STM-Untersuchungen zur Rekonstruktion und Facettierung reiner und adsorbatbedeckter Elementhalbleiteroberflächen mit (001)- und (103)-Orientierungen

DISSERTATION
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von

Gerald Falkenberg
aus Hamburg

Hamburg
1998

Gutachter der Dissertation:	Prof. Dr. R.L. Johnson Prof. Dr. R. Anton Prof. Dr. M. Henzler
Gutachter der Disputation:	Prof. Dr. R.L. Johnson Prof. Dr. W. Hansen
Datum der Disputation:	4. September 1998
Sprecher des Fachbereichs Physik und Vorsitzender des Promotionsausschusses:	Prof. Dr. B. Kramer

Kurzfassung

Gegenstand dieser Dissertation sind Untersuchungen zur Ausbildung verschiedener Rekonstruktionen und zur Facettierung von reinen und adsorbatbedeckten Germaniumoberflächen mit (001)- und (103)-Orientierung sowie vergleichenden Untersuchungen auf Siliziumoberflächen. Die Strukturbestimmung wurde mit hochauflösender Rastertunnelmikroskopie (STM) unter Verwendung beider Tunnelspannungspolaritäten durchgeführt und z. T. mit Oberflächenröntgenbeugungsexperimenten (SXRD) kombiniert. Die Auswahl der Adsorbate Indium, Blei und Antimon (Wismut) umfaßt Elemente der III., IV. und V. Hauptgruppe des Periodensystems.

In Abhängigkeit von der Wahl des Adsorbats, der Bedeckung und der Temperatur des Substrats konnten den verschiedenen Rekonstruktionen charakteristische Strukturelemente zugeordnet werden. Die Struktur der Pb-bedeckten Ge(001)-Oberfläche wird im Submonolagenbereich durch kovalent gebundene asymmetrische Pb-Dimere und für höhere Bedeckungen durch dichtgepackte modulierte metallische Pb-Lagen geprägt. Grundlegende Strukturelemente der In-bedeckten Ge(001)- und Si(001)-Oberflächen sind symmetrische In-Dimere und -Trimere nach Deposition bei Raumtempertur und dreifach zum Substrat gebundene In-Monomere auf getemperten Proben. Die Bindungsgeometrie der In-Monomere bedingt eine Umordnung der obersten Substratlagen unter lokalem Massentransfer. Die Sb-bedeckte Ge(001)-Oberfläche zeigt eine Sb-Dimerstruktur. Nach einem Temperungsvorgang relaxiert die adsorbat-induzierte Verspannung der Oberfläche im Submonolagenbereich durch ein Austausch von Substrat- und Adsorbat-Dimeren zwischen den Lagen und im Monolagenbereich durch eine Aufrauhung der Oberfläche.

Es wurde entdeckt, daß die Ge(001)-Oberfläche durch In-Adsorption in {103}-Fläche facettieren kann. Die Facettenflächen begrenzen bei geeigneter Prozeßführung regelmäßig angeordnete Nanostrukturen einheitlicher Größe und perfekt regelmäßiger prismenförmiger Gestalt. Die verschiedenen Stadien der Facettierung von der Keimbildung über die Ausbreitung und die vollständige Facettierung der Oberfläche bis zum Zerfall der Facetten wurden verfolgt. Die treibende Kraft für die Facettierung stellt die Minimierung der freien Energie der Oberfläche dar, während die einheitliche Größe der Facetten auf die Kinetik des Facettierungsprozesses zurückgeführt wird. Die In-induzierte Facettierung der Ge(001)-Oberfläche stellt ein ideales Modellsystem für die adsorbat-induzierte Nanostrukturierung durch Selbstorganisation dar.

Angeregt durch die Beobachtung der {103}-Facettierung der Ge(001)-Oberfläche wurden die ersten Untersuchungen an hochindizierten (103)-Oberflächen von Si und Ge durchgeführt. Allgemein eröffnen hochindizierte Oberflächen neue Möglichkeiten auf dem Weg zur Verbesserung des heteroepitaktischen Wachstums. Es erwies sich, daß neben der In-terminierten Ge(103)-Oberfläche auch die reine Ge(103)-Oberfläche stabil ist und eine (4×1)-Rekonstruktion zeigt. Die Struktur beider Rekonstruktionen wurde bestimmt. Die Si(103)-Oberfläche bildet keine ebenen Flächen aus, sondern kleine (105)-Facetten und Stufenbündel. Die ebene Si(103)-Oberfläche kann durch die Adsorption von In und Bi stabilisiert werden und rekonstruiert wie die In-bedeckte Ge(103)-Oberfläche in eine einfache (1×1)-Adatom-Struktur. Die Sb-bedeckte Ge(103)-Oberfläche dagegen facettiert in eine regelmäßige "Berg und Tal"-Struktur aus {113}-Flächen.

STM studies on the reconstruction and faceting of clean and adsorbate-covered elemental semiconductor surfaces with (001) and (103) orientations

Abstract

The formation of a variety of different reconstructions on both clean and adsorbate covered germanium (001)- and (103) surfaces together with comparative studies on silicon surfaces are described in this thesis. The investigations are performed with high-resolution bias-dependent scanning tunneling microscopy (STM) augmented with surface X-ray diffraction (SXRD). The adsorbate elements selected from group III, IV and V of the periodic table were indium, lead, antimony and bismuth.

Characteristic structural elements were found in the reconstructions depending on the adsorbate element, coverage and substrate temperature. The structure of Pb covered Ge(001) surfaces in the submonolayer regime is characterized by covalently bonded asymmetrical Pb dimers and by densely packed modulated metallic Pb layers at higher coverages. Fundamental structural elements of the In covered Ge(001) and Si(001) surfaces are symmetrical In dimers and trimers after room temperature deposition and threefold coordinated In monomers on samples annealed at 200 °C. The bonding geometry of the In monomers requires a restructuring of the upper substrate layers with local mass transport. Antimony on Ge(001) forms an Sb dimer structure. After annealing the adsorbate-induced surface strain is released by an interchange of substrate and adsorbate dimers in the submonolayer regime and by a roughening of the surface in the monolayer regime.

It was discovered that In adsorption on a Ge(001) surface at the appropriate temperature induces the formation of regular {103} facets with nanoscale periodicity (∼6 nm). The different steps of the faceting process from nucleation and growth to complete faceting, coarsening and decomposition of the facets due to In desorption are described. The driving force for the faceting is related to the minimization of the surface free energy, while the uniform size distribution of the facets can be attributed to the kinetics of the faceting process. In-induced faceting of the Ge(001) surface represents an ideal model system for adsorbate-induced self-organized nanoscale patterning.

Inspired by the observation of the {103} faceting of the Ge(001) surface pioneering studies on the (103) surfaces of Ge and Si were performed. In general, high index surfaces open up new possibilities for improving heteroepitaxial growth. It was found that besides the In-terminated Ge(103) surface the clean Ge(103) surface is stable and has a (4×1) reconstruction. The structure of both of these surfaces has been determined. The adsorbate-free Si(103) surface is unstable and decomposes into small (105) facets and step bunches. The Si(103) surface can be stabilized by the adsorption of In and Bi and forms like the In-covered Ge(103) surface a simple (1×1) adatom structure. In contrast, the Sb-covered Ge(103) surface facets into a regular “hill and valley” structure composed of {113} surfaces.