar, da ihre p_z-Orbitale, die vermutlich die STM-Abbildung der unbesetzten Zustände dominieren, unterschiedlich ausgerichtet sind.

Dieses Modell entspricht vollständig unserem Modell der In-terminierten {103}-Facetten der Ge(001)-Oberfläche (Abb. 9.16). Es unterscheidet sich von dem Modell, welches Zhao et al. für die Al-induzierte {103}-Facetten der Si(001)-Oberfläche vorschlagen, allein dadurch, daß Zhao jedes zweite Adsorbatatom durch ein Substratatom ersetzt (1 ML Modell) [338]. Dieses 1 ML Modell wurde später von Gai et al. auf die Struktur der In-terminierten {103}-Facetten der Ge(001)-Oberfläche [205] und von Ji et al. auf die (1×1)-Rekonstruktionen der (103)-Oberflächen der Systeme Al/Si, Ga/Si, In/Si und In/Ge übertragen [341, 201]. Zhao, Gai und Ji begründen ihre Modellvariante mit folgenden Beobachtungen. Die Sättigungsbedeckung der (1×1)-rekonstruierten Oberflächen beträgt nach ihren AES-Messungen annähernd 1 ML_{103}. Ihre atomar aufgelösten STM-Messungen an den In-terminierten {103}-

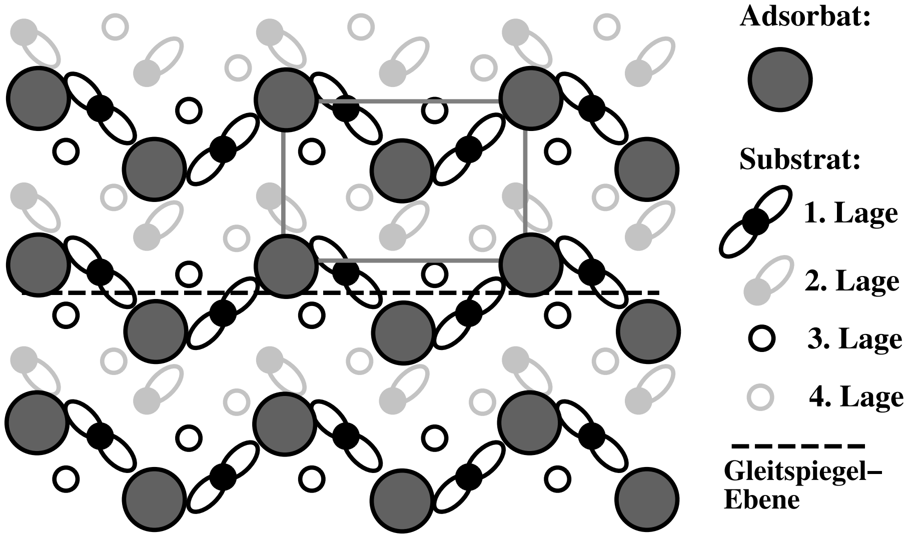

Abbildung 10.15: Schematisches Modell der Ge(103)(1 × 1)-In Rekonstruktion. Die Adsorbatatome sind als Adatome dreifach koordiniert und sättigen alle Dangling Bonds der ideal terminierten (103)-Substratoberfläche ab.

Facetten auf der Ge(001)-Oberfläche zeigen einen Helligheitsunterschied zwischen den beiden Erhebungen der (1 × 1)-Elementarzelle. Jeder zweite LEED-Reflex in [$\bar{3}$01]-Richtung durch den Spekularreflex ist sehr schwach, aber doch beobachtbar. Sie folgern daraus, daß die pg-Symmetrie (durch die unterschiedliche chemische Spezies der Adatome) gebrochen sein muß. Sie konnten mit ihrem Modell eine gute Übereinstimmung zwischen berechneten und experimentellen LEED I-V-Kurven erzielen.

Wir stimmen mit Ji et al. darin überein, daß allen genannten (1 × 1)-Rekonstruktionen die gleiche Struktur zugrunde liegt. Unter Berücksichtigung unserer Beobachtungen kann ihre Argumentation für ein 1 ML Modell jedoch nicht überzeugen. Ji et al. berichten nicht, ob ein 2 ML Modell nicht ähnlich gut an die I-V Kurven angepaßt werden kann. Die beobachtete große Intensitätsdifferenz zwischen symmetrie-verbotenen und symmetrie-erlaubten Reflexen stützt unsere Annahme, daß die pg-Symmetrie erhalten ist. Die Restintensität der verbotenen Reflexe kann dadurch hervorgerufen werden, daß der LEED-Strahl nicht senkrecht auf die Oberfläche trifft und einfallender und gebrochener Strahl nicht in der Gleitebene liegen [400].

Unsere STM-Messungen an der Ge(103)(1 × 1)-In Rekonstruktion zeigen, daß bei allen verwendeten Tunnelspannungen die beiden Erhöhungen pro Elementarzelle in der Regel gleich abgebildet werden. Die Gruppe-IV Substrat-Adatome sind in ihren elektronischen Eigenschaften von Gruppe-III Adsorbat-Adatomen verschieden. Damit sollten die beiden Adatomsorten in den STM-Bildern zuverlässig unterscheidbar sein, wie es für andere Gruppe-III/Gruppe-IV Adatom-Rekonstruktionen demonstriert wurde [401, 402]. Den gelegentlich auftretenden Kontrast führen wir auf eine temporäre Asymmetrie in der Anordnung der vordersten Atome der Tunnelspitze zurück. Wie bereits erwähnt wurde, unterscheiden sich die beiden Adatome in der Orientierung ihrer p_z-artigen Orbitale. Dadurch ist es denkbar, daß die ansonsten identischen Adatome mit einer zur (103)-Ebene asymmetrischen Spitze unterschiedlich abgebildet werden. Spitzenabhängige Asymmetrien in der Abbildung äquivalenter Atome wurden bereits für die CdTe(001)-Oberfläche beschrieben [403]. Diese Interpretation erklärt im Gegensatz zum 1 ML Modell, warum Störungen in der Periodizität der Abfolge der hellen und dunkleren Erhöhungen durch Antiphasengrenzen oder Punktdefekten nie beobachtet wurden.

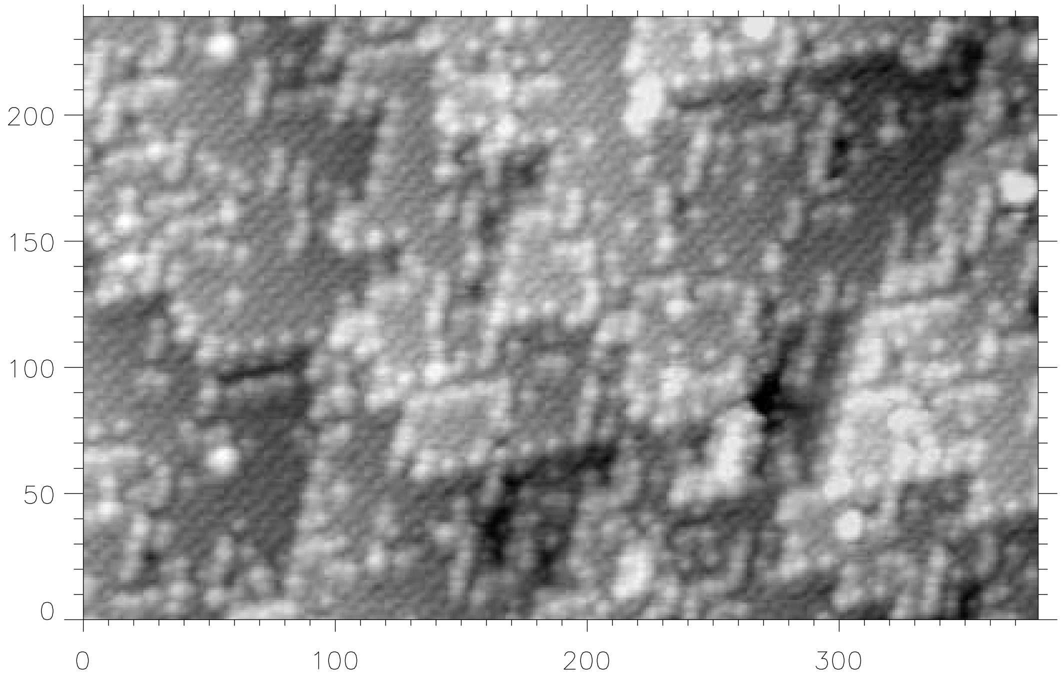

Abbildung 10.16: STM-Topographie einer Ge(103)(1×1)-In Oberfläche nach zusätzlichem 2 min Tempern bei 525 °C. Neben der (1×1)-Rekonstruktion zeigt die Oberfläche charakteristische Defekte ($U = -1,9\ V,\ I = 1,2\ nA$).

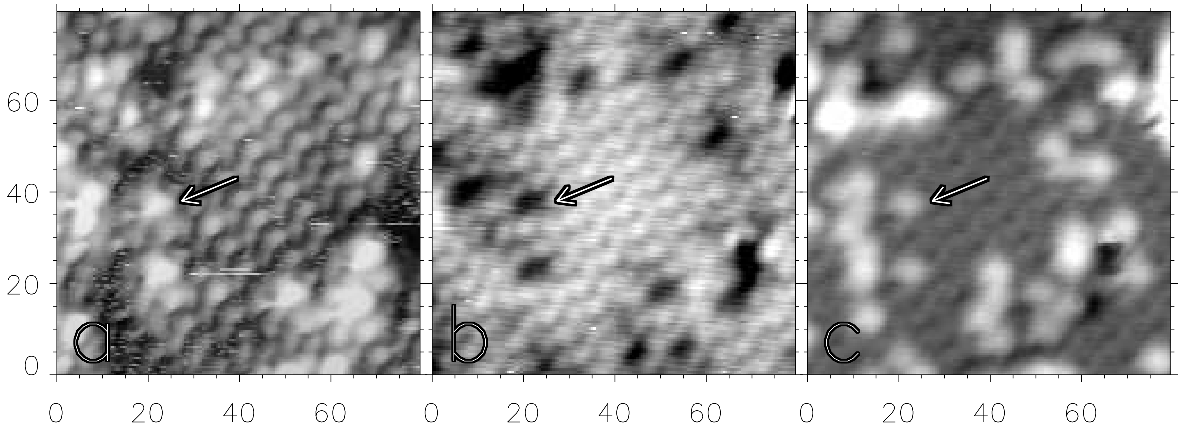

Abbildung 10.17: Sequenz von STM-Bildern des gleichen Ausschnitts der Oberfläche mit unterschiedlichen Tunnelspannungen. Die Pfeile weisen auf denselben charakteristischen Defekt ($a:\ U = +0,8\ V,\ b:\ +1,7\ V,\ c:\ -1,7\ V,\ jeweils\ I = 1,5\ nA$).

Das stärkste Argument für das 2 ML Modell liefert das Phasendiagramm des Systems In/Ge(001). In Kapitel 7 wurde gezeigt, daß eine vollständig {103}-facettierte Ge(001)-Oberfläche allein durch Tempern (Desorption) in eine vollständig $(n \times 4)$-rekonstruierte Ge(001)-Oberfläche überführt werden kann. Da die In-Bedeckung der $(n \times 4)$-Rekonstruktion zweifelsfrei $\sim$ 0,5 ML_{001} beträgt, ist ein 1 ML_{103} Modell für die (1×1)-Rekonstruktionen auszuschließen (1 $ML_{001} \approx$ 3,16 ML_{103}). Es besteht die Aussicht, die Struktur der Ge(103)(1×1)-In Rekonstruktion vollständig durch ein SXRD-Experiment aufzuklären. Entsprechende Messungen wurden bereits am BW2 im HASYLAB durchgeführt, sind aber noch nicht ausgewertet.

Im Vorhergehenden haben wir angenommen, daß die Maxima in den Abbildungen der unbesetzten Zustände durch leere p_z-Orbitale der In-Atome hervorgerufen werden. Wenn diese Zuordnung korrekt ist, sind die Erhöhungen in den Abbildungen der besetzten Zustände jeweils in der Mitte zwischen drei In-Atomen lokalisiert. Die Erklärung dieser Abbildungseigenschaften bleibt detailierten Berechnungen der lokalen elektronischen Struktur der Ge(103)(1×1)-In Rekonstruktion vorbehalten.

Die vollständig In-terminierten Ge(103)(1×1)Oberflächen wurde im Anschluß an die Messungen bei höheren Temperaturen nachgetempert. Abb. 10.16 zeigt eine Übersichtstopographie der Oberfläche nach zweiminütigem Tempern bei 525 °C. Die Terrassen sind weiterhin (1×1)-rekonstruiert. Zusätzlich treten helle runde Defekte und dunkle Defekte unregelmäßiger Form auf. Die hellen Defekte dekorieren bevorzugt die Stufenkanten in regelmäßigen Abständen. Auf diesen Abschnitten verlaufen die Stufen in $\langle\bar{3}11\rangle$-Richtungen, also in Richtungen von Diagonalen durch die (1×1)-Einheitszellen. Die Stufenhöhe beträgt überwiegend 0,9 Å und entspricht einer Ge(103)-Einfachstufe.

Der Kontrast der Defekte zur umgebenden (1×1)-Struktur ist stark abhängig von der gewählten Tunnelspannung. Eine Abfolge von drei Bildern des gleichen Ausschnitts der Oberfläche bei unterschiedlichen Tunnelspannungen ist in Abb. 10.17 dargestellt. Neben einigen Defekten, die nur jeweils in einem der drei Bilder abgebildet werden und einer größeren Vertiefung in der linken oberen Ecke des Ausschnitts ist eine Schar von Defekten auszumachen, die in (a) und (c) als Erhöhungen und in (b) als Vertiefungen abgebildet werden.

Die Art der Präparation, nämlich alleiniges Heizen nahe der In-Desorptionstemperatur, läßt vermuten, daß es sich bei den Defekten nicht um Adatome auf einer weiterhin vollständig In-terminierten Oberfläche handelt, sondern um Fehlstellen in der Anordnung der In-Atome. Bei hohen positiven Tunnelspannungen dominieren die p_z-artigen unbesetzten Orbitale der In-Atome die Abbildung und die Fehlstellen werden als Vertiefung abgebildet. Für niedrigere positive Tunnelspannungen und negative Tunnelspannungen dominieren vermutlich die ungesättigten Dangling Bonds des Substrates. Die Beobachtung einer signifikanten Änderung in der Stufenhöhe und Stufenform läßt auf einen Massentransport von Substratatomen während des Temperns schließen. Es ist deshalb vorstellbar, daß die Fehlstellen des (1×1)-Gitters der In-Atome durch Ge-Atome aufgefüllt sind. Die obige Interpretation der spannungsabhängigen Abbildungseigenschaften der Defekte kann unverändert für dieses Alternativmodell übernommen werden.

10.6 Sb-induzierte {113}-Facettierung der Ge(103)-Oberfläche

In Analogie zu unser kurzen Reihe von Experimente zur Adsorption von Elementen der Gruppen III–V auf den (001)-Oberflächen von Ge und Si erschien es uns konsequent und sinnvoll, die Experimente an der Ge(103)-Oberfläche nach der Untersuchung der reinen und In-bedeckten Oberfläche durch Experimente an der Sb-bedeckten Oberfläche fortzusetzen.

Die Systeme Sb/Ge(103) und In/Ge(103) sind potentiell auch aus technologischer Sicht in Hinblick auf eine Heteroepitaxie von III-V Halbleitern auf (103)-Elementhalbleitern und eine Surfactant unterstützte Heteroepitaxie von Ge/Si(103) interessant.

Die Präparation der Sb-bedeckten Ge(103)-Oberfläche erfolgte wie die Präparationen der Sb-bedeckten Ge(001)-Oberflächen und In-bedecken Ge(103)-Oberflächen durch Aufdampfen des Adsorbates im Überschuß (5 ML_{103}) und bei RT. Das LEED-Bild zeigte im Anschluß an die Deposition ein stark 3D-artiges (1×1)-Muster mit hohem Hintergrund. Im RHEED waren zusätzlich $\frac{1}{4}$-zahlige Reflexe der Ge(103)(4×1)-Rekonstruktion zu erkennen. Die Probe wurde unter RHEED-Kontrolle bis über den $(4\times1)\leftrightarrow$"$(1\times1)$"-Phasenübergang bei 420 °C geheizt. Nach dem Abkühlen der Probe auf RT bliebt das (1×1)-RHEED-Bild erhalten. STM-Bilder zeigen eine Terrassenstruktur, wie sie für die reine Ge(103)(4×1)-Oberfläche typisch ist. Die Terrassen selbst sind vollständig mit runden Clustern bedeckt. Der Durchmesser der Cluster variiert zwischen 10–20 Å und ihre Korrugation beträgt maximal 3 Å. Anschließend wurde die Probe bei steigenden Temperaturen nachgetempert, bis mit dem Einsetzen einer Facettierung eine Veränderung im RHEED-Bild bemerkt wurde (T_{max} = 525 °C für 5 min). Die Oberfläche ist nach unseren STM-Beobachtungen in pyramidenförmige Hügel aufgeworfen (ohne Abbildung). Die Grundfläche der Pyramiden entspricht einem langgezogenen, gleichschenkligen Dreieck, welches in $[\bar{3}01]$ -Richtung ausgerichtet ist. Die Länge der Pyramiden beträgt typisch 50–100 Å und ihre Höhe 6–12 Å. Die längeren Seitenflächen sind rekonstruiert. Soweit erkennbar, ist ihre Struktur mit der Struktur der weiter unten gezeigten Facettenflächen identisch (siehe Abb. 10.20).

Die Probe wurde bei gleicher Temperatur (525 °C) weitere 20 min getempert. Die Intensität und Schärfe der Facettenreflexe nahm während des Temperns und insbesondere während des Abkühlens auf RT stark zu. Die Abbildungen 10.18 (a)-(c) zeigen eine Folge von LEED-Bildern dieser Präparation bei variabler Energie . Durch Vergleich der Abbildungen (a) und (b) ist zu erkennen, daß sich alle Reflexe bei Erhöhung der Energie (abzüglich der Bewegung durch die Expansion der Ewald-Kugel) senkrecht auf eine $[\bar{3}01]$-Symmetrieachse zu oder von der Achse weg bewegen. Die LEED-Bilder lassen sich als eine Überlagerung von Beugungsbildern zweier Oberflächen beschreiben. Die Oberflächen sind zur Ge(103)-Oberfläche in entgegengesetzten Richtungen um eine $[\bar{3}01]$-Achse geneigt und weisen die gleiche Rekonstruktion auf. Insbesondere bei hoher Energie wie in Abb. 10.18(c) wird deutlich, daß die lineare Anordnung der Reflexe durch regelmäßige Versetzungen gestört ist. Dieses Verhalten weist auf eine stark und regelmäßig gestufte Oberfläche hin [18].

Zur Bestimmung der Orientierung der Facetten wurden die Abstände einiger ausgewählter Reflexe zur Symmetrieachse bei mehreren Energien ausgemessen. Die Abstände und Elektronenenergien wurden in Wellenvektoren $k_{\|,[\bar{3}01]}$ und $k_{\perp}$ umgerechnet und in Abb. 10.18 aufgetragen. Daß die Komponente des Wellenvektors in $[\bar{3}01]$-Richtung $k_{\|,[\bar{3}01]}$ auf diese Weise nur bis auf eine additive Konstante bestimmt ist, ist für die Bestimmung der Facettenflächen unerheblich. Der ermittelte Neigungswinkel zwischen den Gitterstäben der Facettenoberflächen beträgt $28° \pm 8°$. Da die Winkel zwischen den Oberflächennormalen bei der Transformation vom K-Raum in den Ortsraum erhalten bleiben, sind die Facettenflächen gegen die (103)-Oberfläche demnach um $\pm(14° \pm 4°)$ um eine Achse in $[\bar{3}01]$-Richtung geneigt.

Eine STM-Übersichtstopographie dieser Präparation zeigt Abb. 10.19. Die Oberfläche weist eine quasi-eindimensionale "Berg und Tal"-Struktur auf. Die Breite und Länge der Strukturen beträgt im Mittel 150 Å und 2000 Å. Das Höhenprofil verdeutlicht den Sägezahnähnlichen Querschnitt der Streifenstrukturen. In der Graustufendarstellung wie im Höhenprofil erscheinen die Seitenflächen bei der gewählten Auflösung eben. Die Neigung der Seitenfläche zur mittleren Probenoberfläche ist im Rahmen der Meßgenauigkeit für beide Flächen

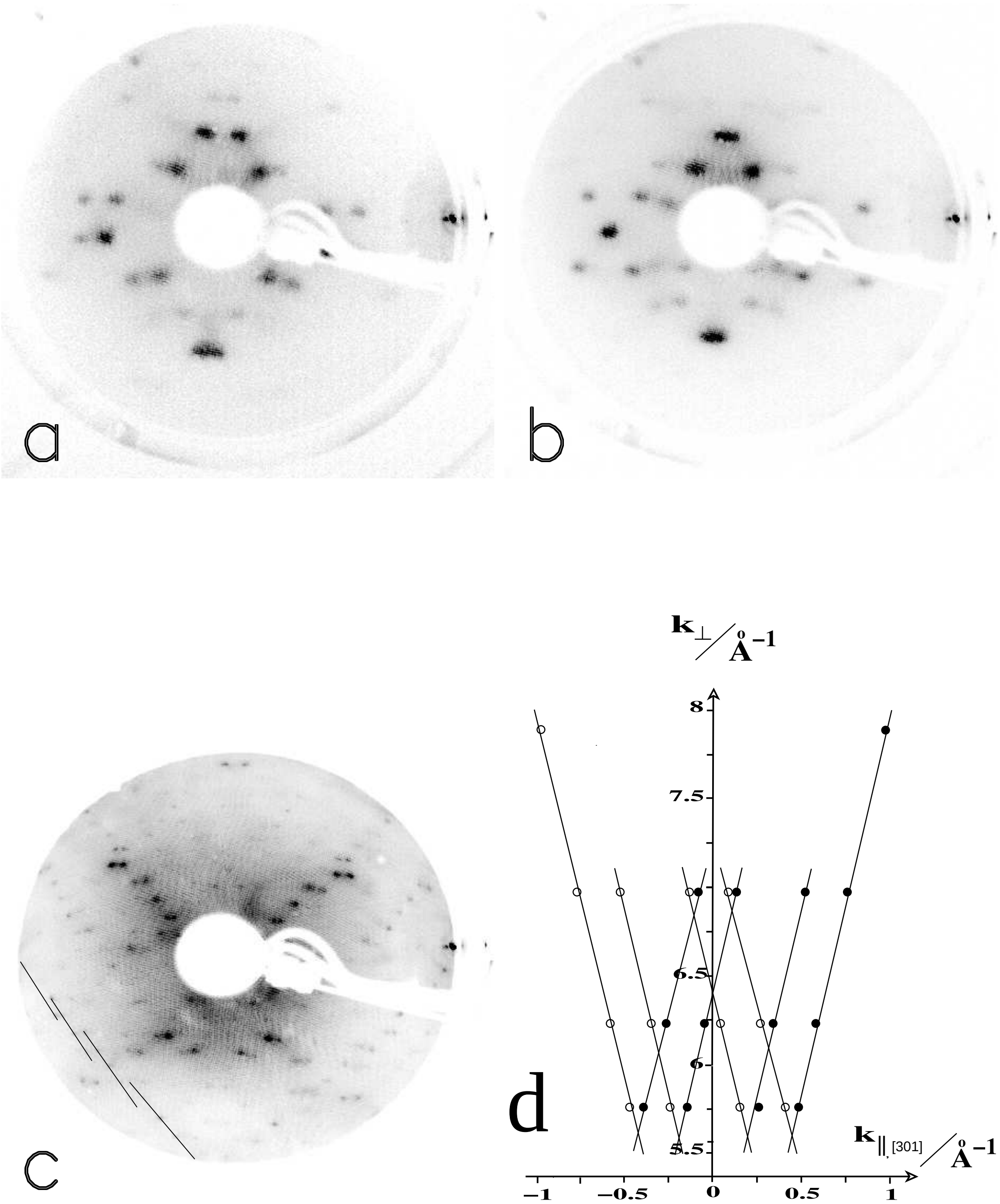

Abbildung 10.18: LEED-Bilder einer nach Sb-Terminierung vermutlich {113}-facettierten Ge(103)-Oberfläche (a-c) und Auftragung der Position ausgewählter Reflexe im K-Raum (d). Die Elektronenenergien betragen in (a) 30 eV, in (b) 35 eV und in (c) 140 eV. Die in (c) eingezeichneten Linien markieren den charakteristischen Versatz der Reflexpositionen im Beugungsmuster.

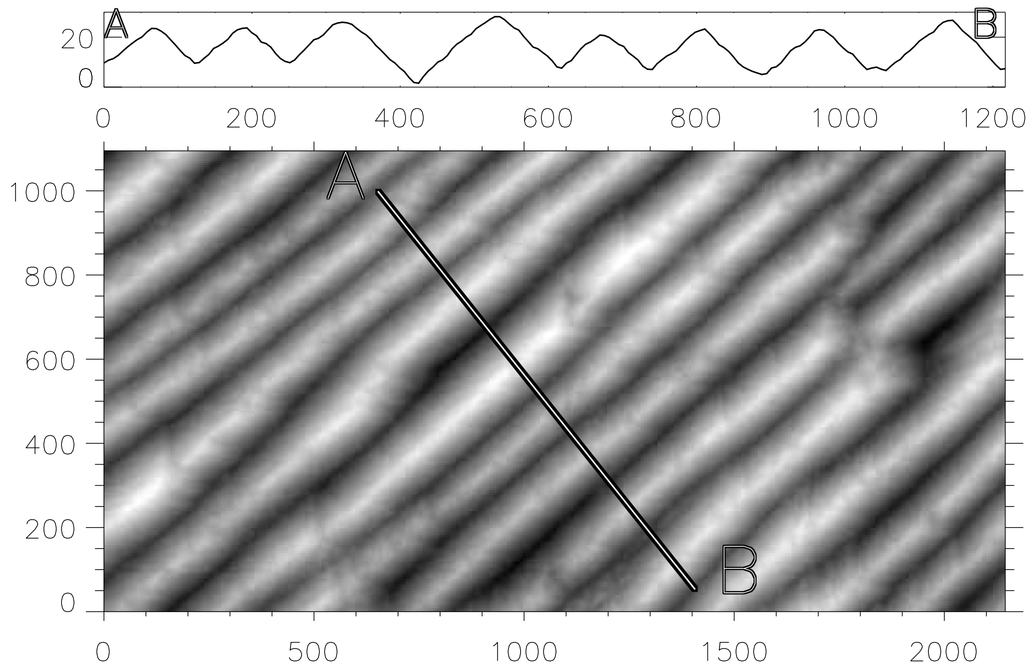

Abbildung 10.19: STM-Übersichtstopographie und Höhenprofil einer infolge Sb-Terminierung facettierten Ge(103)-Oberfläche. Es wurden 10 ML_{103} Sb bei RT deponiert und bei 525 °C nachgetempert ($U = -1,5\ V,\ I = 1,1\ nA$).

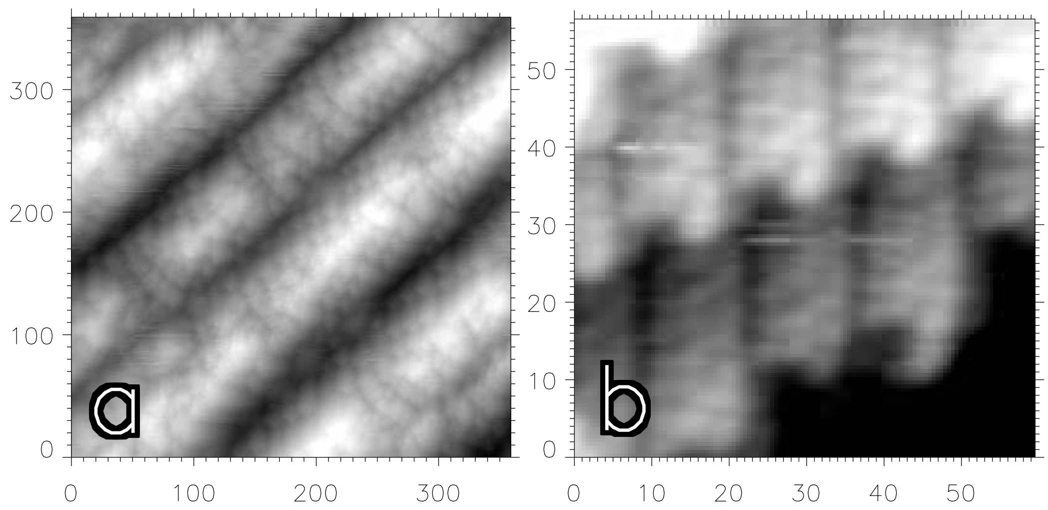

Abbildung 10.20: STM-Topographien einer facettierten Ge(103)-Oberfläche in höherer Auflösung. Die schmalen Terrassen sind vermutlich Ge{113}-Oberflächen (Deposition von 10 ML Sb bei RT, 3 min Nachtempern bei 600 °C, $U = -1,9\ V,\ I = 0,9\ nA$).

und alle Streifen gleich und beträgt $\pm(15^\circ \pm 3^\circ)$.

In einer weiteren Präparation wurden auf die saubere Ge(103)(4×1)-Oberfläche 5 ML_{103} Sb bei RT aufgedampft und für 3 min bei 600 °C nachgetempert. Das Beugungsbild entsprach demjenigen der vorhergehenden Präparation. Trotz erhöhter Temperatur wurde keine Zunahme der Größe der eindimensionalen Strukturen beobachtet. In den STM-Bildern dieser Präparation konnte die Struktur der Seitenfläche der Streifen höher aufgelöst werden (siehe Abb. 10.20). Die Seitenflächen sind nicht atomar eben, sondern stark und regelmäßig gestuft. Die Stufen verlaufen in einem Winkel von $\sim 25^\circ$ zur $[\bar{3}01]$- Richtung und sind $\sim$ 1,7 Å hoch. Die schmalen Terrassen zwischen den Stufen sind rekonstruiert und zeigen dunkle Gräben im Abstand von 14 Å. Anhaltendes Tempern (12 h) der Probe bei 600 °C bewirkt die Desorption des Antimons unter Rückbildung der Facettierung. Nach dem Abkühlen der Probe wurde wieder das (4×1)-Beugungsmuster der reinen Ge(103)-Oberfläche beobachtet.

Auf der Grundlage der Ergebnisse der LEED- und STM-Messungen kann auf die Orientierung der Facettenflächen geschlossen werden: Die unbekannte Facettenfläche (abc) ist um eine $[\bar{3}01]$-Achse gegen die (103)-Ebene geneigt. Der Normalenvektor der unbekannten Ebene (abc) steht also senkrecht auf $[\bar{3}01]$:

$$\begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \tag{10.1}$$

$$\Rightarrow c = 3a \tag{10.2}$$

Der Normalenvektor der Ebene (abc) schließt einen Winkel Θ mit der [010]-Richtung ein:

$$\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2+c^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \cos\Theta \tag{10.3}$$

Daraus folgt für den Neigungswinkel Θ der Facettenfläche zur (103)-Ebene:

$$\Theta = 90 - \arctan\left(\sqrt{10}\frac{a}{b}\right) \tag{10.4}$$

Unter der Bedingung, das die Indizes a,b,c ganzzahlig und klein sind, ergeben sich im Bereich $\Theta = 10^\circ - 18^\circ$ folgende mögliche Facettenorientierungen:

Fläche	Neigung	Basisvektoren	Winkel R
(329)	$\Theta = 11.9^\circ$	$a = 8.94$ Å	$R = 67.6^\circ$
$(3\bar{2}9)$	$\Theta = -11.9^\circ$	$b = 18.76$ Å	
(113)	$\Theta = 17.5^\circ$	$a = 4.00$ Å	$R = 73^\circ$
$(1\bar{1}3)$	$\Theta = -17.5^\circ$	$b = 6.93$ Å	

Tabelle 10.1: Mögliche Orientierungen der Sb-induzierten Facetten der Ge(103)-Oberfläche mit Angabe der Neigung zur (103)-Oberfläche und der Länge und Winkel der Basisvektoren der idealen Oberflächen.

Der Abstand von 14 Å zwischen den dunklen Streifen und die Anordnung der Erhöhungen auf den rekonstruierten Terrassen der Facettenflächen in Abb. 10.20(b) stützt die Zuordnung der Facetten zu {113}-Flächen gegenüber {329}-Flächen, da die Periodizität der Überstruktur in einfacher Beziehung zum (1×1)-Gitter der Fläche stehen sollte. Die STM-Abbildungen sind mit der Zuordnung zu einer Ge{113}(1×2)-Sb Überstruktur vereinbar. Für die Si(113)-Oberfläche ist eine Sb-induzierte (2×2)-Rekonstruktion bekannt [282].

Ein Vergleich der nanofacettierten Oberflächen der Systeme Sb/Ge(103) und In/Ge(001) offenbart folgende Gemeinsamkeiten und Unterschiede. Es ist beiden Systemen gemeinsam, daß die Oberflächen vollständig facettiert werden können. Es entstehen jeweils quasi-eindimensionale prismenförmige Strukturen. Die Größe der Strukturen und die Neigung der Seitenflächen ist sehr ähnlich. In beiden Systemen werden die Oberflächen der Prismen jeweils durch äquivalente Flächen gebildet.

Im Unterschied zum System In/Ge(001) sind die Sb-induzierten quasi-eindimensionalen Strukturen wegen der niedrigeren Symmetrie der Ge(103)-Substratoberfläche komplett in eine Richtung ausgerichtet und es gibt keine Richtungsdomänen. Ihre Gestalt ist bei weitem nicht so regelmäßig und ihre Größenverteilung weniger scharf. Der Prozeß der Facettierung unterscheidet sich ebenfalls. Während die Prismen bei der In-induzierten Facettierung der Ge(001)-Oberfläche bereits im Stadium der Keimbildung ihre endgültige Breite und Form annehmen und die Facettierung durch das Wachstum von Domänen voranschreitet, facettiert die Sb-bedeckte Ge(103)-Oberfläche zunächst vollständig in kleine unregelmäßige Pyramiden. Die Gestalt von Prismen und eine vergleichbare Größe bilden die facettierten Strukturen erst nach fortgesetztem Tempern aus (Coarsening).

10.7 Struktur der Si(103)-Oberfläche

Nachdem von uns entdeckt worden war, daß die reine Ge(103)-Oberfläche stabil und eben ist, lag es nahe, unsere Untersuchungen auf die Si(103)-Oberfläche auszuweiten. Die Eigenschaften der Si(103)-Oberfläche waren zum Zeitpunkt der Experimente vollständig unbekannt. Die Si(103)-Proben wurden ähnlich den Si(001)-Proben für einige Sekunden bei 1100 °C geflasht und über einen Zeitraum von 1 h von 900 °C auf RT abgekühlt. Die Abbildung 10.21 zeigt zwei LEED-Bilder der Si(103)-Oberfläche unterschiedlicher Energie. Die Mehrzahl der Reflexe erscheinen vergleichsweise breit und schwach. Alle Reflexe sind auf äquidistanten Linien in $[\bar{3}01]$-Richtung angeordnet. (Für einen Vergleich der LEED- und STM-Bildern der Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen ist zu beachten, daß die Si(103)-Proben gegenüber den Ge(103)-Proben auf den Probenplättchen um 90° gedreht montiert sind.) Der Abstand der Linien entspricht im Ortsraum $2a_0$ (10,86 Å). Bei Variation der Elektronenenergie wird deutlich, daß das Beugungsbild aus zwei sich in $[\bar{3}01]$-Richtung gegeneinander verschiebenden Beugungsmustern zusammengesetzt ist. Die Si(103)-Oberfläche ist demnach in zwei [m0n]-Oberflächen facettiert. Die einzelnen Facettenflächen sind klein und ihre Rekonstruktion weist in [010]-Richtung eine $2a_0$-Periodizität auf.

Unsere STM-Messungen zeigen, daß die Si(103)-Oberfläche über mehrere Nanometer gemittelt eben ist. Die Si(103)-Oberfläche facettiert nicht in größere "Berg und Tal"-Strukturen benachbarter stabiler Oberflächen, wie es für vizinale Oberflächen zwischen den Polen (001) und (111) sowie (111) und (101) des Stereographischen Dreiecks beobachtet wurde [361, 379, 382, 385]. Mikroskopisch ist die Oberfläche jedoch rauh. Abbildung 10.22 zeigt einen Ausschnitt der Größe (340×200) Å^2. Die Oberfläche wirkt zunächst ungeordnet. Die maximale Höhendifferenz beträgt 6 Å. Nach eingehender Betrachtung sind kleine ebene Flächen zu erkennen. Diese Flächen fallen gegenüber der mittleren (103)-Oberfläche in $[\bar{3}01]$-Richtung um $\sim 8°$ ab. Die Flächen sind rekonstruiert und zeigen eine Reihenstruktur. Der Abstand der Reihen in [010]-Richtung beträgt 11 Å. Die Beobachtungen lassen eine eindeutige Identifizie-

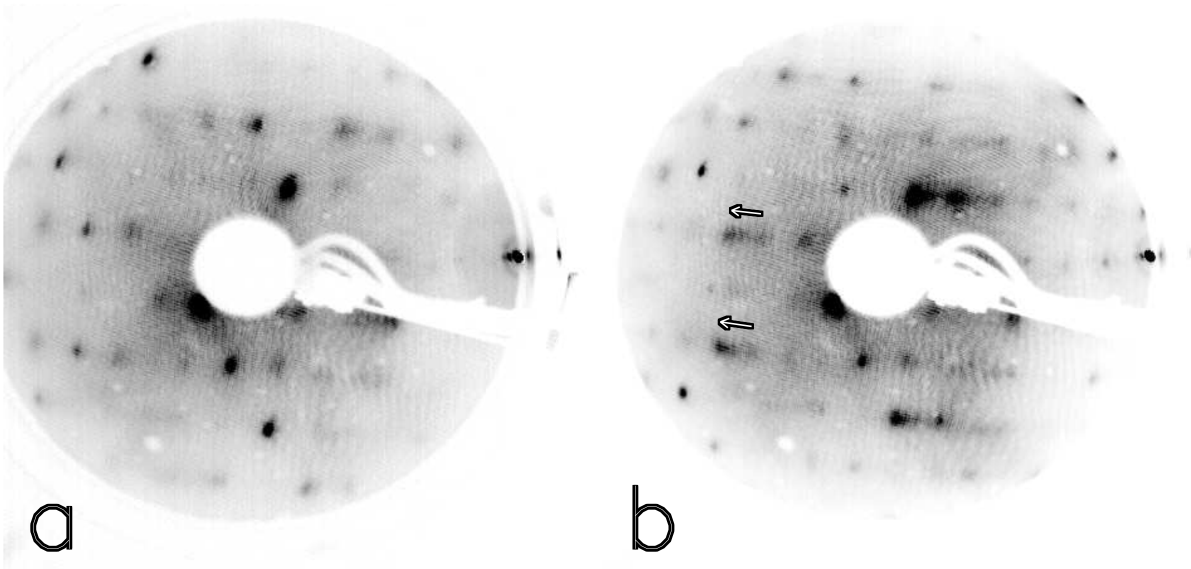

Abbildung 10.21: LEED-Bilder der reinen Si(103)-Oberfläche bei Elektronenenergien von 44 eV (a) und 52 eV (b). Die Bilder werden jeweils von mindestens zwei gegeneinander geneigte Oberflächen hervorgerufen. Mit steigender Elektronenenergie bewegen sich die Beugungsmuster unterschiedlicher Oberflächen wie durch die Pfeile symbolisiert in $[\bar{3}01]$-Richtung aufeinander zu.

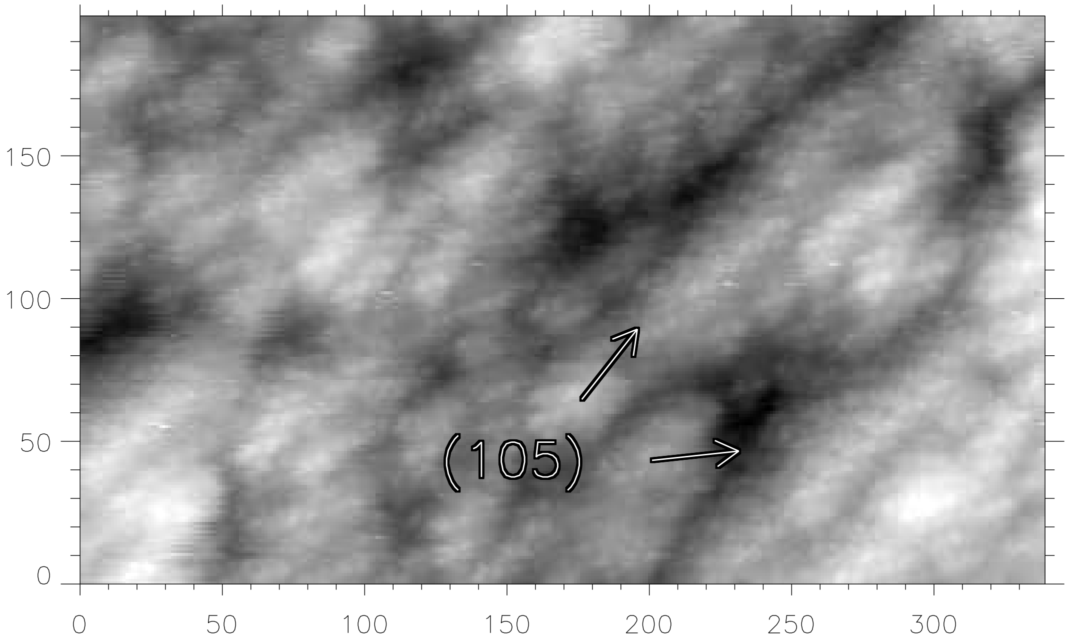

Abbildung 10.22: STM-Topographie einer reinen Si(103)-Oberfläche. Die maximale Höhendifferenz über diesen Bereich von (340×200) $\AA^2$ beträgt 6 Å ($U = +1,4\ V$, $I = 0,6\ nA$).

rung dieser Bereiche als (2×1)-rekonstruierte (105)-Flächen zu. Die Existenz einer ebenen (2×1)-rekonstruierten Si(105)-Oberfläche ist bekannt [361, 360]. Mit Ausnahme von facettierten Bereichen an den Flanken von selten beobachteten Pinning Centers, wurden keine weiteren ebenen Flächen gefunden. Die zweite Komponente des Beugungsmusters führen wir deshalb auf die scheinbar ungeordneten Bereiche zwischen den Si(105)-Facetten zurück, deren lokale Struktur nicht aufgelöst werden konnte.

Unsere Beobachtungen an der reinen Si(103)-Oberfläche weichen substantiell von den Beobachtungen von Ji et al. ab, die kürzlich im Rahmen von LEED-Untersuchungen an der In-stabilisierten Si(103)(1×1)-Rekonstruktion über LEED-Beobachtungen an der reinen Si(103)-Oberfläche berichteten [341]. Ihr LEED-Bild setzt sich bei schwachem Hintergrund lediglich aus schwachen ganzzahligen Si(103)-Reflexen zusammen, von denen nur wenige gleichzeitig sichtbar sind. Facettenreflexe beobachten sie nicht. Sie schließen daraus, daß die Oberfläche ohne jegliche Facettierung aus großen Si(103)-Terrassen aufgebaut ist.

Ein Vergleich ihrer und unserer Beobachtungen läßt vermuten, daß die Morphologie der Si(103)-Oberfläche empfindlich abhängig von der Präparation ist. Als wesentliche Parameter für die Ausbildung der (105)-Facetten kommen die Geschwindigkeit des Abkühlungsprozesses, die Reinheit der Substratoberfläche und der Restgasdruck in Betracht. Die Abwesenheit von Überstrukturreflexen und die Beobachtung, daß gleichzeitig nur wenige Reflexe sichtbar sind, lassen eine atomar ebene Si(103)-Oberfläche unwahrscheinlich erscheinen und stützen die Vermutung, daß die von Ji et al. präparierte Si(103)-Oberfläche ebenfalls mikroskopisch rauh ist und den scheinbar ungeordneten Bereichen in Abb. 10.22 gleicht.

10.8 Si(103)(1×1)-In

Zum Zeitpunkt der Experimente war bekannt, daß die Si(001)-Oberfläche durch In-Adsorption bei Temperaturen oberhalb 550 °C {103}-Facetten ausbildet. Im Gegensatz zum System In/Ge(001) kann die Oberfläche jedoch nicht vollständig facettiert werden und zeigt stets Koexistenz mit ebenen, (4×3)-rekonstruierten Si(001)-Terrassen [184, 191]. Insofern war nicht zwingend zu erwarten, daß durch In-Adsorption eine vollständig ebene und unfacettierte Si(103)-Oberfläche erzeugt werden kann.

Die Si(103)-Probe wurde bei einer Substrattemperatur von 480 °C mit In bedampft, bis sich ein scharfes Si(103)(1×1)-RHEED ausbildete und anschließend bei gleicher Temperatur 1 min nachgetempert. Die LEED-Bilder der abgekühlten Probe weisen die gleichen Eigenschaften auf wie jene der Ge(103)(1×1)-In Oberfläche in Abb. 10.11. Auch in den STM-Messungen konnten keine substantiellen Unterschiede zur Ge(103)(1×1)-In Oberfläche ausgemacht werden. Die In-terminierte Si(103)-Oberfläche in Abb. 10.23 ist aus ebenen Si(103)-Terrassen zusammengesetzt, die überwiegend durch rauhe Einzelstufen voneinander getrennt sind. In anderen Präparationen mit ähnlichen Parametern wurden bevorzugt geradlinig verlaufende Mehrfachstufen zwischen den Terrassen gefunden. Facettierte Bereiche wurden im Gegensatz zur reinen und In-terminierten Ge(103)-Oberfläche weder mit LEED noch mit STM beobachtet.

Die Si(103)-Terrassen sind (1×1)-rekonstruiert und zeigen bei beiden Tunnelspannungspolaritäten zwei gleichartige Erhöhungen pro Elementarzelle (Abb. 10.24). Die Position der Erhöhungen verschiebt sich beim Wechsel der Tunnelspannungspolarität. Die Interpretation der Abbildungen und das Strukturmodell der In-induzierten (1×1)-Rekonstruktion können wegen der übereinstimmenden Beobachtungen von der Ge(103)-Oberfläche unverändert auf die Si(103)-Oberfläche übertragen werden (siehe Abschn. 10.5). Die Ergebnisse der Untersuchungen von Ji et al. zur Struktur der Si(103)(1×1)-In Rekonstruktion [341] sind dort bereits

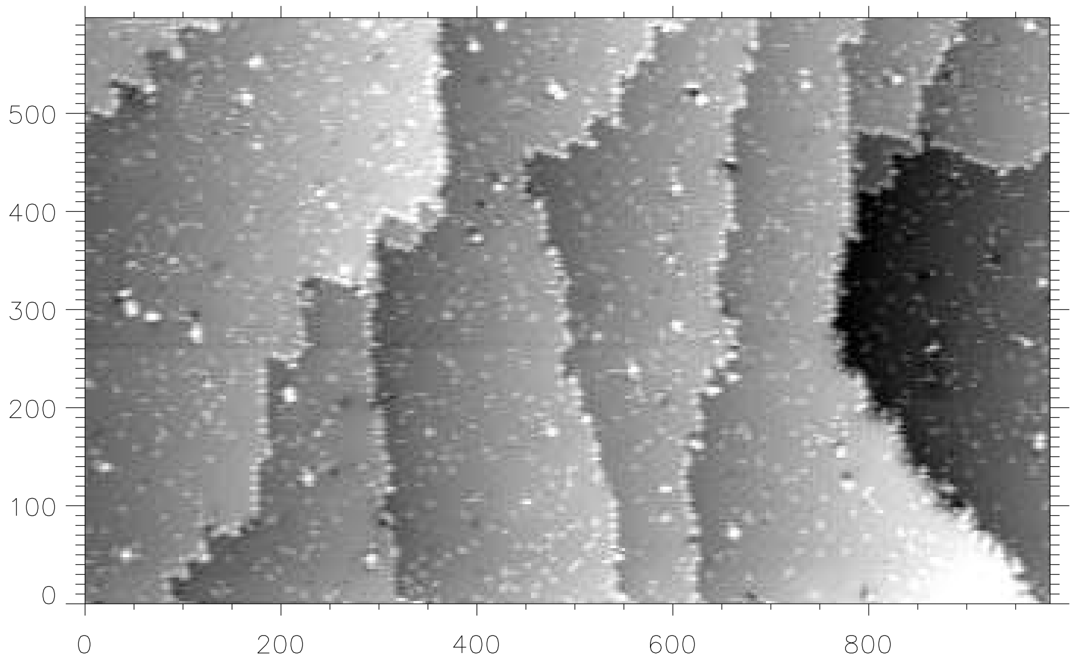

Abbildung 10.23: Überblickstopographie einer vollständig In-terminierten Si(103)(1 × 1)-Oberfläche. Die In-Deposition erfolgte bei 480 °C. Die Terrassen sind (1 × 1)-rekonstruiert und überwiegend durch Einzelstufen voneinander getrennt ($U = -1,2\ V,\ I = 1,4\ nA$).

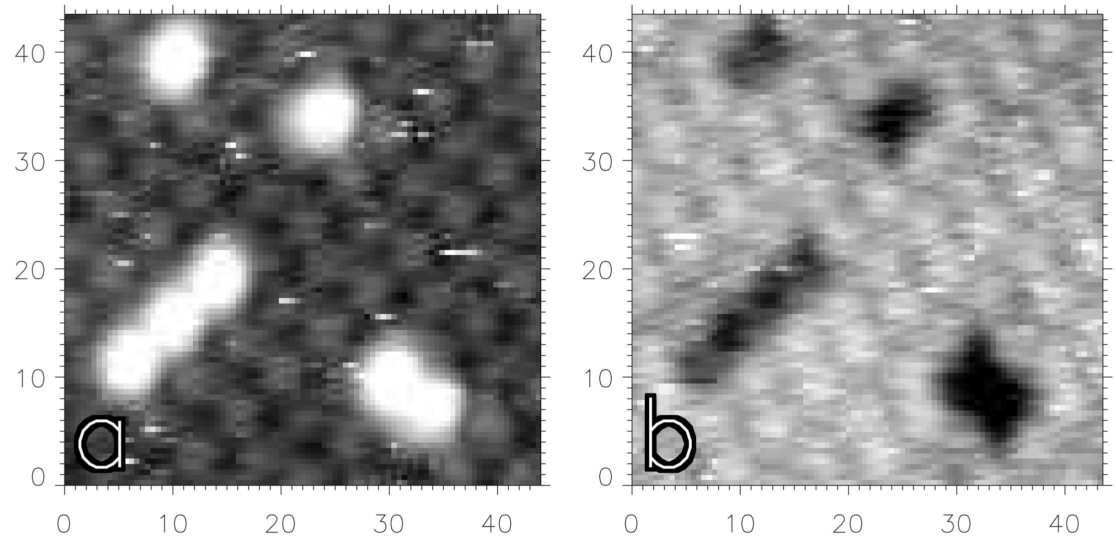

Abbildung 10.24: Hochaufgelöste STM-Topographien der Si(103)(1 × 1)-In Rekonstruktion mit charakteristischen Defekten. Die Bilder zeigen den gleichen Ausschnitt der Oberfläche bei Abbildung besetzter Zustände (a) und unbesetzter Zustände (b) ($a:\ U = -1,4\ V,\ b:\ U = +1,4\ V,\ I = 1,1\ nA$).

diskutiert.

Für alle Präparationen beobachtet und offenbar charakteristisch für die Si(103)(1×1)-In Rekonstruktion sind Punktdefekte auf den Terrassen und an den Stufenkanten. Die Defekte erscheinen hell bei negativer Tunnelspannung und dunkel bei hoher positiver Tunnelspannung. Sie gleichen damit einem der Defekttypen, die nach partieller In-Desorption auf der Ge(103)-Oberfläche beobachtet werden. In Analogie zur Ge(103)-Oberfläche nehmen wir an, daß die Defekte durch In-Fehlstellen gebildet werden. Ob die Fehlstellen unbesetzt oder durch substitutionelle Si-Adatome aufgefüllt sind, bleibt unklar. Beide Interpretationen eröffnen die Möglichkeit, eine kompressive Verspannung in der In-terminierten Substratoberfläche zu kompensieren.

10.9 Sb/Si(103) und Si(103)(1×1)-Bi

Für Adsorptionsexperimente auf der Si(103)-Oberfläche mit Elementen der V. Hauptgruppe wurden zunächst Sb und später Bi ausgewählt. Analog zur Präparation der Sb-terminierten Ge(103)-Oberfläche wurden auf die Si(103)-Oberfläche 5 ML_{103} Sb bei RT aufgedampft. Das LEED-Bild zeigte im Anschluß an die Deposition ein stark 3D-artiges (1×1)-Muster mit hohem Hintergrund. Anschließend wurde unter RHEED-Kontrolle bei steigenden Temperaturen von 250–640 °C getempert. Ähnlich dem Beugungsbild der Ge(103)“(1×1)”-Hochtemperaturphase (Abb. 10.4) war stets nur eine Hälfte der Si(103)(1×1)Reflexe auf dem 0. Lauering zu beobachten. Es wurde kein Anzeichen von Facettierung oder einer 2D-Überstruktur bemerkt. LEED-Bilder zeigten nach dem Tempern bis 400 °C nur über schmale Energiebereiche sichtbare Si(103)(1×1)-Reflexe und nach dem Tempern bis 640 °C das typische Beugungsmuster der facettierten reinen Si(103)-Oberfläche (siehe Abb. 10.21). Es ist uns nicht gelungen, durch Adsorption von Sb bei RT und Nachtempern eine atomar ebene oder facettierte Si(103)-Oberfläche zu präparieren. Experimente zur Sb-Deposition bei erhöhter Substrattemperatur, bei der eine hohe kinetische Barriere für die Ausbildung einer rekonstruierten Sb/Si(103)-Struktur unter Erhaltung der Adsorbat-Bedeckung überwunden werden könnte, stehen noch aus.

Um eine möglichst hohe Temperatur während der Adsorption des Bi auf der Si(103)-Oberfläche bereitzustellen, wurde die Probe im Bi-Fluß langsam von 600 °C auf RT abgekühlt und anschließend bei steigenden Temperaturen bis 520 °C getempert, bei welcher das (1×1) RHEED-Bild ein Maximum an Schärfe und Homogenität gegen eine Verkippung der Probe zum Strahl aufwies. LEED-Bilder der abgekühlten Probe zeigen die gleichen Eigenschaften wie die Beugungsbilder der Ge(103)(1×1)-In Oberfläche in Abb. 10.11. In den STM-Bilder der Bi-bedeckten Oberfläche wie Abb. 10.25 sind ebenfalls kaum wesentliche Unterschiede zur In-terminierten Si(103)- und Ge(103)-Oberfläche zu erkennen. Die Oberfläche ist eben und zeigt breite (1×1)-rekonstruierte Terrassen. Es werden für beide Tunnelspannungspolaritäten zwei gleichartige Erhöhungen pro (1×1)-Elementarzelle abgebildet, die zueinander wie die Atome einer idealen (103)-Lage angeordnet sind. Das Modell der Ge(103)(1×1)-In Rekonstruktion in Abb. 10.15 wird deshalb unverändert auf die Si(103)(1×1)-Bi Rekonstruktion übertragen.

Im Unterschied zu den Beobachtungen auf den In-terminierten Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen ist die Korrugation der (1×1)-Struktur auf der Bi-terminierten Si(103)-Oberfläche in Abbildungen der besetzten Zustände und nicht der unbesetzten Zustände maximal (bis 0,6 Å). Diese Differenz spiegelt die unterschiedlichen elektronischen Strukturen der (1×1)-Rekonstruktionen der III/IV(103) und V/IV(103) Systeme wieder, wie sie nach dem einfachen Dangling Bond Bild erwartet werden. Die Dangling Bonds der *Substratatome* sind für beide Systeme vollständig durch Bindungen an Adsorbatatome abgesättigt. Die Dangling Bonds der

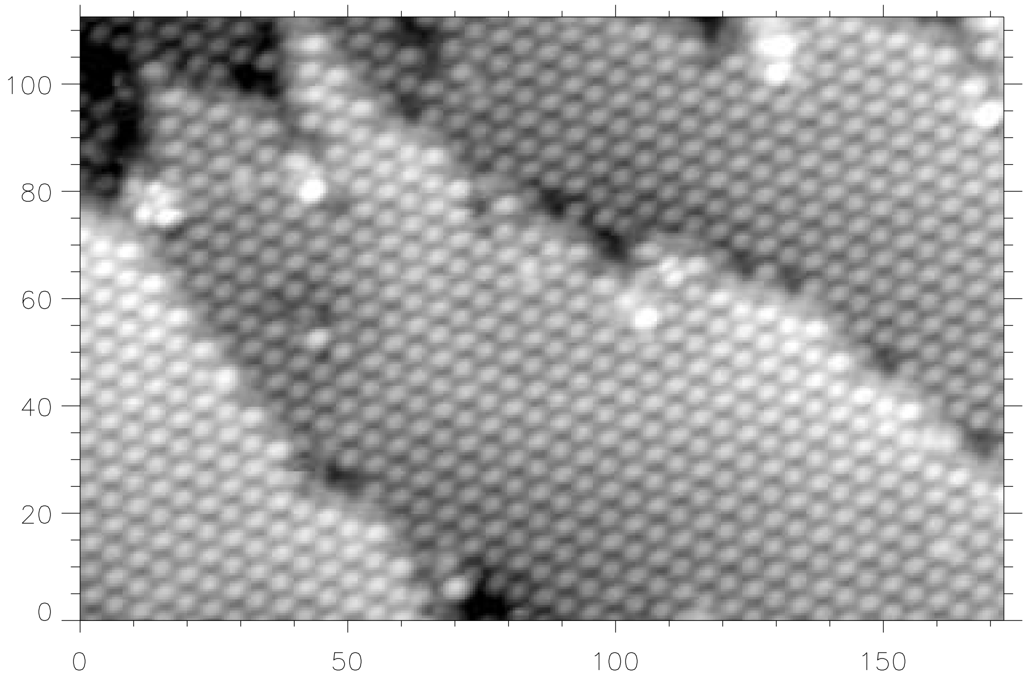

Abbildung 10.25: STM-Topographie der Si(103)(1×1)-Bi Rekonstruktion. Die Probe wurde im Bi-Fluß von 600 °C auf RT abgekühlt und anschließend kurz bei steigender Temperatur bis 520 °C getempert ($U = -2,0\ V,\ I = 1,6\ nA$).

Gruppe-III *Adsorbatatome* werden jedoch von leeren p_z-artigen Orbitalen und die Dangling Bonds der Gruppe-V Adsorbatatome durch vollständig besetzte Lone Pair Orbitale gebildet.

10.10 Vergleichende Diskussion: (III,V)/IV(103) Adsorbatsysteme

Im Verlauf dieses Kapitels wurde dargestellt, daß die In-bedeckten Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen wie auch die Bi-bedeckten Si(103)-Oberflächen stabil und (1×1)-rekonstruiert sind. Nach Sb-Adsorption bleibt die Si(103)-Oberfläche dagegen rauh und die Ge(103)-Oberfläche zerfällt in (113)- und $(1\bar{1}3)$-Facetten. Kürzlich wurde in unserer Arbeitsgruppe die Adsorption von Al und Ga auf Si(103) untersucht [397]. Beide Adsorbatsysteme verhalten sich bis auf das Fehlen der charakteristischen Defekte wie die In-bedeckte Si(103)-Oberfläche. Zeitgleich studierten Ji et al. alle sechs Adsorbatsysteme der Gruppe-III Elemente Al, Ga, In auf den (103)-Oberflächen von Si und Ge mit LEED [341, 201]. In Übereinstimmung mit unseren Ergebnissen finden sie, daß die Si(103)-Oberfläche durch alle drei Gruppe-III Elemente stabilisiert werden kann und (1×1)-rekonstruiert. Für das System In/Si(103) werden unterhalb der Sättigungsbedeckung der (1×1)-Rekonstruktion zusätzlich Reflexe einer $c(2 \times 2)$-Struktur beobachtet. Dagegen ist die Ge(103)-Oberfläche nur nach In-Adsorption (1×1)-rekonstruiert und zerfällt nach Adsorption von Al und Ga in (105)- bzw. (104)-Facetten. Die Beobachtungen sind in Tab. 10.2 in einer Übersicht zusammengefaßt.

Es fällt auf, daß alle adsorbatbedeckten IV(103)-Oberflächen, sofern sie stabil sind, die gleiche einfache Rekonstruktion aufweisen. Es besteht deshalb die Hoffnung, durch einfache

	Si(103)	Ge(103)
rein	rauh + F(105)(2×1)	(4×1)
Al	(1×1) [201, 397]	F(105) [201]
Ga	(1×1) [201, 397]	F(104)c(2×2) [201]
In	(1×1) + Defekte, (1×1) + c(2×2) [341]	(1×1)
Sb	rauh	F((113),$(1\bar{1}\bar{3})$)(2×1)
Bi	(1×1)	

Tabelle 10.2: Übersicht über die Rekonstruktionen und Facettierungen (F) von reinen und adsorbatbedeckten IV(103)-Oberflächen.

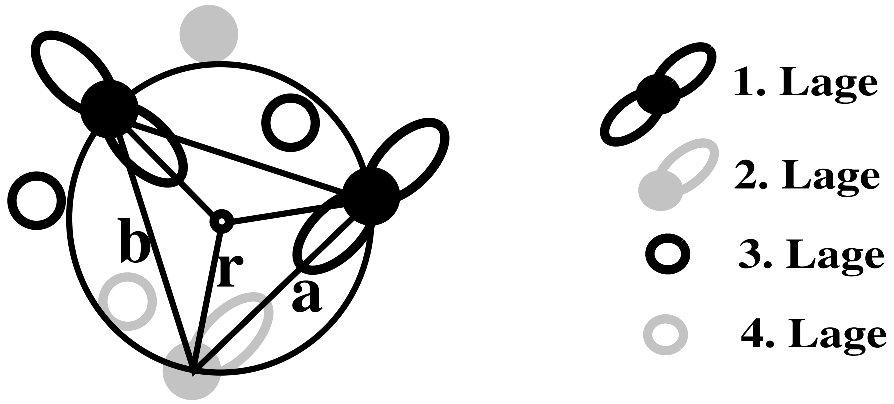

Abbildung 10.26: Schematische Darstellung eines dreifach-koordinierten Adsorptionsplatzes auf einer unrelaxierten IV(103)-Oberfläche mit äquidistanten Abständen zu den bindenden Atomen.

geometrische Überlegungen eine Systematik in der Aufstellung zu erkennen und die Instabilität der übrigen Systeme qualitativ zu ergründen.

Ein dreifach-koordinierter Adsorptionsplatz auf einer IV(103)-Oberfläche ist in Abb. 10.26 dargestellt. Auf der idealen unrelaxierte Oberfläche bilden die bindenen Atome ein gleichschenkliges Dreieck. Die Länge der kürzeren Seite a beträgt $a_0/\sqrt{2}$ und die Länge der beiden längeren Seiten b beträgt $\sqrt{11/16}\ a_0$. Daraus ergibt sich der Radius eines Kreises durch die Position der bindenden Atome zu $r = 11/24\ a_0$ (2,49 Å (Si), bzw. 2,59 Å (Ge)). Dieser Radius r entspricht den Bindungslängen eines in der Ebene der drei Substratatome positionierten Adsorbatatoms unter Vernachlässigung von Relaxationen des Substrats und ist mit der Summe der kovalenten Radien der Adsorbat- und Substratatome zu vergleichen (siehe Tab. 10.3).

Überschreitet die Summe der kovalenten Radien den Wert des Radius r, wird das Adsorbatatom aus der Oberfläche heraus relaxieren. Diese Relaxation kommt den Substratatomen mit bevorzugt tetraedrischen Bindungswinkeln und den Gruppe-V Atomen mit bevorzugt orthogonalen Bindungswinkeln entgegen, nicht jedoch den Gruppe-III Atomen, die planare Geometrie mit 120° Winkeln anstreben. Für die instabilen Systeme Al/Ge(103) und Ga/Ge(103) unterschreitet die Summe der kovalenten Radien den Wert des Radius r um 4,2% und die Bindung wird potentiell geschwächt. Eine Relaxation der Substratatome in Richtung der Ad-

	Al	Ga	In	Sb	Bi	Si	Ge
Si	2,43 Å	2,43 Å	2,61 Å	2,53 Å	2,63 Å	2,34 Å	2,39 Å
Ge	2,48 Å	2,48 Å	2,66 Å	2,58 Å	2,68 Å	2,39 Å	2,44 Å

Tabelle 10.3: Summe der kovalenten Radien. Die kovalenten Radien sind den Tabellen 7.1 und 8.1 entnommen

sorbatatome könnte die angestrebte Bindungslänge ermöglichen. Die Relaxation wird aber dadurch erschwert, daß zwei von drei Substratatomen der Oberfläche an jeweils zwei Adsorbatatome in nahezu entgegengesetzten Richtungen binden. Für Substrat-Adatome ist der Bindungsplatz ebenfalls zu weit. Eine Substitution jedes zweiten Adsorbat-Adatoms durch ein Substratatom, wie von Ji und anderen vorgeschlagen [201], würde die Verspannungen der Oberflächen der Systeme (Al,Ga)/IV(103) für sp^2-hybridisierte Substratatome und mehr noch für sp^3-hybridisierte Substratatome weiter erhöhen. Für die Systeme In/Si(103) und In/Ge(103), für die einzelne Fehlstellen in der In-Lage beobachtet werden, erscheint wegen des großen kovalenten Radius von In eine Kompensation der Verspannungen der Oberfläche durch den Einbau von Substratatomen denkbar.

Die kovalenten Radien der Gruppe-V Elemente Sb und Bi reichen aus, um eine optimale Bindungslänge auf dem (103)-Substrat verwirklichen zu können. Betrachtet man dagegen die Bindungswinkel der Adsorbatatome, die sich unter den Nebenbedingungen optimaler Bindungslängen und unrelaxierten Substrats einstellen, fällt auf, daß die Winkel für das stabile System Bi/Si(103) mit 93,8° und 117,6° deutlich näher an den angestrebten 90° liegen, als die Winkel der instabilen Systeme Sb/Ge(103) mit 101,6° und 130,1° sowie Sb/Si(103) mit 98,7° und 125,5°.

Die adsorbat-induzierten (1×1)-Rekonstruktionen der IV(103)-Oberfläche gleichen in mehrfacher Hinsicht den adsorbat-induzierten $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$R30°-Monomer-Rekonstruktionen auf den IV(111)-Oberflächen [146]. Für beide Rekonstruktionen gilt, daß einzelne Adsorbatatome auf dreifach-koordinierten Adsorptionsplätzen des ideal terminierten Substrats alle Dangling Bonds des Substrats absättigen. Die $\sqrt{3}$-Monomerrekonstruktionen sind ebenfalls für eine Vielzahl von Adsorbatsystemen anzutreffen ((Al,Ga,In,Sn,Pb,Sb,Bi)/Si(111) und (Sn,Pb,Bi)/Ge(111)). Sie sind neben der (1×1)-Rekonstruktionen auf den IV(103) Oberflächen nach unserer Kenntnis die einzigen Rekonstruktionen, die sowohl für Gruppe-III als auch Gruppe-V Adsorbate beobachtet werden. Obwohl sich die Geometrie der Substratoberflächen grundlegend unterscheidet (jedes Substratatom der idealen IV(111)-Oberfläche trägt nur ein Dangling Bond), sind die Abmessungen der Adsorptionsplätze vergleichbar. Die drei bindenden Substratatome der (111)-Oberfläche bilden ein gleichseitiges Dreieck mit einer Kantenlänge von $a_0/\sqrt{2}$. Der Radius r eines Kreises durch die bindenden Substratatome beträgt 2,22 Å für Si bzw. 2,31 Å für Ge und ist damit 11% kleiner als auf der IV(103)-Oberfläche.

Die Aussagekraft dieser einfachen geometrischen Überlegungen ist naturgemäß sehr beschränkt. Obwohl nach obiger Argumentation die Bindungslängen für Al- und Ga- induzierte $\sqrt{3}$-Rekonstruktionen auf der Ge(111)-Oberfläche günstig sind, werden keine Gruppe-III induzierten $\sqrt{3}$-Rekonstruktionen auf Ge(111) beobachtet. Stattdessen werden im entsprechenden Bedeckungsbereich Ga- und In- Atome substitutionell in die oberste Ge(111)-Doppellage eingebaut [160, 161]. Für ein tieferes Verständnis der Stabilität der (1×1)-rekonstruierten (III,V)/IV(103)-Oberflächen (wie der $\sqrt{3}$-Rekonstruktionen auf (III-V)/IV(111)-Oberflächen) sind deshalb Totalenergierechnungen notwendig. Keating-Energie-Rechnungen an beiden Klassen von Adsorbatsystemen sind in Vorbereitung.

Unsere Experimente haben gezeigt, daß eine ebene Si(103)-Oberfläche durch die Elemente In und Bi stabilisiert werden kann. Von beiden Elementen ist bekannt, daß sie auf Si(001)- und Si(111)-Oberflächen als Surfactants für das Lagen-Wachstum von Ge wirken. Die Epitaxie von Ge auf Si(103)-Oberflächen mit und ohne den Einsatz von Surfactants wird Gegenstand der nächsten Untersuchungen sein. Es ist jedoch schwierig, auf der Grundlage unserer Ergebnisse Voraussagen über das Wachstum von III-V-Halbleitern auf Si(103)- und Ge(103)-Oberflächen zu treffen, da die Struktur der idealen Grenzschicht zwischen dem Si(103)-Substrat und dem III-V-Halbleiter für pseudomorphes Wachstum heteropolar ist und einen abweichenden Adsorptionsplatz vorsieht. Bezüglich der Sb-induzierten Nanostrukturierung der Ge(103)-Oberfläche lassen unsere Experimente einen großen Spielraum zur Verbesserung der Qualität der Strukturen durch Optimierung der Präparationsbedingungen. Da die gleichmäßige Facettenbreite für das System Sb/Ge(103) einen Gleichgewichtszustand darstellt und durch Tempern ohne Sb-Verlust nicht verloren geht, besteht die Aussicht, eine regelmäßigere Anordnung und eine perfektere Gestalt der Strukturen durch Sb-Deposition auf dem heißen Substrat (möglichst unter RHEED-Beobachtung) zu erzielen. Die Sb-induzierten Nanostrukturen besitzen gegenüber den In-induzierten Nanostrukturen in Hinblick auf ihre technologische Relevanz drei wesentliche Vorteile: Sie weisen nur eine Richtungsdomäne auf, sie besitzen eine höhere thermische Stabilität und sie sind (vermutlich) chemisch inert. Zumindest nach dem Aufbringen einer schützenden und leicht zu desorbierenden Sb-Schicht (*Sb cap*) sollten die Sb-terminierten Nanostrukturen auch unter atmosphärischen Bedingungen stabil sein.