

## 3 Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden

### 3.1 Substrate

Im folgenden Kapitel wird kurz auf die verschiedenen verwendeten Substrate eingegangen.

#### 3.1.1 Silizium(100)-Substrate

Bei den verwendeten Siliziumsubstraten handelt es sich um aus kommerziellen Wafern geschnittene Proben mit den Dimensionen  $14,5 \text{ mm} \times 4,5 \text{ mm} \times 0,525 \text{ mm}$ . Die „glatten“ Substrate stammen von Wafern der Firma Wacker und sind p-dotiert. Die  $4^\circ$  fehlorientierten Substrate sind von der Firma Si-Mat, sie sind ebenfalls p-dotiert mit einem spezifischen Widerstand von  $(5-10) \ \Omega\text{m}$ . Die Substrate wurden mit der RCA-Methode [Kern1993] nasschemisch präpariert und dann im UHV thermisch (Strahlungsheizung) vom Oxid befreit. Mit Inbetriebnahme einer Direktstromheizung entfiel die Notwendigkeit der RCA-Methode. Auf die thermische Reinigung der Si(100)-Substrate und die beobachteten Eigenschaften wird in Kapitel 4.1.1 und 4.1.2 eingegangen. Um eine möglichst saubere Oberfläche zu gewährleisten, wurde vor die Ladekammer (die bei Schleusevorgängen zwischen der Analyse- und Wachstumskammer passiert werden muss) noch eine Vorkammer (HV) gebaut, die ein Einschleusen neuer Proben ohne ein Belüften der Schleusenkommer ermöglicht.

Die sich nach dem Reinigen einstellende Oberflächenrekonstruktion wird als eine zweidomänige  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion bezeichnet. Die Entstehung dieser Rekonstruktion wird in Abb. 3.1.1.1 illustriert. Die Notwendigkeit einer Rekonstruktion entsteht durch das Spalten

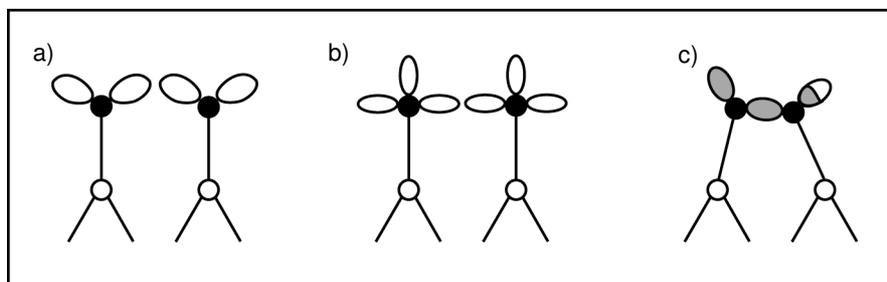


Abb. 3.1.1.1

Schematische Darstellung (angelehnt an Fig. 6.40 b in [Lüdt1998]) der Dimerbildung auf der Si(100)-Oberfläche.

- Volumenstruktur mit  $sp^3$  Orbitalen.
- Nach der Dehydridisierung bilden die  $sp_z$ ,  $p_y$  und  $p_x$  Orbitale eine ideale Oberfläche.
- Diese bilden die Dimere auf der Oberfläche. Die dargestellten asymmetrischen Dimere sind auf Grund der teilweisen Ionisierung energetisch günstiger als symmetrische.

eines Siliziumeinkristalls in einer der kristallographischen Orientierungen. Dabei werden Bindungen aufgebrochen und hinterlassen an den Oberflächenatomen bindungsbereite  $sp_3$  Hybridorbitale. Dieser Zustand ist energetisch ungünstig. Durch ein Entmischen der Orbitale zu mehr  $sp_z$ -,  $p_y$ - und  $p_x$ -artigen Orbitalen entsteht eine ideale Oberfläche. Um die Energie weiter abzusenken werden dann die Dimere gebildet. Das Auftreten der asymmetrischen Dimere wird durch die geringere Gesamtenergie erklärt, die durch die teilweise Ionisation erreicht wird ([Wolkow1992, Lüdt1998]). Dies wurde bereits 1979 in [Chadi1979] vermutet. Interessant ist in diesem Zusammenhang, dass bei Raumtemperatur vorwiegend symmetrische Dimere beobachtet werden (z.B. [Hammers1986]). STM-Messungen bei tiefen Temperaturen [Yokoyama1998] und Vergleiche mit Modellrechnungen [Hwang2000] zeigen, dass es sich bei den bei Raumtemperatur gemessenen symmetrischen Dimeren um zeitlich gemittelte Aufnahmen von asymmetrischen Dimeren handelt, die zwischen zwei Zuständen oszillieren. Zu erklären bleibt nun noch wie die zweidomänige Struktur entsteht. Hier hilft eine einfache geometrische Betrachtung. Die Siliziumeinkristalle besitzen eine Diamantstruktur. Bedingt durch die Symmetrie im Kristall erhält man für atomare Stufen (0,136 nm) auf der Si(100)-Oberfläche eine Drehung von  $90^\circ$ . Dadurch erhält man die zwei Domänen für die Rekonstruktion. In Abb. 4.1.1.6 a) sind die orthogonal laufenden Dimerreihen für die benachbarten Terrassen gut zu erkennen.

Will man nun anstelle einer zweidomänigen eine eindomänige Oberfläche untersuchen, muss auf fehlorientierte Si(100)-Substrate zurückgegriffen werden. Verwendet man  $4^\circ$  in [011]-Richtung fehlorientierte Si(100)-Substrate, so erhält man Doppelstufen. Durch die Doppelstufen sind die Dimerreihen auf benachbarten Terrassen parallel angeordnet. Aus geometrischen Betrachtungen folgt dann eine Terrassenbreite von 3,89 nm. Insgesamt ist die Si(100)-Oberfläche gut verstanden und lässt sich aufgrund der einfachen Symmetrie auch mit theoretischen Methoden bestens behandeln (z.B. [Pehlke1999]).

### 3.1.2 Silizium(111)-Substrate

Die Silizium(111)-Substrate kommen bei den Untersuchungen zur Abhängigkeit des Schmelzpunktes von der Bedeckung der Oberfläche mit Bismutclustern zum Einsatz. Verwendet wurden n-dotierte Wafer der Firma Wacker mit einer Dicke von 0,525 mm. Die thermische Reinigung der Si(111)-Substrate erfolgt nahezu analog zu der der Si(100)-Substrate mit der Direktstromheizung. Im Unterschied zu der (100)- reagiert die (111)-Oberfläche des Siliziums nicht so sensibel auf schnelleres Abkühlen nach der thermischen Desorption des Oxids und von Verunreinigungen. Die Si(111)-Oberfläche bildet nach dem Abkühlen eine  $7 \times 7$ -Rekonstruktion. Die genaue Deutung der Beugungsbilder gelang

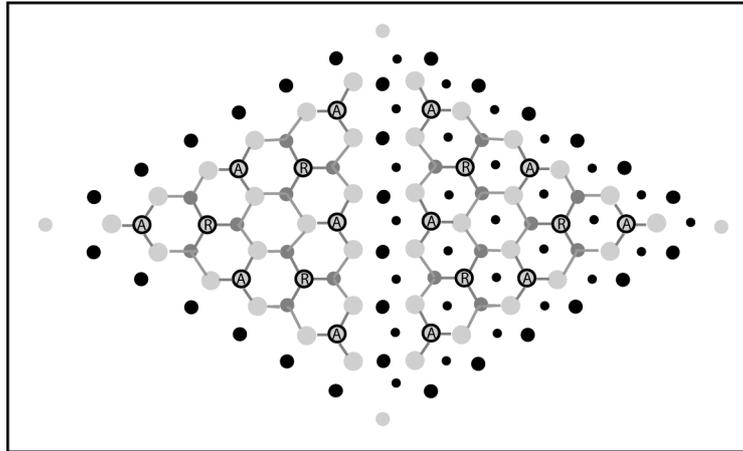


Abb. 3.1.2.1  
Schematische Darstellung des DAS-Modells, in Aufsicht, nach Takayanagi, angelehnt an die Darstellung in [Lüth1998]. Die mit A und R markierten Atome sind Adatome bzw. Restatome. In der rechten Hälfte ist der Stapelfehler zu erkennen, es liegen nicht alle Atome übereinander.

Takayanagi [Takayanagi1985]. Sein Modell wurde von STM-Messungen bestätigt. Es handelt sich um das DAS-Modell (Dimer-Adatom Stacking fault). Dieses Modell enthält 12 Adatome, 6 Restatome, und 9 Dimere und ein sogenanntes „corner hole“ pro Einheitszelle der Oberfläche. In Abb. 3.1.2.1 ist das DAS-Modell skizziert. Die Adatome sind mit A, die Restatome mit R gekennzeichnet. Der Stapelfehler ist auf der rechten Seite erkennbar. Die zusätzlichen kleinen Punkte stellen Atome einer tieferen Ebene dar, die nicht wie auf der linken Seite unter den anderen Atomen liegen. In Abbildung 3.1.2.2 ist eine saubere Si(111)-7×7 Oberfläche zu erkennen, wobei sich a) und b) nur in der Größe des Ausschnittes, den angelegten Spannung und dem Tunnelstrom unterscheiden. Durch diesen Unterschied sind

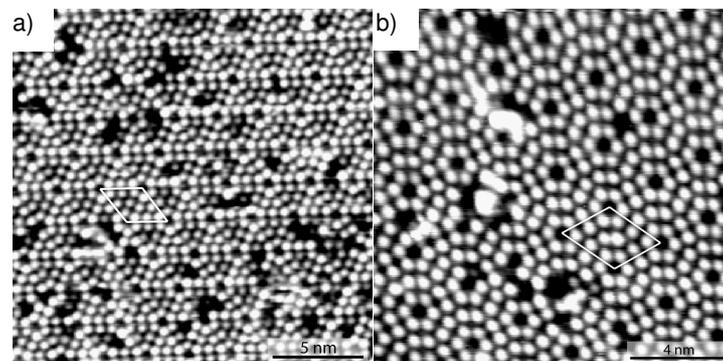


Abb. 3.1.2.2  
STM-Bilder einer Si(111)-7×7 Oberfläche. Die Bilder entstanden im Rahmen der Doktorarbeit [Schwinge2005\_Dis].

- Das STM-Bild bei  $-1,330$  V zeigt die gefüllten Zustände der Oberfläche. Die weiße Raute markiert eine Einheitszelle im DAS-Modell. Die Unterschiede in der Helligkeit zwischen der rechten und linken Seite sind auf den Stapelfehler einer der Seiten zurückzuführen.
- STM-Bild bei  $2,78$  V. Zu erkennen sind die unbesetzten Zustände. Die weiße Raute zeigt wieder die Einheitszelle. Das Bild weist leichte Verzerrungen auf Grund von Drifteffekten auf.

in a) die gefüllten und in b) die unbesetzten Zustände abgebildet. In den STM-Bildern sind die „corner holes“ gut erkennbar. In a) sind auch die Unterschiede zwischen den beiden Hälften der Einheitszelle sichtbar. Die Verzerrungen sind auf einen leichten Drift des Scannkopfes zurückzuführen. Beide Bilder der Abbildung entstanden im Rahmen der Doktorarbeit von Hr. Schwinge [Schwinge2005\_Dis].