

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Die in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen lassen sich in zwei Bereiche einordnen. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Untersuchung adsorbatinduzierter Facettierung von niedrigindizierten Halbleiterflächen, der hochindizierten Halbleiteroberflächen, deren Orientierung der der Facettenflächen entspricht und des Einflusses der Adsorption verschiedener Metalle der III. und V. Hauptgruppe auf die Stabilität der hochindizierten Flächen. Außerdem wurden die niedrigindizierten Oberflächen der binären Legierungen Cu_3Au und Au_3Cu untersucht. Die Untersuchungen wurden jeweils mit LEED und STM durchgeführt, bei einigen Systemen wurden zusätzlich Ergebnisse von SXRD-Messungen zur Bestimmung der Struktur herangezogen.

Im Rahmen seiner Doktorarbeit [4] stellte Gerald Falkenberg fest, daß sich die Ge(001)-Oberfläche durch Adsorption von In bei geeigneten Präparationsparametern vollständig facettieren läßt. Die Oberfläche besteht dann aus einer regelmäßigen Abfolge von prismenförmigen Nanostrukturen, die von (103)-, ($\bar{1}03$) (013)- und (0 $\bar{1}3$)-Facettenflächen begrenzt sind. Das Strukturmodell für die Facettenflächen besteht aus einer idealen {103}-Oberfläche, bei der sämtliche freie Bindungen durch In-Atome abgesättigt werden. Jedes In-Atom bindet auf seinem Adsorptionsplatz an drei Substratome, so daß keine freien Bindungen an der Oberfläche übrigbleiben.

Die Entstehung von {103}-Facetten auf der Ge(001)-Oberfläche durch Adsorption vom In ließ vermuten, daß auch eine reine Ge(103)-Oberfläche stabil sein könnte. LEED- und STM-Untersuchungen zeigen, daß diese Oberfläche eben ist und eine (4×1)-Rekonstruktion vorliegt. Die Struktur ist sehr komplex und ließ sich nur durch die Kombination der STM- und SXRD-Messungen lösen. Das Strukturmodell basiert auf einer periodischen Abfolge von auf- und abwärts führenden Doppelstufen, zwischen denen jeweils ebene Bereiche vorliegen. Innerhalb der ebenen Bereiche wird die Anzahl der freien Bindungen durch zusätzliche dreifachgebundene Ge-„Adatome“ reduziert. In-Adsorption auf der Ge(103)-Fläche führt zu einer (1×1)-Struktur. Diese Struktur ist identisch mit der Struktur der In-induzierten {103}-Facetten auf der Ge(001)-Fläche, wie durch STM- und SXRD-Messungen gezeigt wurde. Bei Adsorption von Sb zerfällt die Ge(103)-Fläche in eine regelmäßige Abfolge von (113)- und (1 $\bar{1}3$)-Facetten.

An der Si(103)-Fläche durchgeführte Untersuchungen zeigen, daß diese Fläche keine ebene Rekonstruktion aufweist. Vielmehr entsteht eine relativ rauhe Oberfläche. Die Korrugation beträgt etwa 10Å und es liegen kleine Facettenflächen vor, deren

Anordnung unregelmäßig ist. Bei Adsorption von In bildet sich eine ebene unrekonstruierte Oberfläche aus. Hier kann von einer "Adsorbatstabilisierung" der Oberfläche gesprochen werden. Die (1×1) -Struktur entspricht der bei Ge(103)-In gefundenen. Die Elemente Al, Ga und Bi führen ebenso zu einer (1×1) -Struktur mit demselben Strukturmodell.

Um die Ursachen für die Stabilität der hochindizierten Oberflächen zu finden wurden Rechnungen nach dem Modell von Keating durchgeführt, welches die elastische Energie beschreibt. Es zeigt sich, daß sich die Stabilität der Oberflächen durch die Rechnungen nach diesem einfachen Modell einordnen läßt. Das zeigt, daß es hierbei hauptsächlich auf zwei Faktoren ankommt, die Minimierung der Anzahl der freien Bindungen und die Minimierung der Verspannung der Oberfläche.

Bei der Adsorption von Ga auf der Si(001)-Oberfläche wurde neben den (2×1) -, (2×2) -, (2×3) - und (2×5) -Rekonstruktionen auch eine $(n \times 8)$ -Rekonstruktion beobachtet. Anhand der STM-Untersuchungen wurde ein Strukturmodell für die $(n \times 8)$ -Rekonstruktion entwickelt, welches das Auftreten der 4-, 5- und 6-fachen Periodizität in der einen und der 8-fachen Periodizität in der anderen Richtung erklärt. Die Bildungsblöcke der Rekonstruktion setzen sich aus Ga-Dimeren und Ga-Adatomen, die an zwei Si-Atome einer und ein Si-Atom einer höher gelegenen Lage binden, zusammen. Diese Bausteine wurden bereits bei vielen anderen Rekonstruktionen, die durch Gruppe III-Elemente auf Halbleitern erzeugt werden, beobachtet. Auf der Oberfläche wurden neben der $(n \times 8)$ -Rekonstruktion noch kleine facettierte Bereiche beobachtet. Die Orientierung der Facettenfläche konnte zu $\{115\}$ bestimmt werden. Auf den Facettenflächen konnte eine Rekonstruktion beobachtet werden, die eine vierfache Periodizität entlang der kürzeren Richtung der $\{115\}$ -Einheitszelle und eine einfache Periodizität entlang der längeren Richtung der $\{115\}$ -Einheitszelle aufweist. Der Aufbau der Facettenflächen aus den Bausteinen der $(n \times 8)$ -Rekonstruktion konnte gezeigt werden.

In Anlehnung an die Untersuchung der (103)-Flächen wurde die reine Si(115)-Fläche untersucht. Die Oberfläche ist eben und weist eine $\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ -Rekonstruktion auf. Anhand von LEED- und STM-Messungen wurde hierfür ein Strukturmodell aufgestellt. Hierbei wurde insbesondere Wert auf die Minimierung der freien Bindungen und der Verspannung der Oberfläche - in Form der Keating-Energie - durch die Rekonstruktion gelegt, da die Untersuchungen der (103)-Flächen die Relevanz dieser Aspekte für hochindizierte Flächen hervorgehoben haben. Durch SXRD-Messungen konnte das Strukturmodell bestätigt werden.

Die Untersuchung der Ga-bedeckten Si(115)-Oberfläche zeigte, daß diese eine komplizierte " (4×1) "-Rekonstruktion aufweist. Die STM-Bilder zeigen, daß ein einzelner (4×1) -Bildungsblock vorliegt. Von diesem existieren vier Translationsdomänen. Anhand der Untersuchungen wurde festgestellt, daß die einzelnen Domänen sehr klein sein können, teilweise sogar nur einen Bildungsblock in der Richtung der einfachen Periodizität. Die Domänengrenze kann als $\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ -Einheitszelle aufgefaßt werden. Bei einer Aneinanderreihung von schmalen unterschiedlichen Translations-Domänen der (4×1) -Rekonstruktion entstehen Domänen mit einer lokalen $\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ -Rekonstruktion. Die Rekonstruktion ist dieselbe, die auch auf den Ga-induzierten $\{115\}$ -Facetten auf der Si(001)-Fläche beobachtet wurde. Eine exakte Bestimmung des Strukturmodells durch SXRD-Messungen steht noch aus.

Die Untersuchung der binären Legierungen Cu_3Au und Au_3Cu zeigt den Unterschied auf, den die chemische Zusammensetzung der Legierung in ihren physikalischen Eigenschaften hervorruft. Für Cu_3Au wurde auf der (001)- und der (111)-Oberfläche eine (1×1)-Struktur, und für die (110)-Oberfläche eine (1×2)-Rekonstruktion beobachtet. Auf all diesen Oberflächen wurde mit dem STM ein chemischer Kontrast erzielt, daß heißt in den STM-Bildern konnten die Au-Atome in der Oberfläche von den Cu-Atomen unterschieden werden. Es wurde beobachtet, daß das Volumen der Cu_3Au -Kristalle geordnet in $L1_2$ -Struktur vorliegt und die chemische Zusammensetzung der Oberfläche einer idealen Oberfläche entspricht. Bei allen drei untersuchten Au_3Cu -Oberflächen zeigte sich anhand der LEED- und SXRD-Messungen, daß das Volumen ungeordnet vorliegt. Für Au_3Cu wurden auf (001)- und der (111)-Oberfläche eine (1×1)-Struktur und für die (110)-Oberfläche eine (1×4)-Rekonstruktion beobachtet. Es konnte gezeigt werden, daß Au_3Cu -Filme, die durch Magnetron-Sputtern auf Glassubstraten erzeugt wurden, eine {111}-Textur zeigen und dieselbe Rekonstruktion aufweisen, wie die (111)-Einkristalloberfläche. Durch die Kombination von STM- und SXRD-Messungen an derselben Probe konnten für die $\text{Au}_3\text{Cu}(001)$ - und die $\text{Au}_3\text{Cu}(110)$ -Oberfläche Strukturmodelle aufgestellt werden, die die chemische Zusammensetzung der obersten Lagen wiedergeben. Bei Au_3Cu findet eine Segregation von Au statt, so daß die oberste und die dritte Lage nahezu vollständig aus Au-Atomen bestehen. Die komplexe (1×4)-Struktur der $\text{Au}_3\text{Cu}(110)$ -Oberfläche wird durch Clusterbildung von Au und Cu Atomen in der zweiten und dritten Lage hervorgerufen.

Die hier vorgestellten Ergebnisse bilden die Grundlage für eine Vielzahl weiterer Untersuchungen. Zunächst sollte die Struktur der "(4×1)"-Rekonstruktion von Ga auf Si(115) durch SXRD-Messungen eindeutig geklärt werden. Diese Messungen sind bereits geplant. Anschließend sollte die Adsorption verschiedener anderer Gruppe III- und auch Gruppe V-Elemente auf der Si(115)-Oberfläche untersucht werden. Dieselben Untersuchungen können dann an der Ge(115)-Fläche wiederholt werden. Besonders interessant ist hierbei die Frage, ob durch unterschiedliche Elemente auch hier dieselbe Rekonstruktion erzeugt wird wie es bei den (103)-Flächen der Fall ist. Es sollte versucht werden, mittels Keating-Rechnungen - analog zu den hier vorgestellten Rechnungen an den (103)-Flächen - Vorhersagen über die Stabilität der einzelnen Systeme zu erhalten.

Die Keating-Rechnungen bieten zudem Ansatzpunkte für das Auffinden von Systemen, die adsorbatinduzierte Facettierung zeigen könnten. Hier sollten insbesondere Untersuchungen mit Bi auf Si(001)- und Ge(001)-Oberflächen durchgeführt werden. Die adsorbatinduzierte Facettierung eröffnet neu Möglichkeiten in der Ausbildung von Nanostrukturen, wie an dem Beispiel von In auf Ge(001) gezeigt wurde.

Die Untersuchungen an den binären Legierungen dienen direkt der Vorbereitung von elektrochemischen Untersuchungen an diesen Oberflächen. Zum einen wird die selektive Korrosion unter Berücksichtigung der chemischen Oberflächenzusammensetzung an diesen Legierungen untersucht, zum anderen wird versucht, mit Hilfe eines elektrochemischen STMs Nanostrukturen auf diesen Oberflächen zu erzeugen. Diese Untersuchungen werden bereits von Gerald Eckstein und Stefan Maupai an der Universität Nürnberg-Erlangen durchgeführt. Ohne die hier gewonnenen Ergebnisse über die chemische Zusammensetzung der Oberfläche und Bestimmung der Struktur wäre eine Interpretation ihrer Meßergebnisse kaum möglich.

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, welche einzigartige Möglichkeiten der lokalen Charakterisierung von nicht langreichweitig geordneten Oberflächen die Rastertunnelmikroskopie bietet. Durch komplementäre Untersuchung mittels Oberflächenröntgenbeugung können inzwischen auch Strukturen wohlgeordneter Oberflächen bestimmt werden, deren Komplexität eine detaillierte Strukturaufklärung bislang unmöglich erscheinen ließ. Durch die immer weiter perfektionierte Kombination der lokalen (STM) und der präzise mittelnden (SXR) Meßmethode ist nun die Charakterisierung einer Vielzahl neuer Systeme möglich geworden. Zukünftig sollten hierbei auch die Möglichkeiten der Kombination von Tieftemperatur-STM- und -SXR-Messungen genutzt werden. Durch die Untersuchungen bei tiefen Temperaturen ergibt sich ein sehr viel detaillierterer Einblick in die verschiedenen Beiträge der freien Oberflächenenergie. Dieses ist ein wichtiger Schritt zum Verständnis der Ursachen für das Auftreten bestimmter Oberflächenrekonstruktionen und zum nano-engineering von Halbleiterstrukturen.