

4.3 Analyse dünner Manganschichten auf glatten Silizium(100)-Oberflächen

Die folgenden Kapitel widmen sich den Versuchen, glatte Mangan- oder Mangansilizidfilme auf verschiedenen Siliziumsubstraten herzustellen. Des Weiteren sollen Rückschlüsse auf die Formationsmechanismen des Mn auf dem Silizium gezogen werden. Speziell zu diesem Zweck wurden Manganmengen im Submonolagenbereich auf den Substraten deponiert.

4.3.1 Untersuchungen an Manganschichten im Submonolagenbereich

Auch wenn dieser Teil der Untersuchungen kaum zum Verständnis der Prozesse bei der Bildung von Mangansiliziden beigetragen hat, sollen die Beobachtungen hier der Vollständigkeit halber vorgestellt werden. Ziel war das Auffinden von Adsorptionsplätzen des Mangans auf dem Silizium und die Identifizierung von Diffusionsprozessen. Die Manganbedeckung der Siliziumoberflächen wurde zwischen 0,75 und 0,125 ML variiert.

Als problematisch erwies sich, dass das Mangan nach der Deponierung auf der Oberfläche des Siliziums Strukturen bildete, die die Messungen mit dem STM erschwerten oder verhinderten. Abb. 4.3.1.1 ist ein STM-Bild einer 0,5 ML dicken Manganschicht direkt nach dem Aufdampfen. Zu erkennen sind nur unstrukturierte Materialanhäufungen und Hinweise auf die ursprünglichen Siliziumterrassen. Aufgrund dieser Abbildungsprobleme bei

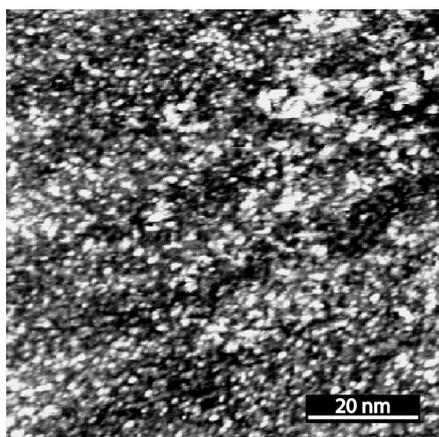


Abb. 4.3.1.1
STM-Bild einer 0,5 ML dicken Mn-Schicht. Es sind weder strukturierte Mn-Bereiche, noch die Morphologie des Substrats auflösbar.

unbehandelten (nicht erwärmten) Manganschichten konnten keine Informationen über die ursprünglichen Adsorptionsplätze gewonnen werden. Auch die direkte Beobachtung von Diffusionsprozessen war dadurch nicht möglich. Auf mögliche Diffusionsprozesse können aber qualitative Rückschlüsse gezogen werden, da bei erhöhten Temperaturen neben einfachen Diffusionsprozessen auch Vorgänge stattfinden, bei denen die Oberfläche des Siliziumsubstrats verändert wird. Diese Veränderungen manifestieren sich nach den Ausheilprozessen in Defekten der Siliziumoberfläche. Beispielsweise ist in Abb. 4.3.1.2 a) eine saubere (unbedampfte) Si(100)-Oberfläche und in b) eine Si(100)-(2×1)

Oberfläche, die mit einer halben Monolage Mangan bedampft und dann auf 460 °C erwärmt

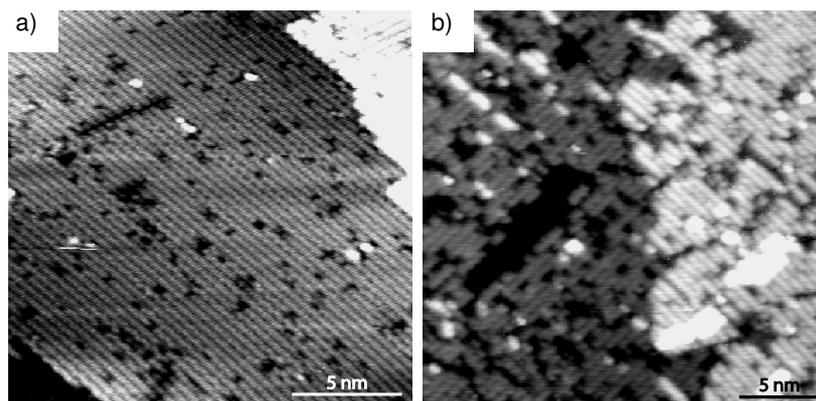


Abb. 4.3.1.2

- a) Zeigt eine saubere Si(100)-(2x1) Oberfläche.
 b) Zeigt eine mit 0,5 ML Mn bedampfte Si(100)-(2x1) Oberfläche, die für 5 min auf 460°C erwärmt wurde.

wurde zu sehen. Durch das Erwärmen der Probe erhält das Mangan ausreichend Energie, um auf der Si(100)-(2x1) Oberfläche zu diffundieren. Dadurch können sich Mangananhäufungen bilden, die entweder kristallin geordnet oder ungeordnet sind. Inwiefern die Mangancluster aus reinem Mangan oder Mangansiliziden bestehen, kann mit den zur Verfügung stehenden Mitteln nur dann entschieden werden, wenn kristalline Strukturen im STM sichtbar sind und diese mit hinreichender Genauigkeit vermessen werden können. Allerdings ist bei genauerer Betrachtung der, nach dem Erwärmen wieder vom Mangan befreiten, Si(100)-(2x1) Oberflächen zu vermuten, dass es sich bei den Anhäufungen um Mangansilizide handelt. Dies wird durch die große Defektdichte und die vergleichsweise großen Defektflächen impliziert. Als Defekte werden hier Regionen bezeichnet, bei denen entweder Atome in der Oberfläche fehlen oder zusätzliche Atome auf der Oberfläche vorhanden sind. Für den zweiten Punkt werden drei mögliche Ursachen in Betracht gezogen:

1. Sind auf der Oberfläche größere Inseln von Adatomen sichtbar und zeigen diese Dimerreihen, die 90° zur Dimerreihenrichtung der nächst tieferen Siliziumlage verdreht sind, so handelt es sich um Bereiche, in denen die Inseln vor der Deposition von Mangan eine geschlossene Siliziumlage (-stufe) gebildet haben.
2. Für einzelne oder wenige Atome auf der Oberfläche, die keine oder nur aus wenigen Atomen bestehende Dimerreihen ausbilden wird angenommen, dass diese entweder während des Massentransportes auf der Oberfläche „hängen geblieben“ sind, oder bereits vor dem Aufwachsen des Mangans auf der Probe vorhanden waren.
3. Es handelt sich um Mangan oder Mangansilizid, das während der Diffusionsprozesse an den beobachteten Stellen angelagert hat.

Defekte der Oberflächenrekonstruktion wurden für diese Untersuchung nicht verwendet. Beispiele für solche Defekte sind in Kapitel 4.1.2, Abb. 4.1.2.1 gegeben. Will man die Defektdichten quantitativ bestimmen, muss man einige Vereinfachungen treffen. In den folgenden Betrachtungen wurden daher die Defektstellen durch rechteckige Regionen

approximiert. Dieses Vorgehen wird beispielhaft in Abb. 4.3.1.3 für die Messungen aus der Abb. 4.3.1.2a) und b) gezeigt. Die rechteckigen Repräsentationen der Defekte wurden mit dem Programm „Illustrator 10“ von Adobe erstellt, das heißt die Rechtecke wurden nach

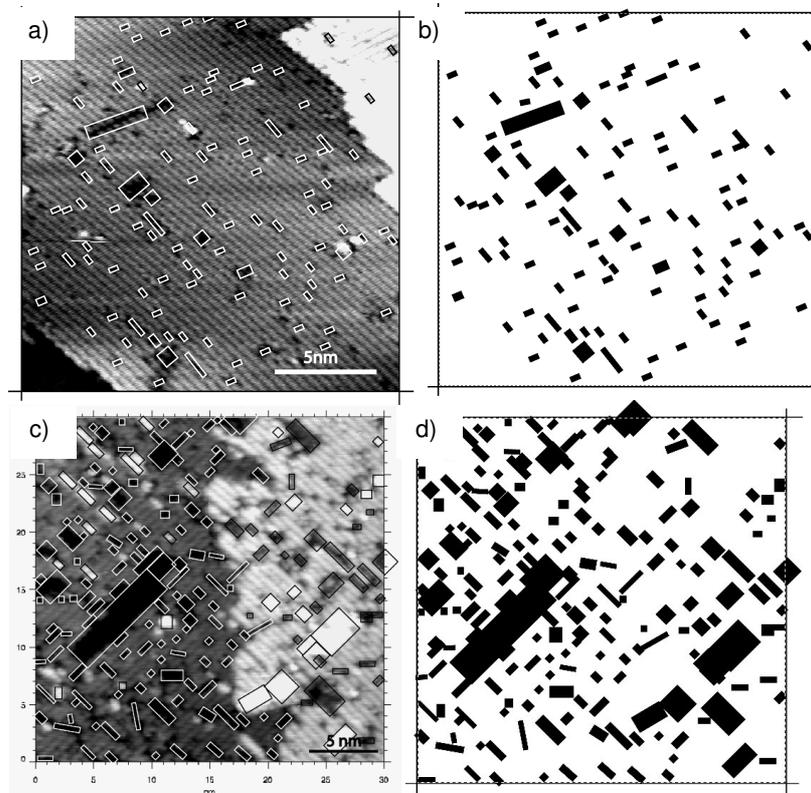


Abb. 4.3.1.3
Beispielhaft wird hier das Vorgehen zur Bestimmung der Defektdichten der Oberflächen schematisch dargestellt.

- a) und c) Die ursprünglichen STM-Bilder werden entfernt und die Bilder im Format „TIF“ gespeichert. Die Flächenverhältnisse können nun entweder per Hand oder aber mit geeigneter Software (hier „Gimp 2.2“) ermittelt werden. Die gestrichelten Linien markieren die Bereiche in denen mittels der Software die Flächenverhältnisse bestimmt werden.
- b) und d) Auf den original STM-Bildern werden mit rechteckigen Flächen die Bereiche markiert, die als Defekte identifiziert sind und die äußeren Dimensionen der Bilder durch Rahmen markiert.

Augenmaß über die Defekte gelegt. Anschließend wurden die Ausmaße des STM-Bildausschnittes mit Linien markiert und das ursprüngliche STM-Bild gelöscht. Übrig bleibt dann ein Rahmen und die rechteckigen Repräsentationen der Defekte. Werden diese im Bildformat „TIF“ gespeichert, so kann man mit Hilfe der freien Bildbearbeitungssoftware „Gimp 2.2“ das Verhältnis der Defektrepräsentationen zur Gesamtfläche mittels eines Histogramms bestimmen. Als Probe wurden die Flächenverhältnisse für die ersten Bestimmungen auch per Hand, durch Ausmessen der Flächen auf einem Ausdruck bestimmt. Beide Verfahren lieferten dasselbe Ergebnis, bei einer deutlichen Zeitersparnis unter Zuhilfenahme von „Gimp 2.2“. Bei der Berechnung wurde auf ganze Prozent gerundet. Für die unbedampfte Si(100)-(2×1) Oberfläche aus Abb. 4.3.1.2 a) erhält man eine Defektdichte von 8%, für die in Abb. 4.3.1.2 b) gezeigte eine von 26%. Die Genauigkeit dieser Art der Bestimmung der Defektdichten ist hier vor allem durch die willkürliche Definition von Defekten und deren Reduzierung auf rechteckige Flächen gegeben. Dabei wird vermutet, dass sich Fehler, die durch das manuelle Markieren der Flächen

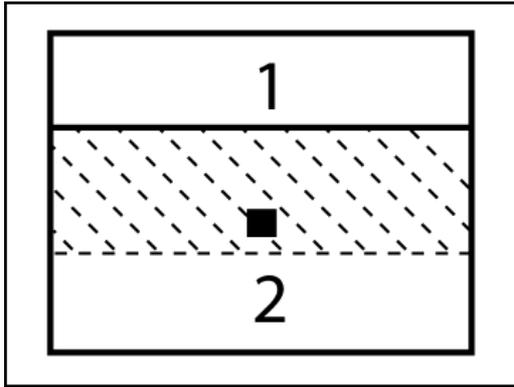


Abb. 4.3.1.4

Hier sind zwei unterschiedliche Möglichkeiten der Defektbildung schematisch dargestellt. Die Zahlen repräsentieren die jeweilige Ebene, wobei niedrigere Zahlen höhere Ebenen markieren. Das schwarze Quadrat stellt einen höher liegenden Defekt auf der Ebene 2 dar. Dieser kann entweder durch

- a) einen Rest der durch MnSi-Bildung veränderten Ebene 1 (gestrichelter Bereich)

oder

- b) durch während des Massentransportes abgelagerte Adatome entstehen.

Während bei a) der eigentliche Defektbereich also der gestrichelte ist (nicht beobachtbar), ist es in b) tatsächlich das schwarze Quadrat.

herausmitteln, beziehungsweise systematische Fehler unbedeutend sind, da hier Verhältnisse von Flächen betrachtet werden. Die in diesem Fall beobachtete Zunahme der Defektdichte um 18 Prozentpunkte ist allerdings nur bedingt verwertbar. Dies liegt in der Methodik begründet. Da der Massentransport nicht direkt beobachtet wird, ist es nicht möglich zu unterscheiden, ob beobachtete Adatome (Mn , Mn_xSi_y oder Si) auf den freien $Si(100)$ -Oberflächen von einer vor dem Erhitzen vorhandenen nächst höheren Stufe stammen oder aber bei dem Massentransport von Mn oder Mn_xSi_y auf der Oberfläche deponiert wurden (Abb. 4.3.1.4). Mit anderen Worten, aus den angegebenen Defektdichten kann man nur bedingt auf die Menge Silizium schließen, die in den Mn_xSi_y -Inseln vorhanden sind. Ähnlich limitiert sind auch die Aussagen bezüglich der Defektdichte in der direkten Umgebung von

strukturierten Mn_5Si_3 Anhäufungen. In Abb. 4.3.1.5 ist eine solche gezeigt. Dabei handelt es sich nicht um die selbe Probe wie in Abb. 4.3.1.2 b), sondern um eine nur 0,13 ML dicke Manganschicht, die für 5 min mit 200 mA (entspricht 390°C) geheizt wurde. Die Schlussfolgerung, dass es sich bei der beobachteten Insel um eine strukturierte Mn_5Si_3 Anhäufung handelt, stützt sich vor allem auf den zu 118° bestimmten Winkel der Spitze.

Dieser Winkel deutet auf eine hexagonale Struktur hin. Des Weiteren wurden von Ctistis *et al.* [Ctistis2002] bereits die Formation von Mn_5Si_3 auf $Si(111)$ berichtet. Diese Experimente fanden unter vergleichbaren Bedingungen und in demselben UHV-System wie die hier vorgestellten Messungen statt. Es ist also wahrscheinlich, dass diese Mangansilizidkonfiguration auch auf dem $Si(100)$ gefunden wird. Aktuelle Studien zur Mangansilizidbildung auf $Si(111)$, die parallel zu den hier vorgestellten Untersuchungen in unserer Arbeitsgruppe vorgenommen wurden, weisen ebenfalls auf eine Mn_5Si_3 Bildung hin. Um eine Redundanz zu verhindern, wird die exakte Argumentation, die zu dem Schluss führt, dass es sich bei den hier beobachteten Strukturen um Mn_5Si_3 handelt erst in Kapitel 4.3.2 vorgestellt. Abb. 4.3.1.5 a) ist ein Übersichtsbild über die 0,13 ML dicke Manganschicht. Zu erkennen sind sechs atomare Stufen (Terrassen) des Substrates. In der Mitte des Bildes sind die Umriss einer Mn_5Si_3 Insel zu erkennen. Der weiße Pfeil markiert eine Vertiefung über der Insel, die an der Position des Linienprofils (Abb. 4.3.1.5 c)) drei atomare Stufen tief in das Substrat reicht. Die Kalibrierung des Scankopfes des STM

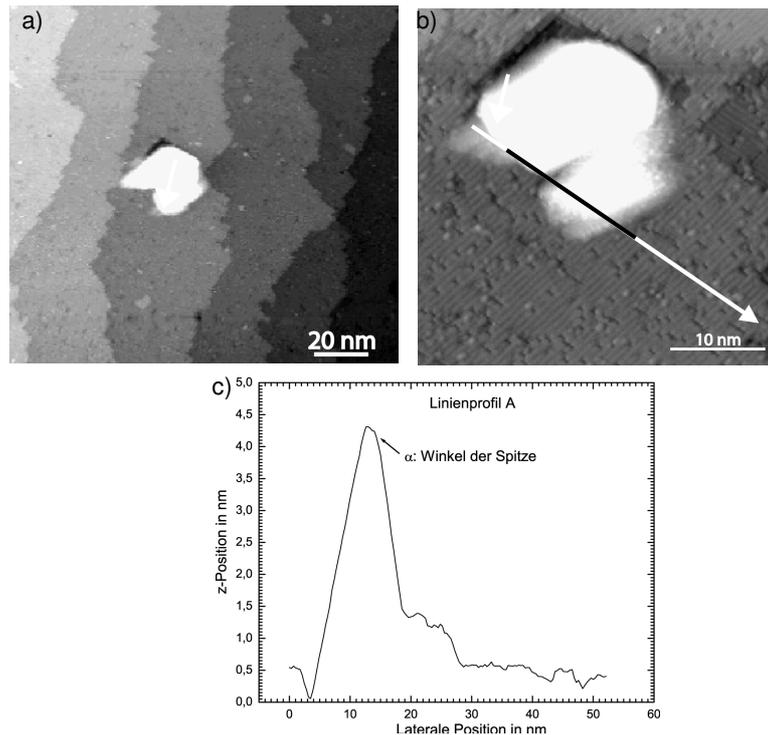


Abb. 4.3.1.5

STM-Bilder einer 0,13 ML Mn auf einer Si(100)-(2x1) Oberfläche, für 5 min geheizt mit 200 mA = 390 °C.

- Übersichtsbild der Probe. Es sind sechs atomare Stufen (Terrassen) des Si(100)-(2x1) Substrates sichtbar. Von der Mn_5Si_3 -Insel ist nur die Kontur der Grundfläche sichtbar. Über der Insel (weißer Pfeil) ist eine Vertiefung erkennbar.
- Das Bild entstand durch Mischen der z-Information mit seiner Ableitung. Gut erkennbar sind die Dimerreihen des Substrates (auf benachbarten Terrassen orthogonal zueinander), Defekte im Substrat und vor allem die mit dem weißen Pfeil markierte Vertiefung über der Insel, die mindestens zwei atomare Stufen in das Substrat reicht.
- Linienprofil entlang der in b) markierten Linie (nur Hintergrund korrigierte Rohdaten der Bilddaten aus b)). Der Winkel α beträgt 118°, die Vertiefung reicht an der Position des Linienprofils drei atomare Stufen in das Substrat.

erfolgte hier wieder über die Vermessung der Dimerreihen und der atomaren Stufen des Substrates, so dass die angegebenen Ausdehnungen eine hohe Genauigkeit aufweisen. In Abb. 4.3.1.6 wurde wieder eine Abschätzung der Defektdichte in der Umgebung der Insel vorgenommen. Nimmt man die Fläche unter der Insel ebenfalls als gestört an, erhält man eine Defektdichte von 19%. Betrachtet man nur die Defekte in der Umgebung der Insel weist sie eine Defektdichte von 7% auf. Dies ist im Vergleich zur oben betrachteten halben Monolage deutlich weniger.

Dafür gibt es folgenden Erklärungsansatz:

Das für die Formation der Mn_5Si_3 -Insel benötigte Silizium wurde hauptsächlich aus dem Substrat unter der Insel gelöst, da das Mangan aufgrund der niedrigen Ausheiltemperatur (390 °C) nicht ausreichend Energie zur Verfügung hatte um beim Zusammenlaufen mehr Silizium aus der Substratoberfläche zu lösen.

Vernachlässigen darf man aber auch nicht die geringe Anzahl von Defekten auf dem unbedampften, gereinigten Substrat von nur 2% bis 3% (siehe Abb. 4.3.1.6 c)). Der Vergleich der Defektdichten der unbedampften (Abb. 4.3.1.6 b)) und der mit 0,13 ML Mn

bedampften Probe (Abb. 4.3.1.6 a)) zeigt auch hier eine starke Zunahme der Defektdichte. Die Annahme, dass das Substrat unter der Insel gestört ist, wird durch die Löcher an der oberen Inselkante gestützt. Es wird vermutet, dass die Inselunterseite nicht parallel mit der Si(100)-Fläche abschliesst, sondern analog zu einem Eisberg unter der Siliziumoberfläche nach unten „gewachsen“ ist (siehe schematische Darstellung in Abb. 4.3.1.6 c)). Das Mangansilizidinseln auch in das Substrat wachsen, wurde bereits früher berichtet, was die hier geäußerten Vermutungen unterstützt [Mogilatenko2003].

Die große Nähe der Insel zu der Terrassenkante impliziert, dass diese die Mangansilizidbildung entweder fördert, oder zumindest es für das Mangan leichter ist, an Stufenkanten oder Defekten im Substrat das Silizium aus dem Kristallverbund zu lösen. Theoretische Betrachtungen wurden zu dieser Fragestellung leider nicht von dem Kooperationspartner durchgeführt.

Ein weiteres Beispiel für den Einfluss der deponierten Manganmenge, der vorgefundenen

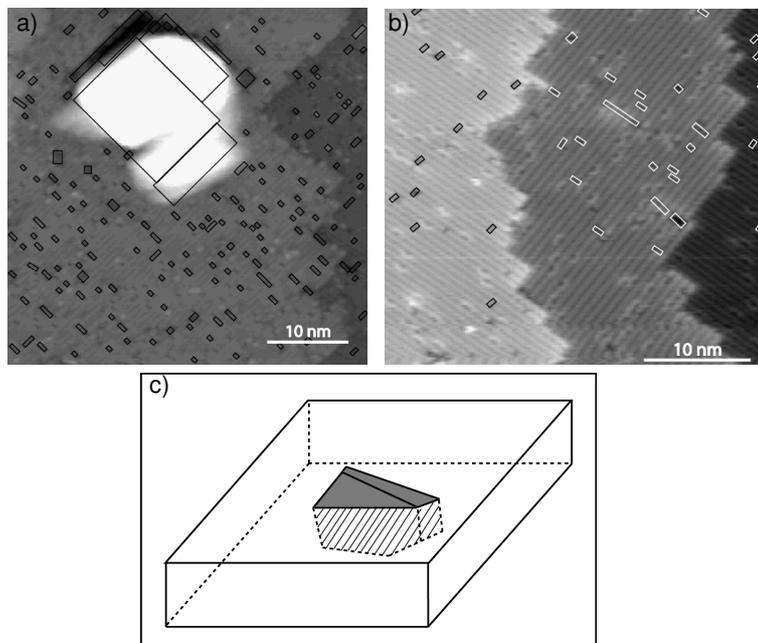


Abb. 4.3.1.6

- a) STM-Bild der 0,13 ML dicken Mn/Si(100)-(2×1) Probe, nach dem Heizen mit 390 °C (identisch mit Abb. 5.3.1.5). Die schwarzen, rechteckigen Konturen markieren Defekte in der Substratoberfläche.
- b) Gereinigtes Substrat vor der Deponierung von Mangan. Die rechteckigen Markierungen zeigen Defekte (fehlende oder zusätzliche Atome, keine reinen Fehler der Rekonstruktion).
- c) Schematische Darstellung einer Mn_5Si_3 -Insel auf, bzw. in dem Si(100)-Substrat (schraffierter Bereich liegt unter der Substratoberfläche).

Defektdichte und der Inselnform findet man bei der folgenden Probe. Auch hier wurde das Mangan bei Raumtemperatur auf das gereinigte Substrat aufgedampft. Es handelt sich um eine 0,75 ML dicke Manganschicht, die für 5 min auf 440 °C geheizt wurde (Direktstromheizung). Die Insel unten rechts weist einen Winkel an der Spitze von 127° auf. Das deutet wiederum auf eine Mn_5Si_3 -Formation hin. Das Loch über der Insel ist 6 atomare Stufen tief.

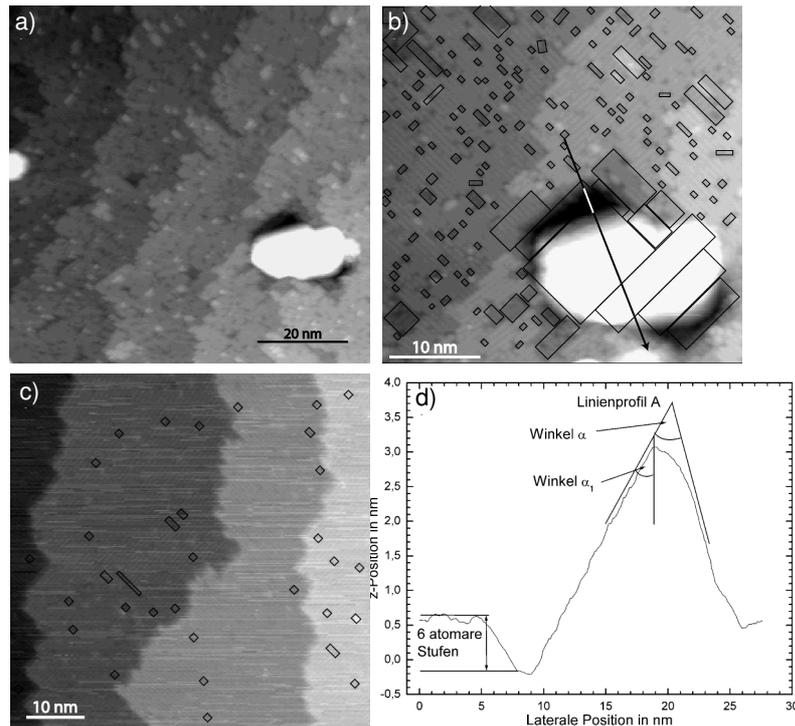


Abb. 4.3.1.7

- Übersichtsbild einer STM-Aufnahme einer 0,75 ML dicken Mn Probe auf Si(100)-(2x1), die für 5 min auf 440 °C geheizt wurde. Unten rechts ist eine Mn_5Si_3 -Insel zu erkennen. Die Terrassen weisen eine gegenüber dem gereinigten Substrat (c) höhere Defektdichte auf.
- Kleinerer Scanbereich um die Mn_5Si_3 -Insel. Markiert sind einerseits die Defekte im Substrat und andererseits das in d) gezeigte Linienprofil.
- Gereinigtes Substrat vor dem Deponieren des Mn.
- Linienprofil entlang des in b) eingezeichneten Pfeils. Der Spitzenwinkel α beträgt 127°, α_2 70°.

Betrachtet man wieder die Defektdichte erhält man 32%, wenn man die Insel als Defektfläche mitrechnet und 19%, wenn die Fläche unter der Insel nicht in die Berechnung einbezogen wird. Betrachtet man nur einen Ausschnitt ohne Insel aus Abb. 4.3.1.7 b), so erhält man eine Defektdichte von 21%. Die Defektdichte auf dem gereinigten Substrat beträgt dagegen nur 2% (Abb. 4.3.1.7 c)). Diese, im Vergleich zu der mit 0,13 ML Mn beschichteten Probe, starke Zunahme der Defektdichte, lässt den Schluss zu, dass die deponierte Manganmenge einen Einfluss auf die nach dem Heizen auftretende Defektdichte hat. Das wird auch im Zusammenhang mit dickeren Proben beobachtet (1,0 ML und 1,5 ML) und in Kapitel 4.3.2 näher beschrieben.

Eine weitere mit 0,5 ML Mn beschichtete Probe wurde bereits in Abb. 4.3.1.2 b) gezeigt. Auch auf dieser wurden, neben den Defekten im Substrat, Inseln beobachtet (Abb. 4.3.1.8). Die Form der Insel und die Löcher am Inselrand lassen auf eine Mn_5Si_3 -Insel schließen. Die Auswertung des Linienprofils (Abb. 4.3.1.8 b)) ergab einen Spitzenwinkel von 142°, was nicht zu den bisherigen Beobachtungen passt. Erklärt werden kann diese Abweichung von dem erwarteten 120° Winkel mit einer verstärkten Drift (in einer Vergrößerung sichtbar, hier aber nicht dargestellt) im oberen Bildbereich, in dem die Insel zu sehen ist. Weitere Aufnahmen existieren nicht von der Insel, da zum Zeitpunkt der Messung das gestörte Substrat interessanter wirkte, als eine unstrukturierte Insel.

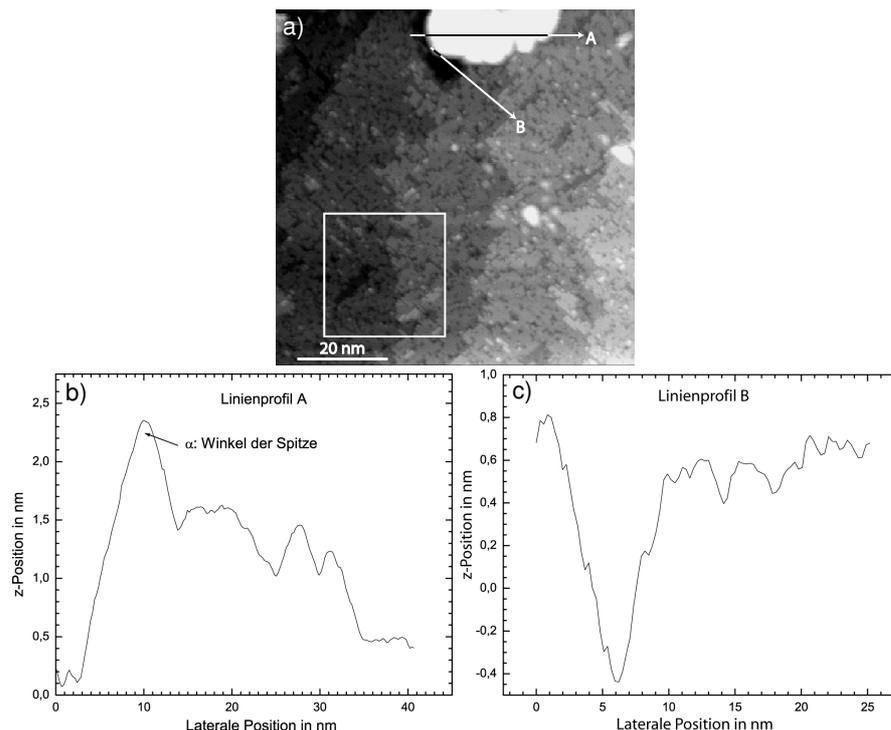


Abb. 4.3.1.8

- STM-Übersichtsbild einer 0,5 ML dicken Mn Probe, die für 5 min auf 460°C erwärmt wurde. Der weiße Kasten unten links markiert den Scanbereich der Abb. 4.3.1.2 b) und Abb. 4.3.1.3 c) und d). Die Linien markieren die Positionen der Linienprofile A und B.
- Linienprofil entlang der Linie A. Der Winkel α wird zu 142° bestimmt.
- Linienprofil entlang der Linie B. Die Senke am Inselrand reicht hier 7 atomare Stufen in das Substrat.

Trotz dieser misslichen Datenlage, scheint die Aussage, dass es sich um Mn_5Si_3 handelt gerechtfertigt. Gerade die am Inselrand beobachteten Löcher weisen darauf hin. Diese Löcher sind bis zu 7 atomare Stufen tief (Abb. 4.3.1.8 c)).

Die nächste hier behandelte Probe nimmt eine Sonderstellung in dem bisher vorgestellten Ensemble ein.

Die 0,75 ML dicke Mn-Schicht auf $\text{Si}(100)-(2\times 1)$ wurde für 5 min auf 440°C und für 2 s auf 670°C geheizt. Da sie aber als einzige der Submonolagen Proben eine MnSi-Insel zeigt, wird sie nicht verworfen sondern hier auch präsentiert. Insgesamt werden auf der Probe drei verschiedene Inseln gefunden:

- MnSi-Inseln
- Mn_5Si_3 -Inseln
- große, polykristalline Inseln.

Diese sollen im Folgenden näher behandelt werden. In Abb 4.3.1.9 a) ist im oberen Teil eine MnSi-Insel erkennbar, während im unteren eine zu erkennen ist, die mit einem Spitzenwinkel von 133° als eine Mn_5Si_3 -Insel identifiziert wird.

Bei der oberen Insel finden wir einen Spitzenwinkel von 156°, der aber auf Grund der Mehrfachspitze nicht aussagekräftig ist. Als gesichert wird aber der Winkel von 10° zwischen der $\text{Si}(100)-(2\times 1)$ Oberfläche und der nach unten orientierten Seitenfläche (Fläche mit dem

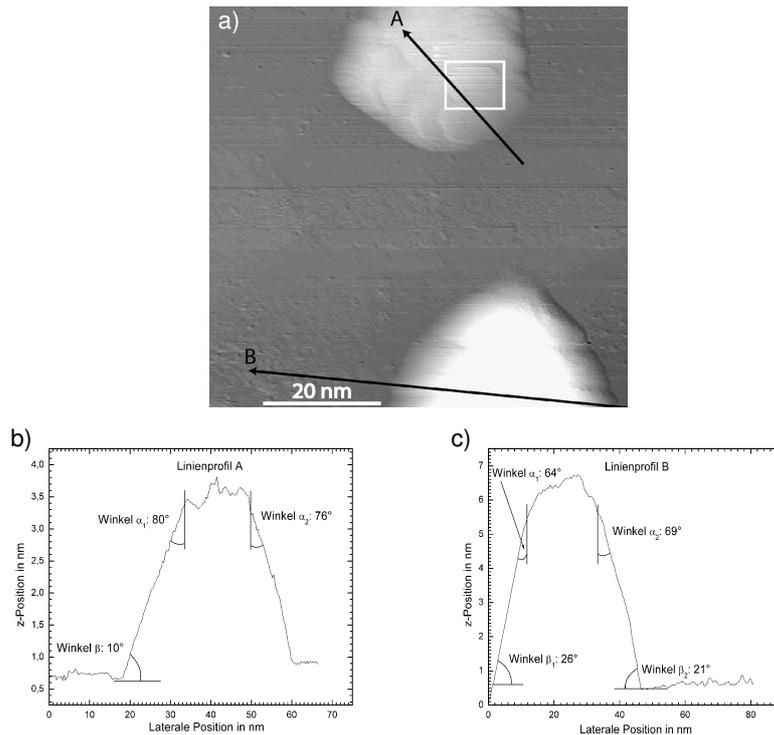


Abb. 4.3.1.9

- a) Übersichtsbild einer STM-Messung. Markiert sind mit den Linien A und B Linienprofile über die beiden Inseln im Bild und mit dem weißen Kasten der Aufnahmebereich des STM-Bildes aus Abb. 4.3.1.10. Die Struktur der oberen Insel weist auf eine (mindestens) dreifache Spitze hin, die aber erst an der oberen Insel entstanden ist (möglicherweise Mangan Anlagerungen).
- b) Linienprofil entlang der Linie A.
- c) Linienprofil entlang der Linie B.

weißen Kasten) betrachtet. Eine genauere Betrachtung dieser Fläche (weißer Kasten) wird in Abb. 4.3.1.10 vorgenommen. Hierbei handelt es sich um eine weitere Messung. Die beobachteten atomaren Strukturen auf dieser Fläche weisen Abstände auf, die sehr gut zu denen einer MnSi(111)-Fläche passen und auf Si(111) auch schon so beobachtet wurden. Des Weiteren bestätigen die wiederholt auftretenden Konturen der Flächen und die an identischen Positionen auftretenden Defekte den Verdacht, dass eine Mehrfachspitze die Morphologie der größeren Objekte beeinflusst. Dies gilt nach Betrachtung der atomaren Strukturen nicht für dieselben.

In Abb. 4.3.1.10 werden neben der Messung des kleineren Bereichs auch die atomaren Strukturen vermessen. Die Linienprofile A und B sind dabei entlang der so genannten kurzen Richtung ($1\bar{1}0$ Richtung) gemessen, während C entlang der langen Richtung ($11\bar{2}$) gemessen ist. Die sich ergebenden atomaren Abstände stimmen gut mit den Werten für MnSi(111) überein: Linienprofil A: 0,61 nm (theoretisch: 0,645 nm), B: 0,62 nm (theor.: 0,645 nm), C: 1,04 nm (theor.: 1,117 nm). Eine weitere interessante Größe ist der Winkel, den die Inselkante mit den Dimerreihen an der Kante bildet. Dieser erwies sich ebenfalls als charakteristisch für die MnSi-Inseln. Er beträgt 12° , und wurde aus den Daten von Abb. 4.3.1.11 gewonnen. In der Umgebung der Insel finden sich keine auffallend tiefen

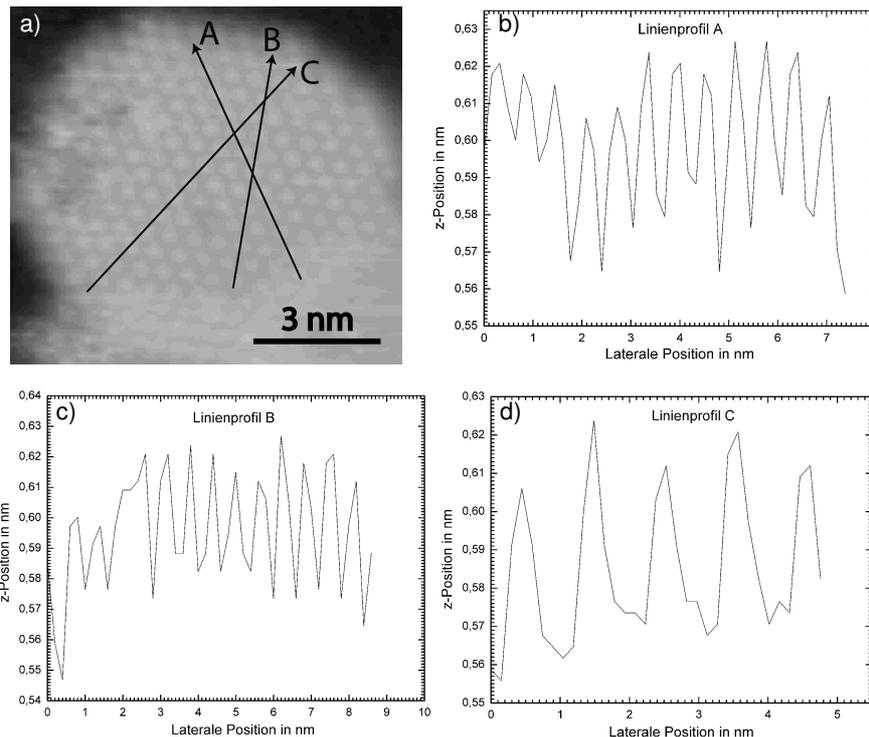


Abb. 4.3.1.10

- STM-Messung des mit dem weißen Kasten markierten Bereichs aus Abb. 4.3.1.9 a). Die Linien A, B, und C repräsentieren die Bereiche, in denen die Linienprofile aus b), c) und d) gemessen wurden. Die laterale und die z-Position wurden wieder durch das sichtbare Substrat kalibriert.
- Linienprofil entlang der Linie A.
- Linienprofil entlang der Linie B.
- Linienprofil entlang der Linie C.

Löcher wie bei den Mn_5Si_3 -Inseln. Dennoch ist die Substratoberfläche stark gestört.

Als dritte Inselform wurde auf derselben Probe die in Abb. 4.3.1.12 gezeigte Insel gefunden. Diese liefert keine eindeutigen Hinweise auf ihre Zusammensetzung. Bei genauerer Betrachtung findet man, dass sie nur teilweise kristallin ist. Da das Substrat auch in ihrer Nähe besonders stark gestört ist, liegt die Vermutung nahe, dass es sich auch hier um ein Mangansilizid handelt. Inseln dieser Form wurden nur noch auf 4° fehlorientierten Si(100)-Substraten beobachtet.

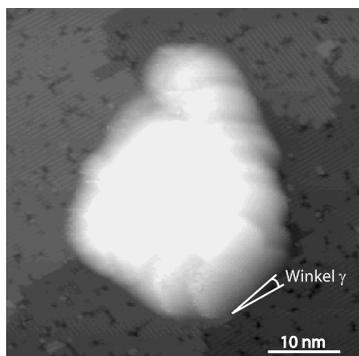


Abb. 4.3.1.11

Interessant an diesem STM-Bild ist, dass sich der Winkel zwischen den Dimerreihen und der Inselkante gut bestimmen lässt (gekennzeichnet durch weiße Linien). Er beträgt hier 12° .

Der Winkel β aus Abb. 4.3.1.12 b) beträgt 24° . Der in Abb. 4.3.1.9 b) und c) eingeführte Winkel α_2 beträgt demnach 66° . Dieser ist mit den gefundenen Winkeln für Mn_5Si_3 -Inseln verträglich, allerdings spricht die äußere Form gegen eine solche Mangansilizidkonfiguration. Bei einer benachbarten Insel der gleichen Form wurden allerdings atomare Strukturen gefunden (Abb. 4.3.1.13), die auch auf Si(111) noch keinem Mangansilizid zugeordnet werden konnten [Schwinge2005_Dis]. Die aus Abb. 4.3.1.13 bestimmten

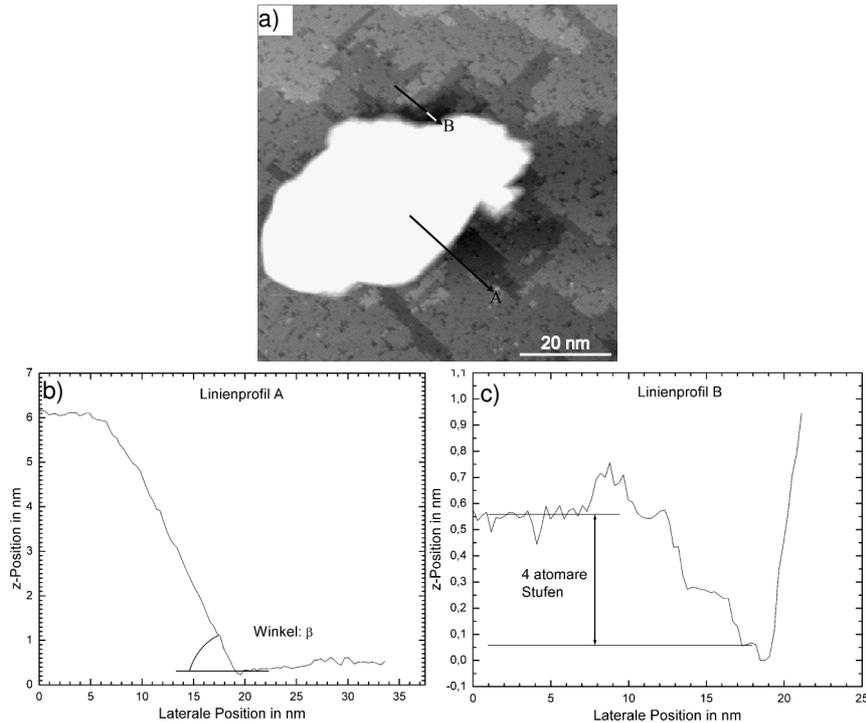


Abb. 4.3.1.12

- STM-Bild einer Mn_xSi_y Insel mit atomar aufgelöster Substratumgebung. Die Pfeile markieren die gemessenen Linienprofile A und B. Der Bereich über dem Linienprofil A ist stark gestört.
- Linienprofil entlang der Linie A. Interessant ist hier der Winkel β : 24°.
- Linienprofil entlang der Linie B. Der Schwerpunkt liegt hier bei der Betrachtung des Loches vor der Insel. Die Tiefe beträgt hier 4 atomare Stufen des Substrates.

Abstände der streifenartigen Strukturen betragen im Mittel 1,23 nm. In [Schwinge2005_Dis] wurden vergleichbare Strukturen nur auf mit Bi bedeckten Substraten gefunden. Die Defektdichte der Substratoberfläche beträgt, für den Fall das man die Fläche unter der Insel als defektfrei annimmt, 26% und unter Einbeziehung der Fläche unter der Insel als gestört 51%. Diese Abschätzungen der Defektdichte sind sehr konservativ, da, wie in Abb. 4.3.1.4 erläutert, nur die Bereiche als gestört angenommen werden können, in denen sich dezidierte

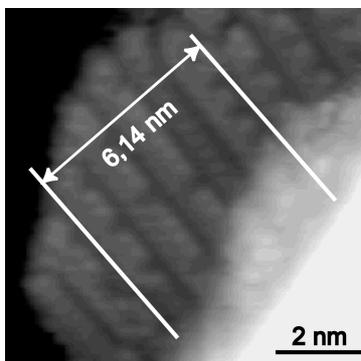


Abb. 4.3.1.13

Der Ausschnitt wurde aus einem STM-Bild entnommen und so bearbeitet, dass die vormalig zur Si(100) geneigte Seitenfläche eben liegt. Der Abstand der erkennbaren Streifenstrukturen beträgt 1,23 nm.

Hinweise (z.B. Adatome oder Löcher) auf dem Substrat finden. Gerade aber der Bereich auf dem Substrat über dem Linienprofil A zeigt mehrere atomare Terrassen. Diese werden aber nur zweidimensional als eine Fläche in die Berechnung der Defektdichte einbezogen, obwohl hier mindestens drei gestörte Ebenen vorliegen. Da es aber nicht möglich ist zu erkennen, welche der Terrassen die ursprüngliche, vor dem Aufheizen vorhandene, ist, bleibt nichts weiter, als diese sehr konservative Methode anzuwenden, die die Defektdichte systematisch unterschätzt. Allerdings kann aus den in der Peripherie der Insel vorhandenen Defekten (Löchern) wieder geschlossen werden, dass auch bei dieser Inselform die Substrat-

oberfläche unter der Insel stark gestört ist. Ebenfalls liegt die Vermutung nahe, dass die Inselunterseite nicht parallel zur Si(100)-Ebene liegt und die Insel in das Substrat gewachsen ist. Abschließend ist nochmals zu dieser Inselform festzustellen, dass Ihre Zusammensetzung (Verhältnis Mn zu Si) nicht mit den zur Verfügung stehenden Mitteln bestimmt werden kann.

Wie oben bereits erwähnt, nimmt die zuletzt vorgestellte Probe auf Grund Ihrer Präparationsgeschichte eine Sonderstellung ein. Um die auf dieser Probe gefundenen Daten zu verifizieren, bzw. Vergleiche mit den anderen Proben zu rechtfertigen, wurde eine lediglich unter anderen Ausheilbedingungen identische Probe auf demselben Substrat hergestellt. Diese wurde bereits in Abb. 4.3.1.7 behandelt. Neben diesen fanden sich Inseln, die auf Grund ihrer Morphologie als MnSi identifiziert wurden. Diese zeigten zwar keine atomare Auflösung auf den Flächen, aber die äußeren Formen reichen aus, um die Existenz von sowohl MnSi-, als auch Mn_5Si_3 -Inseln auf dieser Probe zu bestätigen.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass es im Submonolagenbereich nicht gelungen ist, Mangan oder Mangansilizide auf einer Si(100)-(2×1) Oberfläche zu präparieren, die ebene Flächen parallel zur Si(100)-Fläche haben. Die sich bildenden Strukturen wurden als MnSi oder Mn_5Si_3 identifiziert. Die Bildung dieser Inseln fand nach dem Deponieren des Mangan bei Raumtemperatur ab einer Ausheiltemperatur von 390 °C statt. In der Peripherie der Mn_5Si_3 -Inseln finden sich charakteristische Löcher, die bis zu 7 atomare Stufen in das Substrat reichen. Sowohl für die MnSi, als auch die Mn_5Si_3 -Inseln wird angenommen, dass sie in das Substrat hinein wachsen (Abb. 4.3.1.6 c)) und Ihre Unterseiten nicht parallel zur Si(100)-Ebene liegen. Aussagen über Diffusionsprozesse sind nur sehr begrenzt möglich. Die bis hier gezeigten Ergebnisse legen nahe, dass das Mangan bei Temperaturen, die die Formation von kristallinen Strukturen ermöglichen, bereits mit dem Silizium reagiert (es aus der Substratoberfläche herauslöst) und sich im Verbund mit dem Silizium bewegt. Aussagen über die Mobilität und die Zusammensetzung der Mn_xSi_y -Cluster können nicht getroffen werden.