

4.3.2 Beobachtungen an Manganschichten im Bereich von wenigen Monolagen

In diesem Abschnitt werden die Beobachtungen und Ergebnisse von Proben gezeigt, die auf den glatten Si(100)-(2×1) Oberflächen hergestellt wurden und bei denen die Schichtdicke des deponierten Mangans zwischen einer und 10 Monolagen variiert wurde. Die Ausheilvorgänge (Aufheizen der Proben) wurden mit der Direktstromheizung vorgenommen. Dabei wurden nur die Temperaturen (Heizstrom) verändert, nicht aber die Heizzeiten. Jeder einzelne Heizvorgang dauerte, abgesehen von einem Langzeittest, fünf Minuten. Der Langzeittest diente dem Zweck herauszufinden, ob die Heizdauer von fünf Minuten ausreichend ist, um die begonnenen Diffusionsprozesse abzuschließen, oder ob es Unterschiede in den gefundenen Strukturen gibt. Ohne tiefer in diesen kurzen Kontrollversuch eingehen zu wollen, wurde festgestellt, dass die Heizzeit von fünf Minuten ausreicht, damit keine weiteren strukturellen Veränderungen auf den Proben durch weiteres Heizen mit der gleichen Temperatur erreicht wird. Das soll nicht heißen, dass sich die Inseln bei den verwendeten Temperaturen nicht weiter verändern (es stand kein Hochtemperatur-STM zur Verfügung), sondern nur, dass sich durch längeres Heizen keine neuen oder in der Größe stark abweichenden Strukturen entwickelten. Über die Diffusion und Diffusionsmechanismen kann im Folgenden nur spekuliert werden. Es werden aber Indizien für bestimmte Prozesse gefunden, die sich weitestgehend mit denen aus Kapitel 4.3.1 decken.

Im Weiteren wird dieses Kapitel die Beobachtungen und Ergebnisse nicht nach Proben sortiert wiedergeben, sondern sich an den gefundenen Strukturen und den verwendeten Ausheiltemperaturen orientieren. Das hat zur Folge, dass dieselben Proben in verschiedenen Präparationsstadien wiederholt in unterschiedlichen Zusammenhängen auftreten. Dies stellt keine Redundanz dar, sondern resultiert aus der gewählten Präsentationsart. Zuerst soll auf Proben eingegangen werden, die auf nur relativ geringe Temperaturen aufgeheizt wurden. Die Abb. 4.3.2.1 b) zeigt eine Si(100)-(2×1) Oberfläche, die mit 1,5 ML Mangan beschichtet und anschließend auf 385°C geheizt wurde. In Abb. 4.3.2.1 a) ist die gereinigte Oberfläche vor dem Aufbringen des Mangans zu sehen. Auch hier wurde die Defektdichte wieder mit dem in Kapitel 4.3.1 beschriebenen Verfahren bestimmt. Sie dient ebenfalls dem Vergleich zwischen den verschiedenen Formationsstadien. Direkt nach dem Aufbringen des Mangans auf das gereinigte Substrat war es nicht möglich ein STM-Bild zu erhalten, das Informationen über Adsorptionsplätze oder Strukturen des bei Raumtemperatur aufgewachsenen Mangans enthält. Das heißt, auch hier kann nur indirekt über Inselformen und Defekte in der Substratoberfläche auf Diffusionsmechanismen geschlossen werden. In Abb. 4.3.2.1 b) ist nach dem Erwärmen der 1,5 ML dicken Manganschicht ein

Zwischenstadium zu erkennen, in dem sich bereits Cluster gebildet haben, die aller Wahrscheinlichkeit nach bereits aus einem Mangansilizid bestehen. Diese Vermutung wird durch die über einen Faktor zwei gestiegene Defektdichte untermauert. Nimmt man an, dass die Fläche unter den Inseln auch gestört ist erhält man einen Faktor 12. Welches dieser zwei Szenarien der Wirklichkeit entspricht kann nicht abschließend geklärt werden, da im Zuge dieser Arbeiten keine Methoden zur Verfügung standen, die einen Blick unter solche Cluster erlaubt hätten. Die räumliche Nähe der Defekte (Löcher) legt aber nahe, das die Inseln selber zumindest teilweise auf solchen Defekten liegen. Wie tief diese Defekte unter den

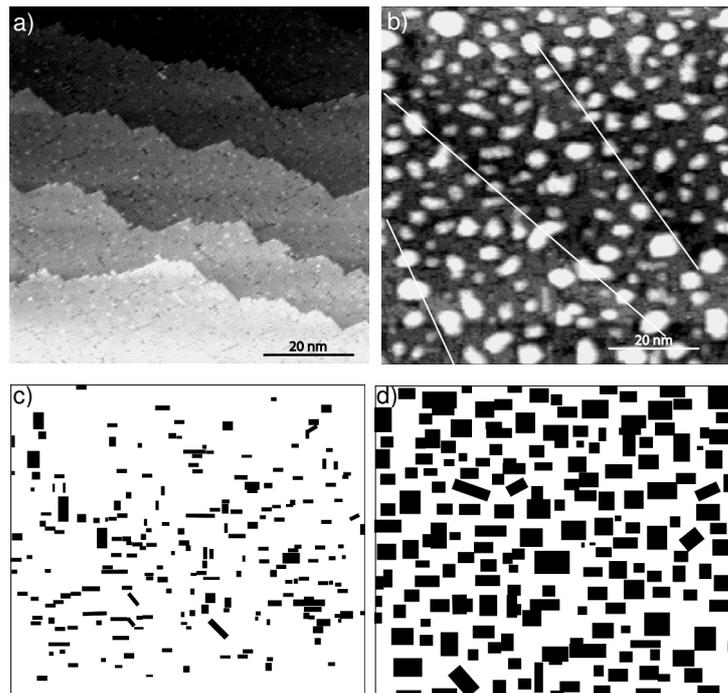


Abb. 4.3.2.1

- Das STM-Bild zeigt eine gereinigte Si(100)-(2x1) Oberfläche. Die Defektdichte beträgt 4%.
- 1,5 ML Mn auf Si(100)-(2x1), die für 5 min mit 385°C geheizt wurde. Die weißen Linien markieren die Stufenkanten. Die Defektdichte beträgt 9% (ohne die Fläche unter den Inseln, 48% mit der Fläche unter den Inseln).
- Markierung der Defekte aus b) mit Rechtecken (9%).
- Markierung der Inseln aus b) mit Rechtecken (39%).

Inseln in das Substrat reichen könnte kann aus den oben genannten Gründen nur spekuliert werden. Die weißen Linien in Abb. 4.3.2.1 b) markieren den Verlauf der Stufenkanten des Substrats. Die in Abb. 4.3.2.1 c) und d) markierten Bereiche beziehen sich nur auf die oberen 88% des Bildes 4.3.2.1 b), da die unteren 12% des Bildes verstärkt Störungen aufweisen, die zwar mit Hilfe der STM-Software von Omicron kaschiert werden konnten, aber für eine quantitative Auswertung nicht in Frage kommen. Bemerkenswert ist auch, dass einige der Inseln anscheinend in die Richtung der Dimerreihen ausgerichtet sind. Das trifft im besonderen Maße für die kleineren Inseln zu, wobei sich auch einige der größeren an den Dimerausrichtungen orientieren. Diese Orientierung kann mit der Entstehung der Inseln zusammenhängen. Es ist plausibel, dass es für freie Manganatome einfacher ist, an solchen Stellen Silizium für die Silizidbildung zu gewinnen und sich entlang der Störung an die Insel

anzulagern, wenn an einer Inselkante das Substrat gestört ist. Da Störungen der Si(100)-(2×1) aber entweder parallel oder senkrecht zu den Dimerreihen verlaufen, kann sich diese Symmetrie, zumindest teilweise, auf die Inseln übertragen. Der in Kapitel 4.3.1

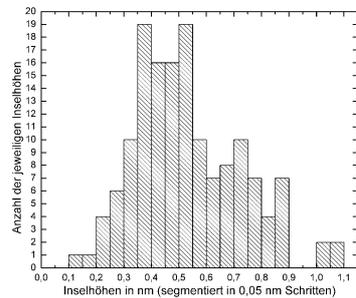


Abb. 4.3.2.2

Histogramm, erzeugt mit den Daten aus Abb. 5.3.2.1 b). Die Zuordnung der Inselhöhen erfolgte in 0,05 nm Schritten. Die z-Kalibrierung erfolgte mit auf der Probe sichtbaren atomaren Stufen des Substrates. Insgesamt fanden 149 Cluster Eingang in das Histogramm.

(Abb. 4.3.1.11) auftretende Winkel von 12° zwischen der Dimerreihenrichtung und der Inselkante der MnSi-Insel ist auch mit dieser Erklärung verträglich, da neben den Anlagerbedingungen auch die Kristallsymmetrie des MnSi berücksichtigt werden muss. Diese Aspekte werden im Laufe dieses Kapitel noch vertieft. Neben den Insel- und Defektflächen sind auch die Inselhöhen der in Abb. 4.3.2.1 b) gezeigten Inseln von Interesse. Abb. 4.3.2.2 zeigt ein aus den Daten von Abb. 4.3.2.1 b) erzeugtes Histogramm. Die mittlere Inselhöhe beträgt 0,53 nm, während die Inselhöhen insgesamt zwischen 0,15 nm und 1,07 nm schwanken. Die Inselhöhen wurden immer bezüglich der Terrasse, auf der sie sich befinden, bestimmt.

Vertiefungen (Defekte) in Inselnähe wurden wenn möglich nicht in die Vermessung einbezogen. Vergleicht man das mit Hilfe des Histogramms abgeschätzte Volumen der Inseln ($\sim 2500 \text{ nm}^3$), mit dem sich aus der Defektdichte und der durchschnittlichen Tiefe der Defekte ergebenden Volumen ($\sim 90 \text{ nm}^3$), so wird deutlich, dass die Cluster entweder größtenteils nicht aus MnSi bestehen oder aber das Substrat unter den Inseln ebenfalls gestört ist. Wahrscheinlich ist, dass beides der Fall ist. Bei Ausheiltemperaturen um 380°C bilden sich also vermutlich Cluster, die sowohl aus Mangan, als auch aus Silizium bestehen. Über das Mischungsverhältnis kann keine Aussage getroffen werden, da wiederum Informationen über die Beschaffenheit der Unterseite der Cluster fehlen.

Als nächstes werden Proben vorgestellt, die auf Temperaturen um 450°C geheizt wurden. In Abb. 4.3.2.3 sind STM-Bilder der Probe aus Abb. 4.3.2.1 b) zu sehen, nachdem sie auf 450°C geheizt worden ist. Sie wird auch in [Lippitz2005] behandelt. In Abb. 4.3.2.3 b) wurde das

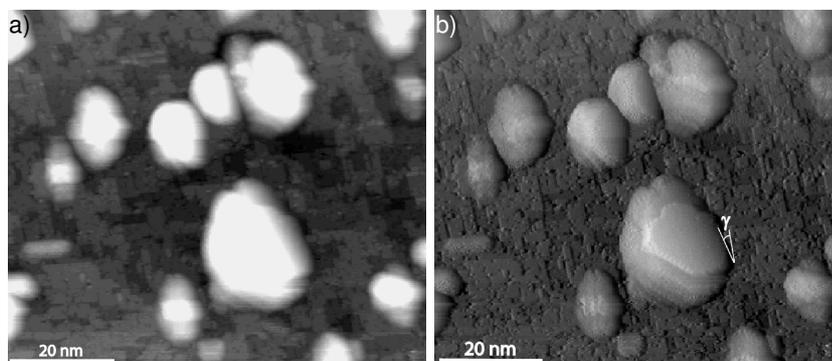


Abb. 4.3.2.3

- STM-Bild einer 1,5 ML dicken Mn Probe auf Si(100)-(2×1). Besonders gut erkennbar sind die massiven Defekte auf dem Substrat.
- Mischung von a) und seiner Ableitung. Der mit γ markierte Winkel beträgt 13° . Die Insel bei γ zeigt als einzige im Bild atomare Auflösung auf der lang gezogenen Fläche.

Bild a) mit seiner Ableitung gemischt, um so Details der Oberfläche sichtbar zu machen. Der mit γ markierte Winkel in Abb. 4.3.2.3 b) beträgt 13° und ist damit mit dem in Abb. 4.3.1.11 für die 0,75 ML dicke Manganprobe bestimmten Winkel verträglich. Das heißt, auch hier besteht ein direkter und erkennbarer Zusammenhang zwischen Substrat und Insel. Die Defektdichte auf dem Substrat hat sich sowohl im Vergleich zum Heizen mit 385°C (Abb. 4.3.2.1 b)), als auch zur eben erwähnten 0,75 ML dicken Mn-Probe erhöht. Ohne die Flächen unter den Inseln in Betracht zu ziehen erhält man eine Defektdichte von 31%, mit der Fläche unter den Inseln 59%. Die Zahlenwerte sind allerdings nur sehr eingeschränkt vergleichbar, da bei der hier vorgestellten 1,5 ML dicken Mn-Probe die Defekte an vielen Stellen nicht nur die Ebene auf der die Insel gewachsen ist betreffen, sondern zwei bis drei Siliziumebenen in das Substrat reichen. Im Vergleich zu den im Kapitel 4.3.1 vorgestellten Mn_5Si_3 -Inseln finden sich am Inselrand der Insel, die atomare Strukturen zeigen keine Vertiefungen, die weiter als eine atomare Stufe in das Substrat reichen. In Abb. 4.3.2.4 wird die strukturierte Insel genauer betrachtet, dabei zeigt a) die atomar strukturierte Oberfläche im Ganzen und b) einen Ausschnitt derselben. In beiden Bildern wurde die Oberfläche als Bezugsebene gewählt, so dass sie in der Darstellung flach sind. Ebenfalls in beiden Bildern erkennt man, dass die atomaren Strukturen ein hexagonales Muster bilden. Die Linienprofile aus Abb. 4.3.2.4 b) orientieren sich an den hochsymmetrischen Richtungen, A und B liegen in der kurzen, C in der langen Richtung. Die sich ergebenden atomaren Abstände (A: 0,67 nm, B: 0,63 nm und C: 1,15 nm) decken sich mit denen für eine $\text{MnSi}(111)$ -Oberfläche (A und B: 0,645 nm, C: 1,117 nm) (Abweichung im Mittel 3%). Die Verbreiterung des Signals in Linienprofil A bei 1,7 nm ist auf eine Veränderung der elektronischen Struktur zurückzuführen, die durch das benachbarte Atom der nächsten Lage entsteht. Dieser Bereich wurde nicht zur Bestimmung der atomaren Abstände verwendet. Atome der nächsten Lage wurden in Abb. 4.3.2.4 b) mit Ellipsen und dem Buchstaben D gekennzeichnet. Sie sitzen an den für MnSi erwarteten Positionen und werden auch auf Si (111) beobachtet [Schwinge2005_Dis]. Die erwarteten Positionen ergeben sich aus der Annahme, dass das MnSi in einer einfach kubischen Struktur vorliegt. Die Realität weicht nur geringfügig von dieser Annahme ab, da das MnSi helikal versetzt aufwächst [Mogilatenko2003].

Interessanterweise finden sich auf derselben Probe auch wieder die Inseln, die im vorherigen Kapitel als Mn_5Si_3 identifiziert wurden. Die Identifizierung beruht hauptsächlich auf dem gefundenen Spitzenwinkel von 120° (Abb. 4.3.2.5). Dieser weist auf eine hexagonale Gitterstruktur hin. In einem kubischen System würde man 90° Winkel oder Vielfache davon erwarten, zumindest wenn man davon ausgeht, dass die gering indizierten Flächen die energetisch günstigsten sind. Leider finden sich in der Literatur keine Angaben über die energetisch bevorzugten Formen von Mn_5Si_3 Kristalliten. Das gleichzeitige Auftreten von MnSi und Mn_5Si_3 wird mit einer unterschiedlichen Verfügbarkeit des Siliziums erklärt. Es

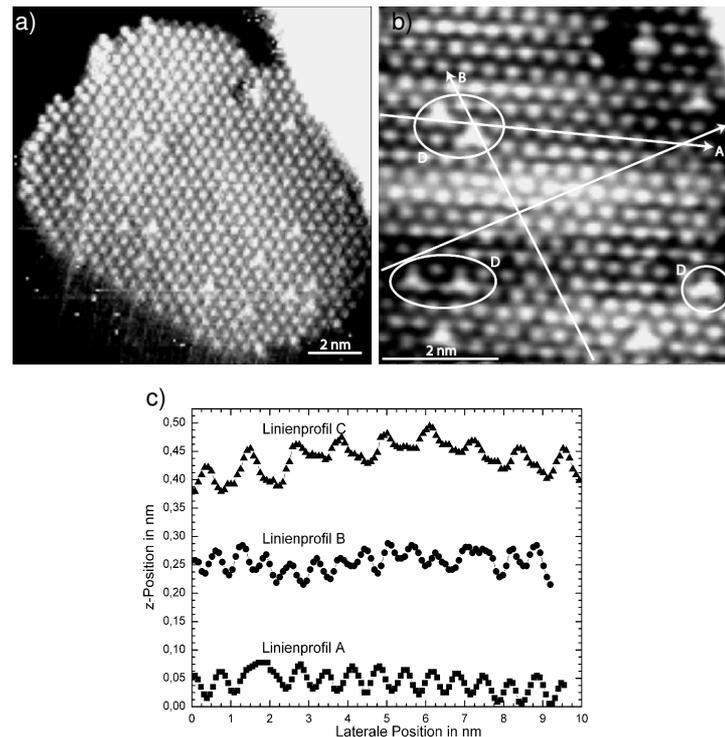


Abb. 4.3.2.4

- STM-Bild der in Abb. 4.3.2.3 zu erkennenden flachen Insel. Das Bild wurde mit seiner Ableitung überlagert, um die atomaren Strukturen hervorzuheben.
- Messung eines Ausschnittes aus a). Markiert sind mit Pfeilen und den Buchstaben A, B und C die in c) dargestellten Linienprofile. Mit D markierte Ellipsen zeigen Regionen, in denen Atome der nächsten Ebene sichtbar sind. Die Positionen entsprechen denen für MnSi erwarteten.
- Linienprofile aus b). Die atomaren Abstände entsprechen denen von MnSi.

wurde unter komplett anderen Bedingungen bei mehr als 200 nm dicken MnSi-Schichten beobachtet [Zhang1991].

Des Weiteren wurden unter vergleichbaren Wachstumsbedingungen auf Si(111) in derselben UHV-Kammer bereits Mn_5Si_3 Formierungen beobachtet [Ctistis2002]. Im Unterschied zu den hier vorgestellten Schichten wurde dort eine Bismut rekonstruierte Si(111)-Oberfläche verwendet. Die Bismutschicht verringert auf der Si(111)-Oberfläche die Menge des für die Silizidbildung zur Verfügung stehenden Siliziums, da ohne das Bismut MnSi gebildet wird [Ctistis2005]. Das führt umgekehrt zu dem Schluss, dass auf der Si(111)-Oberfläche mehr oder leichter aus dem Kristallverbund herauslösbares Silizium zur Verfügung steht als auf der Si(100)-(2×1) Oberfläche. In neueren Untersuchungen wurden auf 4° fehlorientiertem Si(111) Inseln gefunden, die in Ihrer Morphologie den hier vorgestellten Mn_5Si_3 -Inseln sehr ähnlich sind und in [Schwinge2005_Dis] als Mn_5Si_3 -Inseln identifiziert werden. Obwohl im Rahmen dieser Arbeit keine vermessbaren atomaren Strukturen auf den Inseln mit einem Spitzenwinkel um 120° gefunden wurden, die eine eindeutige Identifizierung erlaubt hätten, reichen die Indizien aus um diese als Mn_5Si_3 -Inseln zu identifizieren. In Abb. 4.3.2.5 ist nun eine solche Mn_5Si_3 -Insel zu sehen. Wie bereits erwähnt handelt es sich um dieselbe Probe wie in den Abb. 4.3.2.1, 3 und 4 nach dem Heizen auf 450°C. Es wurde die Kalibrierung aus Abb. 4.3.2.3 unter der Annahme

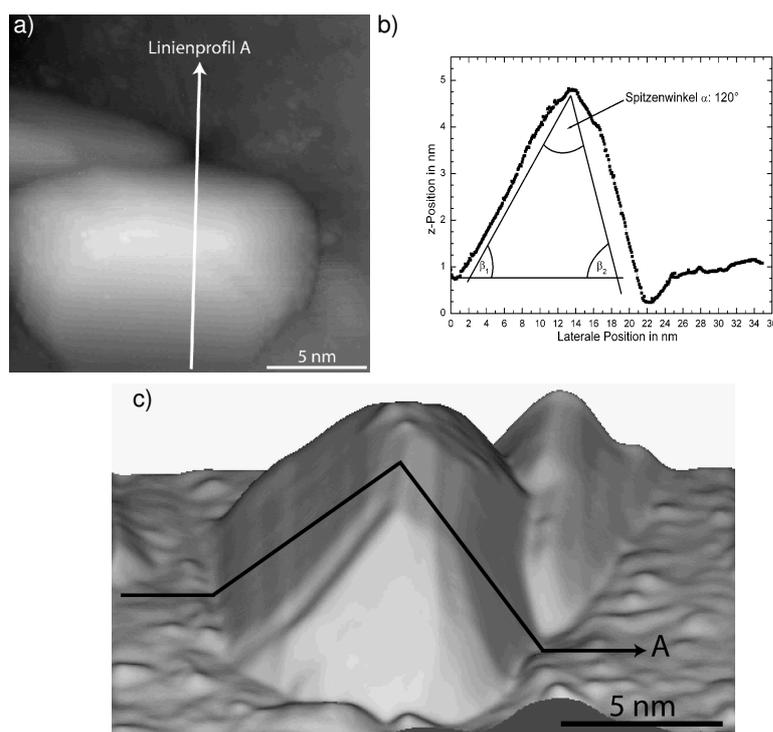


Abb. 4.3.2.5

- STM-Bild einer Mn_5Si_3 -Insel. Um die Konturen der Insel besser zu erkennen wurde das Bild mit seiner Ableitung gemischt. Der Pfeil A markiert die Lage des Linienprofils in dem Originalbild.
- Linienprofil entlang des in a) markierten Pfeils. Der Spitzenwinkel beträgt 120° , die Winkel β_1 : 20° , β_2 : 40° .
- Dreidimensionale Darstellung der Insel aus a). Der Pfeil markiert die ungefähre Lage des Linienprofils. Die z-Achse ist um einen Faktor 1,25 überhöht.

verwendet, dass nach ausreichender Wartezeit die Drifteffekte vernachlässigt werden können. Wie erläutert wird der Spitzenwinkel zur Klassifizierung der Insel herangezogen. Die Winkel, die die Insel mit der Substratoberfläche bildet, betragen $\beta_1=20^\circ$, $\beta_2=40^\circ$. Neben dem Spitzenwinkel deutet auch das Auftreten der Vertiefung (sowohl im Linienprofil, als auch in Abb. 4.3.2.5 c) zu erkennen) auf Mn_5Si_3 hin.

Als problematisch erweist sich in dieser Aufnahmeserie, dass keine atomare Auflösung auf dem Substrat neben der Insel erzielt wurde, obwohl die Parameter der STM-Messung gegenüber denen in Abb. 4.3.2.3 nicht verändert wurden. Da die Spitze aufgrund einer Mehrfachspitze gereinigt wurde, werden die Probleme beim Abbilden des Substrates auf die Änderung der Spitze zurückgeführt. Um eine nähere Untersuchung der Inselperipherie vornehmen zu können, benötigt man die atomare Strukturierung des Substrates. Dies ist in Abb. 4.3.2.6 gegeben. Bei dieser Probe handelt es sich um 1 ML Mn auf einer Si(100)-(2x1) Oberfläche, die für 5 min auf 450°C geheizt wurde.

In Abb. 4.3.2.6 a) ist ein dreidimensionales Übersichtsbild gezeigt. Zu erkennen sind zwei Mn_5Si_3 -Inseln. An der unteren Insel kann man besonders gut die Vertiefung unterhalb der Insel erkennen. In b) sind die Defekte der Substratoberfläche sichtbar, während in c) eine kleinere Messung der unteren Insel aus a) und b) abgebildet ist. Die Linie A markiert die Lage des Linienprofils, das in Abb. 4.3.2.7 gezeigt wird. Betrachtet man nun das Substrat

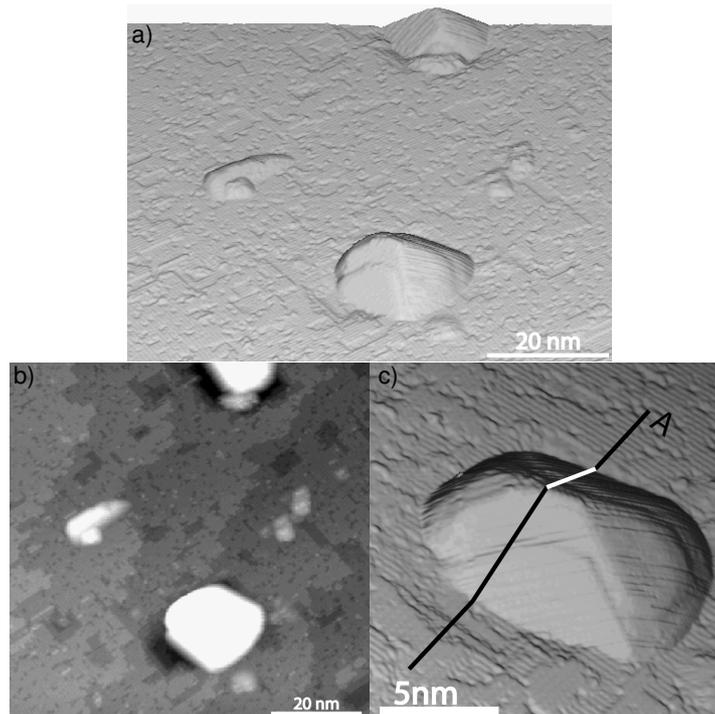


Abb. 4.3.2.6

- Dreidimensionales Übersichtsbild einer mit 1 ML Mn beschichteten Si(100)-(2×1)-Probe, die auf 450 °C geheizt wurden.
- Zweidimensionales Übersichtsbild, der Probe aus a).
- Dreidimensional dargestelltes STM-Bild eines kleineren Messbereiches der unteren Insel aus a) und b). Die Linie A markiert die Position des Linienprofils in Abb. 4.3.2.7.

findet man eine Defektdichte von 22%, wenn man die Fläche unter den Inseln nicht mitrechnet oder 28%, mit der Fläche unter den Inseln. Auch wenn lediglich die Umgebung der unteren Insel, betrachtet wird, erhält man nur Defektdichten von 20%, bzw. 31% (ohne und mit der Fläche unter der Insel). Das ist deutlich weniger, als für die 1,5 ML dicke Mn Schicht nach dem Heizen auf 450 °C (31%, bzw. 59%). Hieraus wird deutlich, dass der Grad des Einflusses auf die Substratoberfläche stark von der Manganbedeckung abhängt. Bezieht man hingegen die für 0,75 ML und 0,5 ML dicken Manganproben gefundenen Defektdichten mit in den Vergleich ein, so unterscheiden sich diese kaum von denen für die 1 ML dicke Probe. Ein deutlicher Unterschied in der Defektdichte findet sich erst wieder für wesentlich geringere Manganbeschichtungen (0,13 ML, Kapitel 4.3.1).

Die Inselhöhe hingegen ist in beiden Fällen (1 ML und 1,5 ML) vergleichbar, während bei den Submonolagenschichten die Inselhöhen stärker variieren.

Die Datenlage lässt keine statistischen Aussagen bezüglich der Inseldichten zu, aus denen eine Abschätzung der Gesamtmenge des Mangans auf der Oberfläche möglich wäre.

Des Weiteren wird dies durch nicht kristalline Cluster erschwert, da bei Ihnen zwar das Volumen abgeschätzt, nicht aber die chemische Zusammensetzung bestimmt werden kann. Die Betrachtung des Linienprofils (Abb. 4.3.2.7) stützt wieder die Vermutung es handle sich um Mn_5Si_3 , da der Spitzenwinkel $125^\circ \pm 2^\circ$ beträgt (was im Rahmen der Messgenauigkeit mit den vorhergesagten 120° vereinbar ist). Die Winkel zwischen Substratoberfläche und Inselflächen betragen für β_1 : 26° und für β_2 : 29° . Vergleichbare Winkel zwischen

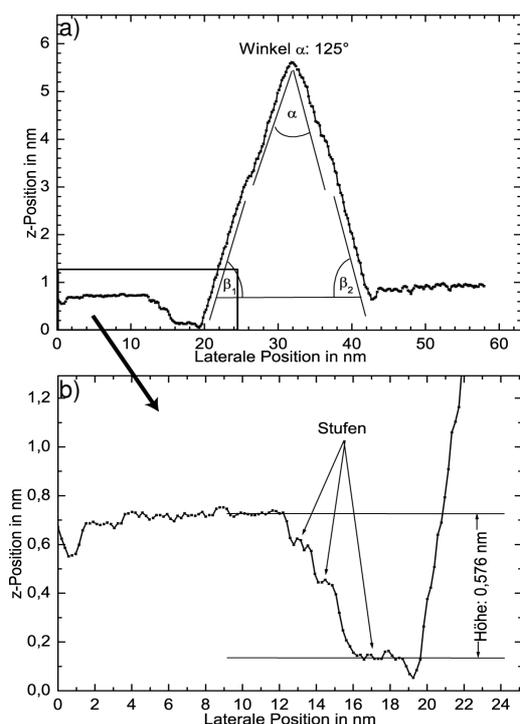


Abb.: 4.3.2.7

- a) Linienprofil entlang der Linie A in Abb. 4.3.2.6 c).
 b) Vergrößerung des mit dem Rechteck markierten Bereiches in a). Die Vertiefung reicht 4 atomare Stufen in das Substrat.

Substratoberfläche und Inselseitenflächen findet man auch bei den Submonolagenmanganschichten in Kapitel 4.3.1, diese weichen aber von denen für die auf der 1,5 ML dicken Manganprobe gefundenen ($\beta_1=20^\circ$, $\beta_2=40^\circ$, Abb. 4.3.2.5) ab. Ein besonderes Augenmerk wird wieder auf die Vertiefung links von der Insel (im Linienprofil) gerichtet. In Abb. 4.3.2.7 a) ist jener mit dem rechteckigen Kasten gekennzeichnet und dieser Bereich in b) vergrößert dargestellt. Die Vertiefung weist eine Tiefe von 0,576 nm auf, was 4 atomaren Stufen des Substrates entspricht, bei 6% Abweichung. Die dritte in Abb. 4.3.2.7 b) sichtbare Stufe in der Vertiefung ist eine Doppelstufe. Rechts von dieser Doppelstufe ist, direkt vor der Insel, noch eine weitere Absenkung zu erkennen, die aber nur eine halbe atomare Stufe (0,068 nm) des Substrates ausmacht. Es wird vermutet, dass die reale Tiefe dieser Absenkung auf Grund einer

zu großen STM-Spitze nicht aufgelöst werden kann. Das heißt, dass hier mit einer hohen Wahrscheinlichkeit die Vertiefung 5 atomare Stufen in das Substrat reicht. Auch diese Beobachtung ist wieder vergleichbar mit den bisher als Mn_5Si_3 identifizierten Inseln (Abb. 4.3.1.5, 7 und Abb. 4.3.2.5). Auch in Abb. 4.3.1.12 sind diese Vertiefungen sichtbar, allerdings steht eine klare Identifizierung dieser Inselform noch aus, auch wenn die Indizien auf Mn_5Si_3 hindeuten.

Bei der nächsten Probe handelt es sich um eine 2,5 ML dicke Manganprobe auf einer Si (100)-(2x1) Oberfläche, die auf 440°C erwärmt wurde. Die Substratoberfläche ist bei dieser Probe komplett mit entweder unstrukturierten Manganclustern oder kristallinen Strukturen bedeckt. Dabei dominieren leicht die unstrukturierten Bereiche und erschweren die Messung der atomaren Strukturen. Die strukturierten Bereiche sind im Mittel (8×8) nm² groß. Zusätzlich zu dem in Abb. 4.3.2.8 a) mit dem Pfeil markierten und in b) dargestellten Linienprofil wurden noch weitere in a) mit unterbrochenen Pfeilen gekennzeichnete Linienprofile ausgewertet. Da deren Qualität jedoch hinter der von Linienprofil A zurückbleibt, wurde hier auf eine Darstellung verzichtet. Die Auswertung des in Abb. 4.3.2.8 b) dargestellten Linienprofils A ergibt einen atomaren Abstand von 0,58 nm. Für C, das am ehesten der Driftrichtung von A entspricht, erhält man 1,07 nm und für B: 0,60 nm. Die hier auftretenden Differenzen zwischen Richtungen, in denen die gleichen Abstände erwartet werden ergeben sich aus Drifteffekten.

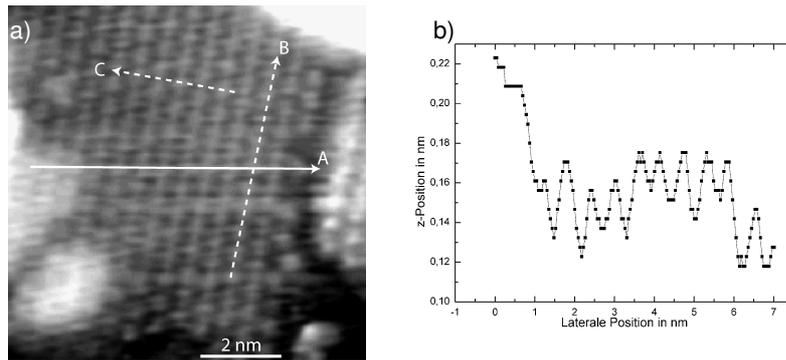


Abb. 4.3.2.8

- a) Ausschnitt aus einem STM-Bild einer 2,5 ML dicken Manganschicht auf einer Si(100)-(2×1)-Oberfläche, die auf 440°C geheizt wurde. Der Pfeil markiert die Lage des Linienprofils, die unterbrochenen Pfeile (B und C) markieren die Positionen von nicht dargestellten, aber ausgewerteten Linienprofilen.
- b) Linienprofil entlang des Pfeils A in a).

Führt man eine Driftkorrektur aus, so erhält man für A: 0,66 nm (für MnSi: 0,645), für B: 0,68 nm (MnSi: 0,645 nm) und für C: 1,19 nm (MnSi: 1,117 nm), was gut zu den für MnSi erwarteten Werten passt. Eine hochwertige Kalibrierung des Scanners war nicht möglich, da dafür die atomare Strukturierung des Substrates fehlte. Die schlechte Qualität der Oberfläche im Vergleich zu den auf 450°C und 460°C geheizten Proben lässt darauf schließen, dass die Formation von MnSi auf den glatten Si(100)-(2×1) Oberflächen erst um 440°C beginnt. Im Vergleich zu den auf höhere Temperaturen erwärmten Proben ist die Menge der nicht strukturierten Cluster wesentlich größer. Möglich ist auch, dass die größere Menge an Mangan eine höhere Formationstemperatur bedingt. Das wird im Zusammenhang mit dickeren Proben noch untersucht. Ähnliches ist auch auf einer weiteren 2,5 ML dicken Manganprobe beobachtet worden, deren Strukturen später betrachtet werden.

Neben den bisher vorgestellten Inseln tritt auf der Si(100)-(2×1) Oberfläche noch eine weitere auf. Diese wird in Abb. 4.3.2.9 dargestellt. Es handelt sich um eine mit 1,0 ML Mn beschichtete Si(100)-(2×1) Oberfläche, die auf 450°C geheizt wurde. Sie zeigt keine atomaren Strukturen auf einer der Flächen. Interessant ist, dass die Oberseite der Insel nur einen Winkel von 11° gegenüber der Substratoberfläche aufweist. Die Summe der Winkel der Seitenflächen im Linienprofil beträgt 96°, was auf eine kubische Kristallstruktur hinweist. Die seitlichen Flächen in Linienprofil B zeigen dagegen keine glatten Flächen, so dass eine Bestimmung von Winkeln nicht sinnvoll ist. Im Gegensatz zu Linienprofil A ist am Rand der Oberseite eine Überhöhung zu erkennen, die links 0,21 nm und rechts 0,20 nm hoch ist. Die Erhöhung in der Mitte der Inseloberseite ist nur 0,142 nm hoch. Hierbei handelt es sich nicht um eine wie in [Kumar2004] oder [Schwinge2005] beschriebene Verbiegung der Oberfläche, sondern um Adatome. Dies wird in Abb. 4.3.2.10 sichtbar, einem Ausschnitt aus Abb. 4.3.2.9 a), der in Abb. 4.3.2.10 a) dreidimensional dargestellt ist. In b) wird die Oberflächenstruktur der Insel sichtbar. In der Peripherie der Insel ist analog zu den Mn₅Si₃-Inseln eine Vertiefung zu erkennen. Diese ist besonders gut im Linienprofil A und C sichtbar.

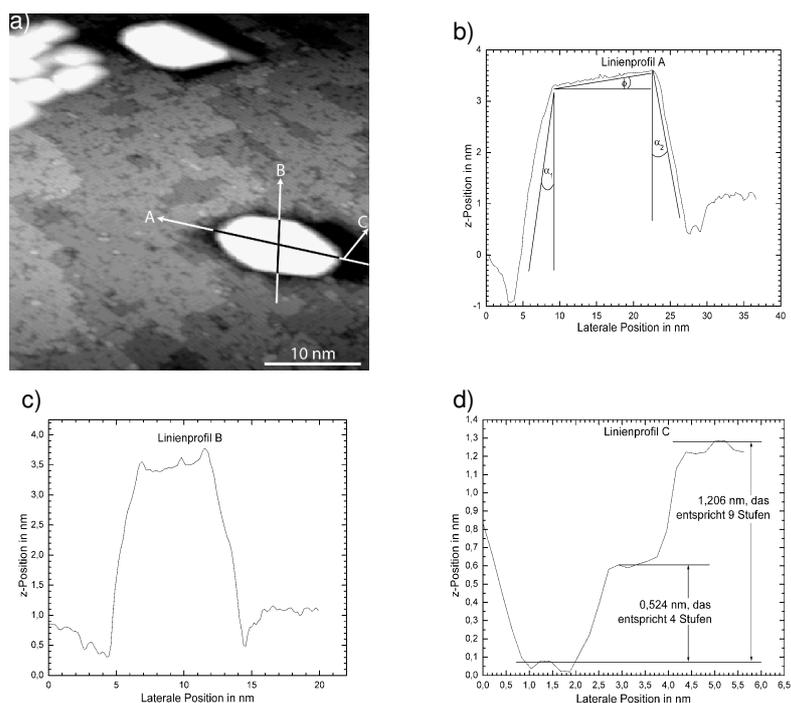


Abb. 4.3.2.9

- STM-Bild einer 1,0 ML dicken Manganschicht die auf 450 °C geheizt wurde. Die Pfeile markieren die Lage von Linienprofilen.
- Linienprofil entlang des Pfeils A. Der Winkel α_1 beträgt 43°, α_2 : 53° und ϕ : 11°.
- Linienprofil entlang des Pfeils B.
- Linienprofil entlang des Pfeils C, die Vertiefung reicht 9 atomare Stufen tief in das Substrat.

Rechts von der Insel (links im Linienprofil A) reicht die Vertiefung bis zu 9 atomare Stufen ($\cong 1,206$ nm) in das Substrat. Theoretisch würde bei 9 Stufen eine Tiefe von 1,224 nm erwartet, was aber im Rahmen der Messgenauigkeit gut mit dem gefundenen Wert übereinstimmt (Abweichung von 1%). Im Unterschied zu den bisher beobachteten Mn_5Si_3 -Inseln handelt es sich aber nicht um einzelne, nicht zusammenhängende (verbundene) Vertiefungen, sondern um eine Vertiefung, die zwar an verschiedenen Stellen unterschiedlich tief ist, aber die Insel komplett umschließt. Auch wenn diese Insel hier mit den Mn_5Si_3 -Inseln verglichen wird, weist außer dem Auftreten der Vertiefung nichts auf dieses Mangansilizid hin. Genau genommen widerspricht der bereits oben erwähnte Winkel

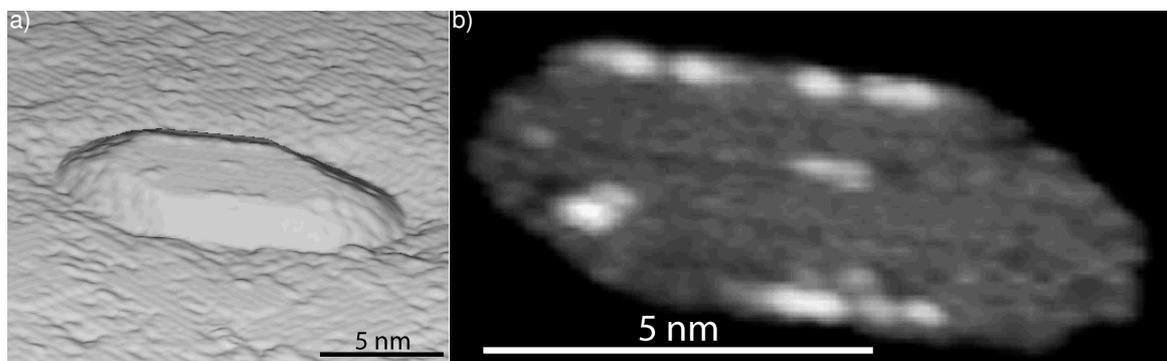


Abb. 4.3.2.10

- Dreidimensionale Darstellung der Insel aus Abb. 4.3.2.9 a).
- Zweidimensionales Bild der Inseloberfläche. Erkennbar sind die größtenteils am Rand der Oberseite angesiedelten Adatome.

von 96° , den die Seitenflächen in Linienprofil A (Abb. 4.3.2.9) bilden, der Annahme einer Mn_5Si_3 -Insel. Diese Abweichung kann aber auch mit dem Fehlen von ausreichend atomar glatten Seitenflächen erklärt werden. Auch eine Betrachtung der Seitenflächen aus Linienprofil B ist wenig hilfreich, da auch hier die Seitenflächen nicht glatt sind (in Abb. 4.3.2.10 a) entsteht der Eindruck von glatten Seitenflächen durch die Beleuchtung). Insgesamt kann über die Zusammensetzung dieser Inselform und damit auch über die Kristallstruktur, keine gesicherte Aussage getroffen werden. Es bleibt bei der vagen Vermutung einer kubischen Struktur.

Im folgenden Abschnitt wird nun auf eine Probe eingegangen, die vergleichbar mit der aus Abb. 4.3.2.3 ist. Es handelt sich um eine 1,5 ML dicke Manganschicht, die auf 480°C aufgeheizt wurde. Diese Probe wurde auch in [Lippitz2005] besprochen. Die sich dabei bildenden Strukturen ähneln denen der auf 450°C geheizten Proben. In Abb. 4.3.2.11 a) und b) ist eine als MnSi identifizierte Insel abgebildet. Die auffällige Doppelstruktur der Insel in b) liefert zwar Hinweise auf eine Mehrfachspitze, diese Vermutung lässt sich aber bei genauerer Betrachtung der Strukturen nicht erhärten, da zwar die groben Umrisse der Insel dupliziert scheinen, aber Details (z.B. Defekte) nicht reproduziert werden. Betrachtet man die in a) eingezeichneten Linienprofile, so finden sich wieder, im Rahmen der Messgenauigkeit, die für MnSi erwarteten atomaren Abstände. Für A ergeben sich 0,60 nm (theoretisch: 0,645 nm), für B 0,62 nm (0,645 nm) und für C 1,13 nm (1,152 nm). Im Teil b) der Abbildung sind neben der Insel mit Ihren Strukturen wieder die atomaren Stufen des Substrates sichtbar. Diese ermöglichen neben der Kalibrierung des Scanpiezos auch wieder eine Aussage über die Formationsmechanismen des MnSi.

Auch wenn diese Aussagen nur auf Rückschlüssen beruhen, kommen ihnen in dieser Arbeit große Bedeutung zu, da, wie bereits erörtert, keine direkten Beobachtungen möglich waren. Die nummerierten Ebenen des Substrats verdeutlichen, dass das Substrat stark gestört ist. Wie im Kapitel 4.1.2 bereits erwähnt, beträgt die Terrassenbreite bei dem hier verwendeten Substrat zwischen 10 und 30 nm. An der linken unteren Ecke der Insel (Abb. 4.3.2.11 b) stoßen hier aber 3 Ebenen aneinander. Allein dies zeigt wie stark das Substrat beeinflusst wird. Die Defektdichte der Substratoberfläche beträgt in der Inselumgebung ohne die Fläche unter der Insel 14%, mit diesen Flächen 43%. Auffällig ist aber auch, dass die Inselformation, wenn man diese mit der Formation des Mangansilizids gleichsetzt, hier hauptsächlich von der Rückseite der Insel stattgefunden hat. Das bedeutet, dass diese wie Chips gestapelten MnSi-Lagen nicht, wie man intuitiv vermuten könnte, von der flachen Seite aus gewachsen sind, sondern von „hinten“ (von der in Abb. 4.3.11 b mit 3 gekennzeichneten Ebene) her an der steileren Seite wachsen. Das würde auch erklären, warum nur vereinzelt Adatome (siehe z.B. Abb. 4.3.2.4) und keine halbfertigen Lagen beobachtet worden sind. Die halbfertigen Lagen wären interessant um den Abstand der MnSi-Lagen bestimmen zu können. In Abb. 4.3.2.11 d) ist der Vollständigkeit halber schematisch eine

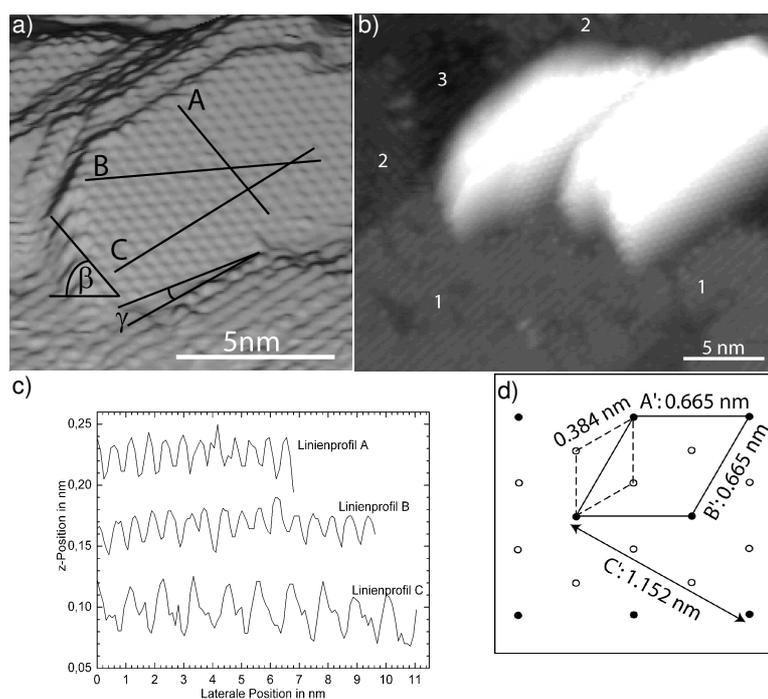


Abb. 4.3.2.11

- Dreidimensionale Darstellung einer mit 1,5 ML Mangan beschichteten Si(100)-(2×1) Oberfläche, die auf 480°C geheizt wurde. Die Linien markieren die Positionen der Linienprofile A, B und C in c). Der Winkel γ zwischen Inselkante und Dimerreihen beträgt 12°, der zwischen der MnSi(111)-Ebene und dem Substrat $\beta=15^\circ$.
- Zweidimensionale Darstellung der Insel aus a), Die Zahlen kennzeichnen die jeweilige Siliziumlage, wobei größere Zahlen tiefer liegende Ebenen bedeuten.
- Linienprofile A, B und C aus den Rohdaten von b). Die atomaren Abstände entsprechen im Rahmen der Messgenauigkeit denen von MnSi.
- Schematische Darstellung der $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Rekonstruktion auf eine Si(111)-Oberfläche. Die offenen Kreise repräsentieren die 1×1 -Struktur, die geschlossenen die Struktur.

$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ rekonstruierte Si(111)-Oberfläche gezeigt. Die offenen Kreise repräsentieren die 1×1 -Struktur, die geschlossenen die $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Struktur. Eingezeichnet ist sowohl die 1×1 -Einheitszelle mit einer Gitterkonstanten von 0,384 nm als auch die $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Einheitszelle mit den Gitterabständen $A'=B'=0,665$ nm und $C'=1,152$ nm. Die Abweichung von nur 3% im Vergleich zur MnSi(111)-Ebene erklärt, warum das MnSi epitaktisch auf der Si(111)-Oberfläche wachsen kann. Dies liefert aber leider keinen Hinweis darauf, warum auf dem Si(100) keine glatten, geschlossenen Filme gebildet werden. Diese Betrachtungen werden in [Deffke2002], [Ctistis2005], [Ctistis2002] und [Schwinge2005] vertieft und sind dort teilweise in die Identifikation der aufgefundenen Strukturen eingeflossen.

Eine weitere 2,5 ML dicke Manganprobe auf der Si(100)-(2×1) Oberfläche zeigt nach dem Heizen auf 440°C zwar die gleichen MnSi-Strukturen wie in Abb.4.3.2.11 a) und b), ist im Gegensatz zu Abb. 4.3.2.8 aber besser strukturiert. Wie in Abb. 4.3.2.12 a) und b) zu erkennen ist, sind die Räume zwischen den größeren Inseln, analog zu der Probe in Abb. 4.3.2.8, größtenteils nicht frei, d.h. das Substrat ist nur an wenigen Stellen sichtbar. Daher ist auch hier eine hochwertige Kalibrierung des Scanners nicht möglich. Dennoch

ermöglichen die wenigen messbaren Dimerreihen des Substrates (Abb. 4.3.2.13 a) oben) eine Identifikation der auf der in Abb. 4.3.2.12 b) oben und in Abb. 4.3.2.13 a) als Insel erkennbaren Strukturen als MnSi. Der Winkel zwischen der strukturierten Fläche und der Si(100)-Oberfläche beträgt hier 20° . Das ist mehr als bei den bisher als MnSi identifizierten Inseln, diese Abweichung ist aber nicht signifikant, da die Kalibrierung nicht die Qualität der anderen erreicht (größerer Fehler). Die in Abb. 4.3.2.12 b) untere Insel weist abgesehen von Scanartefakten keine atomaren Strukturen auf. Betrachtet man den Spitzenwinkel von 130° , so ist eine Zuordnung zum Mn_5Si_3 ebenfalls nicht eindeutig möglich (trotz größerer Fehler).

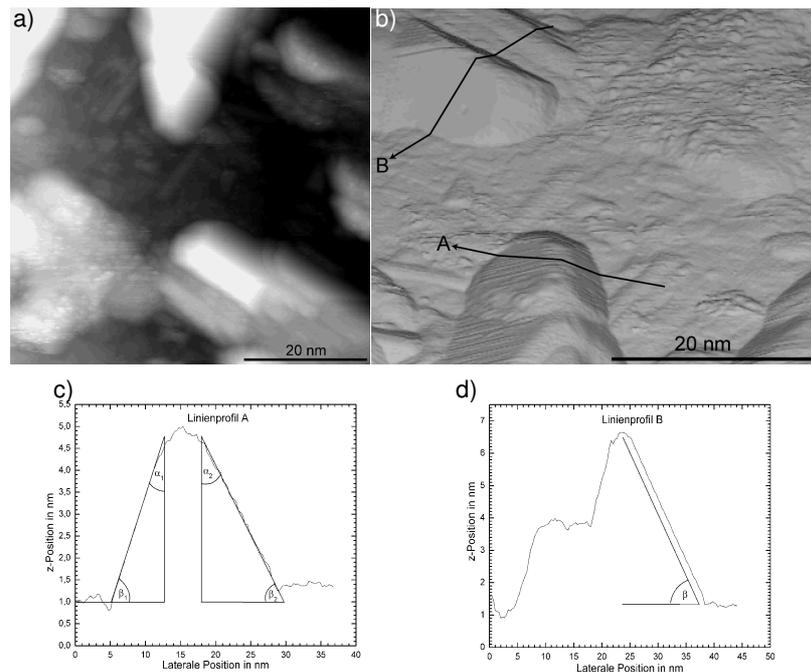


Abb. 4.3.2.12

- Übersichtsbild einer 2,5 ML dicken Manganprobe auf einer Si(100)-(2x1)-Oberfläche, die auf 440°C geheizt wurde.
- Dreidimensionale Darstellung eines Ausschnittes von a), das Bild wurde um 180° gedreht um die interessanten Flächen sichtbar zu machen. Die eingezeichneten Pfeile markieren die Lage der Liniensprofile.
- Liniensprofil A. Die Winkel betragen $\alpha_1: 60^\circ$, $\beta_1: 30^\circ$ und $\alpha_2: 70^\circ$, $\beta_2: 20^\circ$.
- Liniensprofil B. Der Winkel β beträgt 20° .

Der Winkel von 20° zwischen der flacheren Seite und der Si(100)-Oberfläche könnte auf MnSi hinweisen. Das erscheint aufgrund der bisherigen Erfahrungen jedoch unwahrscheinlich.

Abb. 4.3.2.13 a) zeigt einen Ausschnitt der MnSi-Insel, in der die atomaren Strukturen erahnbar sind, in b) ist ein LEED-Bild derselben Probe nach dem Heizen auf 490°C . Dieser große Temperaturschritt wurde unternommen, da sich die Morphologie der Probe (STM-Aufnahmen zu Folge) nach dem Heizen mit 460°C nicht maßgeblich verändert hatte. Die dann folgenden LEED-Bilder sollten schnelle Informationen über Änderungen der Probenmorphologie liefern. Aber auch nach dem Heizen auf 550°C änderten sich die LEED-Aufnahmen nicht signifikant. Sowohl die Signalpositionen, als auch ihre Intensität und Breite blieben weitestgehend konstant. Da die vorhandenen LEED-Signale von der

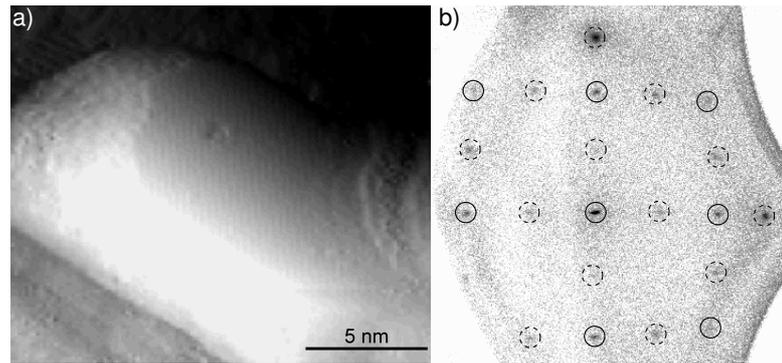


Abb. 4.3.2.13

- a) Ausschnitt aus Abb. 4.3.2.12 a). Um sowohl die atomaren Strukturen der Insel, als auch die Dimerreihen sichtbar zu machen, wurde das STM-Bild mit seiner Ableitung gemischt. Oben Links sind die Dimerreihen des Substrates schwach erkennbar. Die Strukturen auf der Insel sind ausreichend, um die Atomabstände zumindest in einer Richtung bestimmen zu können. Man erhält $a=0,663$ nm, was gut zu MnSi (0,645 nm) passt.
- b) LEED-Bild der Probe nach dem Heizen mit 490°C, bei 85 eV. Auch weiteres Heizen mit höheren Temperaturen führt zu keiner Veränderung im LEED-Bild. Die Kreise markieren die Positionen der 1×1 Reflexe, die gestrichelten die der Überstruktur. Da es sich um ein zweidomäniges Substrat handelt, findet man die Reflexe der Überstruktur in beiden Richtungen.

2×1 -Rekonstruktion der Si(100)-Oberfläche stammen, heißt die konstante Breite der Signale, dass die Regionen mit der freien Si(100)-Oberfläche im Mittel gleich groß bleiben. Das wiederum bedeutet, dass entweder die unstrukturierten Cluster bestehen bleiben oder aber das aus diesen Clustern gebildete Inseln, die gleiche Fläche bedecken, wie vorher die Cluster. Da bei Untersuchungen bei höheren Ausheiltemperaturen ebenfalls unstrukturierte Cluster gefunden wurden, wird hier davon ausgegangen, dass sich die Probenmorphologie nicht wesentlich verändert hat. Von den MnSi(111)-Flächen ist auf Grund der Schräglage der strukturierten Flächen in den LEED-Bildern nichts zusehen.

Des Weiteren soll hier noch eine Probe behandelt werden, die sich vor allem durch die Dicke der aufgedampften Manganschicht von den bisherigen unterscheidet. Es wurden 10 ML Mangan auf der Probe deponiert, um zu untersuchen, ob sich andere Strukturen bilden, als bei geringerer Bedeckung. Problematisch ist, dass nach dem Heizen auf 460°C für 5 min keine Bereiche mehr mit dem STM gefunden wurden, die nicht mit Mangan bedeckt sind. Daher kann über auftretende Winkel zur Substratoberfläche keine Aussage gemacht werden. Die Winkel können nur relativ zu den einzelnen Flächen bestimmt werden. Abb. 4.3.2.14 b) und c) zeigen STM-Bilder einer Auswahl von beobachteten Oberflächen. In c) sind hauptsächlich zwei interessante Flächen zu sehen. Erstere die in c) mit A markierte Fläche, die klar eine hexagonale Strukturen aufweist. Bei genauerer Betrachtung findet man, dass die Positionen der Adatome (besser zu erkennen in Abb. 4.3.2.15 a)), denen auf den MnSi(111)-Flächen entsprechen. Die Zweite ist die mit B markierte Fläche. Sie könnte mit der in Abb. 4.3.2.11 a) angedeuteten Fläche identisch sein, die entsteht wenn man annimmt, dass die Inseln von der steileren Seite aus wachsen. Nimmt man dieses an, so erhält man einen Abstand der Ebenen von 0,7 nm, was etwas mehr ist als erwartet, allerdings darf man nicht vergessen, dass keine direkte Kalibrierung des Rasterpiezos möglich ist. Ob diese, mit

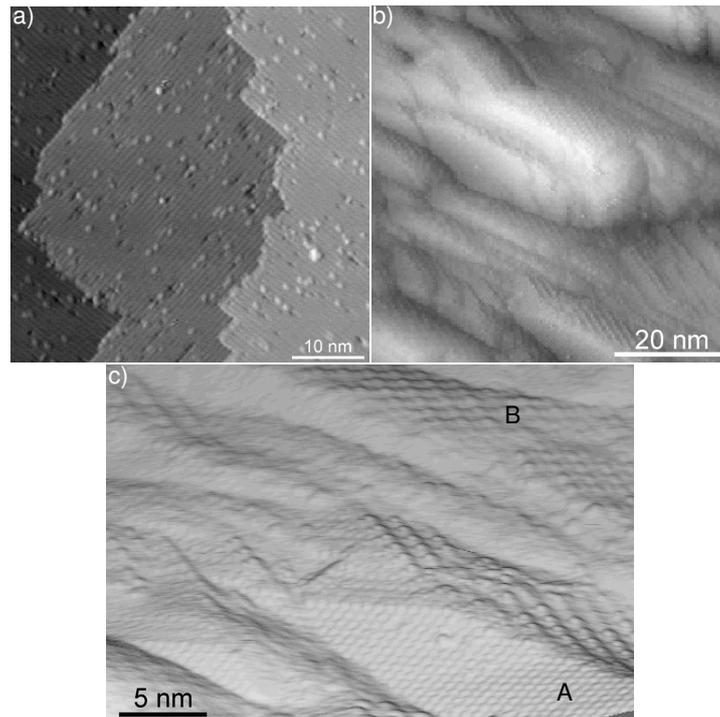


Abb. 4.3.2.14

- Darstellung der sauberen Si(100)-(2x1) Oberfläche vor dem Aufbringen von Mangan, es wurden die Originaldaten mit ihrer Ableitung gemischt.
- Ausschnitt aus einem (145x145) nm² großen Übersichtsbild, das zur Visualisierung der atomaren Strukturen auf allen Flächen mit seiner Ableitung gemischt wurde.
- Dreidimensionale Darstellung eines (30x30) nm² großen Messbereiches, in dem verschiedene atomare Strukturen erkennbar sind.

B markierte Fläche, parallel mit der Si(100)-Ebene ist, kann nur spekuliert werden, aufgrund der bisherigen Beobachtungen ist dies aber unwahrscheinlich.

Diese beiden Flächen werden in Abb. 4.3.2.15 genauer betrachtet. In a) sind drei Linienprofile eingezeichnet, von denen aber nur eines in c) dargestellt ist. Dieses Linienprofil ergibt einen atomaren Abstand von 0,596 nm. Das wäre mit bei einem direkt kalibrierten Rasterpiezo zu wenig (theor.: 0,645 nm). Diese Abweichung von 8,3% kann nun verwendet werden um den atomaren Abstand entlang des Linienprofils C zu skalieren. Tut man dies erhält man einen Abstand von 1,138 nm, der gut mit den Werten für MnSi(111) (1,117 nm) korreliert. Somit handelt es sich bei dieser Fläche um eine MnSi(111)-Oberfläche. Die mit Kreisen und Ellipsen markierten Bereiche zeigen, wie bereits erwähnt, Adatome, die an den für MnSi(111) erwarteten Positionen. In Abb. 4.3.2.15 b) sind nun die atomaren Strukturen der in Abb. 4.3.2.14 c) mit B markierten Fläche zu erkennen und mit Linienprofilen vermessen. Interessant ist dabei der Abstand in der mit C gekennzeichneten Richtung, da aus diesem der oben genannte Abstand der MnSi(111)-Lagen von 0,7 nm berechnet wurde. Der Winkel zwischen den beiden in Abb. 4.3.2.15 a) und b) gezeigten Flächen beträgt 150°. Dieser Winkel deutet an, dass die mit B markierte Ebene nicht parallel zu der Si(100)-Oberfläche liegt. Die bis hier gezeigten STM-Aufnahmen der 10 ML dicken Manganschicht legen eine mit MnSi bedeckte Oberfläche nahe, die wiederum keinen glatten Film auf der Si(100)-(2x1) Oberfläche bildet.

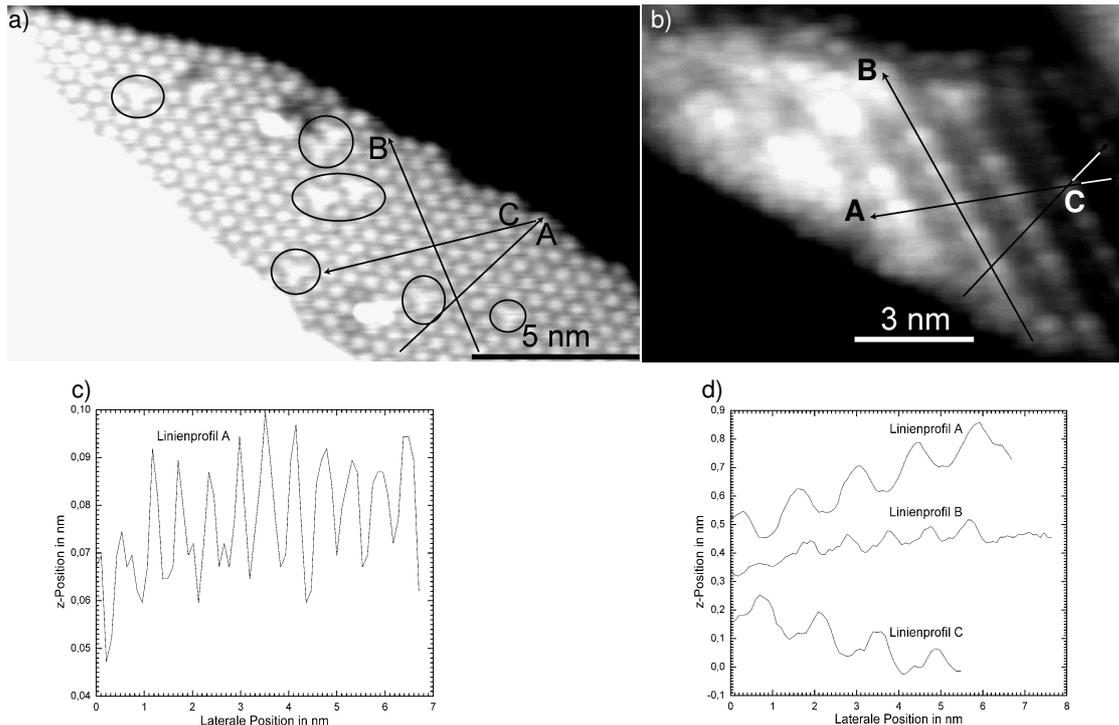


Abb. 4.3.2.15

- Darstellung der in 4.3.2.14 c) mit A markierten Fläche. Die mit A, B und C markierten Pfeile repräsentieren die Lage von Linienprofilen, von denen nur A in c) dargestellt ist. Für die atomaren Abstände erhält man für A: 0,596 nm, B: 0,564 nm und C: 1,051 nm. A weicht damit um 8,3% von dem für MnSi(111) erwarteten Wert ab. Skaliert man B und C damit erhält man für B: 0,611 nm und C: 1,138 nm.
- Darstellung der in 4.3.2.14 c) mit B markierten Fläche. Die Pfeile A, B und C markieren die Lage von Linienprofilen, die in d) dargestellt werden. Es ergeben sich für A: 1,421 nm, für B: 0,949 nm und für C: 1,399 nm.
- Linienprofil A aus a).
- Linienprofile A, B und C aus b).

Neben diesen wurden aber auch andere Bereiche gefunden, denen keine Kristallstruktur und damit kein Mangansilizid eindeutig zugeordnet werden kann.

In Abb. 4.3.2.16 a) ist ein Ausschnitt aus einem Übersichtsbild gezeigt, in dem wieder zwei Flächen von Interesse sind. Diese sind mit Kästen (weiß und schwarz) markiert. Die mit dem schwarzen Kasten markierte Fläche ist in b) und c) erneut dargestellt. In b) ist sowohl die atomare Struktur, als auch die relative Lage der Fläche erkennbar. Es ist weder in b) noch in c) eindeutig unterscheidbar, um was für eine Struktur es sich handelt. Es ist sowohl eine kubische Struktur, als auch eine hexagonale Struktur möglich, wenn man die ungünstige Lage und mögliche Drifteffekte berücksichtigt. Die sich aus den in c) markierten Linienprofilen ergebenden atomaren Abstände passen nicht zu einfachen MnSi- oder Mn₅Si₃-Ebenen. Die Linienprofile sind in Abb. 4.3.2.17 dargestellt. Das Linienprofil D in Abb. 4.3.2.16 d) ist aufgrund seiner geringen Aussagekraft nicht dargestellt. Aus ihm erhält man lediglich die Abstände der Linien, die 0,500 nm betragen. Dieser Abstand ist aber insofern interessant, als das eine LEED-Aufnahme (Abb. 4.3.2.17 b)) eine für eine Si(100)-(2×1) Oberfläche charakteristische Struktur zeigt. Die gefundenen Strukturen, einschließlich der Linienstruktur aus Abb. 4.3.2.16 d), können dieses LEED-Bild nicht

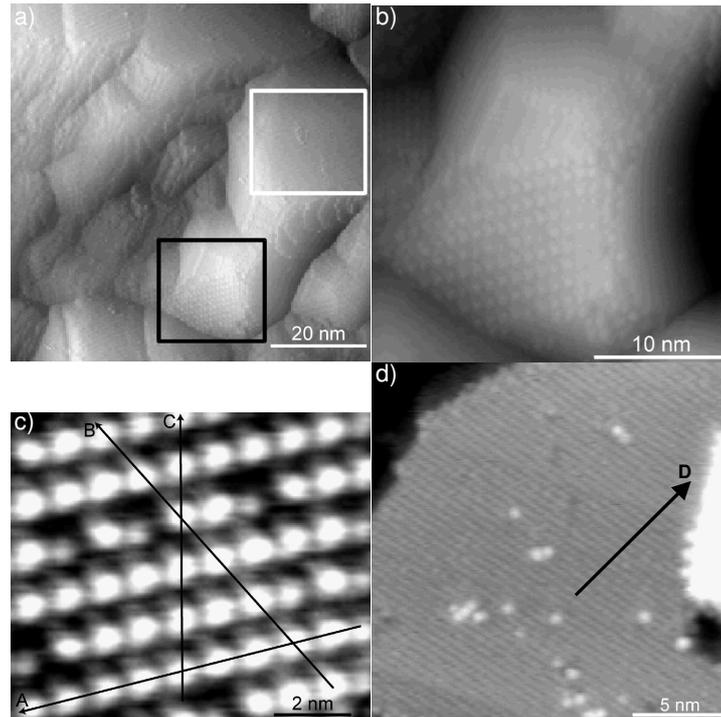


Abb. 4.3.2.16

- Ausschnitt aus einem Übersichtsbild. Das STM-Bild wurde, um atomare Strukturen hervorzuheben mit seiner Ableitung gemischt. Der schwarze Kasten markiert den Bereich des Ausschnittes der in b) zu sehen ist, der weiße den Bereich in c).
- Ausschnitt aus a). Das STM-Bild wurde durch Mischen der Originaldaten mit ihrer Ableitung erzeugt. Es ist eine Fläche mit atomarer Struktur zu erkennen, die aufgrund von Drifteffekten und der problematischen Lage (Schräge) nicht eindeutig einer Kristallstruktur zugeordnet werden kann. Es wäre sowohl eine kubische, als auch eine hexagonale Struktur möglich.
- Messung des Bereichs mit atomarerer Struktur aus b). Die eingezeichneten Linienprofile werden in Abb. 4.3.2.17 gezeigt und erläutert.
- Messung des mit dem weißen Kasten markierten Ausschnittes aus a).

erklären. Einzig plausible Erklärung ist, dass die Si(100)-(2×1) Oberfläche nicht komplett mit Mangansiliziden bedeckt ist, sondern es noch freie Bereiche gibt.

Um diese Probe abschließend zu behandeln, wird nun noch eine Struktur gezeigt, die auf Si(111) nur bei der Verwendung von Bismut terminierten Oberflächen gefunden wurde.

Sie zeichnet sich durch eine vergrößerte, hexagonale Struktur aus, die vielfach Adatome aufweist und die ebenfalls hexagonale Strukturen bilden (Abb. 4.3.2.18). Diese Struktur lässt

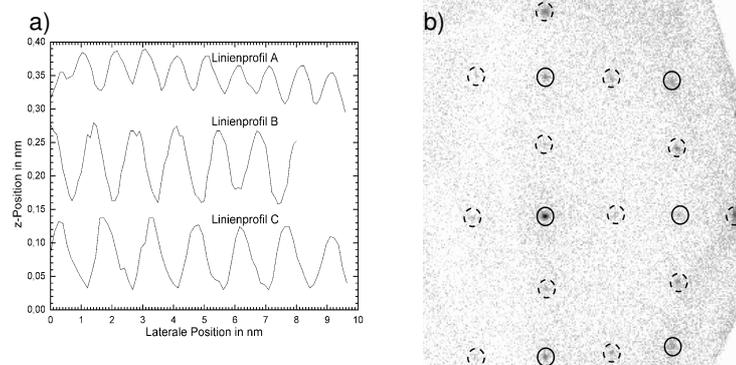


Abb. 4.3.2.17

- Darstellung der Linienprofile A, B und C aus Abb. 4.3.2.16 c). Für die atomaren Abstände ergeben sich: A: 1,017 nm, B: 1,325 nm und C: 1,472 nm.
- LEED-Aufnahme der 10 ML dicken Manganprobe, bei 90 eV. Die 1×1-Signale sind mit den geschlossenen, die 2×1-Signale mit den gestrichelten Kreisen markiert.

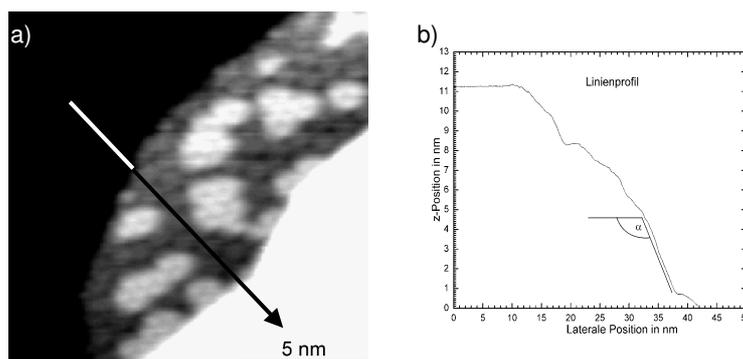


Abb. 4.3.2.18

- a) STM-Bild einer schrägen Fläche der 10 ML dicken Manganprobe. Der Pfeil markiert die ungefähre Lage des Linienprofils in b).
- b) Linienprofil entlang des Pfeils in a). Das Plateau links (0 nm bis ~10 nm) entspricht einer Fläche, die mit der in Abb.: 4.3.2.16 d) vergleichbar ist. Der Winkel α , zwischen dem Plateau und dieser Fläche beträgt 143° .

zweierlei Schlüsse zu. Erstens liefert der Vergleich mit den mit Bismut beschichteten Si(111)-Proben die Erkenntnis, dass diese Formationen entstehen, wenn die Siliziumzufuhr entweder durch Bi (auf der Si(111)-Oberfläche) oder andere Faktoren (Si(100)-Oberfläche) erschwert oder begrenzt ist; Bismut bewirkt auf der Si(111)-Oberfläche nachweislich eine Reduzierung des Siliziumreservoirs [Schwinge2005_Dis]. Zweitens wird deutlich, dass sich die Transportmechanismen auf Si(111) und Si(100) unterscheiden müssen, da auf den nicht mit Bismut beschichteten Si(111)-Substraten diese Formationen, auch bei deutlich stärkeren Manganbedeckungen, nicht gefunden wurden.

Zum Abschluss wird hier noch eine singuläre, aber durchaus interessante Beobachtung vorgestellt. Auf der bereits in Abb. 4.3.2.11 diskutierten Probe (1,5 ML Mn/Si(100)-(2x1)), wurde nach dem Heizen auf 450°C die in Abb. 4.3.2.19 gezeigte Inselformation gefunden. Interessant an dieser Inselgruppe ist, dass die größere Insel auf einer flachen MnSi(111)-Oberfläche gewachsen ist. Die untere, nur noch teilweise erkennbare Insel, ist anhand der Oberfläche klar als MnSi identifizierbar. Die Dimerreihen des Substrates

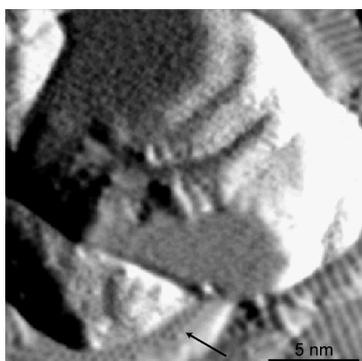


Abb.: 4.3.2.19
Strombild einer STM-Aufnahme an einer 1,5 ML Mn/Si(100)(2x1) Probe, nach dem Erwärmen auf 450°C . Der Pfeil markiert eine unter einer unidentifizierten Insel liegende MnSi-Insel. Über der Skala sind Dimerreihen des Substrates erkennbar.

erlauben hier wieder eine Kalibrierung des Rasterpiezos, so dass eine präzise Bestimmung der atomaren Abstände möglich ist. Für die kurzen Richtungen erhält man 0,630 nm und 0,650 nm. Die eindeutige Identifikation der oberen Insel ist nicht möglich. Der Winkel, den die vordere Seitenfläche mit dem Substrat bildet, beträgt 32° . Dieser Winkel ist mit den Mn_5Si_3 -Inseln vereinbar, reicht hier aber alleine nicht zur Identifikation. Eine mögliche Interpretation der hier gezeigten Situation ist, dass sich zuerst eine MnSi- und eine (vermutlich) Mn_5Si_3 -Insel nebeneinander gebildet haben und später, nach dem das leicht zugängliche Silizium verbraucht war, sich die vermeintliche Mn_5Si_3 -Insel über die MnSi-Insel ausgedehnt hat. Da dies

aber die einzige Beobachtung einer solchen Situation ist und in Ermangelung eines Hochtemperaturrastertunnelmikroskopes, können keine als gesichert anzusehenden Schlüsse gezogen werden.

Um dieses Kapitel kurz zusammenzufassen sollen hier die wichtigsten Erkenntnisse aufgeführt werden:

- Das Mangan wächst unstrukturiert auf dem Si(100)-(2×1) Substrat auf.
- Erst nach dem Erwärmen auf 385 °C sind Cluster (vermutlich Mangansilizide) auf der Substratoberfläche zu erkennen.
- Auch wesentlich längere Heizzeiten liefern keine anderen Ergebnisse, das heißt, die Formationsprozesse sind nach 5 min weitestgehend abgeschlossen.
- Ab 440 °C Ausheiltemperatur bilden sich MnSi- und Mn₅Si₃-Strukturen.
- Ab 460 °C Ausheiltemperatur sind auf Proben mit Manganbedeckungen unter 1,5 ML zwischen den Silizidinseln die Dimerreihen des Substrates weitestgehend frei.
- Ab 2,5 ML Manganbedeckung und 440 °C Ausheiltemperatur, ist im STM nur noch sehr vereinzelt das Substrat erkennbar, bei höheren Ausheiltemperaturen zeigen LEED-Bilder eine schwache 2×1 Struktur, die die Periodizität des Substrates besitzt.
- Auf dicken (10 ML) Manganproben werden nach dem Erwärmen auf 460 °C verschiedene Strukturen gefunden, von denen sich einige als MnSi identifizieren lassen. Es werden Unterschiede in der Siliziumbereitstellung zwischen der Si(111)- und der Si(100)-Oberfläche gefunden.
- Das Nichtvorhandensein von angefangenen MnSi(111)-Lagen und die stärkeren Defekte in der Substratoberfläche an der steileren Seite (Rückseite) der MnSi-Inseln lassen auf eine Inselbildung von der steileren Seite aus schließen.
- Das gemeinsame Auftreten von MnSi und Mn₅Si₃ weist auf ein sogenanntes bimodales Wachstum hin [Lippitz2005], das im Gegensatz zu den verschiedenen Wachstumsstadien auf dem Si(111) nicht konkurrierend ist.
- Das Auftreten der Mn₅Si₃-Inseln wird auf eine reduzierte Siliziumzufuhr zurückgeführt. Das wird durch das Auftreten der Vertiefungen in der Inselperipherie getstützt.