Kapitel 9

Facettierte Halbleiteroberflächen

Die Ursachen von Facettierungen auf Halbleiteroberflächen und ihre Erscheinungsformen sind vielfältig. Ein kurzer Abriß über die Stabilität von Oberflächen gegen Facettierung und ihre Ursachen wurde bereits in Abschn. 2.3 gegeben. Im folgenden wird die Facettierung zweier Adsorbatsysteme behandelt, deren facettierte Oberflächen erstaunlich perfekte, hochsymmetrische Körper umschließen, welche wegen ihrer charakteristischen Form beide *hut-cluster* genannt werden können. Die Natur der Cluster und die treibende Kraft für ihre Ausbildung ist in beiden Systeme jedoch völlig verschieden. Während die Bildung der Hut-Cluster des Adsorbatsystems Ge/Si(001) in die Gruppe der Facettierungen verspannter *Adsorbat*schichten in gitterfehlangepaßten Systemen einzuordnen ist, werden die Hut-Cluster des Adsorbatsystems In/Ge(001) durch eine adsorbat-induzierte Facettierung der *Substrat*oberfläche hervorgerufen.

An beiden Systemen wurden in unserer Gruppe STM-, LEED- und SXRD-Messungen vorgenommen. Die Ergebnisse der SXRD-Untersuchungen in Kombination mit STM-Messungen sind für beide Systeme bereits veröffentlicht [292, 293]. Für die Hut-Cluster-Oberflächen des Systems Ge/Si(001) liegen ausführliche Untersuchungen mit STM und LEED vor, so daß unsere Messungen primär der Charakterisierung der Probenoberfläche für die anschließenden SXRD-Messungen dienten. Den Hauptteil dieses Kapitels wird die Darstellung der In-induzierten Facettierung der Ge(001)-Oberfläche ausmachen. Als Vorbereitung für eine Gegenüberstellung der Beobachtungen werden zunächst einige wichtige Eigenschaften der Ge/Si(001)-Hut-Cluster besprochen und anhand eigener Messungen illustriert.

9.1 Facettierung verspannter Adsorbatschichten: Ge/Si(001)

9.1.1 Einleitung

Pseudomorph verspannte Schichtsysteme sind von größtem technologischem Interesse. Die Eigenschaft "pseudomorph" stellt eine schärfere Bedingung für das Schichtsystem dar als die Eigenschaft epitaktisch. Während *epitaktisch* bedeutet, daß die Struktur der Adsorbatschicht in seiner *Orientierung* mit der Struktur des Substrates übereinstimmt oder zumindest in einer Beziehung steht, heißt *pseudomorph*, daß die *Gitterkonstante* der Adsorbatlage lateral, d. h. in der Ebene der Grenzfläche, mit der Gitterkonstante des Substrates übereinstimmt. Verspannungen in der Adsorbatlage, die durch die Fehlanpassung der Volumenwerte des Substrat- und Adsorbatgitters hervorgerufen werden, werden in pseudomorphen Systemen vollständig elastisch, d. h. ohne plastische Relaxationen über Kristalldefekte wie Fehlstellen, ausgeglichen [294]. Pseudomorphes Wachstum ermöglicht die Stabilisierung kristalliner Phasen, die in der Natur ausgeschlossen sind, wie etwa Phasen neuer Kristallstruktur oder Phasen mit sehr hoher Verspannung, die neue und nützliche Eigenschaften aufweisen. Pseudomorphe Halbleitersysteme besitzen ein großes Potential in Bezug auf neue (opto-) elektronische Eigenschaften, da die Gitterfehlanpassung durch die Wahl der Elementkombination und ihr Mischungsverhältnis über weite Bereiche eingestellt und dadurch die elektronische Bandstruktur gezielt modifiziert werden kann (*band structure engineering*). Hervorragenden Laser-Eigenschaften verspannter Halbleitersysteme wurden zunächst für 2-dimensionale Quantentröge (*quantum wells*) und später auch für 1-dimensionale Quantendrähte (*quantum wires*) und 0-dimensionale Quantenpunkten (*quantum dots*) gezeigt [294]. Wichtige Materialkombinationen pseudomorpher Systeme sind zuvorderst Kombinationen von III-V-Halbleitersysteme, aber auch Si_xGe_{1-x}/Si(001) bzw. Ge/Si(001). Im Fall der Ge/Si-Übergitter ist es möglich, die elektronische Bandstruktur der Elemente Si und Ge, die indirekte Bandlücken besitzen, so zu verändern, daß sie eine quasidirekte Form annehmen und sich für optoelektronische Anwendungen eignen [295].

Gleichförmige verspannte epitaktische Lagen sind von sich aus instabil. Van der Merwe untersuchte das Verhalten von dünnen Filmen unter der Bedingung gleichmäßiger Verspannung und zeigte, daß jenseits einer verspannungsabhängigen kritischen Dicke des Films die Ausbildung eines Anordnung von Versetzungen (*misfit dislocations*) zum Relaxation des Films energetisch begünstigt ist [296]. Später wurde erkannt, daß gleichförmige verspannte Schichten metastabil gegen die Bildung von Versetzungen, aber instabil gegen Änderungen der Form der pseudomorphen Schichten sind [297]. Es ist demnach zu erwarten, daß gitterfehlangepaßte Filme bereits bei geringen Bedeckungen in Form von Inseln wachsen, deren Struktur an der Grenzfläche vollständig kohärent zum Substrat ist und deren Verspannungen an den Begrenzungen der Inseln abgebaut wird. Ein Zusammenhang zwischen Inselwachstum und Verspannungsausgleich wurde von Eaglesham und Cerullo für das Wachstum von Ge auf Si(001) [298] und von Snyder et al. für $In_xGa_{1-x}As$ auf GaAs(001) [299] beobachtet. Für einige Systeme ist es gelungen, die Inseln mit einheitlicher Größe im Nanometerbereich wachsen zu lassen, so daß das Wachstum unter Gitterfehlanpassung einen vielversprechenden Mechanismus für die selbstorganisierte Herstellung von Quantenpunkten hoher Qualität darstellt [300, 301, 302].

Für einige Systeme ist die Gestalt der Inseln vollständig regelmäßig. Nötzel et al. berichten, daß sich beim Wachstum von GaAs/AlAs-Multischichten auf GaAs(211)B- und GaAs-(111)A-Oberflächen asymmetrische bzw. symmetrische Pyramiden bilden [303]. Tersoff und Tromp beobachten Ag-Inseln auf Si(001) mit der Form langgestreckter Prismen, von denen sie annehmen, daß sie frei von Versetzungen sind [304]. Die Seitenflächen der Ag-Inseln werden von {001}- und {111}-Flächen gebildet [305, 306]. Die wohl bekanntesten und meist untersuchten Vertreter kohärenter und facettierter heteroepitaktischer Inseln sind die sogenannten *hut-cluster*, die beim epitaktischen Wachstum von Ge auf Si(001) in Bedeckungsbereich zwischen 3 und 8 ML beobachtet werden [312, 313, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 320, 321, 322, 323, 324]. Auf Si(111)- [307, 308] und Si(113)- [309] Oberflächen wächst Ge ebenfalls in Form facettierter Inseln ({113}- bzw. {519}-Facetten). Ihre Gestalt ist jedoch bei weitem nicht so regelmäßig, und ihre Kohärenz zum Substrat geht mit zunehmender Bedeckung und Größe der Inseln verloren [308].

9.1.2 Überblick: Wachstum von Ge Hut-Clustern auf Si(001)

Das epitaktische Wachstum von Ge auf Si(001) wurde in den letzten Jahren ausführlich studiert. Unterhalb 1 ML substituieren die Ge-Atome die Si-Atome auf den Terrassen, um die Verspannungen der Oberfläche durch die 4,2 % Gitterfehlanpassung zu minimieren. Die verdrängten Si-Atome diffundieren an die Stufenkanten und simulieren so ein einfaches *step flow*-Wachstum [311]. Jenseits einer Monolage ist die Oberfläche wegen der geringeren Oberflächenspannung von Ge im Vergleich zu Si vollständig Ge-terminiert. Die Dimerreihenstruktur wird von *missing dimer rows* durchzogen, die ebenfalls einen Mechanismus zur Reduzierung der Verspannungen darstellen und der Ge-Lage Raum zur Expansion lassen. Die Struktur wird gewöhnlich als $(N \times 8)$- Rekonstruktion bezeichnet, wobei N den mittleren Abstand der fehlenden Dimere angibt und zwischen 8 und 15 beträgt [312]. Im Bedeckungsbereich 3–4 ML treten zu den Reihen fehlender Dimere tiefere Gräben hinzu, und die Terrassenstruktur wechselt von gürtelartig zu fleckenartig [316].

Für Ge-Bedeckungen von mehr als 3–4 ML wird 3D-Inselwachstum beobachtet. Der Wachstumsmechanismus und die Relaxation der 3D-Inseln ist stark abhängig von der Substrattemperatur und der Bedeckung. Im Temperaturbereich zwischen 350–500 °C wächst das Ge zunächst als Hut-Cluster. Hut-Cluster sind wohldefinierte, dreidimensionale Ge-Nanokristallite mit länglicher Walmdachform. Sie sind streng entlang der zwei orthogonalen $\langle 010 \rangle$-Richtungen des Substrats ausgerichtet, und ihre Oberflächen bestehen aus rekonstruierten $\{105\}$-Facetten. Ein wesentliches Merkmal der Hutcluster ist neben ihrer markanten Gestalt die vollständige Freiheit von Versetzungen [319], also die vollständige Kohärenz zum Substrat.

Im Phasendiagramm des Wachstums von Ge auf Si(001) nimmt die Bildung von Hut-Clustern nur einen begrenzten Bereich ein [316]. Weitere Deposition von Ge über die Sättigungsbedeckung der Hut-Cluster von 8 ML hinaus wie auch Deposition oder Tempern der Probe bei Temperaturen oberhalb 600 °C führt zur Ausbildung von Makroclustern [319]. Makrocluster zeichnen sich durch $\{113\}$-facettierte Seitenflächen und eine (001)-Stirnfläche aus. Insbesondere größere Makrocluster sind zum Substrat nicht kohärent und weisen Versetzungen in ihrer Kristallstruktur auf. Darüber hinaus wurden weitere Arten relaxierter Ge-Cluster für das Wachstum bei niedrigeren Temperaturen beobachtet [319].

9.1.3 Probenpräparation

Für die Präparation der Hut-Cluster verwendeten wir poliertes Si(001)-Wafermaterial mit einer Fehlorientierung gegen die (001)-Richtung unter 0,1°. Die Si(001)-Proben wurden wie in Abschn. 5.5 beschrieben sorgfältig bei 600 °C ausgegast und durch Flash-Evaporation bei 1100 °C gereinigt. Das Ge wurde aus einer Verdampferzelle mit PBN-Tiegel aufgebracht. Die Aufdampfrate wurde mit Hilfe eines Schwingquarzes und der in den STM-Bildern mit Hut-Clustern bedeckten Oberfläche bestimmt und lag bei einer Ofentemperatur von ca. 1200 °C bei $1,2 \times 10^{-2}$ ML/s. Für das Wachstum der Hut-Cluster wurden verschiedene Substrattemperaturen im Temperaturbereich 300–500 °C getestet. Für die SXRD-Experimente an den Hut-Clustern wurde eine maximale Größe der einzelnen Hut-Cluster bei maximaler Gesamtfläche und scharfer Größenverteilung der Hut-Cluster angestrebt. Darüberhinaus sollte ein Zusammenwachsens von Hut-Clustern und das Auftreten von Makrocluster vermieden werden und die Eigenschaften der Cluster über die gesamte Probenoberfläche möglichst homogen sein.

Die besten Ergebnisse wurden bei einer Substrattemperatur von 430 °C erzielt und sind empfindlich abhängig von der Ge-Bedeckung. Es stellte sich heraus, daß eine saubere und ebene Si(001)(2×1)-Oberfläche nach der Deposition von Ge weder durch Flash-Evaporation noch durch Sputter-Anneal-Zyklen wiederhergestellt werden konnte und Ge-bedeckte Proben für Neupräparationen unbrauchbar sind. Um den Durchsatz an Proben gering zu halten und eine zu hohe Ge-Bedeckung zu vermeiden, wurde das Ge in mehreren Schritten mit abnehmender Schrittweite aufgedampft. Die Proben wurde nach jedem Schritt mit LEED auf die Existenz, Intensität und Schärfe der Reflexe der {105} Facetten hin geprüft und bei zufriedenstellendem Ergebnis mit STM untersucht.

9.1.4 STM-Messungen

In Abbildung 9.1 sind STM-Bilder von drei verschiedenen Präparationen dargestellt. Das Erscheinungsbild der Hut-Cluster ist mit Ausnahme der Größenverteilung für alle Präparationen gleich. Die Hut-Cluster haben die Form länglichen Prismen mit schrägen Endflächen. Das Verhältnis der Länge zur Breite der Cluster variiert zwischen 1:5 und 1:1, für welches das Prisma zu einer vierseitigen Pyramide degeneriert. Die Cluster sind streng in $\langle 010 \rangle$-Richtungen zum Substrat ausgerichtet und verlaufen somit relativ zu den Dimerreihen unter einem Winkel von 45°. Wie Abb. 9.1 (d) exemplarisch an einem einzelnen Cluster verdeutlicht, sind die Flächen der Hut-Cluster bemerkenswert eben und tragen auf allen vier Seiten die gleiche Struktur. Durch sorgfältige Messung der Neigung der Hut-Cluster-Flächen zu der sie umgebenden (001)-Oberfläche in den STM-Bildern [313] und der Analyse von LEED-Bildern [317] wurde gezeigt, daß alle vier Seitenflächen der Hut-Cluster von {105}-Flächen gebildet werden. Die {105}-Flächen gehen aus einer (001)-Fläche durch Verkippung um 11,3° um eine Achse in $\langle 010 \rangle$-Richtungen hervor. Nach dem Modell von Mo et al. bestehen die {105}-Facetten aus (001)-Terrassen der Breite einer Volumengitterkonstanten ($\sqrt{2}a$) und monoatomaren Stufen entlang $\langle 010 \rangle$-Richtungen, welche mit einer lateralen Verschiebung um $\frac{1}{4}a$ verbunden sind. Zur Verminderung der Anzahl der Dangling Bonds sind benachbarte Atome auf den Terrassen dimerisiert. Die Dimerisierung unterstützt vermutlich auch den Abbau der Verspannungen innerhalb des Clusters [312] und erhöht seine Stabilität [320]. Die Größe der Einheitszelle beträgt durch die Dimerisierung $(2a \times 2,5a)$ in Einheiten der (001)-Oberfläche und (2×1) in Einheiten der idealen (105)-Oberfläche. Die Anordnung der Erhöhungen auf den Facettenflächen in Abb. 9.1 (d) werden durch das Modell gut wiedergegeben, sofern jeder Erhöhung zwei Dimerpaare (vier Atome) zugeordnet werden.

Die Hut-Cluster stehen im Regelfall einzeln und werden von der $(N \times 8)$-Rekonstruktion der pseudomorphen 2D-Ge-Lage umgeben, deren Eigenschaften durch das Auftreten der Hut-Cluster nach den STM-Bildern nicht geändert erscheinen. Gelegentlich grenzen die Hut-Cluster unmittelbar aneinander oder sind — etwa in 9.1 (b) — miteinander verwachsen. Eine Korrelation zwischen den Abständen der Hut-Cluster ist nicht zu erkennen.

Über die Details der Wachstumsprozesse der Hut-Cluster ist relativ wenig veröffentlicht. Mo berichtet, daß die Dichte der Hut-Cluster mit der Ge-Bedeckung schnell steigt, während ihre Größe nur langsam zunimmt [313]. Knall et al. und Tomitori et al. zeigen STM-Bilder von Si(001)-Oberflächen nach Deposition von jeweils 5 ML Ge bei Substrattemperaturen von 350°C bzw. 500°C [312, 316]. In beiden Aufnahmen ist die Oberfläche etwa zur Hälfte mit Hut-Clustern bedeckt und die Breite der Cluster ist mit 150–200 Å sehr einheitlich. Sie gleichen damit der Oberfläche in Abb. 9.1 (c). Die Größe der einzelnen Hut-Cluster und Regelmäßigkeit ihrer Form nimmt nach den Beobachtungen von Tomitori et al. mit der Substrattemperatur zu.

Nach unseren Beobachtungen ist die Größenverteilung der Hut-Cluster nicht allein von der Bedeckung und der Aufdampftemperatur abhängig. Abbildung 9.1 (a) zeigt eine Si(001)-Oberfläche nach der Deposition von $\sim 4,5$ ML Ge bei 400 °C. Neben einigen großen Clustern (A) mit Breiten von 100–150 Å sind viele kleine Cluster (B) mit typischen Breiten von etwa 50 Å zu erkennen. Die Abbildungen 9.1 (b) und 9.1 (c) zeigen zwei verschieden Proben nach der Deposition von jeweils ~ 6 ML Ge bei 430 °C. Die Oberfläche in (c) weist fast ausschließlich große Cluster mit Breiten von 120–200 Å auf, während in (b) neben den

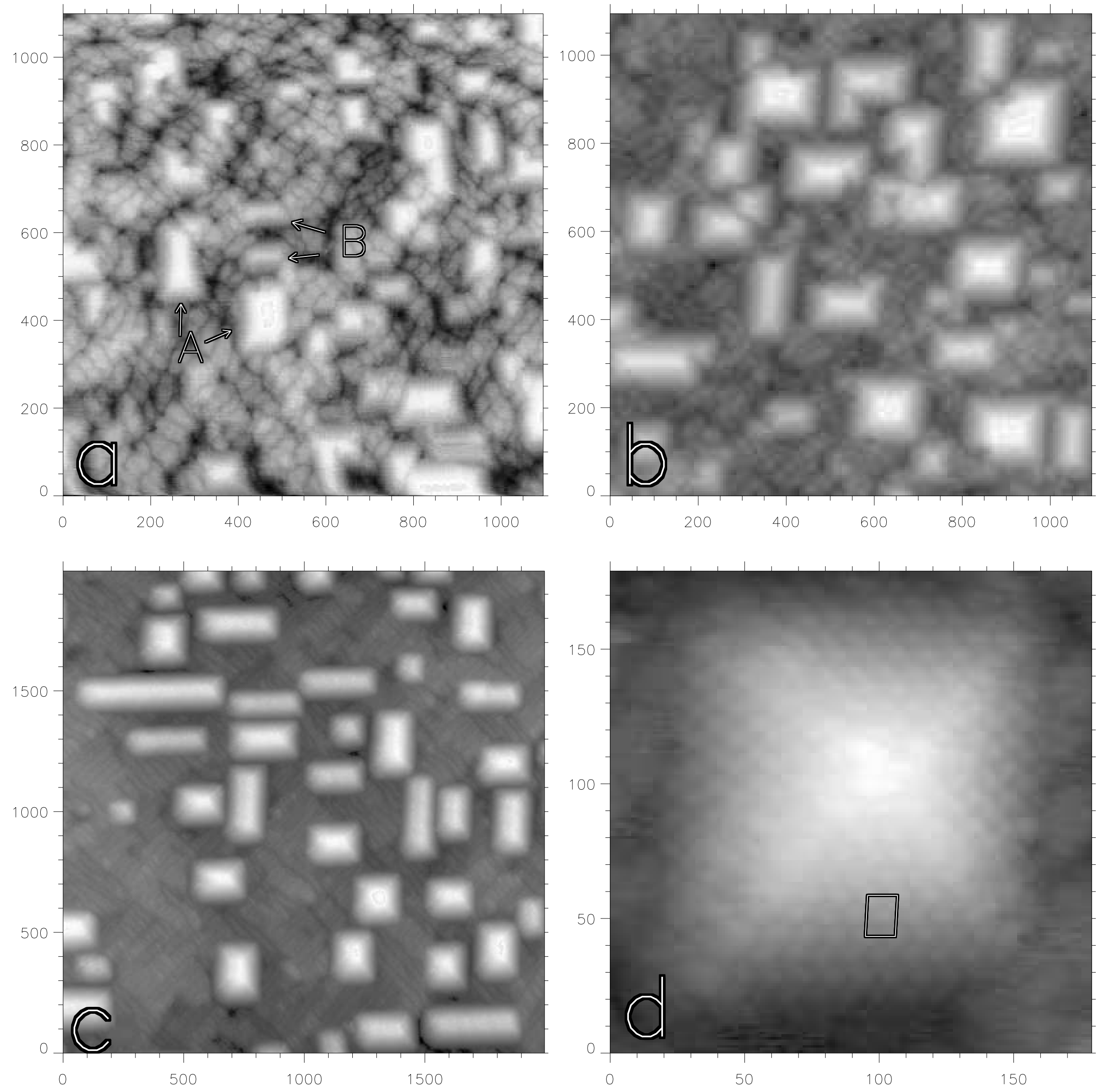

Abbildung 9.1: STM-Bilder facettierter Ge-Schichten auf Si(001)-Oberflächen nach verschiedenen Präparationen. (a) beginnende Facettierung (4.5 ML, 400 °C), (b) inhomogenen Facettierung (6 ML in Schritten von (3+3×1+2×0,5) min, 430 °C), (c) homogene Facettierung (6 ML in Schritten von (5+1+2×0,5) min, 430 °C), (d) einzelner Hut-Cluster mit aufgelöster Struktur der Facetten.

großen Clustern ebenfalls viele kleine Cluster zu erkennen sind. Darüber hinaus sind in (b) bereits einige Cluster koalesziert. Wir nehmen an, daß die breite Größenverteilung in (b) auf die Prozeßführung, nämlich das zyklische Aufdampfen des Germaniums in Verbindung mit Abkühlungs- und Heizphasen, zurückzuführen ist. Kürzlich veröffentlichte STM-Studien von Goldfarb et al.[321, 322] und TEM-Studien von Ross et al. [323] zum Wachstum von Hut-Clustern durch Gasphasen-Molekularstrahlepitaxie unterstreichen die Bedeutung des Massentransports zwischen den Hut-Clustern bzw. zwischen den Hut-Clustern und der $(N \times 8)$-Rekonstruierten Umgebung. Insbesondere zeigten Kamins et al. [324], daß durch eine Unterbrechung des Wachstums eine bimodale Größenverteilung der Ge-Cluster erreicht wird.

9.1.5 LEED-Messungen

Die Hut-Cluster-Oberflächen wurde nach jedem Präparationsschritt mit LEED untersucht, um an Hand der Schärfe und Intensität der Facettenreflexe eine erste Charakterisierung der Größe der Hut-Cluster und ihres Anteils an der Oberfläche vornehmen zu können und die Probe auf Anzeichen für Makrocluster zu prüfen. Hier soll die in Abb. 9.2 dargestellte Folge von LEED-Bildern steigender Elektronenenergie dazu dienen, einige interessante Eigenschaften von Beugungsbildern facettierter Oberflächen zu verdeutlichen und das Verständnis der Beugungsprofile der SXRD-Messungen zu erleichtern.

In allen vier Bildern ist links neben dem Schattenriß der LEED-Kanone der Spekularreflex der (001)-Oberfläche zu erkennen. Die vier äußeren Reflexe, die mit zunehmender Energie das Bild dominieren, sind die (0,1)-, (1,0)-, $(0,\bar{1})$- und $(\bar{1},0)$-Reflexe der Si(001)-Oberfläche. In unmittelbarer Nähe dieser Reflexe sind in (a) und (b) in Verlängerung der Linie zum Spekularreflex der (001)-Ebene und senkrecht dazu schwache Reflexe der $(N \times 2)$ Rekonstruktion zu erkennen. Die überwiegende Zahl der Reflexe hat ihren Ursprung in den $\{105\}$-Facetten. Die Spekularreflexe der Facetten sind bei Variation der Energie ebenfalls ortsfest und in (a) mit Sternen markiert.

Analog zum Beugungsbild einer ebenen Oberfläche bewegen sich die Reflexe der Facetten mit steigender Elektronenenergie auf den Spekularreflex der zugehörigen Facettenfläche zu (und nicht auf den zentralen Spekularreflex der (001)-Ebene). Ist die Kristallstruktur der Facetten vollständig kohärent zum Substrat, kreuzen sich die reziproken Gitterstäbe der verschieden Facettenorientierungen an der Position eines Bragg-Punktes des Substratgitters (siehe Abb. 3.3). Das Kreuzen der Gitterstäbe ruft bei Variation der Elektronenenergie ein charakteristisches Bewegungsmuster im LEED-Bild hervor, welches auch in der Sequenz der Bilder in Abb. 9.2 zu erkennen ist. Mit steigender Energie laufen die Facettenreflexe in der Nähe der ganzzahligen Reflexe der (001)-Ebene (in (a) mit Kreuzen markiert) aufeinander zu und treffen in (d) mit den ganzzahligen Reflexen zusammen. Nachfolgend laufen die Facettenreflexe wieder auseinander (o. Abb.).

9.1.6 SXRD-Messungen

Im Anschluß an die STM-Messungen wurde die in Abb. 9.1.c abgebildete Probe in eine transportable UHV-Kammer mit halbkugelförmigem Beryllium-Fenster transferiert und für die SXRD-Messungen unter Wahrung des UHV zum Diffraktometer am Strahl BW2 im HASYLAB (DESY Hamburg) transportiert.

Die SXRD-Messungen wurden bei konstantem Einfallswinkel $(0,2^\circ)$ des Stahls zur Probenoberfläche durchgeführt. Die Röntgenprofile wurden unter Variation der Koordinaten h oder k und bei konstantem Impulsübertrag l senkrecht zur Oberfläche aufgenommen ($h-$ *scans*). Dabei bedeuten (hkl) die Koordinaten des reziproken Gitters des Si-Volumens mit

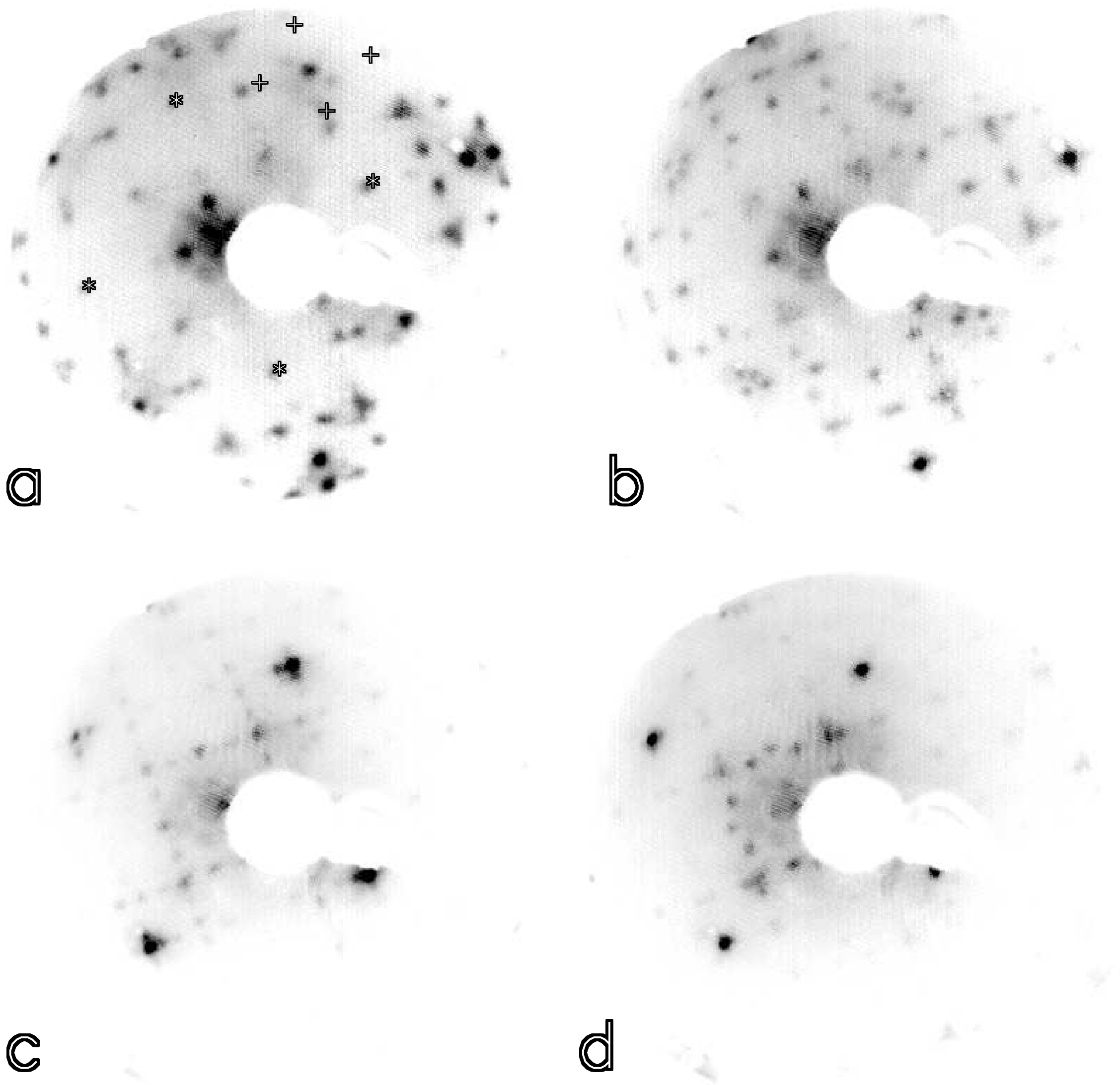

Abbildung 9.2: LEED-Bilder einer {105}-facettierten Si(001)-Oberfläche nach Deposition von ~7 ML Ge bei 430 °C. Mit steigender Elektronenenergie bewegen sich die Facettenreflexe nahe der vier ganzzahligen Reflexe der (001)-Oberfläche aufeinander zu und koinzidieren in (d) mit den ganzzahligen (001)-Reflexen. Diese Facettenreflexe sind in (a) mit "+" markiert. Die Sterne markieren die (0,0)-Reflexe der {105}-Facetten. Die Elektronenenergie beträgt (a) 38 eV, (b) 46 eV, (c) 53 eV und (d) 57 eV.

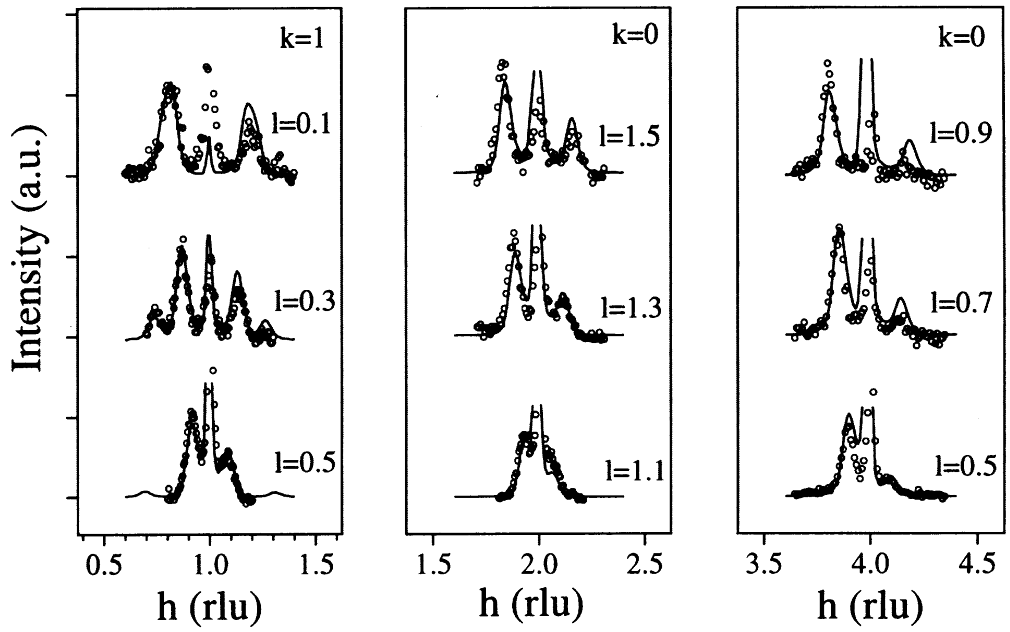

Abbildung 9.3: Gemessene und berechnete Röntgenbeugungsprofile um $(11l)$, $(20l)$ und $(40l)$. Die Kreise bedeuten die gemessenen Datenpunkte und die durchgezogenen Linien die berechneten Profile mit inhomogenem Verspannungsfeld in den Hut-Clustern (aus [292]).

der $\langle 001 \rangle$ -Richtung senkrecht zur Probenoberfläche. Einige repräsentative Beispiele aus dem umfangreichen Datensatz sind in Abb. 9.3 dargestellt. Die Meßpunkte werden durch offene Kreise wiedergegeben. Es werden $h - scans$ durch *crystal truncation rods* (CTR) gezeigt, welche durch die Bragg-Punkte (111), (202) und (400) des Si-Volumens verlaufen. Die CTR rufen die zentralen Maxima in den Röntgenprofilen hervor. Sie werden durch die Gesamtheit aller (001)-Grenzschichten verursacht und beinhalten Beiträge der $(N \times 2)$-rekonstruierten Oberfläche der Ge-Lagen zwischen den Hut-Clustern wie auch der vergrabenen Ge-Si Grenzschichten unterhalb der Hut-Cluster und unterhalb der $(N \times 2)$-rekonstruierten Ge-Lagen.

Neben den zentralen Hauptmaxima der CTR werden in den $h - scans$ Seitenmaxima beobachtet, die bei Variation des Impulsübertrags l zentrisch auf die CTR zulaufen bzw. sich von ihnen entfernen. Ihr Bewegungsmuster bei Variation von l ist analog zur Bewegung der Beugungsreflexe der Facetten in der Sequenz der LEED-Bilder bei Variation der Elektronenenergie (siehe Abb. 9.2). Die Seitenmaxima gehören zu Gitterstäben, die in $\langle 105 \rangle$-Richtungen verlaufen. Sie werden allein durch die Streuung an den Hut-Cluster hervorgerufen. Die Separation der Streubeiträge ermöglicht durch die Analyse der Seitenmaxima und einen Vergleich mit Modellrechnungen wichtige Eigenschaften der Hut-Cluster — insbesondere ihres Verspannungsfeldes — zu bestimmen, ohne Beiträge weiterer Streuer berücksichtigen zu müssen.

Die Analyse der Meßdaten und die Modellrechnungen wurden von J. Steinfort durchgeführt und sind ausführlich in Ref. [292] und [310] beschrieben. Für die Berechnung der gestreuten Intensität wurden Streubeiträge aller Atome der Modellcluster herangezogen. Die Größenverteilung der Hut-Cluster und ihr Anteil an der Gesamtoberfläche, welche zuvor aus den STM-Messungen an derselben Probe bestimmt wurde, wurden für die Modellrechnungen übernommen. Für die Positionen der Clusteratome wurden zwei verschiedene einfache Szenarien getestet, die schematisch in Abb. 9.4 wiedergegeben sind. Im Modell des homogenen Verspannungsfeldes sind die Hut-Cluster vollständig verspannt und die Ge-Atome nehmen

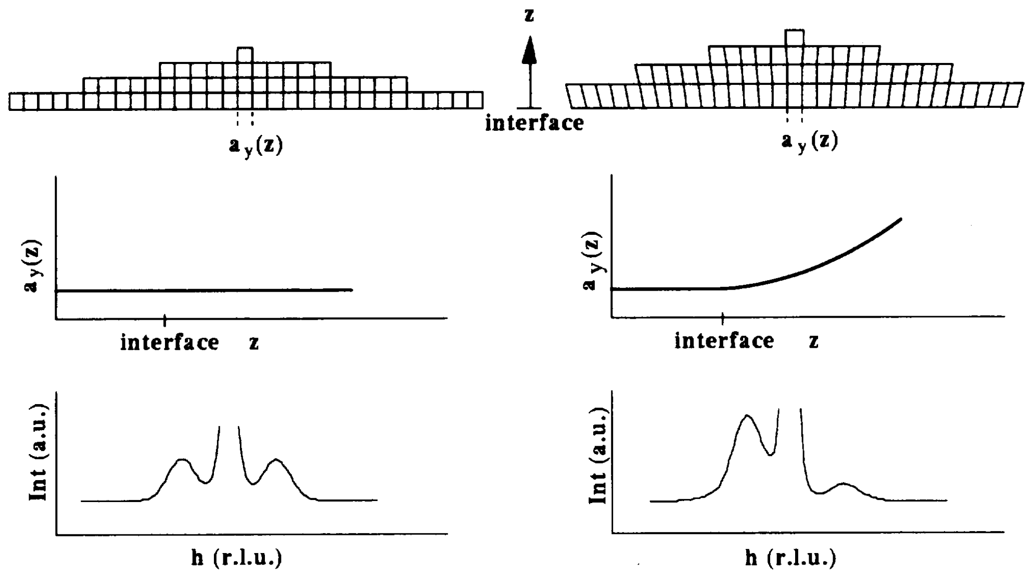

Abbildung 9.4: Schematische Darstellung der Hut-Cluster für homogene (links) und inhomogene Verspannung (rechts). Gezeigt sind vertikale Schnitte durch die Cluster (oben), die Variation der Gitterkonstanten $a_y(z)$ als Funktion der Höhe z über der Grenzfläche und die Strukturfaktoren der h-scans durch den reziproken Gitterpunkt (4 0 0,5) (aus [292]).

lateral Si-Gitterplätze ein. Die *vertikale* Position der Atome berechnet sich aus dem Poisson-Verhältnis. Dieses Modell sagt bereits {105}-Gitterstäbe voraus, die Intensitätsverteilung der Seitenmaxima ist jedoch nicht wie beobachtet asymmetrisch, sondern vollständig symmetrisch. Im zweiten Modell wurde der Gitterkonstanten $a_y(za)$, welche den Abstand der Atome in Richtung der Schmalseite der Hut-Cluster bezeichnet, erlaubt, als (quadratische) Funktion des Abstands z von der Grenzfläche zu expandieren. Diese *laterale Relaxation* der Atompositionen bewirkt eine Asymmetrie im Beugungsprofil, deren Ausprägung mit steigendem Impulsübertrag zunimmt. Durch Variation der freien Parameter a_{bottom} und a_{top}, welche die lateralen Gitterkonstanten des Hut-Clusters an der Grenzfläche und an der Spitze bestimmen sowie eines Skalenfaktors konnte bereits mit diesem einfachen Modell eine zufriedenstellende Anpassung der berechneten Beugungsprofile an die Meßdaten erreicht werden. Die durchgezogenen Linien in Abb. 9.3 zeigen den besten Fit. Die laterale Gitterkonstante $a_y(z)$ ist demnach gegenüber der Si-Gitterkonstanten für die unterste Ge-Lage der Hut-Cluster um 0,5 % relaxiert und hat an der Spitze der Cluster mit einer Relaxation von 4,2 % den Wert der Gitterkonstanten des Ge-Volumens angenommen.

9.2 Adsorbat-induzierte Facettierung: In/Ge(001)

9.2.1 Überblick: adsorbat-induzierte Facettierung von Substratoberflächen

Nachdem im vorhergehenden Abschnitt die Facettierung von verspannten *Adsorbat*schichten erörtert wurde, behandelt der folgende Abschnitt die adsorbat-induzierte Facettierung von *Substrat*oberflächen. Da in der Forschung und Technologie in der Regel möglichst ebene und homogene Grenz-und Oberflächen angestrebt werden, wurde die Facettierung als unerwünschter Effekt eher vermieden, denn als Forschungsgegenstand angesehen. Veröffentlichungen zur adsorbat-induzierten Facettierung sind im Vergleich zu Untersuchungen an ebenen Oberflächen eher rar und behandeln hauptsächlich Metalloberflächen. Daß Oberflächen von Metallen (z.B. Ag, Cu, Fe, Au) und Metallegierungen (z.B. FeCr) unter dem Einfluß von Sauerstoff und hoher Temperaturen facettieren können, ist bereits seit mehreren Jahrzehnten bekannt [325]. In der Folgezeit wurden adsorbat-induzierte Facettierungen für weitere Materialklassen beobachtet. Übersichtsartikel und kurze Zusammenstellungen ausgewählter Literatur zur Facettierung von Metalloberflächen durch Gase und Metalle finden sich in [14, 140, 326]. In diesem Zusammenhang soll auf die ersten, kürzlich veröffentlichten *first principles* -Rechnungen zur adsorbatinduzierten Facettierung hingewiesen werden, die die Stabilität von (111)-Oberflächen von bcc-Metallen (Mo,W) gegen metallinduzierte Facettierung behandeln [327].

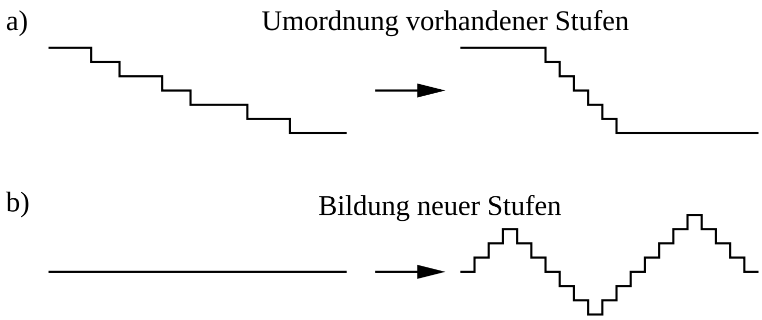

Abbildung 9.5: Schematische Darstellung zweier Varianten adsorbatinduzierter Facettierung. (a) Facettierung durch Umverteilung vorhandener Stufen auf einer vizinalen Oberflächen, (b) Facettierung durch Bildung von Stufen auf einer ebenen, niedrig-indizierten Oberfläche.

Die Arbeiten zur adsorbat-induzierten Facettierung von Si- und Ge-Oberflächen lassen sich im wesentlichen in zwei Gruppen einordnen, deren Unterscheidungsmerkmal in Abb. 9.5 skizziert ist. Die erste Gruppe umfaßt Arbeiten zur Facettierung vizinaler, niedrig-indizierter Oberflächen. Die Facettierung dieser Systeme kann durch eine Umverteilung der auf den vizinalen Flächen vorhandenen Einzel- oder Doppelstufen zu größeren Facettenflächen beschrieben werden. Die niedrig-indizierten Oberflächen bleiben bei diesem Prozeß erhalten. Das Zusammenfassen der Stufen zu Facetten bewirkt eine Vervielfachung der mittleren Terrassenbreiten der niedrig-indizierten Flächen. Beispiele für die Facettierung vizinaler Si-Oberflächen in sind in Tabelle 9.1 aufgeführt.

System	Facetten	Referenz
Au/Si(111)	(111) + (775)	[328, 329]
Au/Si(111)	(111) + (755)	[330]
Au/Si(001)	(001) + (112)	[331]
Au/Si(001)	(001) + (119)	[15]
Ag/Si(001)	(001) + (115) + (117)	[332, 333, 334]
In/Si(001)	(001) + (103)	[191]

Tabelle 9.1: Beispiele für adsorbat-induzierte Facettierung vizinaler Si-Oberflächen.

Ferner wird von Facettierungen in Untersuchungen zur Adsorption von Pt und Ni auf vizinalem Si(111) [335] und zur Adsorption der Gruppe-V Elemente As, Sb, Bi auf vizinalem Si(001) [269] berichtet. Die in Abschn. 6.3.6 beschriebene Ausbildung von Mehrfachstufen auf getemperten Ge(001)-Oberflächen bei höherer Pb-Bedeckung kann ebenfalls als adsorbat-induzierte Facettierung vizinaler Oberflächen verstanden werden. Die Ausdehnung der einzelnen Facettenflächen ist hier jedoch vergleichsweise gering.

Die zweite Gruppe von Arbeiten behandelt die Facettierung ebener, niedrig-indizierter Oberflächen unter partieller oder vollständiger Auflösung der niedrig-indizierten Oberflächen. Im Gegensatz zur Facettierung vizinaler Oberflächen werden hierbei Stufen der niedrig-indizierten Ausgangsfläche nicht nur umgeordnet, sondern es werden neue Stufen gebildet. Die Facetten treten entsprechend der Symmetrie der Oberfläche in drei bzw. vier äquivalenten Orientierungen auf. In Tabelle 9.2 sind einige Beispiele für diese Art der Facettierung zusammengestellt.

System	Facetten	Referenz
Ag/Ge(111)	(111) + {544}	[336]
Sn/Si(001)	{113}	[133]
Al/Si(001)	{103}	[338]
In/Si(001)	(001) + {103}	[184, 191]
In/Ge(001)	{103}	[205, 293]
Bi/Ge(001)	(001) + {111} + {113}	[279]

Tabelle 9.2: Beispiele für adsorbat-induzierte Facettierung ebener Si- und Ge-Oberflächen.

Weitere, in diesem Zusammenhang relevante Arbeiten behandeln die Facettierung der (113) [339] bzw. (103) [201] -Oberflächen von Si und Ge durch Gruppe-III Elemente (Al,Ga,In), die Stabilisierung der Si(112)-Oberfläche durch Ga [340], die C-induzierte Facettierung von Si(001)- und Si(112)-Oberflächen [7] und die adsorbat-induzierte Modifizierung von verspannungsinduzierter Facettierung in gitterfehlangepaßten Systemen ({117}- und {105}-Facettierung beim Wachstum von Ge auf Si(001) mit Hilfe der Surfactants Sb [342] und Bi [343]).

9.2.2 Überblick: {103}-Facettierung von Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen durch Al und In

Bereits 1964 beobachten Lander und Morrison mit LEED, daß die Si(001)-Oberfläche nach Adsorption von $\frac{1}{3}$ ML Al bei einer Substrattemperatur von 700 °C vollständig facettiert [337]. Sie identifizieren die Facetten als $\sqrt{3}$-rekonstruierte {111}-Oberflächen und schließen, daß die Si(111)$\sqrt{3}$-Al Rekonstruktion die stabilste Phase des Al/Si Systems sei. Kürzlich wiederholten Zhao et al. das Experiment und fanden bei gleicher Präparation anstelle der $\sqrt{3}$-rekonstruierten {111}-Facetten (1×1)-rekonstruierte {103}-Facetten [338]. Sie schlagen ein Modell für die (1×1)-Rekonstruktion der Oberfläche der {103}-Facetten vor, nachdem alle Dangling Bonds der ideal terminierten Si(103)-Oberfläche durch je ein Al-Adatom und ein Si-Adatom pro (1×1)-Zelle abgesättigt werden. Wegen der unterschiedlichen Elektronegativitäten von Al und Si wird Ladung vom Al-Adatom zum Si-Adatom übertragen, was zur Rehybridisierung des Si-Adatoms und zur Senkung der Oberflächenenergie führt. Wegen der chemischen Ähnlichkeit der Systeme Al/Si und In/Si übertragen sie dieses Modell auf die In-induzierte {103}-Facettierung der Si(001)-Oberfläche, die zuvor von Knall et al. mit

LEED entdeckt wurde [184].

Knall beobachtete die {103}-Facettierung der Si(001)-Oberfläche für In-Bedeckungen oberhalb 0,5 ML und Substrattemperaturen oberhalb 550 °C, für die bereits merkliche Desorption auftritt. Li et al. studierten die In-Adsorption auf vizinalen Si(001)-Oberflächen mit STM. Sie beobachten eine Bündelung der Stufen (*step bunching*) zwischen weiten, (4×3)-rekonstruierten (001)-Terrassen für In-Bedeckungen oberhalb 0,5 ML. Diese Stufenbündel bilden sich für Bedeckungen > 1 ML zu {103}-Facetten um. Die (4×3)-Rekonstruktion auf den (001)-Terrassen bleibt für alle Bedeckungen und Temperaturen bis 600 °C erhalten, wohingegen die {103}-Facetten durch Tempern bei Temperaturen > 550 °C wieder in undefinierte Stufenbündel zerfallen.

Zeitgleich mit unseren Experimenten beobachteten Gai et al. eine {103}-Facettierung der Ge(001)-Oberfläche nach In-Adsorption mit STM, LEED und AES [205]. Sie erzielten eine vollständige Facettierung der Ge(001)-Oberfläche durch RT-Deposition von 2 ML In und anschließendem Tempern im Temperaturbereich 250–400 °C. Der Temperungsvorgang wurde mit LEED überwacht. Sie berichten, daß die Reflexe der {103}-Facetten nach und nach auf Kosten der (2×1)-Reflexe der (001)-Oberfläche an Intensität und Schärfe zunehmen und keine weiteren Strukturen während des Übergangs beobachtet werden. Die In-Bedeckung beträgt nach dem Tempern gemäß ihren AES-Messungen 0,2–0,6 ML. Die STM-Aufnahmen zeigen eine Oberfläche, die als Mosaik aneinandergrenzender und ineinander verwachsener Prismen und Pyramiden beschrieben werden kann. Die Prismen variieren in ihrer Größe und weisen keine regelmäßige Anordnung auf. Ihre Oberflächen werden ausnahmslos durch {103}-Flächen in vier äquivalenten Orientierungen gebildet. Hochaufgelöste Bilder der Facettenflächen zeigen zwei Erhöhungen pro (1×1)-Elementarzelle, zwischen denen in der Abbildung der unbesetzten Zustände ein deutlicher Helligkeitskontrast beobachte wird. Die hochaufgelösten STM-Aufnahmen und der Bedeckungsbereich, in denen die Facettierung beobachtet wird, sind mit dem Strukturmodell für die Al-induzierte Facettierung der Si(001)-Oberfläche von Zhao et al. konsistent.

Im folgenden werden unsere Messungen zur In-induzierten Facettierung der Ge(001)-Oberfläche dargestellt. *Sie stellen nach unserer Kenntnis die ersten mikroskopischen Messungen zur Nukleation und zum Wachstum adsorbatinduzierter Facettierungen von Halbleiteroberflächen dar.* Sie zeigen die verschiedenen Entwicklungsstufen der Facettierung von der Keimbildung über die fortschreitende Facettierung und verschiedene Formen der vollständigen Facettierung bis zum Verfall der Facetten. Unsere Beobachtungen zum Prozeß der Facettierung und zur In-Bedeckung der Facetten stehen im eindeutigen Widerspruch zu den Beobachtungen von Gai et al. Darüber hinaus wird gezeigt, daß sich die Facetten bei geeigneter Prozeßführung in bemerkenswert homogener Form und Größe und in quasi-periodischer Anordnung ausbilden lassen. *Diese ersten Ergebnisse deuten bereits an, daß die adsorbatinduzierte Facettierung nicht nur als Störung des Ideals der planaren Oberfläche, sondern als neues Instrument zur gezielten (Nano-) Strukturierung von Oberflächen durch Selbstorganisation gesehen werden kann.*

9.2.3 Probenpräparation

Die Experimente zur In-induzierten Facettierung der Ge(001)-Oberfläche waren Teil der Untersuchungen am Adsorbatsystem In/Ge(001), so daß der experimentelle Rahmen für die Probenpräparation bereits in Abschn. 7.2 beschrieben ist. Die Präparationsparameter Aufdampftemperatur und -zeit, Tempertemperatur und -zeit sowie Aufdampfrate des In-Verdampfers wurden im Verlauf der Untersuchungen über weite Bereiche variiert. Unsere Beobachtungen sind mit der Aussage konsistent, daß die Ge(001)-Oberfläche unabhängig von der Prozeßführung für alle In-Bedeckungen $\geq$ 0,5 ML und Temperaturen $\geq$ 300 °C vollständig facettiert. Die Größe und Form der Facetten sowie die Regelmäßigkeit ihrer Anordnung hängen dagegen empfindlich von den Details der Prozeßführung ab. Die Parameter der Präparation werden zusammen mit der Beschreibung der Meßergebnisse angegeben.

Ein weiterer Parameter, der die Morphologie der facettierten Oberfläche bestimmt, ist die Stufendichte der Substratoberfläche vor der Facettierung. Für die Experimente wurde Ge-Wafermaterial mit Fehlneigungen von 0,5° und unter 0,1° gegen die (001)-Ebene benutzt. Große Domänen langer paralleler Prismen wurden ausschließlich auf den wohlorientierten Substraten beobachtet. Sofern nicht ausdrücklich vermerkt, wurden für die dargestellten Experimente die wohlorientierten Substrate verwendet.

9.2.4 Entwicklungsstadien der Facettierung

Im Verlauf der Untersuchungen am Adsorbatsystem In/Ge(001) wurden die Präparationsparameter und die Abfolge der Präparationsschritte in weiten Bereichen variiert und die Präparation *in situ* mit RHEED überwacht. Die Ergebnisse sind im Präparationsdiagramm des Systems In/Ge(001) in Abb. 7.2 schematisch zusammengefaßt. Die Präparationen lassen sich grob in zwei Grundtypen unterscheiden, und zwar in die Deposition auf heißem Substrat (MBE-Typ) und die Deposition bei RT mit anschließendem Tempern (*solid phase epitaxy-*, SPE-Typ).

Während der Deposition auf dem heißen Substrat ($T = 350 - 500$ °C) schwinden zunächst die (2×1)-Reflexe der reinen Ge(001)-Oberfläche. Kurz darauf erscheinen vorübergehend $\frac{1}{4}$-zahlige Reflexe der $(n \times 4)$-Rekonstruktion. Danach werden Streaks im Beugungsbild beobachtet, die durch ihr charakteristisches Verhalten bei Verkippung der Probe zum RHEED-Strahl eindeutig als Facettenreflexe identifiziert werden können. Übersteigt die Depositionsrate bei der gewählten Temperatur die Desorptionsrate von der Oberfläche, verschwinden die Streaks der Facetten und es bleibt ein (1×1)-RHEED-Bild.

Während der RT-Deposition treten zum (2×1)-Beugungsbild der reinen Oberfläche zunächst weitere halbzahlige Reflexe der (2×2)-Rekonstruktion hinzu, welche anschließend durch $\frac{1}{4}$-zahlige Reflexe der (4×3)-Rekonstruktion abgelöst werden. Jenseits einer Monolage wird das Beugungsbild wieder schwächer und diffuser. Tempern der hochbedeckten Proben ($>$ 1 ML) bei Temperaturen $>$ 250 °C bewirkt einen Phasenübergang zur (5×4)-Rekonstruktion. Übersteigt die Temperatur des Temperungsvorgangs 320 °C, wird das (5×4)-Beugungsbild kontinuierlich durch das Beugungbild der facettierten Oberfläche abgelöst, welches für höhere Temperaturen ($>$ 350 °C) wiederum in ein $(n \times 4)$-Beugungsbild übergeht. Die Zeitspanne, in denen die einzelnen Phasenübergänge beobachtet werden, ist stark abhängig von der gewählten Temperatur und beträgt Bruchteile von Sekunden bis hin zu einigen Stunden.

Für die Untersuchung der Entwicklung der Facettierung wurde die Präparation nach dem SPE-Typ gewählt. Durch die Wahl möglichst niedriger Temperaturen für den Temperungsvorgang war es möglich, die Präparation in verschiedenen Phasen der Entwicklung der Facettierung zu unterbrechen und nach dem Abkühlen auf RT eingehend mit dem STM zu untersuchen. Die Beobachtungen fügen sich zu einem geschlossenen Bild zusammen, nach dem die In-induzierte Facettierung der Ge(001)-Oberfläche durch fünf Phasen der Entwicklung beschrieben werden kann, und zwar:

- "Keimbildung" auf ebener (5×4)-rekonstruierter Oberfläche
- fortschreitende Facettierung durch Zunahme der Domänengröße
- vollständige Facettierung der Oberfläche
- Zunahme der Breite einzelner Facetten
- Zerfall der Facetten und Wachstum von Domänen der $(n \times 4)$-Struktur

Im folgenden wird jede dieser Entwicklungsphasen an Hand von STM-Bildern dargestellt und anschließend wird ein Modell für den Entwicklungsablauf entworfen.

Das frühste Stadium des Übergangs von der ebenen Ge(001)-Oberfläche zur facettierten Oberfläche, welches wir beobachtet haben, ist in den Abbildungen 9.6 und 9.7 dargestellt. Sie zeigen eine Ge(001)-Oberfläche nach der Deposition von $\sim$1.5 ML In bei einer Substrattemperatur von 320 °C und 15 sekündigem Nachtempern. Die Präparation weicht damit von SPE-Typ ab, die gleichen Beobachtungen konnten aber auch für eine vollständig SPE-artige Präparation gemacht werden. In den Beugungsbildern dieser Oberfläche wurden ausschließlich Reflexe der (5×4)-Rekonstruktion beobachtet. In einigen STM-Bildern konnten neben weiten (5×4)-rekonstruierten Bereichen bereits vereinzelt kleine facettierte Bereiche gefunden werden.

Die kleinsten facettierten Bereiche bestehen in der Regel wie in Abb. 9.6 aus einer Vertiefung ("Grube") mit quadratischer oder rechteckiger Grundfläche und ein bis drei prismenförmigen Erhöhungen. Die Seitenflächen der Grube wie der Erhöhungen werden von ebenen Fläche (Facetten) gebildet. Die Prismen und die Grube haben jeweils eine Seitenfläche gemeinsam. Dieser Keim der Facettierung befindet sich gewöhnlich an einer Stufenkante von Terrassen der (001)-Oberfläche. Die Abbildung 9.7 zeigt einen Ausschnitt aus Abb. 9.6 in 3-dimensionaler Darstellung. In dieser Ansicht ist deutlich zu erkennen, daß die facettierten Flächen perfekt eben sind und eine Überstruktur aufweisen.

Ein größerer facettierter Bereich der gleichen Oberfläche ist in Abb. 9.8 wiedergegeben. Er ist wiederum aus einer rechteckigen Grube und prismenförmigen Erhöhungen zusammengesetzt. Während die Gruben in Abb. 9.6 und Abb. 9.8 in Form und Größe vergleichbar sind, sind die Prismen bei vergleichbarer Breite deutlich länger und es sind parallel zu den Prismen neben der Grube weitere Prismen angeordnet. Dem Höhenprofil sind weitere charakteristische Eigenschaften der facettierten Bereiche zu entnehmen. Die Prismen weisen alle eine ähnliche Breite und Höhe auf (etwa 60 Å und 10 Å). Die Seitenflächen der Prismen schließen ohne Zwischenraum direkt aneinander an. Die Basis der Prismen befindet sich unterhalb der mittleren Höhe der umgebenden (5×4)-rekonstruierten (001)-Oberfläche. Mit Hilfe der Höhenlinie kann die Neigung der Seitenflächen der Prismen relativ zur (001)-Fläche bestimmt werden. Sie ist im Rahmen der Meßungenauigkeit für alle Flächen identisch und beträgt $\pm(18° \pm 1°)$. Zusammen mit der beobachteten Orientierung der Prismen in $\langle 010 \rangle$-Richtungen (45° zu den $\langle 1\bar{1}0 \rangle$-Hauptsymmetrierichtungen der Ge(001)-Oberfläche) können die facettierten Flächen der Prismen und der Gruben eindeutig als $\{103\}$-Oberflächen identifiziert werden.

Die folgenden Stadien der Facettierung werden anhand einer weiteren Präparationssequenz erläutert. Nach dem Aufdampfen von 1,5 ML In bei RT wurde die Probe bei 280 °C unter RHEED-Beobachtung getempert, bis die Intensität der Beugungsreflexe der (5×4)-Rekonstruktion zugunsten der Beugungsreflexe der $\{103\}$-Facetten deutlich abgenommen hat (15 min). Eine STM-Topographie nach diesem ersten Temperungsschritt zeigt Abb. 9.9. Zwei Arten größerer geschlossenen Flächen koexistieren nebeneinander, und zwar facettierte Bereiche und ebene (5×4)-rekonstruierte Bereiche. Die facettierten Bereiche können in große

Domänen unterteilt werden, in denen die Prismen zueinander *parallel* und wegen der schmalen Verteilung der Prismenbreiten (quasi-)*periodisch* angeordnet sind. Wie in Abb. 9.8 betragen die Breite und die Höhe der Prismen in der Regel etwa 60 Å und 10 Å. Die Länge der Prismen ist bei dieser Prozeßführung im fortgeschrittenen Stadium der Facettierung extrem. Oftmals wird die Länge einzelner Prismen nur durch die Domänengröße limitiert und erreicht 1000 Å und mehr.

Bereits in dieser Graustufendarstellung ist ersichtlich, daß das mittlere Niveau der (5×4)-rekonstruierten Domänen der Ge(001)-Oberfläche zwischen den mittleren Niveaus der Firste und den Grundflächen der Prismen liegt. Eine genauere Bestimmung der Höhenverteilung mittels eines Höhenprofils ergibt, daß sich das mittlere Niveau der (5×4)-Domänen auf halber Höhe der Prismen befindet und zu beiden Extrema der Prismen einen Abstand von (5 ± 1) Å aufweist.

Die Probe wurde nach den STM-Messungen in einem zweiten Temperungsschritt bei 320 °C für 30 min getempert. Die Oberfläche war danach vollständig facettiert. Die Abbildung 9.10 steht stellvertretend für diese Präparation. Die Prismen erscheinen unverändert und weisen die gleiche Größe, Gestalt und Anordnung wie die Prismen nach dem ersten Temperungsschritt auf. Auch die Größe und Gestalt der Prismen-Domänen erscheint durch das fortgesetzte Tempern unverändert.

Im dritten Temperungsschritt wurde die Probe bei 350 °C für 20 min getempert. Im Beugungsbild wurde keine Änderung beobachtet. Die STM-Bilder zeigen nach diesem Präparationsschritt neben den langen schmalen Prismen unveränderter Breite und Höhe einen kleinen Anteil an breiteren Prismen (Abb. 9.11). Zwei typische Varianten dieser breiteren Prismen sind Prismen der doppelten Höhe und Prismenpaare anderthalbfacher Höhe bzw. Tiefe. Beide Varianten passen sich übergangslos in die Anordnung benachbarter regulärer Prismen ein. Die Oberflächen aller Prismen sind unabhängig von ihrer Größe weiterhin {103}-Facetten.

Im vierten und letzten Temperungsschritt wurde die Probe bei gleicher Temperatur (350 °C) über einen längeren Zeitraum (13 h) getempert. Es werden — ähnlich der Oberfläche im Stadium der fortschreitenden Facettierung — nebeneinander ausdehnte Domänen facettierter Bereiche und ebener Bereiche beobachtet (Abb. 9.12). In den facettierten Bereichen ist der Anteil der langen schmalen Prismen zugunsten von breiteren Prismen (80–200 Å) zurückgegangen. Die breiteren Prismen bilden zusammen mit den schmalen Prismen weiterhin Rotationsdomänen. Die Form- und Größenverteilung der Prismen ist nicht mehr homogen, und die Anordnung der Prismen hat ihren periodischen Charakter verloren. Die ebenen Bereiche sind $(n \times 4)$-rekonstruiert. Die Struktur der $(n \times 4)$-Rekonstruktion wurde bereits in den Abschnitten 7.3.5 und 7.5 behandelt. Das Höhenniveau der ebenen, $(n \times 4)$-rekonstruierten Flächen liegt mittig zwischen den Extrema der Prismen.

Auf der Grundlage der beschriebenen Beobachtungen wurde folgende Vorstellung über die Entwicklungsstadien der Facettierung erarbeitet. An einer Inhomogenität auf der (5×4)-rekonstruierten ebenen Oberfläche, wie sie z.B. Stufenkanten zwischen (001)-Terrassen darstellen, bildet sich unter dem Einfluß erhöhter Temperatur spontan ein Facettierungskeim. Der kleinste beobachtete Facettierungskeim besteht aus einer pyramidenförmigen Grube und daran anschließenden, prismenförmigen Erhöhungen. Die prismenförmigen Erhöhungen ähneln in ihrer Gestalt den Hut-Clustern, welche beim epitaktischen Wachstum von Ge auf Si(001) beobachtet werden (siehe Abschn. 9.1). Im Gegensatz zu den Hut-Clustern ist das Volumen der Prismen jedoch nicht aus *Adsorbat*atomen, sondern aus *Substrat*atomen aufgebaut. Das Material für die Prismen wird bei der Bildung der Grube freigesetzt. Es findet lokal eine Umverteilung von Substratatomen statt. Diese Umverteilung wird durch die Adsorbatatome, die die Oberfläche benetzen, induziert.

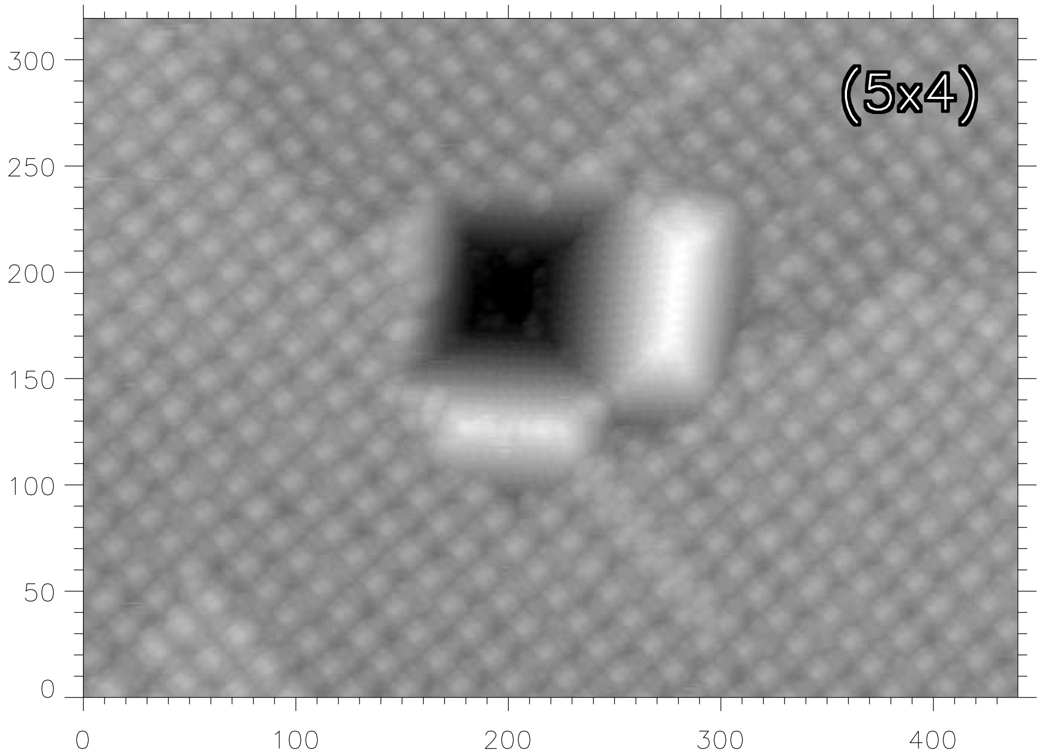

Abbildung 9.6: STM-Topographie einer Ge(001)-Oberfläche nach der Deposition von 1,5 ML bei einer Substrattemperatur von 320 °C. An einer Stufenkante der (5×4)-rekonstruierten Oberfläche haben sich ein pyramidenförmiger Krater und zwei prismenförmige Erhöhungen gebildet. Die Oberflächen des Kraters und der Prismen sind ausschließlich {103}-Flächen ($U = -1,4\ V,\ I = 0,5\ nA$).

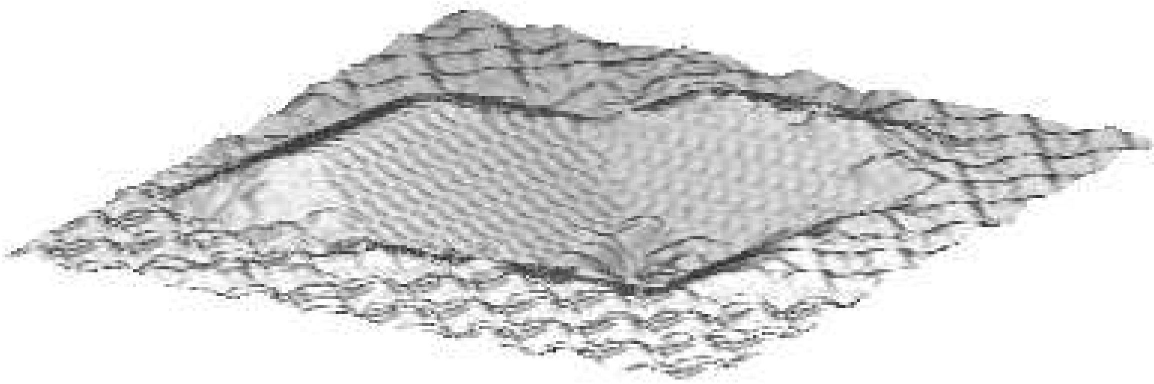

Abbildung 9.7: 3D-Darstellung eines Ausschnitts aus Abb. 9.6 (gedreht), in der die (1×1)-Überstruktur auf den {103}-facettierten Flächen des Kraters und der beiden Prismen zu erkennen ist.

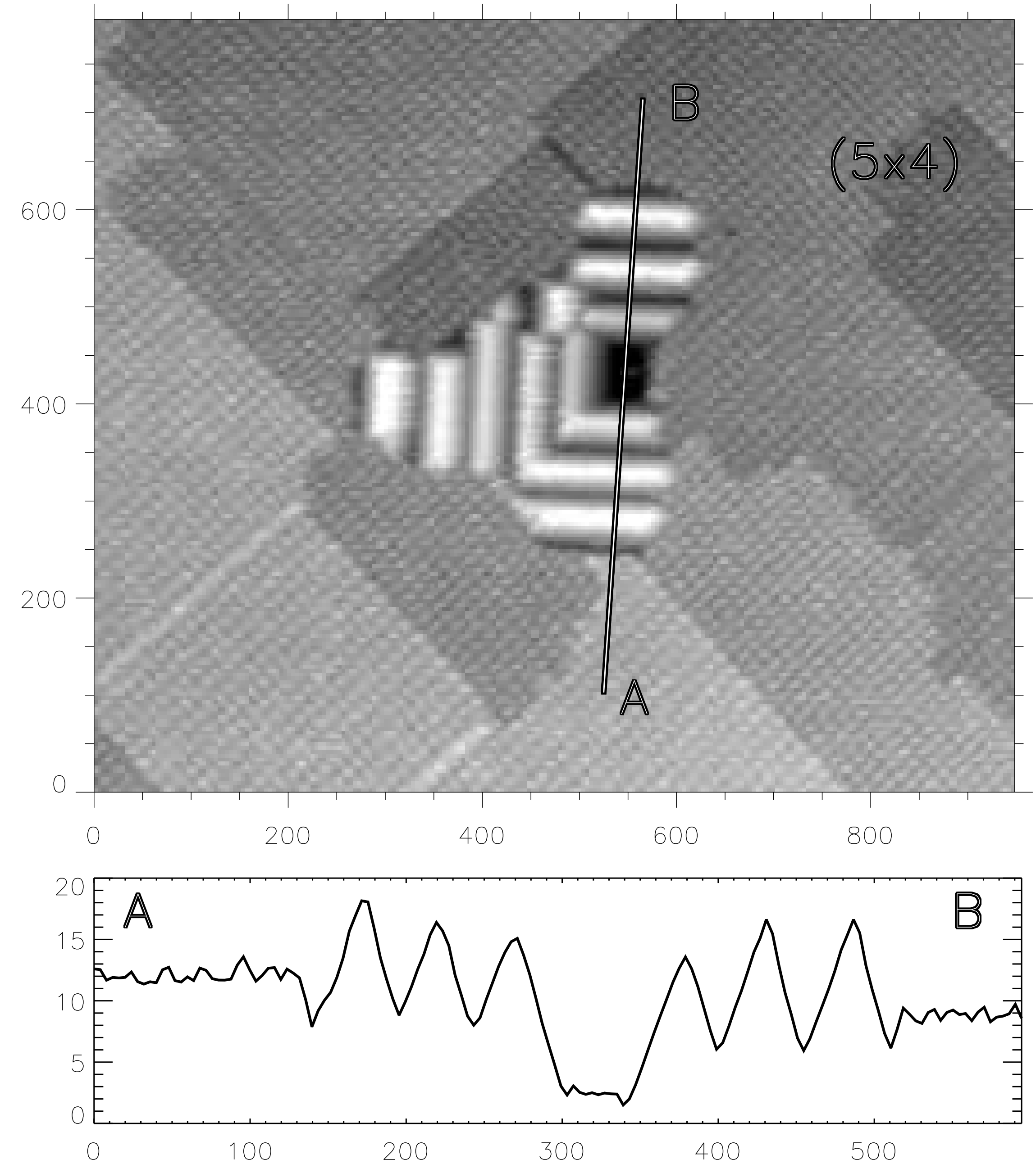

Abbildung 9.8: Oben: STM-Topographie einer weiteren Ausschnitts der Oberfläche aus Abb. 9.6, in dem die Facettierung bereits weiter vorangeschritten ist. An einen Krater schließen sich kleine Domänen länglicher Prismen an ($U = -1,4\,V,\ I = 0,5\,nA$). Unten: Höhenlinie entlang der Linie zwischen den Punkten A und B.

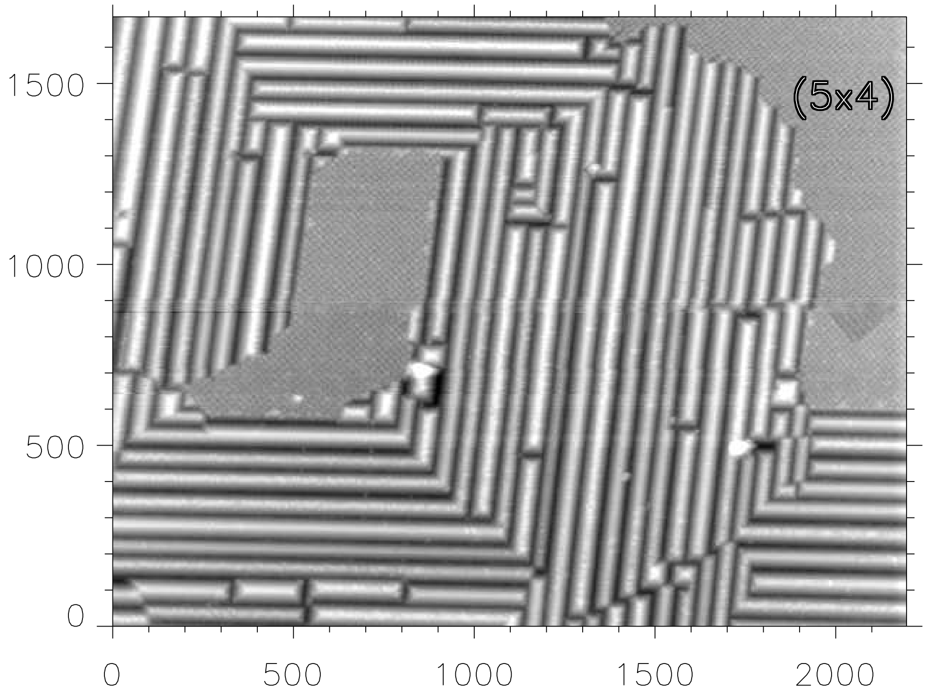

Abbildung 9.9: STM-Topographie einer Ge(001)-Oberfläche nach RT-Deposition von 1,5 ML In und 15 min Nachtempern bei 280 °C. Der Anteil der facettierten Fläche hat gegenüber Abb. 9.8 zugenommen. Die Prismen bilden große Domänen und sind um ein Vielfaches länger. Sie weisen jedoch i. a. die gleiche Breite und Höhe wie die Prismen in Abb. 9.8 auf ($U = -1,9\ V,\ I = 1,1\ nA$).

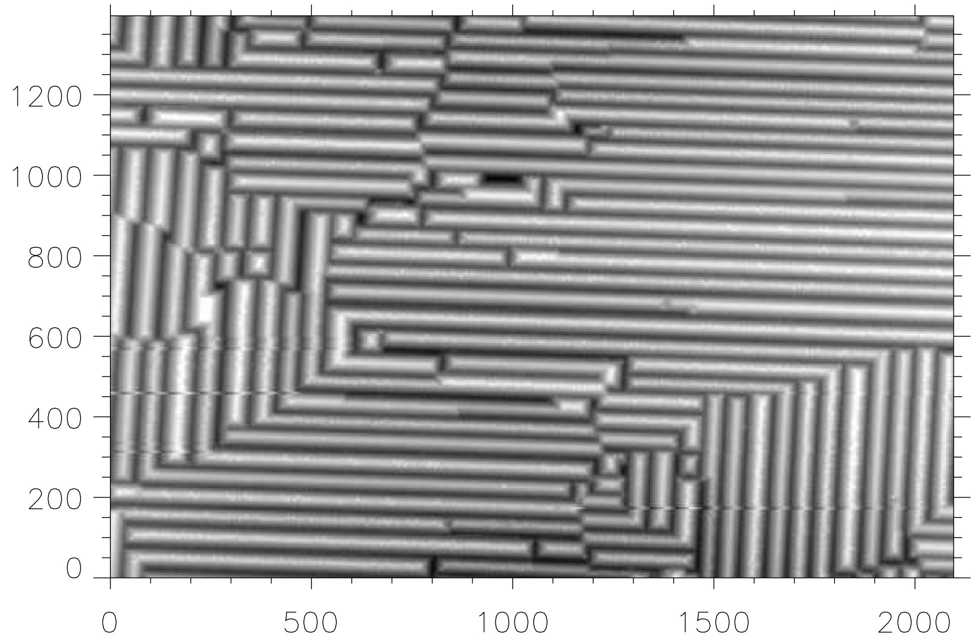

Abbildung 9.10: STM-Topographie der Oberfläche aus Abb. 9.9 nach dem zweiten Temperungsschritt (320°C, 30 min). Die Oberfläche ist vollständig mit länglichen Prismen einheitlicher Breite bedeckt ($U = -2,0\ V,\ I = 1,8\ nA$).

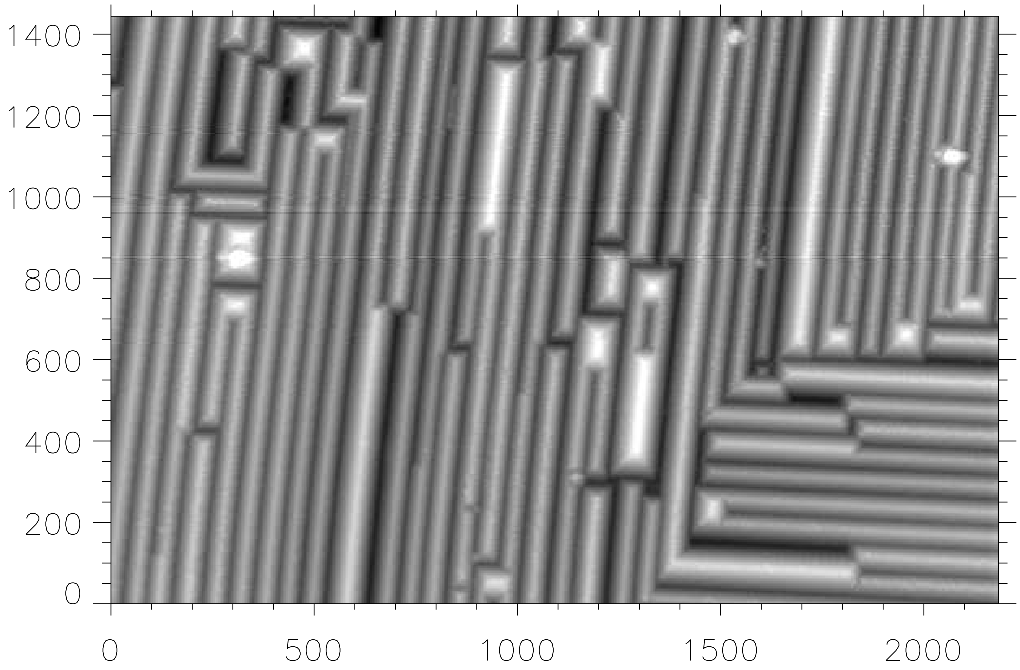

Abbildung 9.11: STM-Topographie der Oberfläche aus Abb. 9.10 nach dem dritten Temperungsschritt (350 °C, 20 min). Neben länglichen Prismen unveränderter Größe wird ein kleiner Anteil breiterer Prismen beobachtet ($U = -1,4\ V,\ I = 1,1\ nA$).

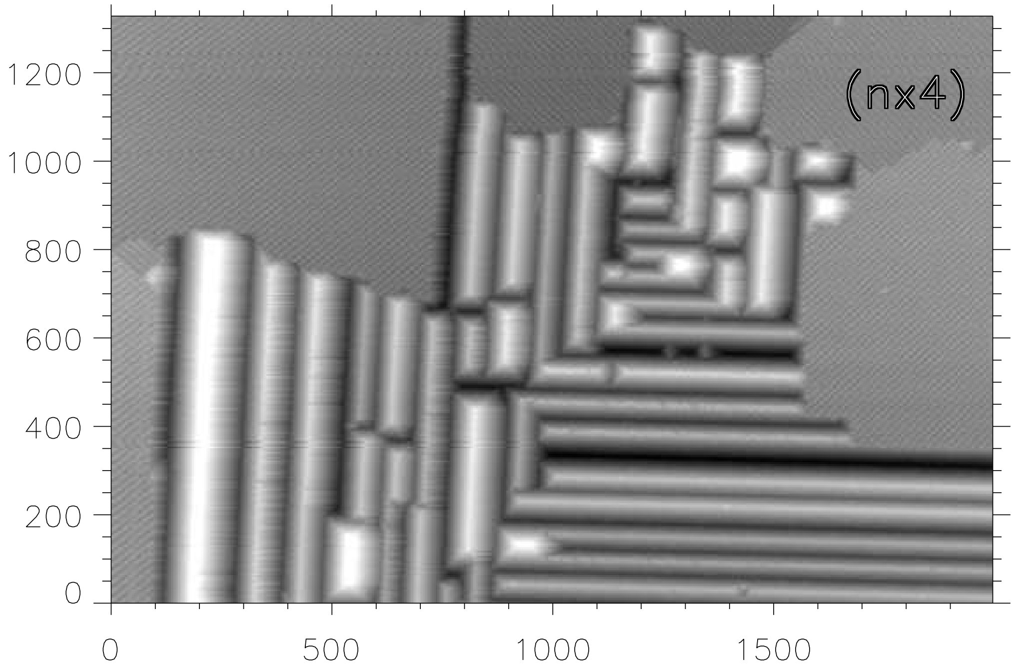

Abbildung 9.12: STM-Topographie der Oberfläche aus Abb. 9.10 nach weiterem Tempern bei 350 °C für 14 h. Ein Großteil der facettierten Fläche hat sich in eine ebene (001)-Oberfläche zurückgebildet und ist $(n \times 4)$-rekonstruiert. Die Breite der verbliebenen Prismen ist nicht länger einheitlich und übersteigt die Anfangsbreite z. T. um ein Vielfaches ($U = -1,9\ V,\ I = 1,4\ nA$).

Die Prismen in Abb. 9.8 repräsentieren den Beginn der fortschreitenden Facettierung. Die Existenz einer Grube und die Anordnung der Prismen legen nahe, daß dieser größere facettierte Bereich aus einem Keim ähnlich dem in Abb. 9.6 hervorgegangen ist. Die Grube und die anschließenden Prismen bleiben während des Wachstumsprozesses des facettierten Bereichs zunächst unverändert erhalten. Direkt an die ersten Prismen angrenzend, bilden sich nacheinander weitere Prismen, die zu den ersten Prismen parallel orientiert sind. Da die Basis der Prismen genausoweit *unter* das Niveau der (001)-Oberfläche reicht, aus der die Prismen hervorgegangen sind, wie die Spitzen der Prismen *über* dieses Niveau herausragen, ist für die weitere Bildung der Prismen nur ein lokaler Massentransport über die Breite eines Prismas erforderlich. Die massenspendende Funktion der Grube im Keimbildungsstadium wird von jenem Teil des Raums zwischen den Prismen übernommen, der unterhalb des (001)-Oberflächenniveaus liegt ("Furche"). Besonders bemerkenswert ist die Beobachtung, daß die Prismen in etwa alle die gleiche Breite bzw. Höhe aufweisen.

Zur Ausbreitung der Facettierung trägt neben der Bildung neuer Prismen das Längenwachstum bereits gebildeter Prismen bei. Die Facettierung schreitet so über eine Wachstumsfront voran, während sich der bereits facettierte Bereich in diesem Stadium kaum noch verändert. Es bilden sich auf diese Weise ausgehend von einem Wachstumskeim ein bis vier Domänen langer, paralleler Prismen. Da die Prismen eine einheitliche Breite aufweisen und sich die Länge der Prismen in der Regel über die gesamte Domäne erstreckt, erscheint jede Domäne wie ein regelmäßiges Strichgitter. Das Stadium der fortschreitenden Facettierung endet mit dem Aufeinandertreffen der Wachstumsfronten verschiedener Domänen. Die vollständig facettierte Oberfläche wurde auf ähnliche Weise mehrmals präpariert. Die mittlere Domänengröße variierte für die einzelnen Präparationen zwischen (500 Å)^2 und (2000 Å)^2. Zusammen mit der beobachteten Keimdichte von 1 Keim/1000 Å^2 in der Präparation der Oberfläche in Abb. 9.6 ist die mittlere Domänengröße gut mit dem dargestellten Wachstumsmodell der Facettierung vereinbar.

Eine konkretes Modell zur Natur und Abfolge der Umordnungsprozesse des Substrats an der Wachstumsfront auf atomarem Niveau konnte auf der Grundlage unserer Beobachtungen nicht entwickelt werden, denn unsere Aufnahmen zeigen nur einen ausgezeichneten Zustand der Prismen an der Wachstumsfront. Der Übergang zwischen den facettierten Bereichen und den ebenen (5×4) bzw. $(n \times 4)$-rekonstruierten Bereichen wird in den Abschnitten, in denen die Längsrichtung der Prismen parallel zur Wachstumsfront verläuft, nahezu ausschließlich durch Gräben gebildet (eine Ausnahme von dieser Regel stellen die Prismen in der ersten Keimbildungsphase dar, siehe Abb. 9.6) und die vordersten erhabenen Prismen an der Wachstumsfront unterscheiden sich in ihrer Höhe und Breite nicht signifikant von den folgenden Prismen innerhalb der Domänen. Vermutlich beschreibt dieser Zustand nur ein einzelnes, aber energetisch ausgezeichnetes Stadium innerhalb des Wachstumsprozesses an der Facettierungsfront, welches beim Abkühlen der Probe bevorzugt eingefroren wird. Es wäre deshalb sehr reizvoll, den Wachstumsprozeß *in situ*, also während des Temperns, mit HT-STM (High Temperature-STM) zu studieren. Da STM-Untersuchungen bei erhöhter Temperatur an unserem Experiment nicht möglich sind, stehen diese Untersuchungen noch aus.

Im Stadium der fortschreitenden Facettierung bis zur vollständigen Facettierung bilden sich die Prismen bei der vorgestellten Prozeßführung in bemerkenswert regelmäßiger Größe und Anordnung aus. Die regelmäßige Facettierung ist jedoch kein thermodynamisch stabiler Zustand, denn nach weiterem Tempern der komplett facettierten Oberfläche wurden neben den regulären Prismen mit einer Breite von etwa 60 Å auch größere Prismen beobachtet. Zwei Typen dieser breiteren Prismen sind in Abb. 9.13 skizziert. Die breiteren Prismen fügen

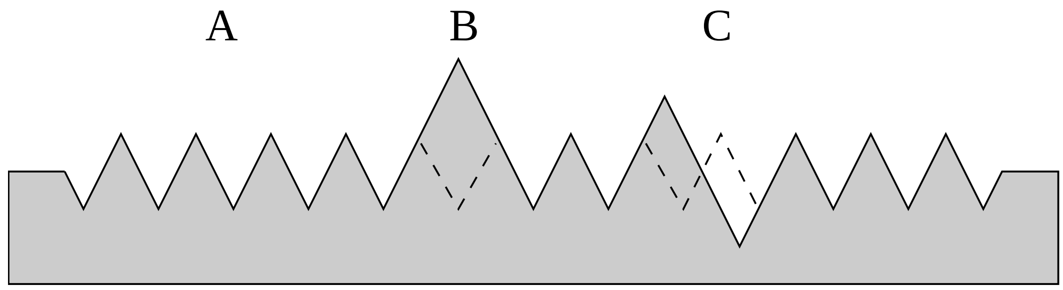

Abbildung 9.13: Regelmäßig facettierte Oberfläche (A) und Modifikationen (B,C) infolge fortgesetzten Temperns.

sich in die Anordnung der regulären Prismen ein, und ihre Breite ist durch die Breite der sie umgebenden regulären Prismen bestimmt. Für die verbliebenen regulären Prismen wurden keine Veränderungen in Form, Größe und Position beobachtet. Das Wachstum der Prismen mit steigender Temperatur ist somit offenbar kein über größere Distanzen kollektiver und korrelierter Prozeß, sondern hat lokalen Charakter und ist zunächst auf einzelne Prismen beschränkt. Durch fortgesetztes Nachtempern bereits vollständig facettierter Oberflächen geht die Regelmäßigkeit der Anordnung der Prismen verloren.

Die Ursache des Wachstums der Prismen liegt nicht in einer Vergrößerung der facettierten Oberfläche begründet. Die facettierte Gesamtoberfläche bleibt beim Wachstum der Prismen nahezu konstant. Vielmehr nimmt die Länge der Begrenzungen zwischen den Facettenflächen pro (001)-Einheitsfläche mit der Größe der Prismen ab. Im Zusammenhang mit der Diskussion des Strukturmodells der {103}-facettierten Oberfläche wird gezeigt werden, daß die Begrenzungen zwangsläufig Dangling Bonds aufweisen, so daß größere Prismen gegenüber kleinen energetisch begünstigt sind. Für die Bildung größerer Prismen ist demgegenüber ein Transport größerer Massen von Substratatomen über weitere Strecken erforderlich. Die Morphologie der regelmäßig facettierten Oberfläche ist bei der beschriebenen Prozeßführung also maßgeblich durch die Kinetik des Facettierungsprozesses bestimmt.

Weiteres Tempern bei 350 °C über längere Zeit oder kurzzeitiges Tempern bei höheren Temperaturen läßt die facettierte Oberfläche wieder in eine ebene (001)-Oberfläche zerfallen. Die facettierte Oberfläche ist bei konstanter In-Bedeckung jedoch nicht thermisch instabil. Wird während des Temperns bei erhöhter Temperatur ausreichend Indium angeboten und so die Desorption des In von der Oberfläche kompensiert, bleibt die Oberfläche facettiert (siehe Abschn. 9.2.7). Die facettierte Oberfläche zerfällt vielmehr unterhalb einer kritische Bedeckung infolge von In-Verarmung. Die resultierende (001)-Oberfläche ist weder notwendigerweise die reine (bzw. kontaminierte) Ge(001)-Oberfläche, wie von Gai et al. [205] und Sawitzki [200] berichtet wurde, noch ist die Oberfläche nach der Desorption rauh oder ungeordnet. Wird das Adsorbat vollständig desorbiert, erhalten wir eine ebene und wohlgeordnete Ge(001)(2×1) Oberfläche. Bei frühzeitiger Unterbrechung der In-Desorption wird die Koexistenz von facettierten Bereichen und ebenen $(n \times 4)$-rekonstruierten Bereichen beobachtet (Abb. 9.12).

Aus dem Zerfall der facettierten Oberfläche in eine $(n \times 4)$-rekonstruierte Oberfläche folgen unmittelbar zwei wichtige Eigenschaften der facettierten Oberfläche:

- Die In-Bedeckung der facettierten Oberfläche ist höher als die In-Bedeckung der $(n \times 4)$-rekonstruierten Oberfläche. Zusammen mit der Beobachtung, daß die facettierte Oberfläche durch Tempern der vollständig (5×4)-rekonstruierten Oberfläche präpariert werden kann, folgt daraus als Bedingung für die Sättigungsbedeckung Θ_{fac} der facettierten

Oberfläche:

$$0,5\ ML < \Theta_{fac} < 0,7\ ML$$

- entgegen den Schlußfolgerungen von Gai et al. [205] hat die facettierte Oberfläche keineswegs eine besonders geringe Oberflächenenergie. Für alle In-Bedeckungen unterhalb 0,5 ML gilt, daß die Koexistenz der $(n \times 4)$-rekonstruierten Oberfläche mit der reinen Oberfläche energetisch gegenüber der Koexistenz der facettierten Oberfläche mit der reinen Oberfläche begünstigt ist.

Für alle In-Bedeckungen $> \Theta_{fac}$ dagegen ist die Aussage, daß die facettierte Oberfläche die geringste freie Energie aufweist, nach unseren Beobachtungen korrekt.

Das Wachstum der In-induzierten Facetten unterscheidet sich – trotz ähnlicher Gestalt der facettierten Körper – grundsätzlich von dem der Germanium Hut-Cluster auf der Si(001)-Oberfläche. Die Hut-Cluster nukleieren und wachsen als einzelne Cluster, deren Position nicht korreliert ist. Die Hut-Cluster wechselwirken miteinander durch den Austausch von Atomen über die umgebenden Ge-Lagen (*wetting layer*) und wachsen bis zu einer kritischen Größe, welche durch die Verspannung an der Grenzschicht zwischen der Substratoberfläche und den kohärenten Clustern gegeben ist [322].

Da unsere Messungen nach unserer Kenntnis die ersten mikroskopischen Messungen zur Nukleation und Ausbreitung adsorbat-induzierter Facettierung auf niedrig-indizierten Halbleiteroberflächen darstellen, ist ein Vergleich mit verwandten Systemen nicht möglich. Dagegen sind einige experimentelle und theoretische Arbeiten zur Dynamik des Facettierungsprozesses an vizinalen (Metall-, Halbleiter- und Keramik-) Oberflächen bekannt. Auf der Grundlage von Beobachtungen zur Facettierung von Ag-Oberflächen mit optischer Mikroskopie [344] entwickelte Mullins [345] erste Modelle zur quantitativen Beschreibung der Ausbreitung der Facettierung. Er sagte voraus, daß die Facettierung mit der Nukleation *einzelner* Facetten beginnt, deren Wachstum über die Zeit durch ein Potenzgesetz beschrieben werden kann. STM-Messungen zur O-induzierten Facettierung vizinaler Ag(110)-Oberflächen bestätigen die Annahme, daß die Facettierung über das Wachstum einzelner Facetten voranschreitet [346].

Die Facettierung der reinen Si(111)-Oberfläche unterhalb der Temperatur des $1\times1 \leftrightarrow 7\times7$-Phasenübergangs studierten Phaneuf et al. [347] mit LEEM und Hibito et al. [348] mit HT-STM. Während Phaneuf et al. die Nukleation einzelner (111)-Facetten beobachtet, berichtet Hibino, daß sich die (111)-Facetten bevorzugt in der Nähe bereits vorhandener Facetten bilden. Die domänenartige Ausbreitung der Facettierung ist nach AFM-Untersuchungen von Heffelfinger et al. noch deutlicher für die thermische Facettierung von $Al_2O_3(\{10\bar{1}0\}$-Oberflächen ausgeprägt [349, 350]. Das Wachstum einer Facette verursacht eine lokale Verzerrung der Oberfläche in der Umgebung und begünstigt dadurch die Bildung einer angrenzenden Facette [348, 349]. Theoretische Arbeiten untermauern diesen Ansatz [351, 352] und sagen voraus, daß es eine kritische Facettenbreite gebe, bei der eine einzelne Facette durch lokalen Massentransport die Bildung einer angrenzenden Facette induziert [352]. Die Facettierung schreitet über das Wachstum der Domäne von Facetten einheitlicher Breite voran, bis die Domänengrenzen kollidieren.

Fortgesetztes Tempern im Stadium der vollständigen Facettierung läßt die Größe der Facetten in der Regel zunehmen (*coarsening*) und die Anordnung der Facetten gewinnt an Regelmäßigkeit [346, 349, 353]. Song et al.[353] studierten die Facettierung vizinaler Si(113)-Oberflächen nach dem Abkühlen der Probe aus der Hochtemperaturphase mittels Röntgenstreuung und beobachteten, daß der charakteristische Abstand der Facetten in der Phase des Coarsenings mit der Zeit über ein Potenzgesetz zunimmt. Der Mechanismus des Coarsenings wird auf die thermische Fluktuation von Stufenbündeln zurückgeführt. Die Kollision von Stufenbündel bewirkt durch das Ausheilen von Kinken das Wachstum der Facetten. Die Oberfläche strebt einem geordneten Zustand mit begrenzter Facettenweite zu. Der Wert der Facettenweite ist abhängig von der Temperatur und der Vizinalität der Oberfläche. Dieses Verhalten kann durch eine Theorie beschrieben werden, nach der dem Energiegewinn während des Coarsenings durch die Auflösung von Facettenbegrenzungen ein Verlust an *elastischer Energie* entgegensteht, die durch Spannungen der Substratoberflächen induziert wird [354]. Phaneuf et al. beobachten auf der vizinalen Si(111)-Oberfläche eine einheitliche Sättigungsweite der Facetten bereits im Stadium der isolierten Facetten und führten die begrenzte Größe auf den gleichen Mechanismus zurück [347]. Baski et al. schlagen ebenfalls vor, daß ein Gleichgewicht zwischen der Energie der Facettenkanten und einer elastischen Energie die einheitliche Breite der Facetten bestimmt, welche sie auf wohlgetemperten hochvizinalen Si(113)-Oberflächen beobachten [355].

Es erscheint verlockend, die Ansätze zur Erklärung der domänenartigen Ausbreitung und der regelmäßigen Anordnung der Facettierung auf die In-induzierte Facettierung der ebenen Ge(001)-Oberfläche zu übertragen. Dem steht allerdings entgegen, daß in unseren STM-Bildern trotz atomarer Auflösung kein Anzeichen für eine Störung der ebenen Ge(001)-Oberfläche an der Facettierungsfront zu erkennen ist und die dynamische Theorie der Ausbreitung der Facettierung auf vizinalen Oberflächen sich wegen des Fehlens des Elements "Stufenbündel" nicht ohne weiteres auf die Facettierung ebener Flächen übertragen läßt. Durch fortgesetztes Tempern in der Phase der vollständigen Facettierung (Coarsening) geht die Regelmäßigkeit verloren, was gegen die Interpretation des regelmäßigen Abstands als Eigenschaft eines energetischen Gleichgewichtszustands spricht. Weitere Argumente für unsere These, daß die regelmäßige Anordnung der Prismen auf die Kinetik des Facettierungsprozesses zurückzuführen ist, werden im Anschluß an die Darstellung der Beugungsexperimente und des Modells der In-terminierten Ge{103}-Facetten gegeben.

9.2.5 Beugung an der regelmäßig facettierten Oberfläche

Im folgenden sollen Beugungsexperimente an vollständig und regelmäßig facettierten Oberflächen vorgestellt werden. Die Untersuchung mit LEED dient der schnellen Charakterisierung der Probenoberfläche bezüglich ihrer Homogenität und einer möglichen Koexistenz facettierter Bereiche mit der ebenen (001)-Oberflächen. Darüber hinaus hat sich gezeigt, daß das Profil der Reflexe erste Informationen über die Gestalt und Größe der Facetten und die Regelmäßigkeit der Abfolge der facettierten Flächen offenbart. Die SXRD-Messungen ermöglichen genauere Aussagen über diese Größen und liefern insbesondere Informationen über die atomare Struktur der facettierten Oberflächen und das Verspannungsfeld.

LEED-Messungen

Die in Abbildung 9.14 dargestellte Sequenz von LEED-Bildern wurde an einer Oberfläche aufgenommen, deren Präparation weitgehend der in Abb. 9.10 gezeigten Oberfläche gleicht. Auf die saubere Ge(001)(2×1)-Oberfläche wurden etwa 1,2 ML In bei RT aufgedampft und anschließend bei etwa 320 °C für mehrere Minuten nachgetempert. Analog zur Sequenz der LEED-Bilder der Hut-Cluster auf der Si(001)-Oberfläche in Abb. 9.2 laufen die Reflexe am äußeren Rand des Schirms aufeinander zu und vereinen sich in (c) nahezu in einem Punkt (Koinzidenz bei 53 eV). Durch Vergleich mit LEED-Bild-Sequenzen von Oberflächen mit facettierten und ebenen (001)-Oberflächen in Koexistenz oder durch Rechnung kann leicht gezeigt werden, daß der Ort der Koinzidenz der Ort eines ganzzahligen reziproken Gitterstabs der (001)-Ebene ((1,1)-, ($\bar{1}$,1)-, ($\bar{1}$,$\bar{1}$)- bzw. (1,$\bar{1}$)-Reflex) und darüber hinaus ein

Bragg-Punkt des Substratgitters ist. Die atomare Struktur der Facetten ist somit kohärent zum Substratgitter.

Die inneren Reflexe dieser Gruppe aufeinanderzulaufender Reflexe ändert bei Variation der Elektronenenergie ihre Position auf dem Schirm nicht und werden als Spekularreflexe der {103}-Oberflächen identifiziert. Nach Abschnitt 3.2 kann mit Hilfe dieser Koinzidenz und der zugehörigen Elektronenenergie eindeutig die Orientierung der Facetten bestimmt werden. Der aus dem Beugungsbild bestimmte Neigungswinkel zwischen den Spekularreflexen der Facetten und der (001)-Ebene von $\Theta = 18 \pm 0,5°$ stimmt gut mit der Identifikation als {103}-Facetten überein.

Die Anordnung der Reflexe und die für facettierte Oberflächen charakteristische Änderung der Position der Reflexe zueinander kann durch eine einfache Überlagerung der Beugungsbilder an (1×1)-rekonstruierten (103)-, $(0\bar{1}3)$-, (013)- und $(\bar{1}03)$-Oberflächen erklärt werden. Eine solche Anordnung ist schematisch in Abb. 9.14.d für eine Elektronenenergie von 40 eV wiedergegeben. Analog zu einem Beugungsbild einer ebenen Oberfläche bewegen sich die Reflexe, die zur gleichen Facette gehören, mit steigender Elektronenenergie auf ihren Spekularreflex zu. Die Bahnen von Reflexen, die zu Facetten unterschiedlicher Orientierungen gehören, kreuzen sich. Die Zuordnung der Reflexe entspricht der Zuordnung von Gai et al. für die In-induzierte Facettierung der Ge(001)-Oberfläche [205] und von Zhao et al. für die Al induzierte Facettierung der Si(001)-Oberfläche [338].

Im Vergleich zu den Beugungsbildern der {105}-facettierten Hut-Cluster Oberflächen werden mehrere Unterschiede beobachtet. Die Spekularreflexe der {103}-Facetten befinden sich näher zum Rand des Schirms, was direkt eine Folge der größeren Neigung der {103}-Oberflächen zur (001)-Oberfläche ist. Es werden keine Reflexe der (001)-Oberfläche beobachtet, da die Oberfläche vollständig facettiert ist und kein Zwischenraum zwischen den Prismen offen bleibt. Die Beugungsbilder weisen einen hohen Kontrast und einen geringen Hintergrund auf, was auf eine hohe Qualität der Oberfläche, aber auch auf die hohe Ordnungszahl der Streuatome zurückzuführen ist. Und schließlich ist das Profil der Facettenreflexe nicht rund, sondern länglich aufgeweitet. Bei genauer Inspektion der Reflexe kann bei geeigneter Wahl der Elektronenenergie eine Aufspaltung der Reflexe beobachtet werden.

Die anisotrope Aufweitung der Reflexe ist bedingt durch die geringe Breite der einzelnen Facettenflächen von ca. 30 Å, welche deutlich unter der Transferweite unseres LEED-Systems liegt. Die Aufspaltung der Reflexe gibt die Regelmäßigkeit der Abfolge der Facettenflächen wieder [356]. Die Distanz der Reflexe im reziproken Raum entspricht im Ortsraum einem Abstand von (60 ± 30) Å und ist mit der mittleren Breite der Prismen bei regelmäßiger Facettierung vereinbar. Diese Aufspaltung der Facettenreflexe ist bei geeignetem Neigungswinkel der Probe zum Strahl ebenfalls gut im RHEED-Bild zu erkennen, so daß die Oberfläche in Bezug auf eine regelmäßige Anordnung der Prismen bereits während der Präparation untersucht werden kann.

SXRD-Messungen

An einer weiteren vollständig und regelmäßig facettierten Probe wurden im Anschluß an eine eingehende Charakterisierung mit STM (siehe Abb. 9.19) SXRD-Messungen vorgenommen. Dazu wurde die Probe in eine transportable UHV-Kammer mit halbkugelförmigem Be-Fenster transferiert und unter Wahrung des UHV zum Diffraktometer am Strahl BW2 im HASYLAB transportiert.

Die Messungen sowie die Analyse der Meßdaten und die Modellrechnungen wurden von M. Nielsen durchgeführt und sind in Ref. [293] beschrieben. Analog zu den SXRD-Messungen

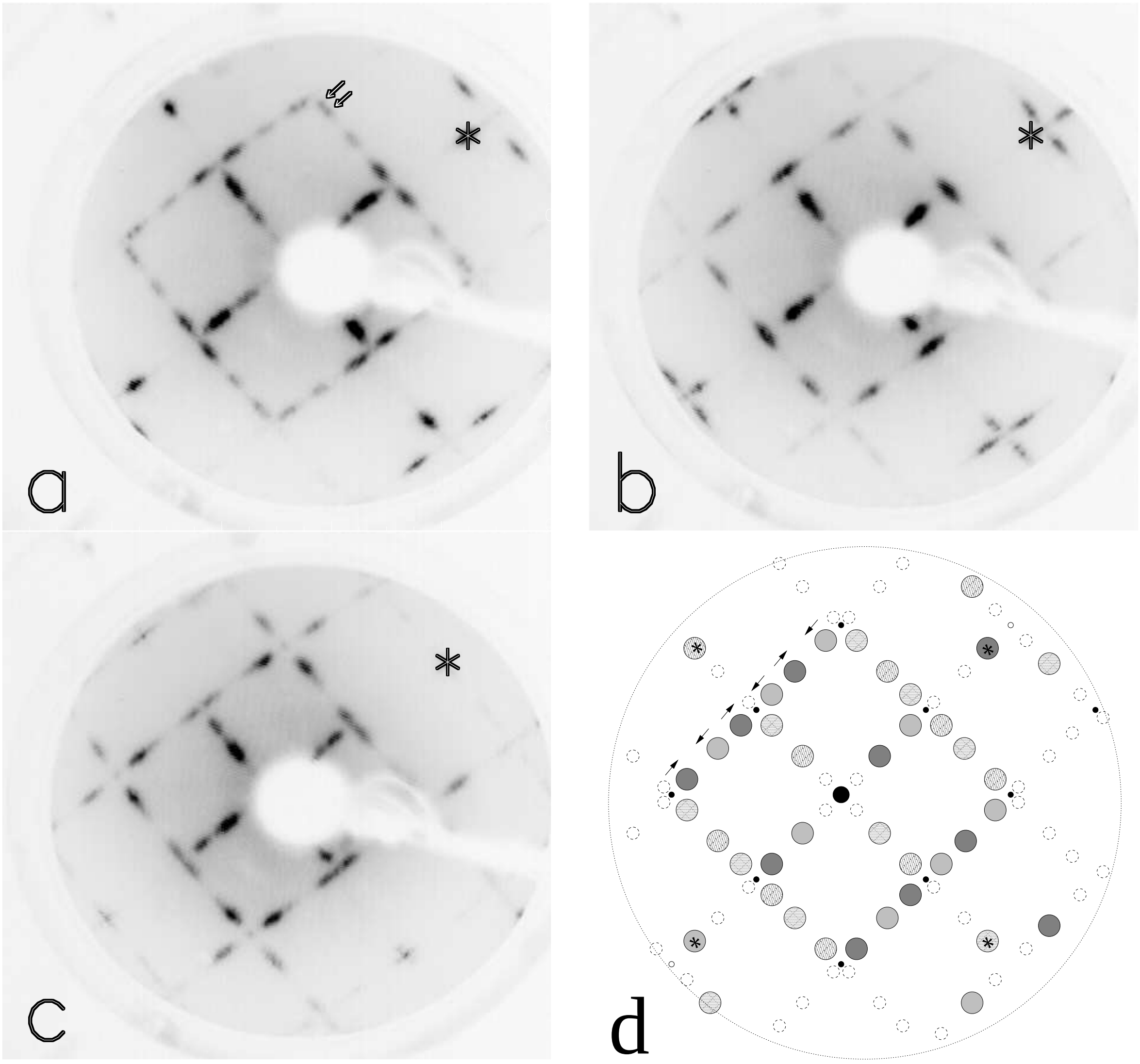

Abbildung 9.14: LEED-Bilder einer nach In-Deposition vollständig und regelmäßig {103}-facettierten Ge(001)-Oberfläche (a)-(c) und ihre schematische Repräsentation (d). Die Elektronenenergie beträgt (a) 40 eV, (b) 45 eV und (c) 51 eV. Der (0,0)-Reflex einer Facettenorientierung ist in (a)-(c) mit einem $*$ gekennzeichnet. Die Pfeile in (a) weisen exemplarisch auf aufgespaltene Reflexe infolge der regelmäßigen Anordnung der Facetten. (d) Schematische Repräsentation eines LEED-Bildes der facettierten Oberfläche bei 40 eV. Die schwarzen Kreise markieren die Position der ganzzahligen Reflexe der (001)-Oberfläche. Die großen Kreise geben die abgebildeten Reflexe der facettierten Oberflächen allen vier Orientierungen wieder. Die kleinen Kreise vervollständigen die periodische Anordnung der Reflexe, werden aber nicht beobachtet. Die (0,0)-Reflexe der Facetten sind mit einem $*$ gekennzeichnet. Die Pfeile markieren die Bewegungsrichtung der Reflexe bei Erhöhung der Elektronenenergie.

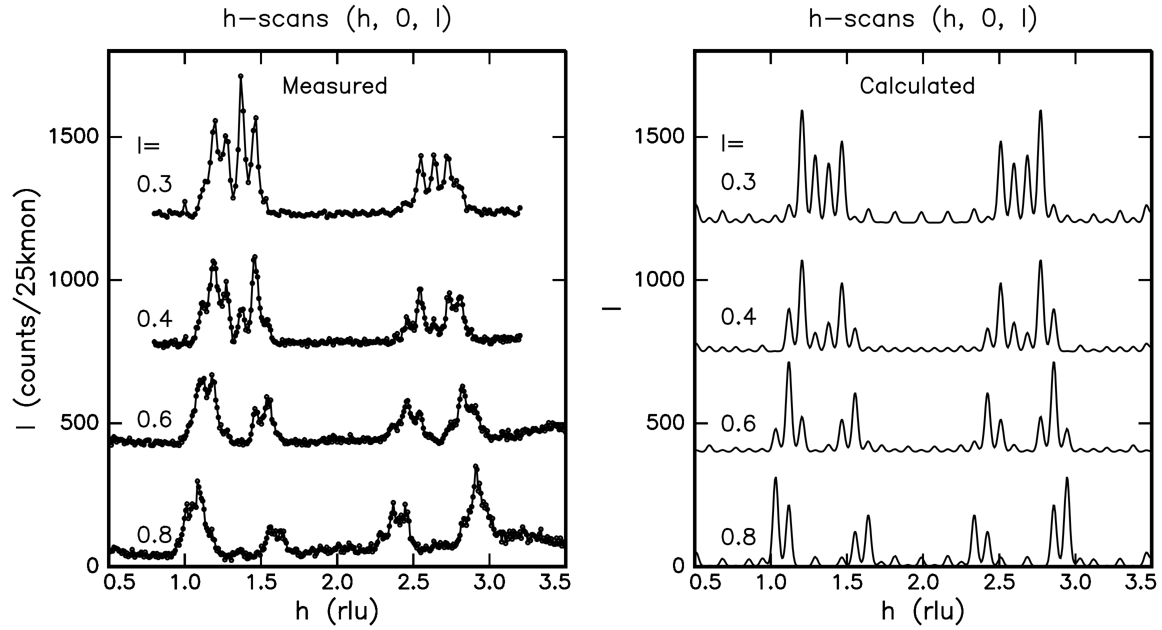

Abbildung 9.15: Gemessene und berechnete Röntgenbeugungsprofile der vollständig {103}-facettierten Ge(001)-Oberfläche infolge In-Adsorption. Die Beugungsprofile ($h - scans$ bei verschiedenen Werten von l) verlaufen durch den ($20l$) crystal truncation rod der (001)-Oberfläche.

an den Ge/Si(001) Hut-Cluster Oberflächen (Abschn. 9.1.6) wurden $h - scans$ bei verschiedenen festgehaltenen Werten von k und l durchgeführt. Im Fall einer ebenen Oberfläche entspricht dies der Messung eines Röntgenprofils durch einen *crystal truncation rod* (CTR). Die Abbildung 9.15 zeigt einige $h - scans$ durch den ($20l$) CTR. Im Vergleich zu den Messungen an den Ge/Si(001) Hut-Cluster Oberflächen fällt auf, daß ein zentrales Maximum an der Position $h = 2$, wo ein CTR erwartet wird, nicht existiert. Daraus kann unmittelbar geschlossen werden, daß weder Teile der (001)- Oberfläche zwischen den facettierten Flächen offen bleiben — was in Übereinstimmung mit den LEED- und STM-Messungen ist — noch eine ausgezeichnete Grenzfläche zwischen der Basis der Prismen und dem Substratvolumen existiert, für die die SXRD wegen der großen Eindringtiefe der Röntgenstrahlung ebenfalls empfindlich sein sollte. Der Kristallstruktur des Ge-Volumens wird in den Prismen demnach bis zur Oberfläche fortgeführt.

Die Form der beobachteten Maxima wird durch Satellitenmaxima dominiert, die analog zur Reflexaufspaltung in den LEED-Bildern durch die Regelmäßigkeit der Anordnung der Prismen hervorgerufen wird. Eine Asymmetrie äquivalenter Facettenreflexe, wie sie für die Beugungsprofile der Ge/Si(001) Hut-Cluster Oberflächen charakteristisch ist, wird nicht beobachtet. Insbesondere die Ergebnisse der Messungen nahe dem (4 0 0) Bragg-Punkt (o. Abb.) zeigen, daß die Verspannung in den Prismen sehr klein ist ($< 1\%$).

Für die Modellrechnung wurde deshalb angenommen, daß alle Ge-Atome Positionen des idealen Ge-Gitters einnehmen. Die Oberfläche wird ausschließlich durch {103}-Facetten begrenzt, die die Seitenflächen von Prismen darstellen. Die Prismen weisen eine einheitliche Größe auf (Breite 63 Å, Länge 1000 Å) und grenzen aneinander. Durch ihre regelmäßige Anordnung bilden sie eine Überstruktur. Die Einheitszelle für die Strukturfaktorberechnungen entspricht einem vollständigem Prisma. Die Ergebnisse der Rechnungen sind in Abb. 9.15 den experimentellen Daten gegenübergestellt. Um eine akzeptable Übereinstimmung der relativen Intensitäten der vier Hauptmaxima zu erzielen, war es notwendig, In-Atome in die Rechnung mit einzubeziehen. Die In-Atome terminieren die {103}-Flächen gemäß einem Modell, welches im folgenden Abschnitt vorgestellt wird.

9.2.6 Strukturmodell der {103}-facettierten Oberfläche

In Abschnitt 9.2.4 wurde anhand einer Folge von STM-Messungen gezeigt, daß die In-bedeckte Ge(001)-Oberfläche nach geeigneter Präparation nicht länger als ebene Fläche (bzw. als schuppige Fläche bei höherer Stufendichte) zu beschreiben ist, sondern als Mosaik prismenförmiger Objekte. Die Oberflächen der Prismen sind atomar eben. Ihre Neigung und Orientierung zur (001)-Ebene lassen darauf schließen, daß es sich um {103}-Oberflächen handelt. Da das Höhenniveau der Oberfläche nach der Facettierung, gemittelt über die Fläche mehrerer Prismen, erhalten bleibt, stellen die Prismen eine lokale Verwerfung der Substratoberfläche dar und bestehen nicht vollständig aus Adsorbatatomen. Die Ergebnisse der LEED- und SXRD-Messungen unterstreichen die Identifizierung der Prismenflächen als {103}-Facetten. Die SXRD-Messungen zeigen eindeutig, daß die Kristallstruktur des Substrats in den Prismen unverändert fortgeführt wird und lediglich ihre Oberfläche durch In-Atome terminiert ist.

Die ideale (103)-Oberfläche kann wie die Oberflächen der äquivalenten Orientierungen $(\bar{1}03)$, $(0\bar{1}3)$ und (013) als hochvizinale (001)-Oberfläche verstanden werden. Die Abbildung 9.16 zeigt in einer schematischen Darstellung zwei aneinandergrenzende $(\bar{1}03)$- bzw. (103)-Flächen in Projektion auf die (001)-Ebene (Aufsicht) und in Projektion auf die (010)-Ebene (Schnitt). Die $(\bar{1}03)$-Fläche (links) stellt die unbedeckte ideale Fläche dar, während die (103)-Fläche (rechts) bereits In-terminiert ist. Die Stufen zwischen den (001)-Terrassen verlaufen in $\langle 010 \rangle$-Richtung, also unter 45° zur Richtung der Dimerreihen auf der ebenen (001)-Oberfläche. Die Breite der Terrassen beträgt $\frac{3}{4}a_0$ (4,25 Å). Die oberste Ge-Atomlage auf jeder Terrasse wird von zwei Reihen von Ge-Atomen gebildet, die parallel zu den Stufenkanten angeordnet sind. Die Ge-Atome der ersten Reihe befinden sich an den unteren Stufenkanten. Sie binden zu zwei Atomen der nächst tieferen Ge-Lage und zu einem Ge-Atom der nächst höheren Terrasse, so daß die Ge-Atome an den unteren Stufenkanten jeweils ein Dangling Bond aufweisen. Die Atome der zweiten Reihe bilden die obere Stufenkante. Sie binden zu zwei Ge-Atomen der nächst tieferen Lage und weisen zwei Dangling Bonds auf. Der Abstand der Atome innerhalb der Reihen beträgt $1a_0$ (5,66 Å). Die Ge-Atome auf aufeinanderfolgenden Terrassen sind alternierend versetzt angeordnet. Die Länge einer (1×1)-Einheitszelle der {103}-Oberfläche beträgt somit $\sqrt{10}/2a_0$ (8,95 Å) und in Projektion auf die (001)-Ebene $\frac{3}{2}a_0$ (8,49 Å). Eine (1×1)-Einheitszelle ist mit durchgezogenen Linien eingezeichnet. Eine Beschreibung der {103}-Facetten als ebene (103)-Oberfläche wird in Abschn. 10.2 gegeben.

Unser Modell der In-terminierten Ge(103)-Oberfläche ergibt sich aus dem Modell der idealen (103)-Oberfläche, indem die Stufenkanten der (001)-Terrassen im Abstand von $1a$ mit In-Atomen besetzt werden. Jedes In-Atom bindet an zwei Atome einer unteren Terrasse und ein Atom einer oberen Terrasse. Die beste Übereinstimmung der SXRD-Daten mit den Simulationsrechnungen ergibt sich für eine nahezu zentrale Position der In-Atome zwischen den drei Ge-Atomen [293]. Die In-Atome sättigen alle Dangling Bonds der Ge-Atome ab, ohne extreme Abweichungen von den angestrebten Bindungswinkeln und -Längen hervorzurufen. Die Oberfläche bleibt in Übereinstimmung mit den STM, LEED und SXRD-Beobachtungen (1×1)-rekonstruiert, und jede (1×1)-Einheitszelle enthält zwei In-Atome. Die In-Bedeckung beträgt in diesem Modell bezogen auf die (103)-Fläche 2 ML_{103} und bezogen auf die (001)-Fläche 0,63 ML_{001}. Unter Vernachlässigung der Relaxation der Substratatome ist die Bindungsgeometrie der In-Atome zu den nächsten Substratatomen identisch mit der Bindungsgeometrie der In-Atome in den Rekonstruktionen Ge(001)(5×4), Ge(001)$(n \times 4)$ und Si(001)(3×4). Die Abstände der In-Atome zu ihren nächsten In-Nachbarn sind in der (103)(1×1)-Struktur jedoch größer.

Unser Modell entspricht weitgehend dem Modell von Gai et al. für die In-terminierten Ge{103}-Facetten [205]. Gai et al. ersetzen allerdings die In-Atomen in jeder zweiten Reihe durch Ge-Atome und die In-Bedeckung reduziert sich auf 0,32 ML_{001}. Sie erklären dadurch gleichermaßen ihre STM-Abbildungen, in der jede zweite Reihe von Erhöhungen dunkler erscheint und ihre AES-Ergebnisse, nach der die Facettierung in einem Bedeckungsbereich von 0,6-0,2 $ML_{(001)}$ beobachtet wird. Ihr Modell ist identisch mit dem Modell der Al-induzierten Si{103}-Facetten, welches Zhao et al. auf der Grundlage von LEED- und AES-Messungen vorgeschlagen haben [338].

Diese Modellvariante mit halber In-Bedeckung ist mit unseren Beobachtungen zur In-Bedeckung facettierter Oberflächen nicht vereinbar. Die facettierte Oberfläche kann ohne weitere In-Deposition durch Tempern der vollständig (5×4)-rekonstruierten Oberfläche präpariert und durch weiteres Tempern in eine vollständig $(n \times 4)$-rekonstruierte Oberfläche überführt werden. Die In- Bedeckung der facettierten Oberfläche muß deshalb zwischen der Sättigungsbedeckung der (5×4)-rekonstruierten Oberfläche (0,7 ML) und der Bedeckung der $(n \times 4)$-rekonstruierten Oberfläche (0,5 ML) liegen. Diese Bedingung wird von unserem Modell erfüllt. Die Bedeckung im Modell von Gai et al. liegt jedoch erheblich unterhalb der Bedeckung der $(n \times 4)$-Rekonstruktion. Weitere Unterstützung erfährt unsere Modellvariante durch die Beobachtungen von Knall et al. und Li et al. am verwandten System In/Si(001). Knall et al. beobachten eine (partielle) In-induzierte {103}-Facettierung gemäß ihren AES-Messungen nur auf Oberflächen mit In-Bedeckungen >0,5 ML [184]. Li et al. beobachten {103}-facettierte Stufenbündel auf vizinalen Si(001)-Oberflächen ebenfalls nur für In-Bedeckungen, die die Sättigungsbedeckung der (3×4)-Rekonstruktion (0,5 ML) übersteigen [191].

Die hochaufgelösten STM-Bilder der facettierten Oberflächen unserer Gruppe und von Gai et al. weisen keine grundsätzlichen Unterschiede auf. Sie zeigen zwei Erhöhungen pro Einheitszelle. Die beiden Erhöhungen sind in Richtung der langen Seite der Elementarzelle bzw. in Richtung der Spitze der Prismen zueinander versetzt angeordnet und geben die Anordnung der In-Atome der Adlage in unserem Modell oder auch der Ge-Atom der idealen (103)-Oberfläche gut wieder. Die zwei Erhöhungen pro Elementarzelle erscheinen in einigen Abbildungen identisch, während in anderen ein deutlicher Höhenkontrast beobachtet wird. Nach Gai et al. ist der Kontrast abhängig von der Tunnelspannung. Bei der Abbildung der unbesetzten Zustände (+1,6 V) wird ein Kontrast beobachtet und bei der Abbildung der besetzten Zustände (-1,6 V) nicht.

Nach unseren Erfahrungen der Zustand der Tunnelspitze bzw. die Orientierung der Facettenoberfläche zur Tunnelspitze ein entscheidender Faktor für die Abbildung der Erhöhungen. Abbildung 9.17 zeigt eine Aufnahme eines Ausschnitt der Oberfläche aus Abb. 9.6 bei Abbildung der unbesetzten Zustände (+1,4 V) in 3-D Darstellung. Der Ausschnitt umfaßt vier {103}-Facettenflächen mit drei verschiedenen Orientierungen. Obwohl die Tunnelparameter für die Abbildung der Flächen naturgemäß identisch sind, erscheinen die beiden Erhöhungen jeder (1×1)-Zelle auf Fläche (A) gleich, auf Fläche (B) mit unterschiedlicher Höhe und auf Fläche (C) in leicht versetzter Anordnung. Es ist wenig wahrscheinlich, daß die Struktur auf den benachbarten Flächen unterschiedlich ist. Vielmehr sind die Facettenflächen unterschiedlich zur Tunnelspitze orientiert, so daß unter der Annahme einer asymmetrischen Spitze eine abweichende Darstellung resultieren kann.

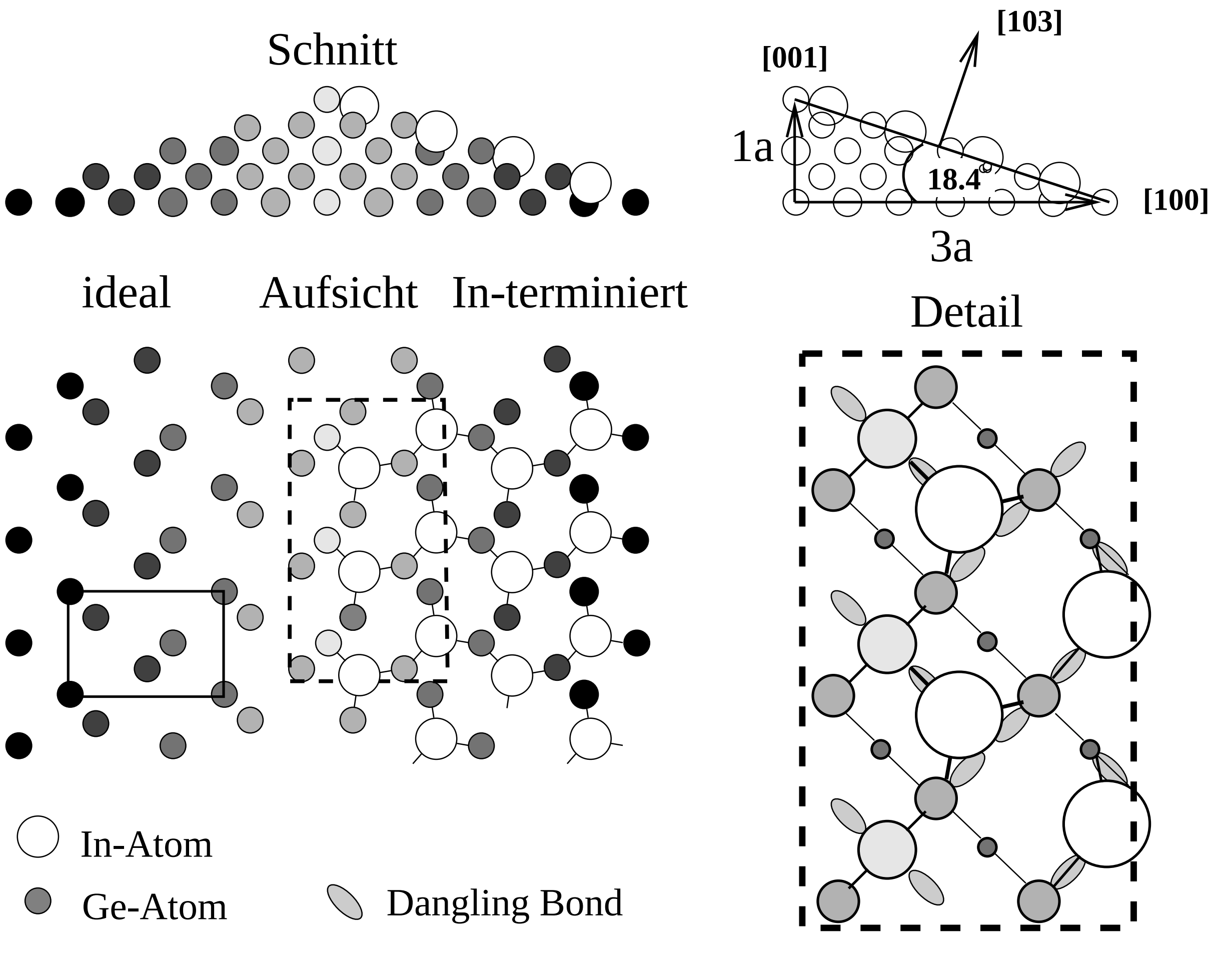

Abbildung 9.16: Schematisches Modell der idealen (links) und In-terminierten {103}-facettierten Ge(001)-Oberfläche. Die Graustufen in der Darstellung der Aufsicht unterstützen die Zuordnung der Atome zu (001)-Lagen verschiedener Höhe. Eine (1×1)-Einheitszelle der {103}-Oberfläche ist mit durchgezogenen Linien eingezeichnet.

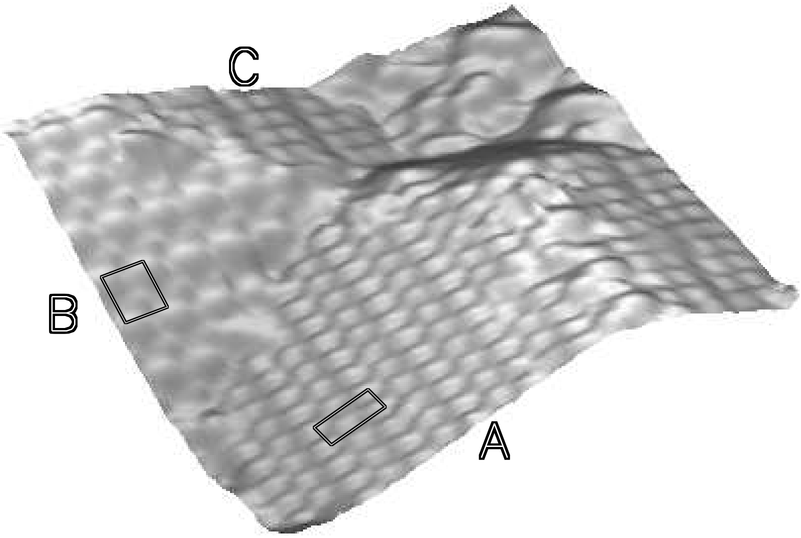

Abbildung 9.17: STM-Bild in 3D-Darstellung mehrerer aneinandergrenzender {103} - Facettenflächen mit atomarer Auflösung. Die Abbildung der Strukturen auf den ebenen Flächen ist abhängig von ihrer Orientierung (Spitzenartefakt). Die Maschen markieren (1×1)-Einheitszellen der {103}-Oberfläche ($U = +1,4\ V,\ I = 0,5\ nA$).

Ein Kontrast zwischen zwei Erhebungen sollte aber nur möglich sein, falls die beiden abgebildeten Atome nicht ununterscheidbar sind. In der Interpretation von Gai et al. ist der beobachtete Kontrast ein elektronischer Effekt und spiegelt die unterschiedliche chemische Natur der Atome der obersten Lage wider. Wir nehmen dagegen an, daß die Oberfläche ausschließlich von In-Atomen terminiert wird und der Kontrast primär ein geometrischer Effekt ist. Die beiden Adsorptionsplätze der In-Atome innerhalb der Elementarzelle sind nicht vollständig äquivalent, sondern gehen mittels einer Gleitspiegeloperation auseinander hervor. Die In-Atome binden zu jeweils zwei Substratatomen der ersten {103}-Lage und zu einem der zweiten {103}-Lage. Die Ebenen, welche jeweils durch die drei bindenden Ge-Atome gegeben sind, sind gegeneinander geneigt. Diese Differenz in der Orientierung setzt sich vermutlich in der Ladungsdichteverteilung der Oberfläche fort, etwa in der Ausrichtung von unbesetzten p_z-Orbitalen der In-Atome. Eine geeignet asymmetrische Spitze sollte deshalb die Orbitale einer Orientierung bevorzugt abbilden können. Bezüglich einer anderen Orientierung der Facettenfläche ist die asymmetrische Spitze dagegen annähernd symmetrisch und beide Erhöhungen werden gleich abgebildet. Die Möglichkeit der Abbildung eines Kontrastes zwischen Oberflächenatomen, die sich allein durch die Orientierung ihrer Bindungen zu Nachbaratomen unterscheiden, ist bekannt [357].

Eine Abhängigkeit der Abbildung des Kontrastes von der Tunnelspannungspolarität wurde von uns ebenfalls beobachtet, jedoch tragen die Beobachtungen nicht zu einer Vereinfachung des Bildes bei. Die Abbildung 9.7 zeigt dieselbe Oberfläche wie Abb. 9.17 nach dem Wechsel der Tunnelspannungspolarität. Die linke Facette in Abb 9.7 entspricht der Fläche (B) in Abb. 9.17 und die rechte Facette der Fläche (A). Mit dem Wechsel der Tunnelspannungspolarität von positiver Probenspannung zu negativer Probenspannung wechselt die Abbildung der Erhöhungen auf Fläche (A) von identisch zu unterscheidbar, während sie gleichzeitig auf Fläche (B) von unterscheidbar zu identisch wechselt. In Abschnitt 10.5 wird gezeigt werden, daß auf der ebenen Ge(103)(1 × 1)-In Oberfläche die zwei Erhebungen pro Elementarzelle im allgemeinen bei allen verwendeten Tunnelspannungen ununterscheidbar sind.

Das Modell der Facettenflächen erklärt das Bestreben der Oberfläche zu facettieren, da nach dem Modell alle Dangling Bonds des Substrates durch die Bindung an In-Atome abgesättigt sind, die In-Atome ihre planare dreifach zum Substrat koordinierte Bindungsgeometrie einnehmen können und gleichzeitig die Verspannung des Substrates nach den SXRD-Messungen gering ist. Das Modell erklärt jedoch eine bemerkenswerte Eigenschaft der facettierten Oberfläche nicht, nämlich die (bei geeigneter Präparation) homogenen Größenverteilungen der Prismen. Die Beschreibung der facettierten Oberfläche durch ein Modell für die Facettenflächen allein ist jedoch unvollständig und vernachlässigt die Begrenzungen zwischen den Facettenflächen an der Basis der Prismen, an ihren Firsten und die seitlichen Begrenzungen der Facettenflächen.

Sofern, wie im Modell in Abb. 9.16 dargestellt, die oberste Terrasse der Prismen durch eine einzelne Substratatomreihe gebildet wird, ist es möglich, auch an den Firsten alle Dangling Bonds der Substratatome durch Bindungen an In-Atome abzusättigen. Für alle anderen Begrenzungen ist dies nicht möglich. Es bleiben zwangsläufig Dangling Bonds des Substrats offen oder es greifen andere Rekonstruktionsmechanismen wie Dimerisierung.

Aus den STM-Bildern konnten keine weiteren Informationen über die Begrenzungen gewonnen werden. Es ist jedoch auffällig, daß in einigen Bildern wie Abb. 9.8 die Firste einiger Prismen vollständig regelmäßig abgebildet werden, während die Firste anderer Prismen mit Defekten dekoriert erscheinen. Diese Beobachtung legt die Vermutung nahe, daß sich die Struktur der Oberfläche auf den Firsten unterscheidet und neben den Prismen mit einer einzelnen obersten Substratatomreihe auch Prismen mit einer doppelten obersten Substratatomreihe gebildet werden, deren Firste weniger inert gegen Restgaskontamination sind.

Die Länge der Begrenzungen der Facettenflächen und der Umfang des mit der Facettierung verbundenen Massentransports bilden zwei wichtige Größen, mit Hilfe derer ein qualitatives Verständnis der Abhängigkeit der Größe der Prismen von der Temperatur entwickelt werden kann. Im vorhergehenden Abschnitt wurde gezeigt, daß bei niedrigen Temperaturen in der Phase der fortschreitenden Facettierung lange schmale Prismen entstehen und durch ein Nachtempern der vollständig facettierten Oberfläche die Größe einzelner Prismen zunimmt. Die Gesamtfläche der Facetten wird dadurch kaum berührt, es sinkt jedoch die Gesamtlänge der Begrenzungen zwischen den Facettenflächen. Unter der Annahme, daß die Oberflächenenergie der Begrenzungen höher als die der facettierten Fläche ist, sinkt die Oberflächenenergie durch die Vergrößerung der Prismen und die Oberfläche strebt ihrem thermischen Gleichgewicht entgegen. Für die Bildung größerer Prismen ist jedoch ein größerer Massentransport über weitere Strecken erforderlich. In der Phase der fortschreitenden Facettierung, in der die Reduktion der Oberflächenenergie durch die Zunahme der facettierten Gesamtfläche dominiert wird, bilden sich deshalb lange schmale Prismen, da die facettierte Fläche bei gleichem Massentransport umgekehrt proportional zur Prismenbreite zunimmt. In diesem stark vereinfachten Bild des Facettierungsprozesses ergibt sich die Facettengröße demnach als Kompromiß aus notwendigem Massentransport und der Dichte der Begrenzungen der Facettenflächen.

9.2.7 Abhängigkeit der Prismenbreite von der Präparation

Zur Untermauerung unserer These, nach der die Oberflächenenergie wesentlich von der Gesamtlänge der Begrenzungen zwischen den Facettenflächen abhängt, der Prozeß der Facettierung dabei aber durch die Kinetik begrenzt ist, wurden weitere Experimente zur Facettierung durchgeführt, in denen unterschiedliche Temperaturen für den Prozeß der fortschreitenden

Facettierung gewählt wurden. Durch die Erhöhung der Temperatur und damit des potentiellen Massentransports in der Phase der fortschreitenden Facettierung sollte es bei kinetischer Begrenzung der Facettenbreite möglich sein, die Breite einzelner Prismen zu erhöhen und gleichzeitig eine regelmäßige Anordnung von Prismen homogener Breite zu erreichen. Die Breite der Prismen, also die "Weite des Strichgitters" sollte durch die Wahl der Temperatur bestimmt werden können. Im folgenden werden erste Experimente zu dieser Thematik dargestellt.

Die Abbildungen 9.18-9.21 zeigen STM-Bilder und Höherprofile von vier verschiedenen Präparationen vollständig facettierter Ge(001)-Oberflächen. Die Größe der dargestellten Ausschnitte beträgt jeweils (2000×1000) Å^2. Die Höhenlinien erstrecken sich jeweils über die Breite von zehn Prismen. Sie wurden durchgehend in Scanrichtung ausgeführt, um eine Verfälschung der Abstandsmessung durch Drift zu minimieren.

Die Präparation in Abb. 9.18 zeigt hinsichtlich der Homogenität der Prismenbreiten und der Größe der Domänen paralleler Prismen die besten Ergebnisse. Auf die Ge(001)-Oberfläche wurden etwa 1,5 ML In bei RT aufgedampft und für einigen Minuten bei 280 °C nachgetempert. Die Temperatur von 280 °C stellt nach unseren Erfahrungen die untere Grenze dar, für die eine vollständige Facettierung erreicht werden kann. Die Domänengröße langer paralleler Prismen homogener Breite beträgt typisch (1000×1000) Å^2, wobei auch Domänen bis zu einer Größe von (5000×5000) Å^2 beobachtet wurden. Die Dichte von Defekten in Form breiterer und dabei in der Regel kürzerer Prismen ist gering. Die Höhenlinie zwischen den Punkten A und B im defektfreien Bereich zeigt eine über zehn Prismen gemittelte Prismenbreite von 61 Å an. Da in den Prismen das Substratgitter fortgeführt wird, muß die Breite der Prismen ein Vielfaches von $\frac{3}{4}a_0$ (4,25 Å) betragen. Der gemessene Wert ist gut vereinbar mit einer Prismenbreite von $16 \times 4,25$ Å. Bei genauerer Betrachtung ist die Breite der Prismen auch in den defektfreien Bereichen nicht vollständig konstant, sondern weist gelegentlich Abweichungen vom mittleren Wert auf.

Die Oberfläche in Abb. 9.19 wurde durch Deposition von 1,5 ML In bei RT und dreiminütigem Nachtempern bei 350 °C präpariert. An dieser Oberfläche wurden die SXRD-Messungen vorgenommen. Trotz der im Vergleich zur vorherigen Präparation höheren Temperatur des Tempervorgangs ist die mittlere Prismengröße in den homogen erscheinenden Bereichen mit ca. 60 Å nahezu unverändert. Die Dichte einzelner breiterer Prismen ist im Vergleich höher, und in den homogen erscheinenden Bereichen sind lokale Abweichungen der Prismenbreiten vom mittleren Wert häufiger. Die über die linken fünf Prismen des Höhenprofils gemittelte Prismenbreite beträgt 64 Å und über die rechten fünf Prismen 56 Å.

Eine größere mittlere Prismenbreite konnte durch Präparation bei 450 °C erzielt werden. Für Substrattemperaturen jenseits 380 °C besteht das Problem, daß von der Oberfläche merklich In desorbiert und die Facettierung in kurzer Zeit wieder zerfällt. Deshalb wurde das Adsorbat in der in Abb. 9.20 dargestellten Präparation nicht bei RT deponiert und nachgetempert, sondern im Desorptionsgleichgewicht bei 450 °C aufgedampft. Die Depositionsrate wurde dafür um eine Größenordnung auf 0,2 ML/s erhöht. Die Anordnung der Prismen ist im Vergleich zu den obigen Präparationen bei geringeren Temperaturen durch das Auftreten einzelner großer Prismen mit Breiten bis 250 Å und durch Domänen mit Prismen uneinheitlicher Orientierung und Größenverteilung weniger regelmäßig (Abb. 9.20 rechts). Der größte Teil der Oberfläche zeigt Domänen langer paralleler Prismen. Die Breite der Prismen in diesen Bereichen variiert zwischen 80 Å und 120 Å und beträgt im Mittel 110 Å.

Eine signifikant kleinere Prismenbreite wurde durch In-Deposition bei einer Substrattemperatur von 350 °C erzielt (Abb. 9.21). Im Vergleich zu den Oberflächen, die durch RT-Deposition und Nachtempern präpariert wurden, sind die Prismen durch das Auftreten von

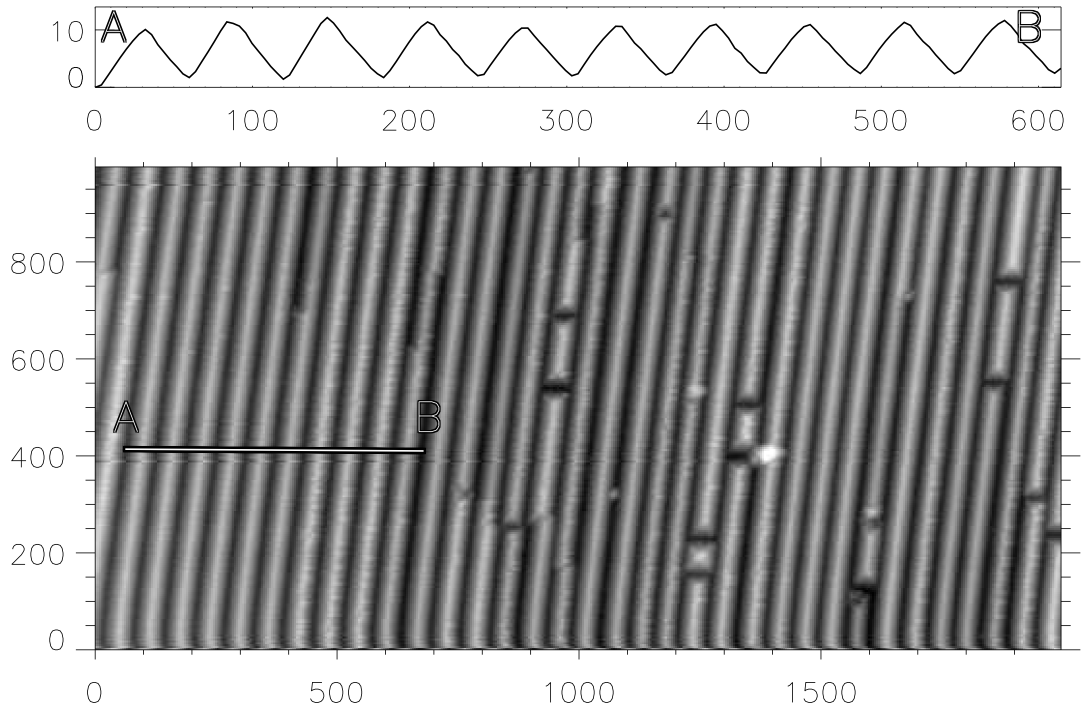

Abbildung 9.18: STM-Topographie und Höhenprofil einer Ge(001)-Oberfläche nach Aufdampfen von 1,5 ML In bei RT und Nachtempern bei 280 °C ($U = -1,9\ V,\ I = 1,2\ nA$).

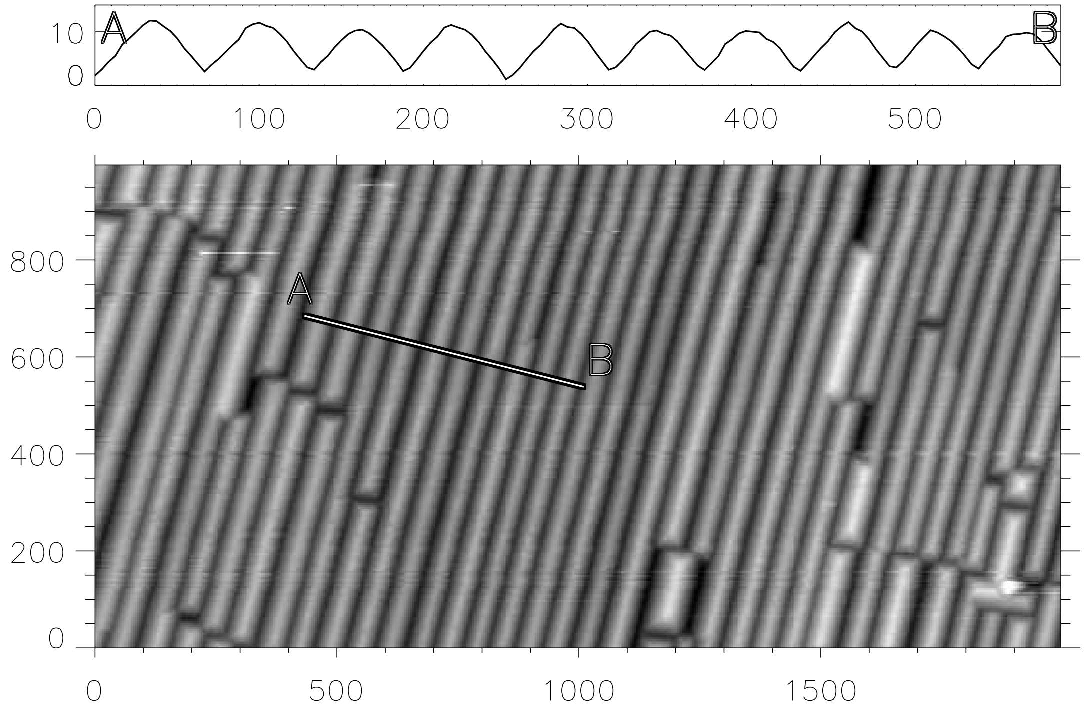

Abbildung 9.19: STM-Topographie und Höhenprofil einer Ge(001)-Oberfläche nach Aufdampfen von 1,5 ML In bei RT und Nachtempern bei 350 °C ($U = -0,4\ V,\ I = 3,0\ nA$).

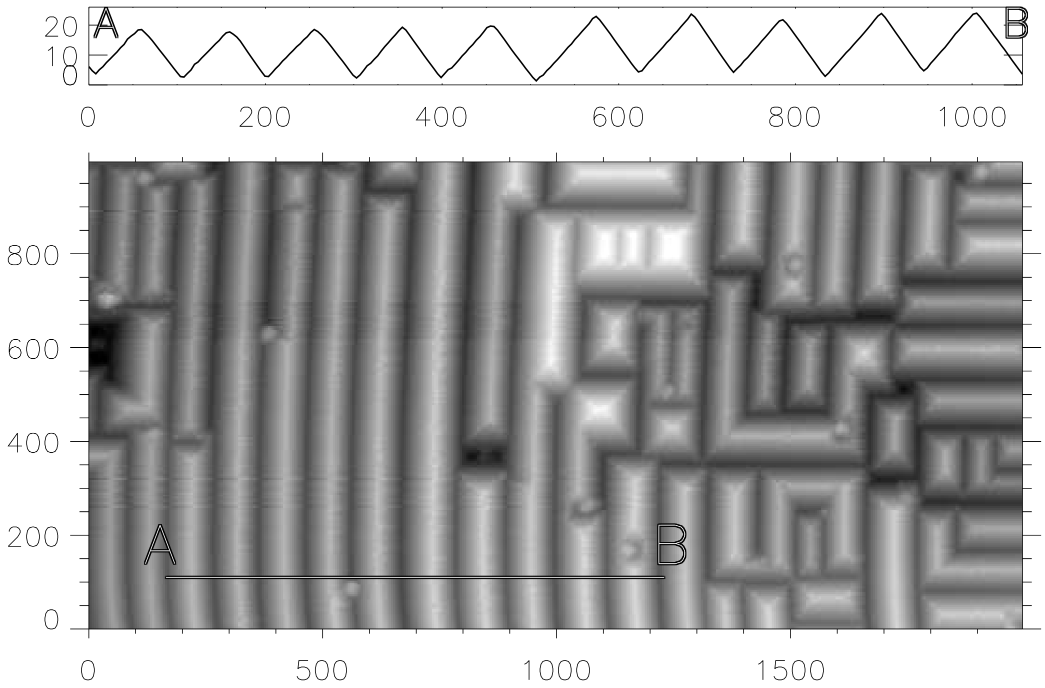

Abbildung 9.20: STM-Topographie und Höhenprofil einer Ge(001)-Oberfläche nach der Deposition von In im Desorptionsgleichgewicht 450 °C und 5 min Nachtempern bei 420 °C ($U = -2,0\ V,\ I = 2,2\ nA$).

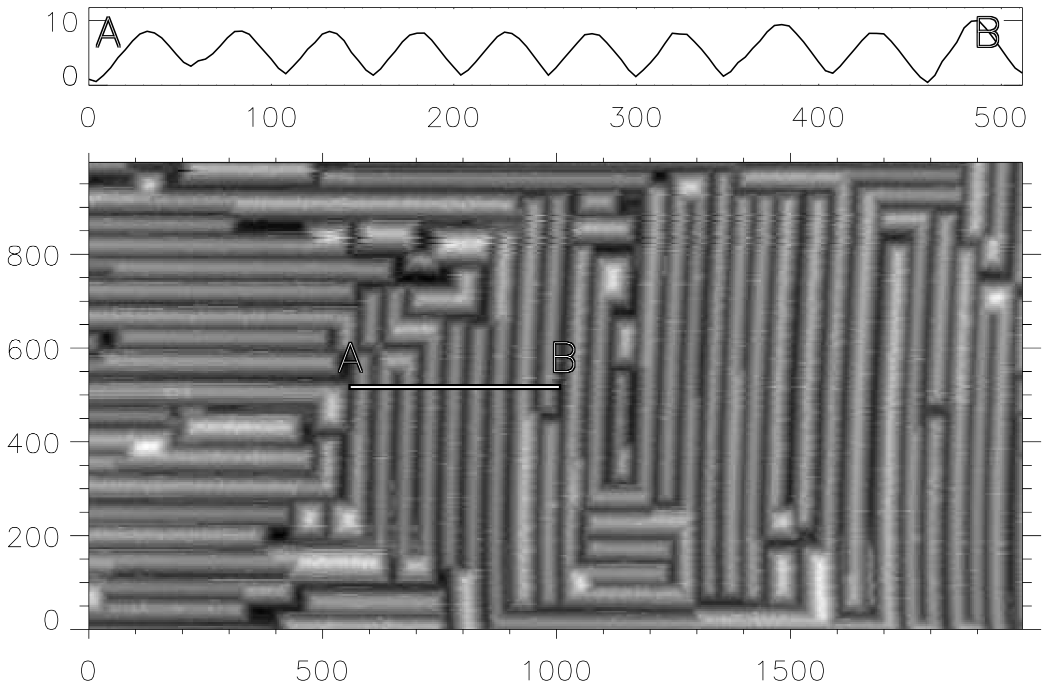

Abbildung 9.21: STM-Topographie und Höhenprofil einer Ge(001)-Oberfläche nach dem Aufdampfen In bei 350 °C ($U = -1,9\ V,\ I = 0,9\ nA$).

breiteren und kürzeren Prismen weniger homogen. Unter Vernachlässigung der Defekte beträgt die gemittelte Prismenbreite auf dieser Oberfläche 52 Å. Trotz vergleichbarer bzw. höherer Temperatur während der Präparation ist die mittlere Prismenbreite damit kleiner als für die Präparation durch RT-Deposition und Nachtempern.

Diese ersten Versuche haben gezeigt, daß in Abhängigkeit von der Präparation regelmäßig facettierte Oberflächen mit unterschiedlichen Prismenbreiten erzeugt werden können. Die Breite der Prismen ist wie erwartet abhängig von der Temperatur, darüber hinaus aber auch von anderen Parametern wie der Prozeßführung.

9.2.8 Facettierung auf vizinalen Substraten

Neben der In-Bedeckung, der Temperatur und der Prozeßführung ist die Stufendichte des Substrates ein weiterer Parameter, der die Morphologie der facettierten Oberfläche bestimmt. Für alle bisher gezeigten STM-Topographien der facettierten Oberflächen wurden ausschließlich ebene Substrate mit einer Fehlneigung zur (001)-Ebene unter 0,1° verwendet. Daneben wurden Experimente auf Substraten mit einer Fehlneigung zur (001)-Ebene von 0,5° vorgenommen. Auf den vizinalen Oberflächen konnte wie auf den ebenen Substraten eine vollständige {103}-Facettierung in Form von Prismen erreicht werden. Die Präparation von Prismen einheitlicher Breite in regelmäßiger Anordnung ist nach unseren Beobachtungen auf den vizinalen Substraten nicht möglich.

Die Abbildung 9.22 zeigt eine vizinale Ge(001)-Oberfläche nach der Deposition von 1,5 ML In bei RT und 2 minütigem Nachtempern bei 300 °C. Die Oberfläche ist auf den ebenen Terrassen (5×4)-rekonstruiert und benachbarte Terrassen sind durch Einfach- und Mehrfachstufen voneinander getrennt. Die lokale Fehlneigung der Oberfläche dieses Ausschnitts, die auf der Grundlage der beobachteten Stufendichte bestimmt wurde, beträgt 1,5°. Die facettierten Bereiche unterscheiden sich in ihrer Größe, und es kann wie auf den ebenen Oberflächen zwischen mehrere Stadien der Facettierung unterschieden werden. Die Keimbildungsphase ist durch einzelne Prismen oder Gruppen aus wenigen Prismen gekennzeichnet. Die Prismen befinden sich stets an Stufenkanten und sind bevorzugt entlang der Stufenkanten ausgerichtet. Gruben, die ein typisches Element der Keimbildungsphase auf ebenen Substraten darstellen, werden nur selten beobachtet. Die Breite der Prismen ist mit 50–80 Å vergleichbar mit denen auf ebenen Substraten, aber weniger einheitlich. Ihre Länge beträgt 100–300 Å und übersteigt auch in größeren Bereichen, in denen die Facettierung weiter fortgeschritten ist, nur selten 500 Å. Eine mögliche Ursache für die geringe Länge der Prismen ist die hohe Keimdichte, die im oberen linken Quadranten des Bildes zu beobachten ist und die vermutlich auch auf die bereits vollständig facettierten Bereiche im unteren Teil des Bildes übertragen werden kann. Die Domänen zueinander kohärent angeordneter Prismen wachsen nur eine kurze Strecke, bevor benachbarte Domänen aufeinandertreffen.

Diese Beobachtungen liefern möglicherweise einen Ansatz für die Interpretation der STM-Messungen von Gai et al. [205]. Trotz ähnlicher Präparation (Deposition von 2 ML In bei RT und Nachtempern bei 250–400 °C) sind ihre facettierten Oberflächen durch Prismen stark variierender Größe gekennzeichnet. Dabei ist die Form der Prismen nicht vollständig ausgebildet und benachbarte Prismen unterschiedlicher Größe gehen ineinander über. Weder eine Regelmäßigkeit in der Anordnung der Prismen, noch ein größeres Längen-zu-Breiten-Verhältnis, welches die Form der Prismen in unseren Experimenten auszeichnet, wurde beobachtet. Gai et al. geben keinen Wert für die Fehlorientierung ihrer Probe an und lassen die genaue Temperatur ihrer Präparation offen. Die Stufendichte auf der reinen Ge(001)(2×1)-Oberfläche war auf ihren Substraten jedoch in der Regel sehr hoch [358]. Unter den Annahmen einer hohen

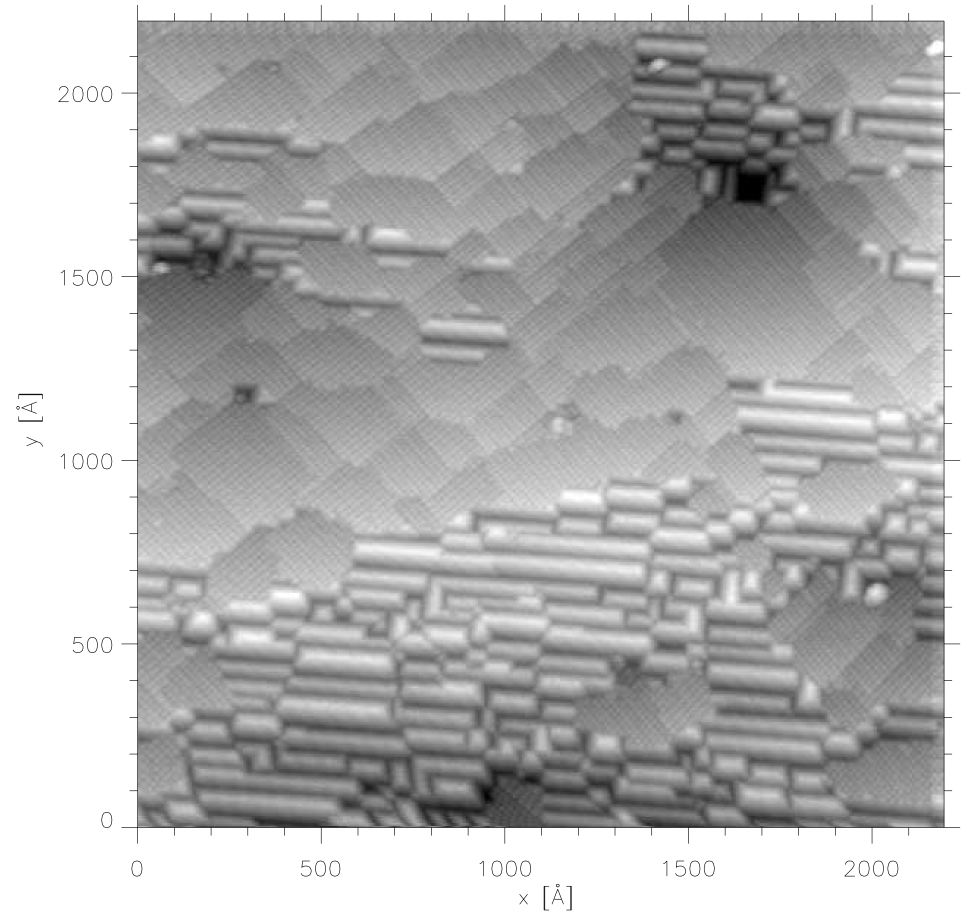

Abbildung 9.22: STM-Topographie einer vizinalen Ge(001)-Oberfläche im Stadium der fortschreitenden Facettierung nach der Deposition von 1,5 ML In bei RT und Nachtempern bei 300 °C ($U = -0,8\ V,\ I = 1,6\ nA$).

Dichte an Facettierungskeimen, einer starken Neigung der Probenoberfläche zur (001)-Ebene und einer hohen Temperatur während des Temperungsvorgangs erscheint die unregelmäßige Morphologie ihrer facettierten Oberflächen nachvollziehbar.