

Struktur von GaAs-Oberflächen und ihre Bedeutung für InAs-Quantenpunkte

von

Dipl.-Phys. **Juan M. Márquez Bertoni**

aus Viña del Mar

Vom Fachbereich 4 (Physik)
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften
genehmigte Dissertation

Berlin 2000

D 83

Promotionsausschuß:

Vorsitzender: Prof. Dr. P. Zimmermann

Berichter: Prof. Dr. K. Jacobi

Prof. Dr. D. Bimberg

Tag der mündlichen Prüfung: 19. Dezember 2000

Kurzzusammenfassung

Hintergrund der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung der Form von selbst organisiert wachsenden InAs-Quantenpunkten. Motiviert von experimentellen Beobachtungen anderer Forschungsgruppen wurden zunächst hochindizierte GaAs-Oberflächen untersucht, um die atomaren Strukturen der planaren Substrate mit denen der Facetten der Quantenpunkte vergleichen zu können. Die Oberflächen wurden durch Molekularstrahlepitaxie präpariert und anschließend *in situ*, d.h. ohne die Ultrahochvakuum-Umgebung zu unterbrechen, mit Rastertunnelmikroskopie (STM) und Elektronenbeugung (LEED, RHEED) untersucht. Die Form der InAs-Quantenpunkte wurden ermittelt, indem dreidimensionale InAs-Inseln auf GaAs(001) gewachsen und unmittelbar nach ihrem Entstehen abgekühlt wurden, um sie mit dem STM untersuchen zu können.

Die **GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B**-Oberfläche zeigt zwei unterschiedliche Phasen auf. Eine Ga-reiche Phase, die bereits beim Wachsen mit Hilfe von RHEED beobachtet wurde, besitzt eine (8×1) -Rekonstruktion und wird als die zur GaAs(113)A(8×1) analogen Rekonstruktion identifiziert. Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Struktur wird aus Ga-Dimeren gebildet, die zu einer zickzackförmigen Reihe angeordnet sind. Dabei treten die Zickzackreihen in zwei unterschiedlichen atomaren Ebenen auf. Kennzeichnend für diese Oberfläche ist eine extrem anisotrope Stufenstruktur. Es wird festgestellt, daß die Zickzackreihen sehr lang ausgedehnt sein können. Mittels RHEED-Intensitätsoszillationen wird diese Anisotropie auf ein bevorzugtes Wachstum entlang einer Zickzackreihe zurückgeführt. Im Unterschied zur GaAs(113)A(8×1)-Oberfläche zeigt die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche keine mesoskopische Welligkeit auf sondern sehr weite und glatte Terrassen. Eine zweite Phase wird unter As-reichen Präparationsbedingungen gefunden. Die atomaren Strukturen dieser Phase zeigen nur eine lokale Ordnung, die in der Lage sind, die Oberfläche gegenüber einem Zerfall in Oberflächen niedrigerer Energie, d.h., gegen eine Facettierung der Oberfläche, zu schützen.

Auf der **GaAs(114)A**-Oberfläche werden ebenfalls zwei Phasen gefunden. Die atomare Anordnung einer As-reichen Phase, die während des Wachstums vorherrscht, kann auf ein bereits bestehendes Strukturmodell zurückgeführt werden. Diese Phase zeigt darüber hinaus eine Rauigkeit auf atomarer Skala, die die Oberfläche in (113)- und (115)-orientierte Bereiche aufteilt. Unter Ga-reichen Präparationsbedingungen wird ein Übergang zu einer sehr glatten und wohlgeordneten Struktur beob-

achtet. Für diese Oberfläche wird ein Strukturmodell entwickelt, das verglichen mit der $\text{GaAs}(\bar{1}\bar{1}\bar{3})\text{B}(8 \times 1)$ erstaunlich einfach aufgebaut ist. Es entsteht unmittelbar aus der idealen Oberfläche, ohne daß zusätzliche Atome hinzugefügt werden. Dieses mit $\text{GaAs}(114)\alpha 2(2 \times 1)$ bezeichnete Strukturmodell wird zusätzlich in Zusammenarbeit mit P. Kratzer durch *ab-initio*-Gesamtenergierechnungen als Niederenergiefläche bestätigt.

Auf den Facetten von **InAs-Quantenpunkten** wird eine atomare Struktur gefunden, die auf keine der bisher untersuchten Oberflächen hindeutet. Statt dessen zeigen die 3D-Inseln ausgeprägte Facetten, deren Oberflächennormalen auf hochindizierte Oberflächen im Inneren des stereographischen Dreiecks deuteten. In Zusammenarbeit mit Experimenten an $\text{GaAs}(2\ 5\ 11)$ -Flächen, die von L. Geelhaar an derselben Apparatur durchgeführt wurden, können die Facetten zweifelsfrei als $\{137\}$ -Oberflächen identifiziert werden. Die Untersuchungen an den $\text{GaAs}(2\ 5\ 11)$ -Oberflächen lassen den Schluß zu, daß die $\{137\}$ lediglich semistabil sind. Die Semistabilität von $\{137\}$ wird daher in Betracht gezogen, die schmale Größenverteilung von InAs-Quantenpunkten zu erklären. Darüber hinaus wird die atomare Struktur der Benetzungsschicht zwischen den Inseln mit derjenigen eines 1 Monolage dicken InAs-Films verglichen. Diese Experimente geben Grund zur Annahme, daß In nicht vollständig in die Kristallstruktur eingebaut wird, sondern eine lokal geordnete, schwach gebundene Schicht oberhalb einer (In/Ga)As-Mischstruktur bildet. Es wird daher vermutet, daß diese In-Schicht für die beobachtete hohe Mobilität von InAs auf GaAs verantwortlich ist.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	10
1.1	...immer kleiner	10
1.2	Aufbau der Arbeit	13
2	Grundlagen	14
2.1	Halbleiteroberflächen	14
2.2	Präparation einer Oberfläche	17
2.3	Molekularstrahlepitaxie	19
2.3.1	Prinzip	19
2.3.2	Wachstumsmodi	20
2.4	Untersuchungsmethoden	24
2.4.1	Elektronenbeugung	24
2.4.2	Rastertunnelmikroskopie	27
3	Experimentelle Methoden	31
3.1	Apparatur	31
3.2	Probenpräparation	39
3.3	Wachstumsparameter	42
3.4	Analyse	48
3.4.1	LEED	49
3.4.2	STM	50
4	Die GaAs(001)-Oberfläche	62
4.1	Einführung	62
4.2	Oberflächengeometrie	63

4.3	GaAs(001) β 2(2×4)	63
4.3.1	Einführung	63
4.3.2	LEED	64
4.3.3	STM	65
4.3.4	Strukturmodell	67
4.4	Weitere (2×4)-Strukturen	71
4.5	GaAs(001)c(4×4)	74
4.5.1	Präparation	74
4.5.2	LEED	74
4.5.3	STM	75
4.5.4	Strukturmodell	75
4.6	GaAs(001)(2×6) und GaAs(001)(4×2)	77
4.6.1	Präparation	77
4.6.2	LEED	79
4.6.3	STM	80
4.6.4	Strukturmodelle	83
4.7	Zusammenfassung	84
5	Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche	85
5.1	Einführung	85
5.2	Oberflächengeometrie	86
5.3	Literatur zur GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche	89
5.4	GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)	90
5.4.1	Präparation	90
5.4.2	LEED	90
5.4.3	STM	91
5.4.4	Strukturmodell	93
5.4.5	Diskussion	96
5.4.6	Morphologie	99
5.4.7	Vergleich mit GaAs(113)A(8×1)	103
5.5	GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B As-reiche Phase	105
5.5.1	Präparation	105
5.5.2	LEED	106
5.5.3	STM	107

5.5.4	Diskussion	109
5.5.5	Strukturmodelle	111
5.5.6	Fazit	114
5.6	Übergang zwischen den Phasen	115
5.7	Zusammenfassung und Ausblick	117
6	Die GaAs(114)A-Oberfläche	120
6.1	Einführung	120
6.2	Oberflächengeometrie	122
6.3	Literatur zur GaAs(114)-Oberfläche	123
6.4	GaAs(114) $\beta_2(2\times 1)/\beta_2c(2\times 2)$	126
6.4.1	Präparation	126
6.4.2	LEED	127
6.4.3	STM	128
6.4.4	Strukturmodell und Diskussion	132
6.4.5	Morphologie	136
6.5	GaAs(114) $\alpha_2(2\times 1)$	138
6.5.1	Präparation	138
6.5.2	LEED	138
6.5.3	STM	139
6.5.4	Strukturmodell und Diskussion	141
6.6	Zusammenfassung und Ausblick	147
7	InAs-Inseln auf GaAs(001)	148
7.1	Einführung	148
7.2	Hintergrundinformationen	149
7.3	Experimentelle Bestimmung der Form	151
7.4	Präparation	153
7.5	Eigene STM-Messungen	155
7.5.1	Übersichtsbilder	155
7.5.2	Form der Inseln	156
7.6	Diskussion und Vergleich mit der Literatur	161
7.7	Atomare Struktur der Facetten	165
7.7.1	STM auf den Facetten	165

7.7.2	Bestimmung der Facettenorientierung	166
7.8	Diskussion	169
7.9	Die Benetzungsschicht	173
7.9.1	Einführung	173
7.9.2	STM und LEED	174
7.9.3	Diskussion	175
7.10	Zusammenfassung und Ausblick	178
8	Zusammenfassung	180
	Literaturverzeichnis	185
	Veröffentlichungen	201
	Danksagung	203

Liste häufig verwendeter Akronyme

AFM	<i>atomic force microscopy</i> , Rasterkraftmikroskopie
BEP	<i>beam equivalent pressure</i> , Druck im Molekularstrahl
CVD	<i>chemical vapor deposition</i>
DFT	Dichtefunktional-Theorie
ECR	<i>electron counting rule</i> , Elektronen-Zählregel
HRTEM	<i>high-resolution transmission electron microscopy</i> , hochaufgelöste Elektronenmikroskopie
IBA	<i>ion bombardment and annealing</i> , Ionenbeschuß und Ausheilen
LEED	<i>low-energy electron diffraction</i> , Beugung niederenergetischer Elektronen
MOVPE	<i>metal organic vapor phase epitaxy</i> , metallorganische Gasphasenepitaxie
MBE	<i>molecular beam epitaxy</i> , Molekularstrahlepitaxie
ML	Monolage
QD	<i>quantum dot</i> , Quantenpunkt
QW	<i>quantum well</i> , Quantentrog
RHEED	<i>reflection high-energy electron diffraction</i> , Beugung hochenergetischer Elektronen
STM	<i>scanning tunneling microscopy</i> , Rastertunnelmikroskopie
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
UHV	Ultrahochvakuum

1 Einleitung

1.1 ...immer kleiner

Kaum ein anderer Bereich in der technologischen Entwicklung der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts hat sich so auf Miniaturisierung konzentriert wie die Halbleitertechnologie. Während die ersten Computer noch ganze Räume ausfüllten, sind heutzutage sehr leistungsfähige, tragbare Computer erhältlich, die die Größe eines Buches besitzen. Entscheidend für diese Entwicklung war im wesentlichen die Miniaturisierung der einzelnen Halbleiterbauelemente.

Mit fortschreitender Verkleinerung der Abmessungen von Bauelementen stößt man derzeit in Dimensionen vor, die quantenmechanische Phänomene nachsichziehen. Dies ist dann der Fall, wenn die Größe der Objekte in etwa mit der de-Broglie-Wellenlänge der Ladungsträger übereinstimmt [1]. Eine bemerkenswerte Folge davon ist beispielsweise, daß Bauelemente, in denen die Ladungsträgerbeweglichkeit in allen drei Raumrichtungen eingeschränkt ist, sich elektronisch nicht mehr wie ein reiner Halbleiter verhalten. Statt dessen sind ihre elektronischen Zustände quantisiert und haben folglich eher den Charakter eines großen, ‘künstlichen’ Atoms [2, 3]. Solche Objekte werden daher als *Quantum Dots* (QDs, englisch für ‘Quantenpunkte’) bezeichnet [4]. Aufgrund dieser Eigenschaft würde ein elektronisch angeregter QD Licht einer einzigen Frequenz ausstrahlen.

Photonische Halbleiterbauelemente, wie z.B. Laser-Dioden, in denen *Quantum Dots* als Laser-aktives Medium eingebettet sind, könnten prinzipiell als Lichtquellen verschiedenster Emissionsfrequenzen hergestellt werden. Dazu müßten einerseits Materialien geeigneter Bandlückenenergien verwendet werden und andererseits in einem Bauelement eine große Anzahl möglichst gleichförmiger QDs vorhanden sein [5]. Letzteres stellt allerdings eine große technologische Herausforderung dar. Die notwendigen

(sehr) kleinen Abmessungen der Strukturen sind mit herkömmlichen selektiven Ätzverfahren kaum zu realisieren. Der Einsatz von Elektronenstrahlolithographie ermöglicht zwar die notwendigen örtlichen Auflösungen, ist aber sehr aufwendig und daher für eine industrielle Produktion nicht akzeptabel [6].

Glücklicherweise hilft uns die Natur selbst in diesem Fall weiter: Beim epitaktischen Wachsen einiger Monolagen eines Halbleiters auf einem anderen Halbleiter mit unterschiedlichen Gitterkonstante können nanokristalline Strukturen quasi von selbst entstehen. Eine dafür geeignete Schicht/Substrat-Kombination bildet das Indiumarsenid/Galliumarsenid-System, dessen Gitterkonstanten sich um etwa 7 % unterscheiden [7]. Mit den daraus entstehenden sogenannten selbstorganisiert wachsenden QDs [8] konnten tatsächlich QD-Laser von verschiedenen Forschungsgruppen realisiert werden [10–12].

Obwohl die ersten Berichte von Quantisierungsphänomenen in selbstorganisiert wachsenden Indiumarsenid-QDs einige Jahre zurückliegen [13–15], ist der selbst ablaufende Mechanismus, der zur Bildung der QDs führt, Gegenstand aktueller und intensiver theoretischer [16] und experimenteller [17] Forschung. Genau dieses Phänomen aufzuklären ist aber unbedingt notwendig, um die Größe der QDs in einem Ensemble einerseits zu vereinheitlichen und andererseits zu kontrollieren. Nur dann könnten tatsächlich Licht emittierende Bauelemente einer gewünschten Frequenz hergestellt werden. Einer der Gründe für die Unzulänglichkeiten in den bisherigen Modellierungen ist, daß die Form der QDs, d.h. die umhüllenden Facetten der einzelnen Strukturen, noch nicht zweifelsfrei identifiziert werden konnten.

Diverse theoretische Arbeiten, in denen die Bildung von QDs behandelt wurde, setzten als Facettenorientierungen niedrigindizierte Oberflächen an. Darauf aufbauend wurde die Bildung der QDs im Rahmen der Gleichgewichtsthermodynamik beschrieben [18]. Auch experimentell konnten in einigen Arbeiten niedrigindizierte Orientierungen gefunden werden [19–21]. Andere experimentelle Ergebnisse zu diesem Thema gaben allerdings deutliche Hinweise darauf, daß die Orientierungen der Facetten keine niedrigindizierten Oberflächen sind, sondern Facettenorientierungen mit hohen Millerschen Indizes. Unter diesen hochindizierten Oberflächen fanden sich $\{11n\}$ -, $\{10n\}$ -, $\{125\}$ -, und $\{136\}$ -orientierte Flächen [15, 22–26]. Diese Beobachtungen werfen nun die Frage auf, ob diese Oberflächen stabil sind und damit zu einer Gleichgewichtsstruktur führen [18] oder ob diese Oberflächen nur aufgrund kinetischer Effekte beim Wachstum auftreten [27]. Um dieses beantworten zu können, ist zunächst eine genaue Kenntnis der Oberflächen selbst notwendig. Genau an dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit

an.

Seit einiger Zeit werden in unserer Arbeitsgruppe epitaktisch gewachsene Galliumarsenid-Oberflächen erforscht [28]. Dabei wurde der Schwerpunkt der Untersuchungen auf $\{11n\}$ -orientierte Oberflächen gelegt. Die Besonderheit dieser Oberflächen aus oberflächenphysikalischer Sicht ist, daß sie kristallographisch zwischen den $\{001\}$ - und $\{111\}$ -Oberflächen liegen und daher als Kombination dieser beiden Oberflächen aufgefaßt werden können. $\{001\}$ - und $\{111\}$ -Oberflächen zeigen stabile Strukturen auf [28, 29], und daher stellt sich die Frage, ob eine beliebige $\{11n\}$ -Oberfläche in $\{001\}$ - und $\{111\}$ -Flächen zerfällt oder ob sich eine eigenständige Oberfläche bildet. Bislang wurde die Struktur von lediglich einer dieser $\{11n\}$ -Flächen sowohl experimentell [30] als auch theoretisch [31] aufgeklärt, nämlich die $\text{GaAs}(113)A(8 \times 1)$ -Oberfläche. Interessanterweise liegt diese Oberfläche genau zwischen $\{001\}$ und $\{111\}$, d.h. ihre Einheitszelle besteht gerade aus einer $\{001\}$ - und einer $\{111\}$ -ähnlichen Einheitszelle. Die Einheitszelle der rekonstruierten $\text{GaAs}(113)$ -Oberfläche ähnelt jedoch in keinsten Weise den $\{001\}$ - und $\{111\}$ -Oberflächen, sondern bildet eine eigenständige, wenn auch komplizierte, Rekonstruktion.

Darüber hinaus sind hochindizierte Oberflächen als Substrate für Bauelemente interessant. So wurden beispielsweise auf $\text{GaAs}(\bar{1}\bar{1}\bar{3})B$ gewachsenen Quantenstrukturen faszinierende Selbstordungseffekte gefunden [32].

Im Laufe der Jahre wurden zahlreiche Untersuchungsmethoden für Oberflächen entwickelt. Eine jedoch hat der Oberflächenphysik Weltruhm [33] verschafft: die Rastertunnelmikroskopie. Diese Methode erlaubt es, Oberflächen mit einer Auflösung bis hin zu atomaren Dimensionen abzubilden, und macht sie daher zu einer der mächtigsten (und wohl auch spektakulärsten [34]) Techniken in der Oberflächenanalytik.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war, die Rastertunnelmikroskopie mit dem epitaktischen Kristallwachstum zu kombinieren, d.h., die kleinen InAs -QDs einerseits zu präparieren und andererseits ihren Aufbau auf atomarer Ebene aufzuklären. Dazu war es notwendig, nicht nur die QDs selbst, sondern die möglichen Oberflächen, aus denen die QDs aufgebaut sind, zu untersuchen. Wegen der großen Anzahl der bisher vermuteten Facettenorientierungen (s.o.) wurde diese Untersuchung in Zusammenarbeit mit Lutz Geelhaar [35] durchgeführt, der an derselben Apparatur Oberflächen im Inneren des stereographischen Dreiecks untersucht hat. Aufgrund der Ähnlichkeit von InAs - und GaAs -Oberflächen [36] wurden hierfür hochindizierte GaAs -Oberflächen verwendet, da GaAs -Substrate guter Qualität kommerziell einfacher zu beziehen sind als

InAs-Substrate.

1.2 Aufbau der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wurden epitaktisch gewachsene GaAs Oberflächen sowie die Form von selbstorganisiert wachsenden InAs-Inseln mit Rastertunnelmikroskopie und Elektronenbeugung untersucht.

Nach einem einleitenden Kapitel, in dem die grundlegenden Prinzipien, die zum Verständnis dieser Arbeit dienen sollen, dargestellt werden, werden der experimentelle Aufbau und die verwendeten Methoden vorgestellt.

Im dritten Kapitel wird die Anwendbarkeit des Systems für Oberflächenuntersuchungen anhand der GaAs(001)-Oberflächen gezeigt. Dazu wurde die GaAs(001)-Oberfläche ausgesucht, da sie zahlreiche Rekonstruktionen besitzt, die sich in ihrer Stöchiometrie und Struktur stark unterscheiden. Andererseits können die Ergebnisse mit der Literatur sehr gut verglichen werden, da GaAs(001) die am häufigsten untersuchten Oberfläche ist.

Die folgenden Kapitel behandeln die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B- und die GaAs(114)-Oberfläche. Für beide Oberflächen werden die atomaren Strukturen sowie die Morphologie von unter verschiedenen Präparationsbedingungen erhaltenen Rekonstruktionen vorgestellt.

Schließlich beschäftigt sich das siebte Kapitel mit der Form von dreidimensionalen InAs-Inseln, die auf GaAs(001) gewachsen wurden. Dabei werden die Ergebnisse vorgestellt, die zur Bestimmung der Orientierung der Facetten geführt haben sowie die atomare Struktur der Facetten von MBE gewachsenen InAs-Inseln aufgezeigt. Darüber hinaus wird die InAs-Benetzungsschicht, die zwischen den Inseln vorliegt, diskutiert.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.

2 Grundlagen

2.1 Halbleiteroberflächen

III-V-Halbleiterkristalle nehmen überwiegend die sogenannte Zinkblende-Struktur ein[37]. Die Volumenatome bilden sp^3 -Hybridorbitale mit bindenden und antibindenden Zuständen und ordnen sich tetraederförmig aneinander an. Dabei besitzt jedes Atom vier im gleichen Abstand liegende Nachbaratome der jeweils anderen Sorte. Wird der Kristall gebrochen, d.h., eine Oberfläche erzeugt, verbleiben einige Bindungen offen und ragen aus dem Kristall heraus. Solche Bindungen werden daher hängende Bindungen genannt. Die Struktur einer so erzeugten Oberfläche wird im allgemeinen mit dem englischen Begriff '*bulk-truncated*' bezeichnet. Die hängenden Bindungen der *bulk-truncated*-Oberfläche sind nur teilweise mit Elektronen gefüllt. Nur teilweise gefüllte hängende Bindungen würden zu Oberflächenbändern führen, die metallischen Charakter aufweisen, und damit zu höheren Oberflächenenergien [38]. Im allgemeinen tendieren daher Halbleiteroberflächen dazu, selbst wieder einen halbleitenden Zustand einzunehmen, was zu niedrigeren Oberflächenenergien führt. Die Energie der hängenden Bindungen der Gruppe III-Atome liegt oberhalb des Fermi-Niveaus des Leitungsbandes des Volumenmaterials. Die Energie der hängenden Bindungen der Gruppe V-Atome liegt hingegen innerhalb des Valenzbandes des Volumenhalbleiters. Der halbleitende Zustand einer Oberfläche kann daher durch einen Elektronentransfer von den hängenden Bindungen der Gruppe III-Atome zu den hängenden Bindungen der Gruppe V-Atome erreicht werden. Als Ergebnis sollten die hängenden Bindungen der Gruppe III-Atome entleert und die der Gruppe V-Atome vollständig gefüllt werden. Dieser Ladungstransfer und damit der halbleitende Zustand können erreicht werden, indem die Gruppe III-Atome vom sp^3 -Hybridzustand in einen sp^2 -artigen Hybridzustand übergehen und sie ihre Überschußladung an die Gruppe V-Atome abgeben. Die

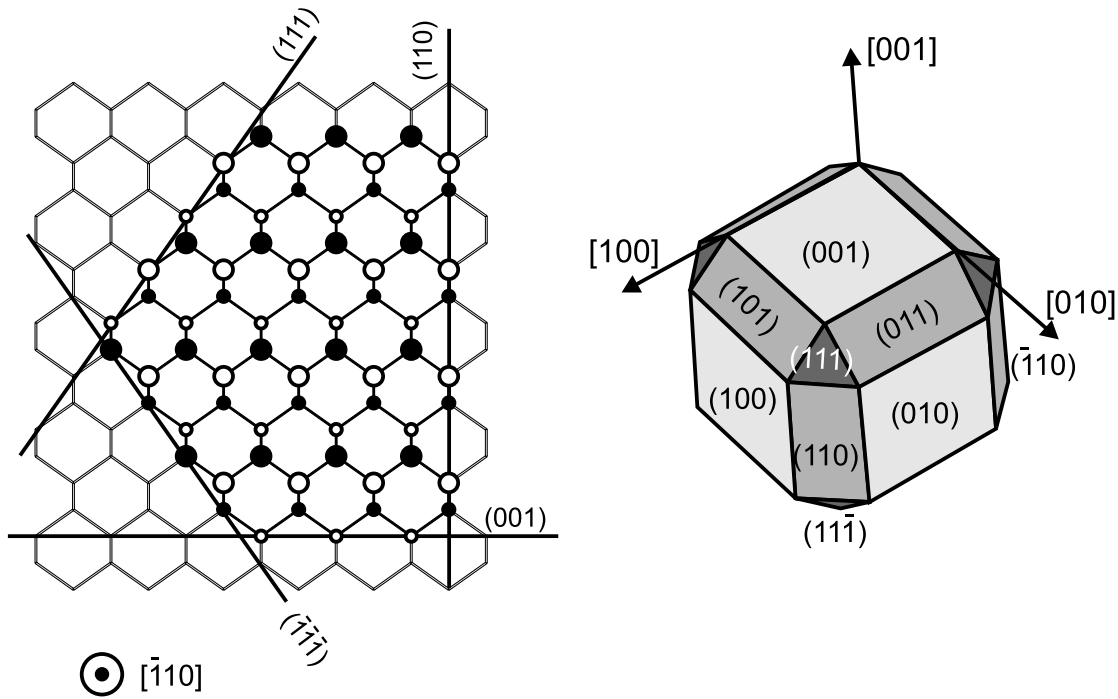


Abb. 2.1: Links: Ausschnitt eines III-V-Halbleiterkristalls in $[\bar{1}10]$ -Richtung gesehen. Die niedrigindizierten Oberflächen sind eingezeichnet. Gruppe III-Atome sind durch weiße, Gruppe V-Atome durch schwarze Kreise dargestellt. Rechts: Lage der niedrigindizierten Oberflächen in einem Einheitswürfel.

Gruppe V-Atome nehmen dabei einen p^3 -artigen Bindungszustand an. Durch die planare Geometrie der sp^2 -Bindungskonfiguration ändern sich dabei die Bindungsgeometrien der Oberflächenatome. So werden in diesem Fall die Bindungswinkel vergrößert. Im Falle der Gruppe V-Atome werden die Bindungswinkel verkleinert. Bleiben die Bindungspartner der Oberflächenatome die gleichen wie die im Volumenmaterial, wird dieser Prozeß als Relaxation bezeichnet. Werden hingegen zusätzlich neue Bindungen eingegangen (zum Beispiel zwischen zwei Atomen derselben Gruppe) wird der Prozeß Rekonstruktion genannt.

Allein durch Relaxation kann eine Oberfläche nur dann den halbleitenden Zustand erreichen, wenn sie stöchiometrisch ist, d.h., wenn sie in allen atomaren Lagen dieselbe Anzahl von Gruppe III- und Gruppe V-Atome besitzt. Ein Beispiel hierfür ist die GaAs(110)-Oberfläche [39–41]. Eine beliebige Oberfläche wird dieses Kriterium im allgemeinen nicht erfüllen, so daß sie rekonstruiert wird. Jede beliebige Oberfläche des Zinkblende-Kristalls läßt sich aus Kombinationen der niedrigindizierten Oberflä-

chen $\{111\}$, $\{110\}$ und $\{001\}$ darstellen. Zum Überblick sind diese Oberflächen in der Seitenansicht in Abb. 2.1 dargestellt. Die Lage der Oberflächen im Volumen läßt sich anhand des nebenstehenden Würfels erkennen. Aus dieser Abbildung wird darüber hinaus deutlich, daß die Oberflächen sowohl von Gruppe III-Atomen wie auch von Gruppe V-Atomen terminiert sein können. Als Konsequenz muß eine solche Oberfläche rekonstruieren, um den halbleitenden Zustand zu erreichen. Des weiteren ist die Anzahl der hängenden Bindung pro Atom abhängig von der Orientierung der Oberfläche. So besitzen die Atome einer (001)-orientierten Oberfläche zwei hängende Bindungen, die der (111)-Oberfläche lediglich eine. Ein weiteres Prinzip für die Rekonstruktion einer Oberfläche ist die Verminderung der Anzahl von hängenden Bindungen [38]. Eine sehr effiziente Methode, um diesem Prinzip gerecht zu werden, ist die Ausbildung von Dimeren auf der Oberfläche. So wird die Anzahl der hängenden Bindungen pro Atom durch Bildung von Dimeren auf einer (001)-orientierten Oberfläche um eine hängende Bindung pro Atom reduziert.

Das Erreichen des halbleitenden Zustandes und die Minimierung der hängenden Bindungen sind zwei Prinzipien, die dazu führen, daß eine stabile Oberfläche eine andere Struktur haben wird als die *bulk-truncated* Struktur. Eine stabile Struktur wird diejenige sein, die die niedrigste freie Energie besitzt und kinematisch zugänglich ist. Das heißt, befindet sich die Oberfläche im Gleichgewicht mit einem Teilchenreservoir, wird sich die Struktur einstellen, die für einen gegebenen Druck p und eine gegebene Temperatur T die niedrigste Oberflächenenergie γ bezogen auf eine Fläche F besitzt [42]:

$$\gamma = [G(p,T,N_{III},N_V) - \mu_{III}N_{III} - \mu_V N_V]/F.$$

Dabei bezeichnet G die freie Enthalpie, N die Teilchenanzahl und μ das chemische Potential der Gruppe III- bzw. der Gruppe V-Atome.

Eine stabile Struktur einer Oberfläche zu finden gehört zu den Herausforderungen der Oberflächenphysik [43]. Im allgemeinen wird es für eine gegebene Orientierung mehrere experimentelle Hinweise auf verschiedene Strukturen einer Oberfläche geben, woraus sich unterschiedliche Möglichkeiten ergeben, ein Strukturmodell für eine Rekonstruktion zu erstellen. Die Aufgabe besteht nun darin, sowohl mit Hilfe von experimentellen Daten als auch anhand von theoretischen Berechnungen die stabile Struktur der Oberfläche zu ermitteln. Die Berechnung der Oberflächenenergie ist aufgrund der sehr großen Teilchenanzahl extrem zeitaufwendig und bedarf einiger Näherungen sowie

Verfahren, die das Vielteilchenproblem auf ein berechenbares Problem zurückführen [44]. Die experimentellen Daten sind häufig ambivalent und führen häufig zu mehreren Strukturmodellen. Es wurde daher im Laufe der Jahre nach Methoden gesucht, um unter verschiedenen Strukturmodellen vorhersagen zu können, welches die niedrigste Oberflächenenergie besitzt. Gelungen ist dies allerdings noch nicht. Eine sehr effiziente Methode unter den verschiedenen Modellen, zumindest einige auszuschließen, ist die Elektronenzählregel. Sie wurde aus den bereits erwähnten Prinzipien abgeleitet [45–48]. Dabei geht es darum, die Valenzelektronen der Oberflächenatome so zu verteilen, daß die Bindungen der Gruppe V-Atome mit jeweils zwei Elektronen gefüllt werden, während die hängenden Bindungen der Gruppe III-Atome entleert werden. Gezählt werden dabei sämtliche Bindungen, die sich von Bindungen im Volumenmaterial unterscheiden. Aus den o.g. energetischen Überlegungen werden den Orbitalen der Gruppe III-Atome formale Ladungen von jeweils $\frac{3}{4}e$, denen der Gruppe V-Atome Ladungen von jeweils $\frac{5}{4}e$ zugeteilt. Dabei bezeichnet e eine Elementarladung für ein Elektron. Ein Strukturmodell erfüllt die Elektronenzählregel, wenn die Elektronen so verteilt werden können, daß die Bindungen der Gruppe V-Atome mit jeweils zwei Elektronen gefüllt werden, während die hängenden Bindungen der Gruppe III-Atome entleert werden und Ladungsneutralität erreicht wird. Diese Regel hilft beim Erstellen von Strukturvorschlägen und bei der Verminderung der Anzahl von möglichen Strukturmodellen.

Die Beschreibung einer Oberfläche folgt der Notation, die es auch für dreidimensionale Kristallstrukturen gibt [49]. Ihre Orientierung wird wie die Netzebenen eines Kristalls durch Millersche Indizes angegeben. Oberflächenrekonstruktionen oder Überstrukturen von Adsorbaten auf Oberflächen werden üblicherweise durch Periodizitäten der Einheitsvektoren der *bulk-truncated*-Oberfläche dargestellt [50]. Auch das reziproke Gitter einer Oberfläche wird wie im dreidimensionalen Fall als Fourier-Transformation des Realraumgitters bestimmt.

2.2 Präparation einer Oberfläche

Um eine reine Oberfläche studieren zu können, bedarf es einer Ultrahochvakuum (UHV)-Umgebung, da sie anderenfalls innerhalb kürzester Zeit durch Adsorption von Fremdatomen aus der Gasphase kontaminiert wird. Als Ultrahochvakuum wird der Druckbereich bezeichnet, der kleiner als 1×10^{-10} mbar ist [51]. Zur Präparation ei-

ner sauberer Oberfläche haben sich in Abhängigkeit vom zu untersuchenden Material mehrere Methoden durchgesetzt. Die einfachste Methode, eine saubere Oberfläche zu erhalten, erreicht man durch Spaltung des Materials im UHV [52]. Diese Methode hat allerdings natürliche Grenzen, insofern als nur Oberflächen untersucht werden können, die tatsächlich Bruch- bzw. Spaltflächen des Materials sind. Diese sind bei den Kristallen mit Diamant-Struktur die $\{111\}$, bei denen mit Zinkblende-Struktur die $\{110\}$ orientierten Oberflächen. Spaltflächen sind die Oberflächen niedrigster Energie.

Eine weitere Methode ist das sogenannte IBA (engl. *ion-bombardment and annealing*). Hierbei wird die Oberfläche mit schweren Edelgasionen (z.B. Ar^+) beschossen und anschließend durch Heizen ausgeheilt. Dadurch werden die obersten Schichten der Oberfläche abgetragen, bis schließlich eine saubere Oberfläche übrig bleibt [53] (vgl. auch Kap. 3.2). Diese Technik für sich allein angewendet ist allerdings beschränkt auf Metalle und Elementhalbleiter. Verbindungshalbleiter zeigen hingegen zu unterschiedlichen Abtragungsraten der verschiedenen Materialien, und beim anschließenden Ausheilen kann die Zusammensetzung auf der Oberfläche aufgrund der möglichen unterschiedlichen Verdampfungstemperaturen der Materialien nicht kontrolliert werden [52, 54].

Die eleganteste Methode, eine saubere Oberfläche zu präparieren, ist zweifellos das epitaktische Wachsen dünner Filme auf kristallinen Substraten. Dazu werden die einzelnen Komponenten des Materials in atomarer oder molekularer Form auf ein geheiztes Substrat, das in der zu untersuchenden kristallographischen Orientierung geschliffen ist, abgeschieden. Auf diesem Substrat wächst dann ein Film kristallin auf. Es gibt eine Reihe unterschiedlicher epitaktischer Verfahren, die sich im wesentlichen in der Art und Weise unterscheiden, wie die einzelnen Komponenten des Kristalls auf das Substrat gebracht werden (vgl. z.B. [55]). Dazu zählen zum einen die chemischen Verfahren, sogenannte CVD (engl. *chemical vapour deposition*) Verfahren. Hierbei werden die einzelnen Substanzen in chemischen Verbindungen über das Substrat geleitet, auf dem sie durch chemische Reaktionen abgeschieden werden [56, 57]. Zum anderen kann das Material direkt aus der Gasphase auf das Substrat geführt werden. Es wird adsorbiert und geht dann in die feste Phase über. Zu diesen Verfahren zählt die Molekularstrahlepitaxie (MBE, engl. *molecular beam epitaxy*), die im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurde [58]. Einer der wichtigsten Vorteile dieser Methoden ist, daß hierbei direkt Einfluß auf die atomare Zusammensetzung der Oberfläche genommen werden kann, da die Quellen der Materialien einzeln gesteuert werden können.

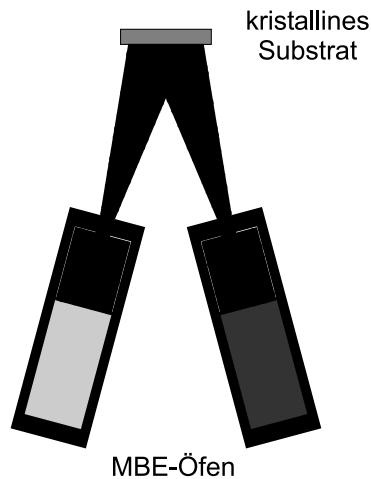


Abb. 2.2: Prinzip der Molekularstrahlepitaxie.

2.3 Molekularstrahlepitaxie

2.3.1 Prinzip

Molekularstrahlepitaxie (MBE) läßt sich nicht nur zur Präparation einer Oberfläche verwenden, sondern auch zum Wachsen qualitativ hochwertiger kristalliner Filme. Bestehen Substrat und Film aus den gleichen Substanzen, spricht man von Homoepitaxie, in dem Fall, daß sich die Materialien unterscheiden, spricht man von Heteroepitaxie. MBE findet sowohl in der Grundlagenforschung, d.h. im Labormaßstab, als auch in der industriellen Produktion Anwendung [55, 59]. Das Prinzip ist in Abb. 2.2 dargestellt. Als Quelle der aufzubringenden Materialien dienen effusive Zellen, in denen das Material verdampft wird. Durch eine kleine Öffnung können die Moleküle bzw. Atome ins Vakuum gelangen und treffen auf ein kristallines Substrat. Dieses ist auf eine Temperatur geheizt, bei denen die Atome auf der Oberfläche diffundieren können, bevor sie in den Kristall eingebaut werden. Beim Wachsen der kristallinen Filme spielen sich eine ganze Reihe (etwa 30 [60]) von Prozessen auf der Oberfläche ab. In erster Näherung läßt sich das Wachsen in folgende Einzelschritte unterteilen: 1) Adsorption und Desorption, 2) Diffusion auf der Oberfläche, 3) Diffusion durch Austausch, 4) Keimbildung und 5) Einbau in freien Plätzen. Diese sind in Abb. 2.3 skizziert. Die Beschreibung der einzelnen Schritte kann beliebig kompliziert werden. Insbesondere ist Punkt 5) Gegenstand intensiver Forschung. Einfachste Modelle gehen davon aus, daß Teilchen beispielsweise bevorzugt an Stufen angelagert werden [61, 62]. Neuere

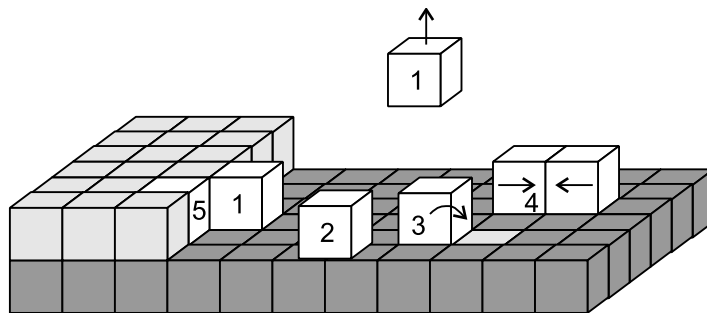


Abb. 2.3: Prozesse beim Wachsen eines Kristalls: 1.) Adsorption und Desorption von Teilchen. 2.) Diffusion von Teilchen auf der Oberfläche. 3.) Diffusion durch Austausch von Teilchen. 4.) Keimbildung. 5.) Einbau von Teilchen in freien Plätzen.

ab-initio-Rechnungen zeigen, daß die Anlagerungsplätze entscheidend von der Rekonstruktion auf der Oberfläche abhängen [63]. Es sei noch betont, daß MBE Wachstum ein Prozeß ist, der weit entfernt vom thermodynamischen Gleichgewicht sein muß, damit tatsächlich ein Film gewachsen werden kann. Im thermodynamischen Gleichgewicht würde die feste Phase im Gleichgewicht mit der Gasphase sein, und daher würden genau so viele Teilchen adsorbieren wie desorbieren.

2.3.2 Wachstumsmodi

Die Art und Weise, wie ein kristalliner Film auf einem Substrat wächst wird Wachstumsmodus genannt. Während die Beschreibung des Wachstumsprozesses auf atomarer Ebene sehr schwierig ist, kann eine Klassifizierung der Wachstumsmodi aufgrund von experimentellen Beobachtungen vorgenommen werden [64]. Die einzelnen Modi sind in Abb. 2.4 zusammengefaßt.

- Mit **Frank-Van der Merwe-Modus** wird der Wachstumsmodus bezeichnet, bei dem der Film von Lage zu Lage wächst, d.h., erst wenn eine Lage die darunterliegende Lage komplett bedeckt, fängt die eine neue Lage zu wachsen an. Hierdurch werden kristalline Schichten sehr hoher Qualität erzeugt. Eine Möglichkeit, diesen Modus zu erreichen, besteht darin, nach jeder Lage das Wachstum zu unterbrechen, während die Substrattemperatur beibehalten oder erhöht wird. Dadurch soll den Teilchen mehr Zeit zur Verfügung stehen, bevor sie in die feste Phase übergehen. Eine andere Möglichkeit besteht darin, fehlorientierte Substrate zu verwenden. Fehlorientiert heißen Substrate, die in einem kleinen Winkel zur

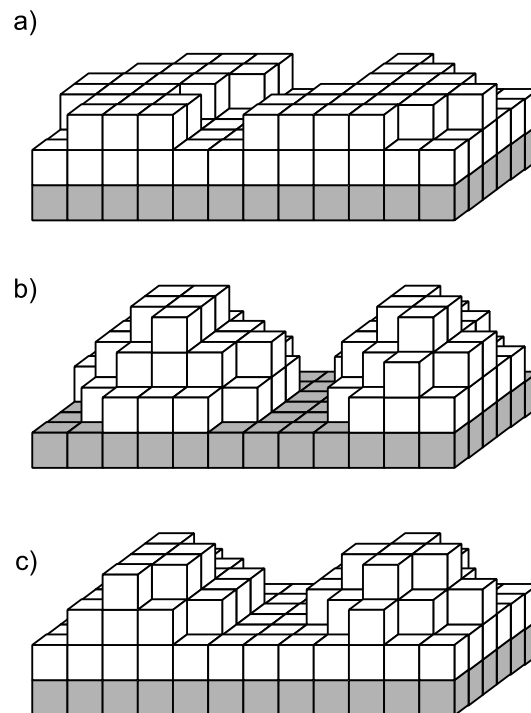


Abb. 2.4: Schematische Darstellung der Wachstumsmodi: a) Frank-Van der Merwe, b) Volmer-Weber und c) Stranski-Krastanow.

nominalen Oberfläche geschnitten werden. Dadurch entsteht auf der Oberfläche eine Treppenstruktur, deren Terrassenbreite vom Winkel der Fehlorientierung abhängt. Die Oberfläche eines fehlorientierten Substrates wird Vizinalfläche genannt. Die Idee, Vizinalflächen als Substrate zu verwenden, besteht darin, daß die Terrassenbreite kürzer gewählt wird als typische Diffusionslängen der Teilchen. Dadurch wird gewährleistet, daß alle Teilchen in der Lage sind, eine Stufenkante zu erreichen, an der sie bevorzugt eingebaut werden sollten. Dieser Wachstumsmodus ist auch unter dem Begriff Stufenflußwachstum bekannt. Abb. 2.5 zeigt eine schematische Darstellung des Stufenflußwachstums. Da die ankommenden Teilchen immer die Stufenkante erreichen, bevor sie eingebaut werden, scheinen die Stufenkanten während des Wachstums zu fließen.

- **Volmer-Weber-Modus** bezeichnet den Wachstumsmodus, bei dem die Teilchen ausschließlich zu Inseln zusammenlaufen und dreidimensional weiterwachsen. Die resultierende Oberfläche des epitaktischen Filmes wird daher sehr rau. Auch für technologische Zwecke (Bauelemente) ist dieser Modus ungeeignet, da

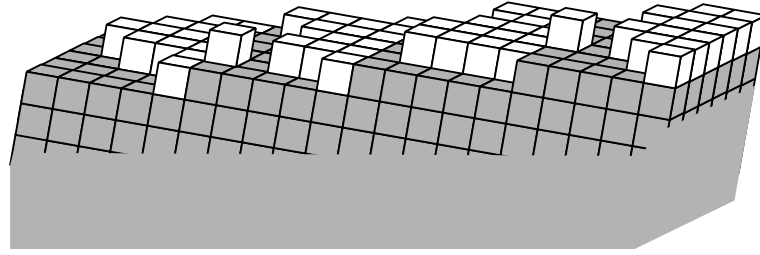


Abb. 2.5: Schematische Darstellung des Stufenflußwachstums einer Vizinallfläche.

an den Bereichen, wo mehrere Inseln zusammentreffen, Gitterfehlstellen entstehen können, an denen Ladungsträger gestreut werden und daher in ihrer Beweglichkeit stark beeinträchtigt wären.

- Der **Stranski-Krastanow-Modus** ist eine Mischung aus den beiden eben beschriebenen Modi. Das heißt, zunächst wächst ein wenige Monolagen dicker Film auf dem Substrat auf, und dann beginnt das weitere Material in dreidimensionalen Inseln zu wachsen.

Welcher Modus beim Wachsen aufzutreten wird, läßt sich anhand der Bilanz $\Delta\Gamma$ der freien Enthalpie vorhersagen [65]:

$$\Delta\Gamma = \Gamma_f + \Gamma_i - \Gamma_s.$$

Dabei ist Γ_s die freie Enthalpie des Substrates, Γ_f die des Films sowie Γ_i die freie Enthalpie der Grenzfläche. Für $\Delta\Gamma \leq 0$ erhält man den Frank-Van der Merwe- und für $\Delta\Gamma > 0$ den Volmer-Weber-Wachstumsmodus. Für den Spezialfall, daß zunächst negativ ist und dann positiv wird erhält man den Stranski-Krastanow-Modus.

Von großer Bedeutung ist der Wachstumsmodus bei der Heteroepitaxie, da hierbei die Grenzflächenenergie stark von den Gitterkonstanten der Materialien abhängen wird. Sind die Gitterkonstanten der Materialien gleich, können beide Materialien in beliebigen Zusammensetzungen aufeinander abgeschieden werden. Dies ist beispielsweise bei AlAs und GaAs bzw. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ der Fall, deren Gitterkonstanten nahezu gleich sind. Anders sieht die Situation für das System InAs/GaAs aus. Die Gitterkonstanten dieser Materialien unterscheiden sich um 7,2% [7]. Werden zwei gitterfehlangepaßte Materialien aufeinander abgeschieden, nimmt der epitaktische Film parallel zur Grenzschicht die Gitterkonstante des Substrates ein. In Wachstumsrichtung liegt hingegen keine Einschränkung der Gitterkonstante vor, so daß sich der Film nach oben hin entsprechend entspannt. Man spricht hierbei vom pseudomorphen Wachstum. Einerseits

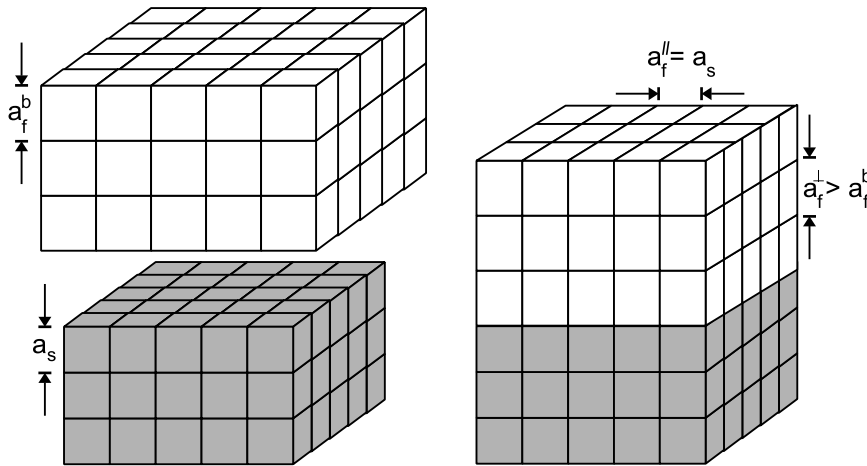


Abb. 2.6: Schematische Darstellung eines (kompressiv) pseudomorph wachsenden Films. *Links:* Zwei Materialien mit unterschiedlicher Gitterkonstante a_s und a_f^0 mit $a_s < a_f^0$. *Rechts:* Werden sie aufeinander abgeschieden, paßt sich die Gitterkonstante des Filmes parallel zur Grenzfläche der Gitterkonstanten des Substrates an. Senkrecht dazu vergrößert sich ihre Gitterkonstante. Substratteilchen sind durch graue Würfel, die Teilchen des Filmes sind durch weiße Quader dargestellt.

kann das pseudomorphe Wachstum zugverspannt sein, falls die Gitterkonstante des epitaktischen Filmes kleiner ist als die des Substrates. Andererseits kann es (z.B. beim InAs/GaAs-System) druckverspannt sein, wie in Abb. 2.6 skizziert ist. Mit zunehmender Schichtdicke steigt die Verspannungsenergie. Ab einer kritischen Schichtdicke wird diese Energie zu groß, so daß der Kristall entsprechend reagieren muß, um diese Energie abzubauen. Eine Möglichkeit besteht darin, Versetzungen oder Fehlstellen in den Kristall einzubauen. Eine andere Möglichkeit bietet der o.g. Stranski-Krastanow-Mechanismus. Die Verspannung wird abgebaut, indem dreidimensionale Inseln gebildet werden. Innerhalb der Inseln nimmt die Verspannung dann nach oben hin ab. Der Abbau von Verspannungsenergie geht allerdings auf Kosten einer nun größeren Oberfläche, so daß die Oberflächenenergie ansteigt. Stranski-Krastanow besteht daher aus der Balance zwischen Verspannungs- und Oberflächenenergie. Ein Spezialfall dieses Wachstumsmechanismus wird beim Wachsen von InAs auf GaAs(001)-Oberflächen beobachtet und führt zur Herstellung von selbstorganisiert wachsenden nulldimensionalen Quantenstrukturen (vgl. Kap. 7).

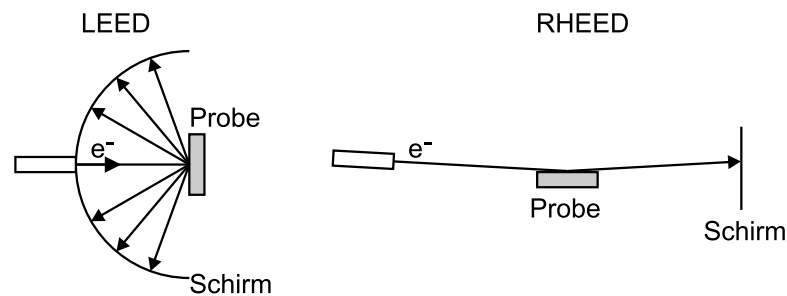


Abb. 2.7: Schematische Darstellung der verwendeten Elektronenbeugungsmethoden.
Links: LEED; Rechts: RHEED.

2.4 Untersuchungsmethoden

2.4.1 Elektronenbeugung

Molekularstrahlepitaxie wird unter UHV-Bedingungen durchgeführt, was den Einsatz von Elektronenbeugungsmethoden erlaubt. Elektronenstrahlen bestimmter Energien eignen sich für Oberflächenuntersuchungen, da ihre de Broglie-Wellenlängen im Bereich atomarer Abstände liegen kann, und weil ihre Eindringtiefe in Festkörper gering genug ist, um oberflächensensitiv zu sein. Die Abhängigkeit der Wellenlänge λ_e (in Å) der Elektronen von ihrer Energie E_e (in eV) läßt sich durch folgende Berechnung abschätzen [66]:

$$\lambda_e = \sqrt{\frac{150,4}{E_e}}.$$

Die Abhängigkeit der Eindringtiefe der Elektronen in Festkörper von der Energie wird durch die universelle Kurve angegeben, die die freie Weglänge der Elektronen im Festkörper beschreibt. Diese hat ein Minimum von ca. 5 Å bei etwa 50 eV [67]. Bei Elektronenenergien im Bereich von einigen kV wird die Oberflächensensitivität durch streifenden Einfall erreicht. Dadurch ist die Tiefe der Wechselwirkungszone lediglich durch $\sin(\theta)$ gegeben, wobei θ den Einfallswinkel bezeichnet. Diese Geometrie hat darüber hinaus zur Folge, daß hochenergetische Strahlen während des MBE-Wachstums verwendet werden können, da die Probe nicht abgedeckt wird. Im Rahmen dieser Arbeit wurde sowohl Beugung mit hochenergetischen Elektronen (RHEED, engl. *reflection high-energy electron diffraction*) wie auch Beugung mit langsamen Elektronen (LEED, engl. *low-energy electron diffraction*) angewendet. Detaillierte Beschreibungen der beiden Methoden finden sich z.B. in Ref. [68] und in Ref. [69].

Hier sollen nur kurz die Prinzipien erläutert werden. Die Geometrien der beiden

Methoden ist in Abb. 2.7 dargestellt. Gemäß der elastischen Streutheorie müssen sowohl der Impuls als auch die Energie erhalten werden. Die Impulserhaltung läßt sich in Form der sogenannten Laue-Gleichung aufschreiben:

$$\Delta \vec{k} = \vec{k}_0 - \vec{k}'.$$

Hierbei bezeichnet \vec{k}_0 den Wellenvektor der einfallenden, \vec{k}' den der gestreuten Welle. Für die Wellen, bei denen die Differenz, bzw. der Streuvektor $\Delta \vec{k}$, mit einem reziproken Gittervektor \vec{g}_{hkl} übereinstimmt, gibt es konstruktive Interferenz. Die in dieser Richtung gebeugten Elektronen treffen auf einen Leuchtschirm, wo sie ein Reflexmuster erzeugen. Für $\Delta \vec{k} \neq \vec{g}_{hkl}$ gibt es destruktive Interferenz, und damit ist die Intensität der gestreuten Welle gleich Null. Daher stimmt das Beugungsbild mit dem reziproken Gitter der Oberfläche überein. LEED ergibt ein Abbild des zweidimensionalen reziproken Gitters, RHEED hingegen einen eindimensionalen Schnitt des reziproken Gitters, da nur eine Richtung jeweils abgefragt wird. Genau genommen muß hierbei nur die zur Oberfläche parallele Komponente des Streuvektors betrachtet werden, da die Streuung idealerweise am zweidimensionalen Gitter der Oberfläche geschieht. Die Beugung an nicht idealen Oberflächen kann zu unterschiedlichen Phänomenen führen, die aus Überlagerungen der einzelnen Periodizitäten auf der Oberfläche resultieren. Zwei Spezialfälle sollen hier kurz erwähnt werden.

Im LEED-Reflexmuster von periodisch gestuften Oberflächen ist eine Aufspaltung von Reflexen zu beobachten, deren Auftreten von der Energie abhängig ist. Der Grund für die Aufspaltung liegt darin, daß der Periodizität des reziproken Gitters der Oberfläche die Periodizität der Stufenfolge überlagert wird. Überlagern sich die Intensitäten benachbarter Terrassen gerade konstruktiv, wird ein Reflex scharf erscheinen. Wird die Energie verändert, ergibt die Periodizität auf den Terrassen und zusätzlich die Periodizität der Stufenfolge einen Beitrag für das Beugungsbild, und damit erscheinen die Reflexe aufgespalten. Eine detaillierte Darstellung der möglichen Beugungserscheinungen an Strukturen mit Defekten ist z.B. in Ref. [70] zu finden.

Das RHEED-Reflexmuster einer Oberfläche, auf der dreidimensionale Inseln vorhanden sind, erscheint nicht streifig, sondern punktförmig, wobei die Punktreflexe nicht an den Laue-Kreisen angeordnet sind. Der Grund hierfür liegt darin, daß die Inseln ‘durchleuchtet’ werden. Dadurch geben die Netzebenen der kristallinen Inseln ebenfalls Beiträge zum Beugungsbild. Darüber hinaus tragen die Facettenseiten der Inseln zum Beugungsbild bei. Daraus resultiert, daß die Reflexe Nebenmaxima erhalten, die

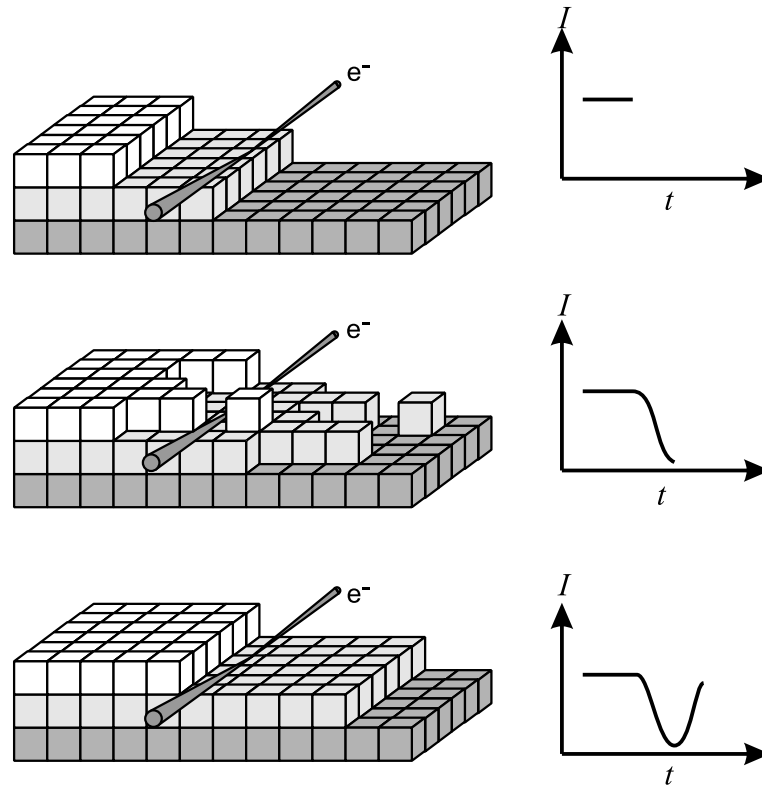


Abb. 2.8: Entstehung von RHEED-Intensitätsschwankungen während der MBE.

die Reflexe keilförmig erscheinen lassen. Der Winkel der streifigen Reflexe ist korreliert mit den Winkeln der Facetten gegenüber der Substratoberfläche [71].

Eine für die MBE besonders wichtige Anwendung zur Wachstumskontrolle ist RHEED. Während des Wachstums wird eine periodische Änderung der Intensität der gebeugten Strahlen beobachtet [72, 73]. Dieses Phänomen wird durch die Rauigkeit von Stufenkanten und Entstehung von zweidimensionalen Inseln auf den Terrassen erklärt [73, 74]. An den Stufenkanten werden Elektronen diffus gestreut. Ist eine Terrasse ideal geordnet, wird die Intensität der gestreuten Welle maximal. Während des Wachstums verursacht die Nukleation von zweidimensionalen Inseln zusätzliche Stufenkanten, und damit erhöht sich der Anteil an diffus gestreuten Elektronen. Als Konsequenz nimmt die Intensität der kohärent gestreuten Elektronen ab, und damit vermindert sich die Intensität der Reflexe. Sie erreicht ein Minimum, wenn die Hälfte einer Terrasse mit zweidimensionalen Inseln bedeckt ist. Mit zunehmender Zeit wird die Terrasse vollständig überwachsen, so daß die Intensität wieder maximal wird. In Abb. 2.8 ist dieser Vorgang schematisch dargestellt.

Das Auftreten von RHEED-Intensitätssoszillationen läßt sich daher zur Bestimmung von Wachstumsraten ausnutzen. Die Zeit zwischen zwei Maxima wird mit dem Wachstum einer Monolage identifiziert. Daher werden Wachstumsraten häufig in Monolagen pro Sekunde angegeben. RHEED-Intensitätssoszillationen werden ebenfalls beim Wachsen von Schichtstrukturen verwendet. Über die Depositionszeit kann bei bekannter Wachstumsrate die Dicke der Schicht sehr präzise bestimmt werden. Häufig werden Intensitätssoszillationen aufgezeichnet und dann zwischen den Materialien gewechselt, wenn jeweils die Intensität gerade durch ein Maximum verläuft [75]. So kann die Dicke der einzelnen Schichten bis auf eine Monolage genau gesteuert werden.

2.4.2 Rastertunnelmikroskopie

Seit der ersten Abbildung einer Oberfläche mit einer Auflösung in atomaren Dimensionen mit Hilfe eines Rastertunnelmikroskops (STM, engl. *scanning tunneling microscope*) durch Binnig *et al.* im Jahre 1982 [76] sind eine ganze Reihe von Apparaten entwickelt worden, die auf ähnliche Art und Weise funktionieren. Im Prinzip unterscheiden sie sich dabei lediglich in der Art des Signals, das von der Oberfläche abgefragt wird. Allgemein werden heutzutage diese Techniken unter den Begriff der Rastersondenmikroskopie zusammengefaßt. Einen Überblick über die zahlreichen Verfahren findet man z.B. in Ref. [77]. Einer der Gründe für den Erfolg all dieser Techniken liegt sicherlich in der Vielseitigkeit der Methoden. STM kann z.B. im Vakuum, an Luft oder in Lösungen angewendet werden. Daraus ergeben sich Anwendungen für fast alle wissenschaftlichen und technologischen Zweige unserer Zeit.

Das STM erlaubt es, Abbildungen einer leitenden Oberfläche mit atomarer örtlichen Auflösung zu erzeugen. Wie der Name schon vermuten läßt, beruht diese Abbildungsmethode auf dem quantenmechanischen Tunneleffekt. Werden zwei leitende Oberflächen nahe genug zueinander gebracht, wird es für die Elektronen möglich, durch die Barriere zwischen den Oberflächen zu tunneln. Nahe genug heißt in diesem Fall, daß das Überlappen der Wellenfunktionen der Elektronen einen endlichen Wert erreicht. Beim STM ist eine Oberfläche eine atomar scharfe Metallspitze, die andere ist die zu untersuchende Oberfläche. Das Prinzip ist in Abb. 2.9 skizziert. Probe und Spitze werden in einem Abstand von etwa 1 nm positioniert, und zwischen ihnen wird eine Spannung von wenigen Volt angelegt, bis ein Tunnelstrom von typischerweise 0,1 – 5 nA zu messen ist. Danach wird die Spitze oder die Probe in einem Rasternetz

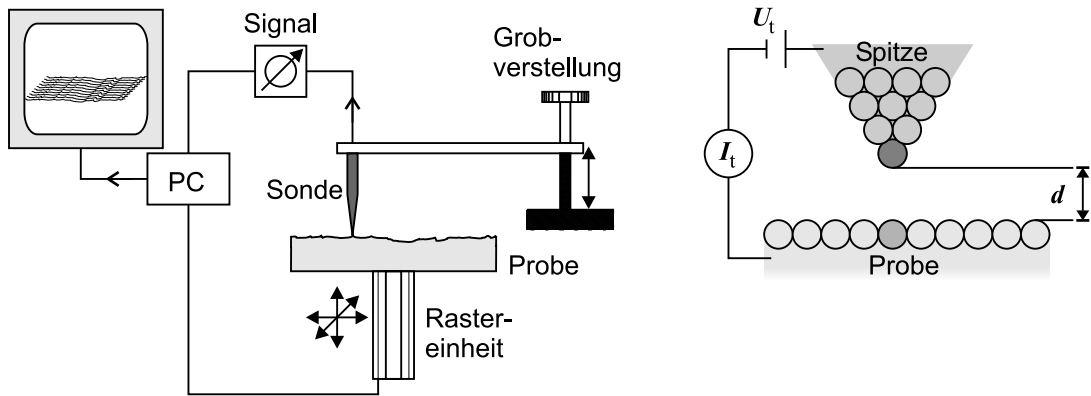


Abb. 2.9: Links: Prinzip der Rastersondentechniken. Probe und Sonde werden zunächst mit Hilfe einer Grobverstellung angenähert. Die feine Annäherung sowie die Rasterbewegungen werden mit einer Rastereinheit durch Piezoelemente durchgeführt. Die Sonde gibt ein Signal an den Computer (PC), das mit der Oberfläche korreliert ist. Der Computer erzeugt eine Abbildung und steuert den Meßvorgang. Rechts: Schematische Darstellung der Funktionsweise eines STM.

bewegt, wobei an jedem Punkt ein Stromwert aufgenommen wird. Somit erhält man einen Stromwert in Abhängigkeit der Position auf der Oberfläche. Die gemessenen Signale werden anschließend mit Hilfe eines Computers in eine topographische Abbildung der Oberfläche umgewandelt.

Entscheidend für die extreme örtliche Auflösung der Methode ist die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms I_T vom Abstand d zwischen Spitze und Probe, die in erster Näherung durch:

$$I_T \propto \frac{U}{d} \cdot \exp(-Kd\sqrt{\bar{\phi}})$$

angegeben werden kann [78]. Dabei bezeichnet K eine Konstante, U die Spannung zwischen Probe und Spitze und $\bar{\phi}$ die Höhe der Tunnelbarriere. Als Signal von der Oberfläche kann entweder der Abstand zwischen Probe und Spitze oder der gemessene Stromwert dienen. Bei der ersten Methode wird ein Stromwert von der Regelungstechnik konstant gehalten, indem der Abstand zwischen Spitze und Probe variiert wird. Diese Methode wird *constant-current* (engl. konstanten Strom)-Modus genannt und ist in Abb. 2.10 a) dargestellt. Die zweite Methode läßt den Abstand zwischen Probe und Spitze konstant, wobei der sich verändernde Stromwert aufgezeichnet wird. Dieser Modus wird *constant-height* (engl. konstante Höhe) genannt und ist in Abb. 2.10 b) skizziert. Welcher Modus verwendet wird, hängt von der Anforderung der Messung

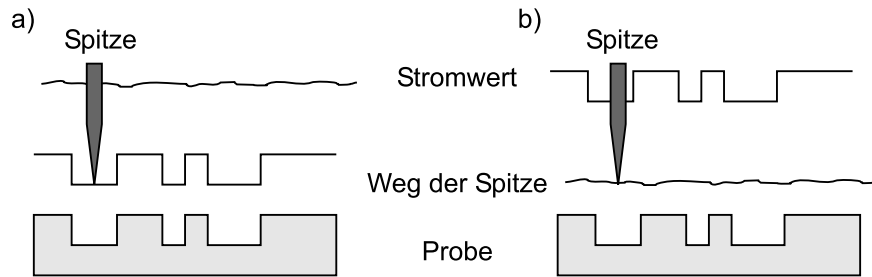


Abb. 2.10: Vergleich der Funktionsweisen eines STM. a) Konstanter Stromwert; b) Konstante Höhe.

und von der Probenqualität ab. Der *constant-height*-Modus ist nur für sehr glatte Proben geeignet, erlaubt aber sehr viel schnelleres Rastern. Daher wird dieser Modus i.allg. nur bei Metalloberflächen verwendet.

Der Tunnelstrom hängt sowohl vom Abstand zwischen Probe und Spitze als auch von der Barrierenhöhe ab. Die Höhe der Energiebarriere ergibt sich aus der angelegten Spannung, der Austrittsarbeit der Probe und der Austrittsarbeit der Spitze [52]. Änderungen im Tunnelstrom haben daher sowohl topographische wie auch elektronische Ursachen. Abb. 2.11 zeigt eine schematische Darstellung der Energiebilanz gegenüber einer Ortskoordinate. Der Tunnelvorgang findet zwischen den elektronischen Zuständen der Spitze und der Probe statt, sobald die Überlappung der Wellenfunktionen groß genug ist. Je nach Polarität werden Elektronen entweder aus den besetzten Zuständen der Spitze in die unbesetzten der Probe oder aus den besetzten Zuständen der Probe in die unbesetzten Zuständen der Spitze übergehen. Das Vorzeichen der angelegten Spannung wird üblicherweise als das Potential der Probe angegeben. So wird bei negativer Spannung aus der Probe, bei positiver in die Probe getunnelt.

Am Tunnelvorgang beteiligte Zustände liegen in einem Energiefenster der Größe eU zwischen den Fermi-Niveaus der Probe und Spitze. Während die Zustandsdichte der Metallspitze als nahezu konstant angenommen werden kann, wird sie für den Halbleiter stark energieabhängig sein. Daher können sich i.allg. Abbildungen von Halbleiteroberflächen in Abhängigkeit von der Größe und Polarität der angelegten Spannung stark unterscheiden. Bei GaAs ist bekannt, daß besetzte Zustände überwiegend von den As-Oberflächenatomen herrühren, leere Zustände hingegen von Ga-Atomen [79, 80]. Es ist also notwendig, für GaAs und allgemein für halbleitende Oberflächen die elektronische Struktur der Oberfläche zu berücksichtigen, um Aussagen über die Topographie der Oberfläche zu treffen.

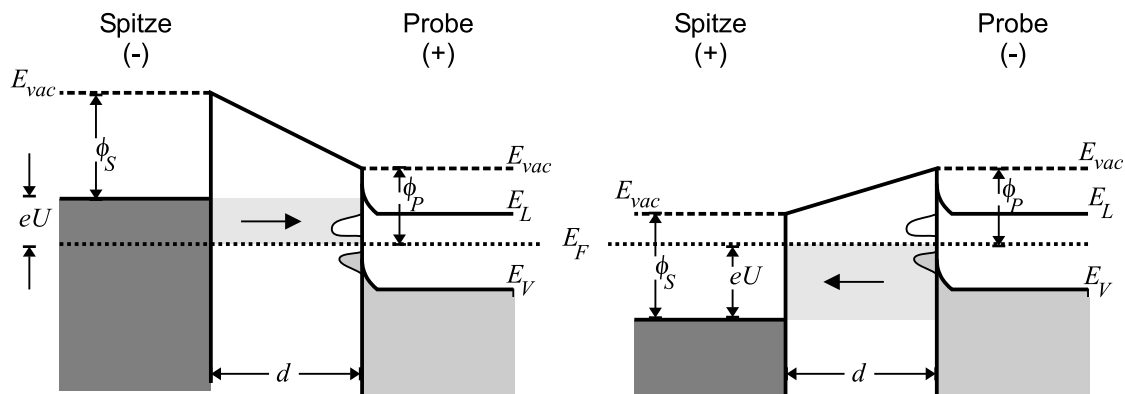


Abb. 2.11: Schematische Darstellung des Tunnelprozesses zwischen der Metallspitze und der halbleitenden Probe. *Links:* Positive Spannung. Die Elektronen der Spitze gehen in freie Zustände der Probe über. Elektronen mit einer Energie $E_{vac} - \phi_S - eU < E < E_{vac} - \phi_S$ sind am Tunnelprozeß beteiligt (hellgrau unterlegter Bereich). *Rechts:* Negative Spannung. Hierbei gehen die Elektronen der besetzten Zustände der Probe in freie Zustände der Spitze über. Die Energie der Elektronen liegt innerhalb von $E_{vac} - \phi_P - eU < E < E_{vac} - \phi_P$ (hellgrau unterlegter Bereich). Besetzte Zustände sind durch die grau schraffierten Flächen gekennzeichnet. Oberflächenzustände sind schematisch innerhalb der Energielücke durch eine grau unterlegte (besetzt) und durch eine weiß unterlegte (leer) Kurve angedeutet. Hierbei bezeichnen E_{vac} das Vakuumniveau, $\phi_{S(P)}$ die Austrittsarbeit der Spitze (Probe), U die angelegte Spannung, $E_{L(V)}$ das Niveau des Leitungsbandes (Valenzbandes) und d den Abstand zwischen Spitze und Probe.

3 Experimentelle Methoden

3.1 Apparatur

Die Experimente wurden in einem Ultrahochvakuum-System durchgeführt, das aus vier miteinander verbundenen Einheiten besteht und in Abb. 3.1 schematisch skizziert ist. Die einzelnen Einheiten bestehen aus Edelstahl- bzw. μ -Metall-Kammern, die jeweils durch eigene Pumpen evakuiert werden. Das System war zu Beginn der Arbeit im wesentlichen vorhanden. Neu hinzugekommen ist die STM-Kammer nebst Transfermechanismus. Die anderen Kammern wurden teilweise verändert; daher sollen die Erneuerungen kurz dargestellt werden.

Alle Kammern sind durch einen UHV-Transfermechanismus gekoppelt, der das Präparieren der Proben und anschließende Untersuchungen erlaubt, ohne daß das UHV unterbrochen werden muß. Das Kernstück des Transfermechanismus bildet der Probenträger, der in Abb. 3.2 skizziert ist. Er besteht aus einem 20 mm durchmessenden und 14 mm hohen Zylinder aus Tantal. Damit der Probenträger im UHV bewegt und in die Manipulatoren eingesetzt werden kann, sind an den Seitenflächen zwei Rillen sowie eine Bohrung an der Rückseite eingefräst.

Wie aus Abb. 3.1 zu erkennen ist, sind die MBE-, die Schleusen- und die Analyse-kammer in einer Linie angeordnet. Der Probentransfer erfolgt zwischen diesen Kammern durch einen magnetisch geführten Transferstab von 110 mm Länge. Am Transferstab ist eine federnde Gabel montiert, die in die untere Rille des Probenträgers eingeführt wird. Der Transferstab erlaubt neben der linearen Bewegung eine Drehung der Probe um 360° . Beide Bewegungen sind motorisiert und fernsteuerbar, so daß trotz der langen Strecken das Transferieren mit nur einer Person möglich ist. Der Antrieb des Transferstabes wurde neu entwickelt und ist gegenüber dem alten [81] präziser.

Der Manipulator der MBE-Kammer besitzt ein Plättchen mit einer halbkreisförmigen

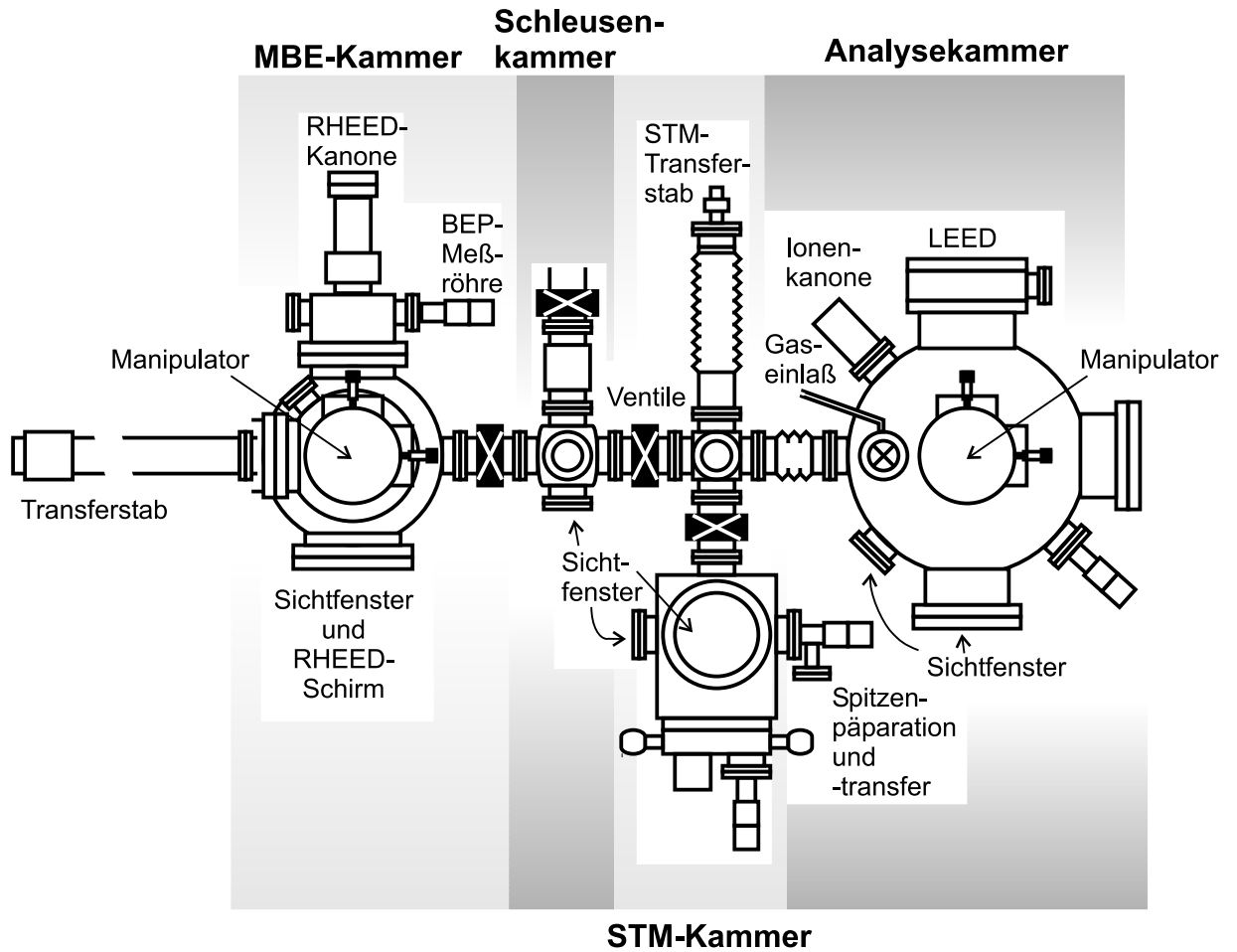


Abb. 3.1: Schematische Darstellung der UHV-Anlage in Aufsicht. Die Anlage besteht aus vier Einheiten (MBE-, Schleusen-, STM- und Analyse-kammer), die durch graue Farbflächen gekennzeichnet sind.

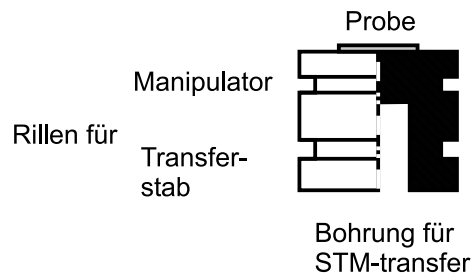


Abb. 3.2: Schematische Zeichnung (Halbschnitt) des Ta-Proben-trägers.

gen Aussparung, die den gleichen Radius hat wie der Radius der Rille des Probenträgers. Der Probenträger kann in dieses Plättchen abgelegt werden und muß zusätzlich mit einem Stift, der in die rückseitige Bohrung eingeführt wird, fixiert werden, um die Gabel des Transferstabes abziehen zu können.

Der Manipulator der Analysekammer besitzt eine Drahtschleife, die in die Rille des Probenträgers eingeschoben und festgezogen wird, um die Probe fassen zu können (vgl. auch [81, 82]). Der Transfermechanismus zur STM-Kammer erfolgt senkrecht zur Linie des Transferstabes (s.u.).

Schleusenkammer

Als Ultrahochvakuum (UHV) wird der Druckbereich $< 1 \times 10^{-10}$ mbar bezeichnet [52]. Dieser Druckbereich kann in angemessener Zeit nur dann erreicht werden, wenn die Kammern ausgeheizt werden. Um nicht das komplette System ausheizen zu müssen, wenn neue Proben ins Vakuum gebracht werden, ist eine kleine Schleusenkammer ins System eingegliedert worden. Abb. 3.3 zeigt eine Skizze der Schleusenkammer in einem zur Abb. 3.1 senkrechten Schnitt.

Die Schleuse besteht im wesentlichen aus einem $2\frac{3}{4}$ Zoll 6-Wege-Kreuzstück (Iso CF Flansch), an das an dem nach unten führenden Ende ein 120 mm langes Rohr befestigt ist. An diesem Rohr ist ein *Wobblestick* (engl. Begriff für eine Vakuumdurchführung, die sowohl Schubbewegungen als auch seitliche Bewegungen erlaubt) angebracht, auf dem ein Probenregal befestigt ist. Im Regal haben bis zu vier Proben Platz.

Die Schleusenkammer wird ständig von einer Ionengetterpumpe (Varian, Starcell, 221s^{-1}) gepumpt. Beim Einsetzen neuer Proben sind die Ventile zu den anderen Kammern (siehe Abb. 3.1) geschlossen und nur die Schleusenkammer belüftet. Die Proben können dann ins Regal gesetzt werden, und nach Verschließen wird ein Vorvakuum durch eine Turbomolekularpumpe (Pfeiffer-Balzers, TPU 050, 501s^{-1}) und eine Drehschieberpumpe (Pfeiffer-Balzers, DUO 008B, 21s^{-1}) erzeugt. Aufgrund des kleinen Volumens der Schleusenkammer wird ein Vakuum von etwa 1×10^{-7} mbar nach etwa 1,5 h erreicht. Hiernach wird die Schleusenkammer für 15 – 20 h ausgeheizt.

MBE-Kammer

In der MBE-Kammer werden auf einkristalline Substrate dünne Filme durch Molekularstrahlepitaxie gewachsen. Auf diese Weise werden Oberflächen höchster Qualität

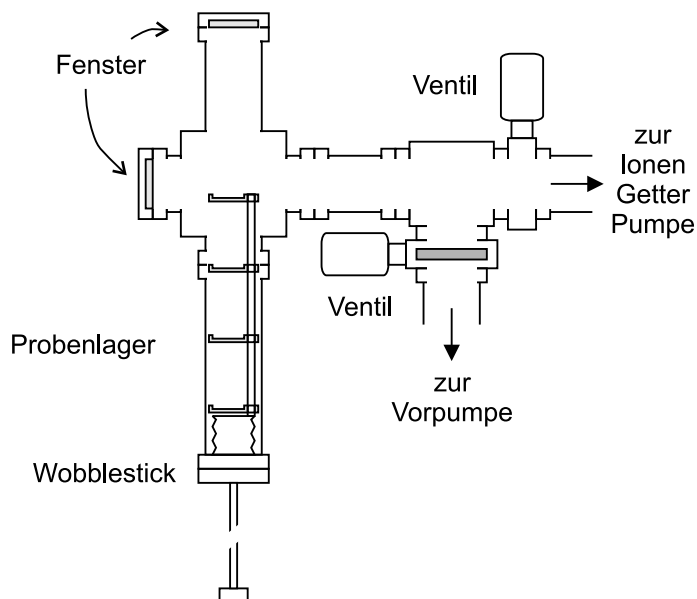


Abb. 3.3: Schematische Seitenansicht der Schleusenkammer.

und Reinheit hergestellt. Die MBE-Kammer wurde von P. Geng entworfen und gebaut und im Rahmen der Dissertationsarbeiten von C. Setzer [81] und J. Platen [82] in Betrieb genommen. Ein Schnitt durch die Kammer ist in Abb. 3.4 gezeigt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden in die MBE-Kammer eine neue As-Quelle (DCA, Valved Cracker MBS-250-35-11), eine In-Quelle (Oxford Instruments, Miniature K-Cell), eine bewegliche Meßröhre zur Messung der Drücke in den Molekularstrahlen und ein neues RHEED-System integriert.

Die neue As-Quelle besitzt ein wesentlich größeres Fassungsvermögen für As (250 cm^3) als die ursprüngliche Quelle und eine sogenannte *Cracker*-Stufe. Diese besteht im wesentlichen aus einer bis zu 1200°C erheizbaren Fläche, an der der Molekularstrahl vorbei geleitet wird. As sublimiert in Form von As_4 -Molekülen, aus denen sich dann der Molekularstrahl zusammensetzt. Die As_4 -Moleküle müssen auf der Oberfläche dissoziieren, bevor sie in den Kristallverbund eingebaut werden. An der *Cracker*-Stufe werden As_4 - ab einer Temperatur von ca. 900°C thermisch in As_2 -Moleküle dissoziiert [83]. Dadurch entfällt dieser Prozeß auf der Oberfläche, wodurch sich der As-Einbaukoeffizient erhöht. Darüber hinaus besitzt die As-Quelle ein Nadelventil, mit dem sich der Fluß stufenlos regeln läßt.

Die Ga- und In-Quellen sind baugleich und haben ein Fassungsvermögen von je $0,5 \text{ cm}^3$. Sie besitzen eine Klappe vor der Öffnung, die zur Abblockung der Strahlen

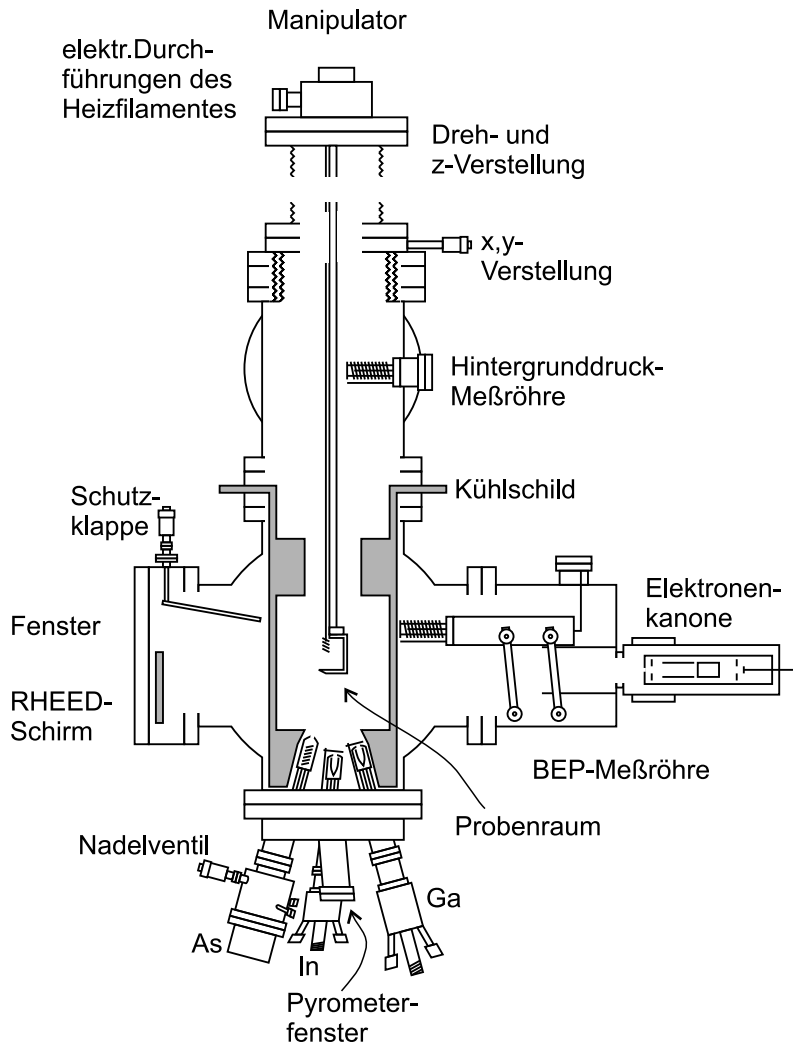


Abb. 3.4: Schematische Zeichnung der MBE-Kammer im Querschnitt.

dient. Der Fluß der Quellen muß über die Temperatur der Verdampfungsöfen geregelt werden.

Typische Betriebstemperaturen sind für den As-Ofen $440\text{ }^{\circ}\text{C}$, für den Ga-Ofen $1020 - 1120\text{ }^{\circ}\text{C}$ und für den In-Ofen $950 - 1050\text{ }^{\circ}\text{C}$. Die Öffnungen der Quellen sind nach oben gerichtet, so daß die Probe am Manipulator hängend nach unten zeigt.

Der Manipulator erlaubt Bewegungen in drei Raumrichtungen und Drehbewegungen bis zu 270° . Die Auf- und Abwärtsbewegungen sowie Drehbewegungen sind motorisiert. Bewegungen in der Ebene sind per Hand zu vollziehen. Geheizt wird die Probe durch ein Heizfilament, das in die hintere Bohrung des Probenträgers eingeführt wird (s.o.). Temperaturen bis zu $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ sind auf diese Weise erreichbar. Die Proben tempera-

3 Experimentelle Methoden

tur wird über die Wärmestrahlung der Probe durch ein Pyrometer (Kleiber, Pyroskop 202) gemessen, das sich außerhalb der Kammer befindet.

Der Druck im Molekularstrahl (BEP, engl. *beam equivalent pressure*) wird mit einer Ionisationsmanometerröhre gemessen, die in den Probenraum geschwenkt werden kann. Sie ist auf zwei Haltern befestigt, die jeweils am unteren Ende drehbar gelagert sind. Der hintere Halter kann von außen durch eine Drehdurchführung gedreht werden, so daß die Meßröhre durch eine Schwenkbewegung in die Position der Probe gesetzt wird.

Zur Wachsumskontrolle ist ein neues RHEED-System in die Kammer eingebaut worden. Dieses besteht aus der Elektronenkanone (Staib Instrumente, RHEED 15) und einem selbst hergestellten Leuchtschirm [81]. Vor dem Leuchtschirm ist eine Schutzklappe angebracht, um die Beschichtung zu schützen. Die RHEED-Reflexe können mit Hilfe einer CCD-Kamera (EHD, kamPro02) aufgenommen und durch eine *Framegrabber*-Karte mit entsprechender Software (Dr. M. F. Opheys, EE 2000) in einen PC geladen werden. Die Software eignet sich zudem zur Erfassung von RHEED-Intensitätssoszillationen.

Der Hintergrunddruck der Kammer wird mit einer zweiten Ionisationsmeßröhre gemessen, die sich oberhalb des Probenraums befindet. Während des Wachsens wird der Hintergrunddruck mit Hilfe eines Kryoschildes, der den Probenraum umgibt, gering gehalten ($< 1 \times 10^{-8}$ mbar). Es wird automatisch mit flüssigem Stickstoff gefüllt [82].

Der Basisdruck der MBE-Kammer beträgt 1×10^{-10} mbar und wird durch eine Ionengetterpumpe (VTS, MECA 2000, PID 200, 200 l s^{-1}) und durch eine Titansublimationspumpe (Balzers, USP 034) aufrechterhalten. Die MBE-Kammer wird nach einer Belüftung über die Vorpumpen der Schleusenkammer gepumpt, bis die Ionengetterpumpe bei einem Druck von 1×10^{-6} mbar angeschaltet werden kann. Aufgrund der geringen Pumpleistung der Vorpumpen kann das Erreichen dieses Druckes bis zu 3 h dauern. Die Kammer wird bei einer Temperatur von 140°C 25–30 h ausgeheizt.

STM-Kammer

Das STM (Park Scientific Instruments, Autoprobe VP2) ist ein kommerziell erhältliches Gerät, das auf einem 8 Zoll Iso CF-Flansch befestigt ist. Die Kammer, in der das Mikroskop eingebaut ist, besteht daher aus einem modifizierten 8 Zoll-Kreuzstück (vgl. Abb. 3.1). Das Mikroskop selbst ist an der Vorderseite angebaut, nach unten

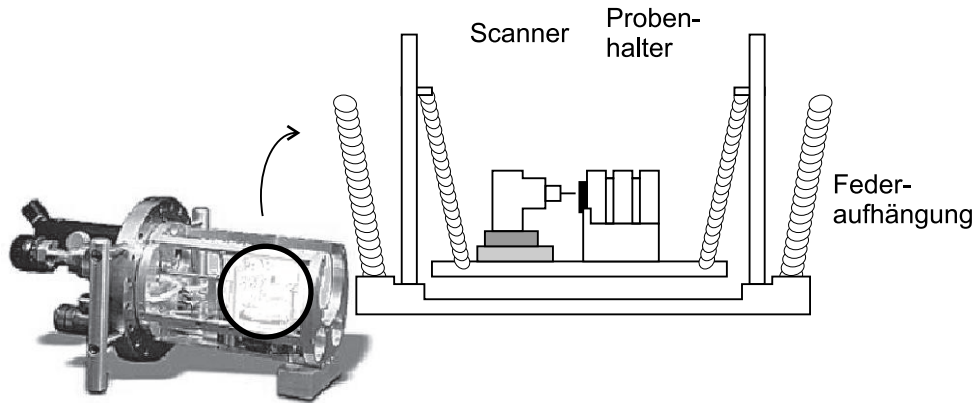


Abb. 3.5: Foto des STM-Aufbaus und schematische Zeichnung der Aufhängung des STM.

hin wird gepumpt und zum weiteren UHV-System geht es an der Rückseite. Auf der oben liegenden Seite ist ein großes Fenster angebracht, das eine Sicht über das ganze Mikroskop ermöglicht.

Einer der Hauptgründe, dieses Gerät einzusetzen, lag darin, daß alle Bewegungen, d.h. Grobannäherung und Rasterbewegungen, auf der Seite des Scanners (Rastereinheit) sind. Damit war der Einsatz des bestehenden Transfersystems und der Probenträger möglich. Die Probenträger werden ohne zusätzliche Befestigung auf einen selbstgebauten Halter gelegt. Die Schwingungsdämpfung des STM wird durch eine zweifache Federaufhängung realisiert, die durch Wirbelstrombremsen gedämpft wird (vgl. z.B. [84]). Eine schematische Skizze des STM ist in Abb. 3.5 gezeigt. Aufgrund des relativ großen Gewichtes der Probenträger (55 g) mußte ein neuer stärkerer Federersatz eingesetzt werden. Allerdings mußten Probenträger angefertigt werden, die sich in ihrem Gewicht nicht unterschieden, um eine waagerechte Aufhängung mit allen Probenträgern zu gewährleisten.

Ein weiterer Vorteil dieses Gerätes ist, daß es die Möglichkeit bietet, bis zu 6 Spitzen zu verwenden. Dazu gibt es ein Spitzenlager und eine Manipulationsvorrichtung, um die Spitzen vom Lager in den Scanner zu legen. Zusätzlich wurde eine Drehdurchführung seitlich an die Kammer montiert, mit der die Spitzen im UHV nachpräpariert werden können (vgl. Abschnitt 3.4). An ihrer Vorderseite ist ein Halter angebracht, mit dem die Spitzen vom Spitzenmanipulator des STM übernommen werden können. In Abb. 3.6 ist dieser Mechanismus skizziert. Mit der linearen Bewegung können die Spitzen vor einem Filament positioniert werden, wo sie durch Elektronenstoß geheizt werden können. Darüber hinaus können mit Hilfe dieser Vorrichtung Spitzen aus der

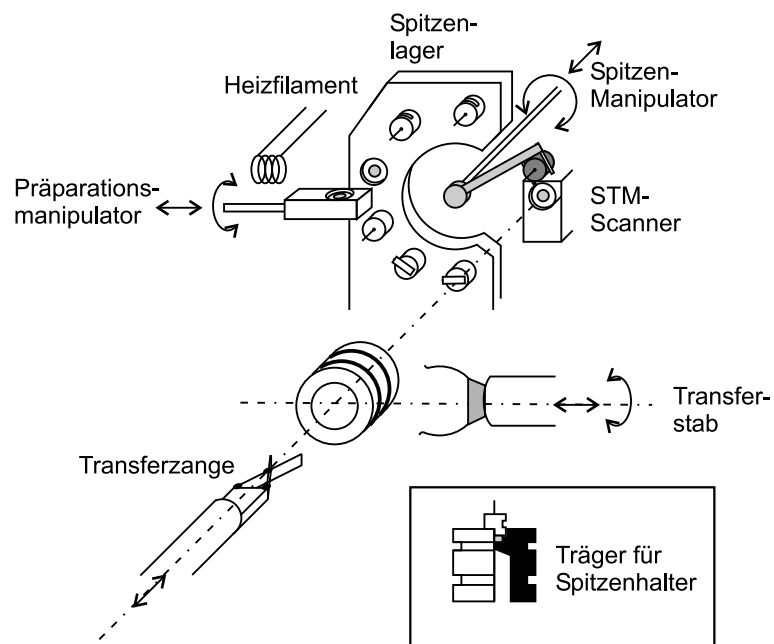


Abb. 3.6: Spitzenmanipulation in der STM Kammer: Die Spitzen werden mit dem Spitzenmanipulator vom und ins Spitzenlager befördert. Mit dem Präparationsmanipulator können die Spitzen zur Präparation vor einem Filament positioniert werden. Darüber hinaus können sie damit um 180° gedreht werden, um sie auf dem speziellen Träger (Einschub) aus der Kammer zu befördern.

Kammer in die Schleusenkommer transferiert werden. Dazu wurde ein Träger gebaut, in den die Spitzen gelegt werden können (siehe Einschub in Abb. 3.6). Die Spitzen werden mit dem Präparationsmanipulator zunächst gedreht, so daß sie in Richtung des Scanners zeigen. Sie werden dann vom Spitzenmanipulator übernommen und in den Träger gelegt, an dem sie durch einen kleinen Magneten gehalten werden.

Der Probentransfer in die und aus der STM-Kammer erfolgt durch einen Wobblestick, der senkrecht zum Transferstab bewegt werden kann. Der Probenträger wird von der Gabel des Transferstabes übernommen, indem eine Zange in die Bohrung des Probenträgers eingeführt und gespreizt wird.

Ein Druck von 5×10^{-11} mbar wird in der STM-Kammer durch eine Ionengetterpumpe (Varian, Noblediode, 135 l s^{-1}) aufrechterhalten. Das Vorvakuum nach dem Belüften der Kammer wird durch eine Turbomolekular-Dragepumpe (Pfeiffer, TMH 064, 421 s^{-1}) und eine Membranpumpe (Vacuubrand, MD 4,1 l s^{-1}) erzeugt.

Analysekammer

Die Analysekammer enthält eine LEED-Optik (VSI, ErLEED 1000-A) zur Untersuchung der Oberflächen sowie eine Ionenkanone (PHI, Model 04-161) und ein Gaseinlaßventil zur Vorbehandlung der Probe durch Ionenbeschuß. Zur Lecksuche ist ein Quadrupolmassenspektrometer (VG, QMS Micromass Q7) eingebaut. Am Manipulator ist zusätzlich ein Probenregal angebracht, in dem zwei Proben gelagert werden können. Aufgrund des guten Druckes in dieser Kammer ist eine Aufbewahrung der Proben bis zu einigen Tagen möglich, ohne daß die Oberflächenqualität darunter leidet. Ferner ist hier ein Energieanalysator für Elektronen (VG, ADES400) untergebracht, der im Rahmen dieser Arbeit nicht eingesetzt wurde. Eine detaillierte Beschreibung dieser Kammer ist in [81, 82, 85] zu finden.

Der Basisdruck in dieser Kammer beträgt 5×10^{-11} mbar und wird durch eine Turbomolekularpumpe (Balzers, TPH 180, 170 l s^{-1}) erreicht. Der Vordruck wird mit Hilfe einer Membranpumpe (Vacuubrand, MD 4,1 l s^{-1}) erzeugt.

3.2 Probenpräparation

Als kristalline Substrate dienten $10 \times 10 \text{ mm}^2$ große Proben, die aus n-dotierten GaAs-Wafers gebrochen wurden. Die Dotierung mußte in der Größenordnung von $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

3 Experimentelle Methoden

liegen, um genügend Leitfähigkeit für STM-Messungen zu haben.

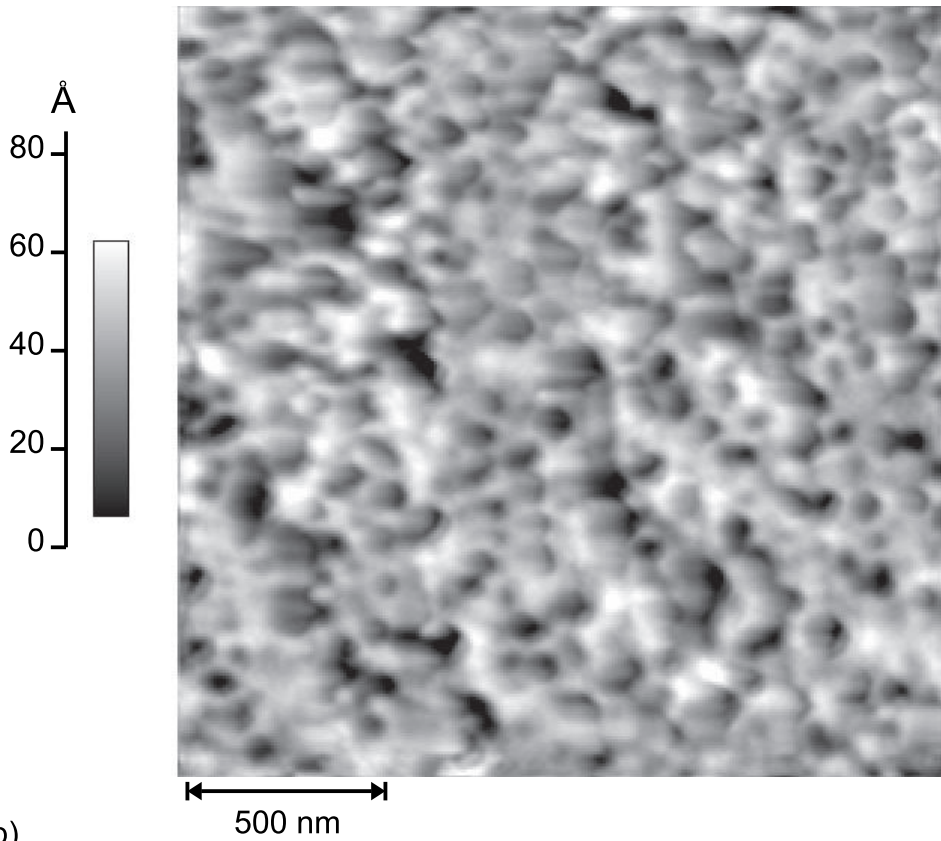
Vor dem Einschleusen ins Vakuum wurden die Substrate lediglich mit hochreinem Propanol (p.A.) gereinigt und mit etwas Indium auf die Probenträger geklebt. Indium wird bei einer Temperatur von 156 °C flüssig und kann daher als dünner Film auf einem aufgeheizten Probenträger verstrichen werden [86]. Auf diesen Film wird die Probe dann daraufgelegt. Dabei muß einerseits beachtet werden, daß der In-Film dünn genug ist, um lediglich durch Adhäsionskraft das Substrat halten zu können. Andererseits darf der In-Film nicht zu dünn sein, da sonst die Probe beim Aufheizen in der MBE-Kammer vom Probenträger abfallen kann. Des weiteren ist unbedingt darauf zu achten, die Indiumreste, die seitlich aus der Probe hervortreten, zu entfernen. Diese könnten sonst die Probe verunreinigen [81].

Nach dem Kleben wurden die Proben (mit dem Probenträger) in kochendes Propanol (p.A.) getaucht und unmittelbar vor dem Einsetzen in die Schleusenkammer mit He trocken geblasen. Die Schleusenkammer wurde dann etwa 15 h ausgeheizt. In der MBE-Kammer wurden die Proben anschließend bei etwa 350 °C 2 h lang ausgegast.

Um Adsorbate und Oxide von der Probe zu entfernen, wurden die Proben unter As-Gegendruck, d.h. bei angeschaltetem As-Ofen, auf eine Temperatur oberhalb von 580 °C geheizt. Dabei konnte die Desorption der Oxidschicht mit Hilfe von RHEED verfolgt werden. Sobald die Oberfläche vom Oxid befreit war, erschienen scharfe RHEED-Reflexe des Grundgitters. Dabei wurde gleichzeitig die Temperatur notiert, da die Temperatur der Oxiddesorption als guter Temperatur-Eichpunkt benutzt werden kann [87].

Hiernach wurde die Probe abgekühlt und in die Analysekommer transferiert, wo sie durch Ionenbeschuß und durch daran anschließendes Ausheilen zusätzlich gereinigt wurde. Dazu wird die Analysekommer mit 1×10^{-4} mbar Ar geflutet. Ar^+ -Ionen werden in der Kanone durch Elektronenbeschuß erzeugt, anschließend zu einem Strahl gebündelt und elektrostatisch beschleunigt. Die Probe wird vor dem Strahl positioniert, wodurch das Material aus der Probe herausgeschlagen wird [53]. Abb. 3.7 a) zeigt ein STM-Bild einer GaAs(001)-Probe, die mit 1 kV Ar^+ -Ionen 30 min lang beschossen wurde. Deutlich sind die Vertiefungen als schwarze Bereiche zu erkennen, die durch den Ionenbeschuß erzeugt wurden. Ein typisches Höhenprofil des Bildes, siehe Abb. 3.7 b), ergibt einen durchschnittlichen Durchmesser der Löcher von etwa 7,5 nm und eine Tiefe von etwa 2 nm. Die Proben müssen anschließend wieder in die MBE-Kammer transferiert werden und durch Erhitzen unter As-Gegendruck etwa 1 h

a)



b)

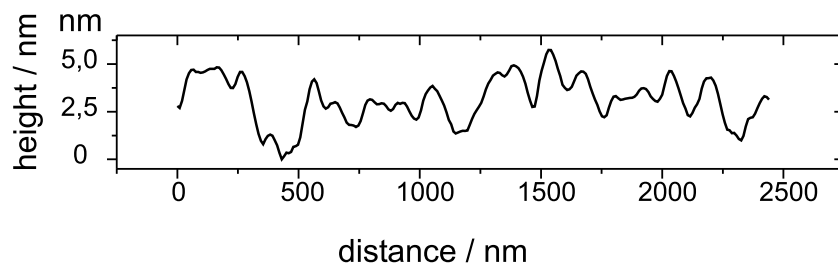


Abb. 3.7: a) STM-Bild einer mit 1 keV Ar⁺-Ionen bombardierten GaAs(001)-Probe. $U = -2,5$ V, $I = 0,1$ nA. b) Höhenprofil einer Raster-Linie.

lang ausgeheilt werden. Ein solcher Durchlauf wird IBA (engl. *ion bombardment and annealing*) genannt.

Die Temperatur zum Ausheilen der Proben betrug 560°C . Daraufhin wurde ein weiterer IBA-Durchlauf mit $0,5\text{ kV}$ Ar^+ -Ionen und anschließendes Ausheilen (erneut 1 h) bei einer Temperatur von 560°C durchgeführt. Abb. 3.8 a) zeigt ein STM einer GaAs(001)-Probe, die 30 min mit $0,5\text{ kV}$ Ionen beschossen wurde. Hier sind keine großen Krater mehr zu erkennen, sondern eine gleichmäßigere Abtragung der Oberfläche. Beste Ergebnisse wurden erzielt, wenn die Probe daraufhin nochmals einen IBA-Zyklus mit $0,5\text{ kV}$ Ionen durchlief, wobei im letzten lediglich 20 min bombardiert wurde.

Nach dem letzten IBA-Durchlauf wurde auf den Proben eine 50–100 nm dicke GaAs-Schicht unter Standard-MBE-Bedingungen gewachsen. Standard heißt in diesem Fall, daß ohne Rücksicht auf die Orientierung des Substrates

- die Probentemperatur zwischen 530°C und 560°C eingestellt wurde und
- As im Überschuß angeboten wurde, d.h., das BEP-Verhältnis von BEP_{As} zu BEP_{Ga} war etwa 40.

Hiernach wurde die Klappe des Ga-Ofens geschlossen und für einige Minuten die Temperatur erhöht, bevor die endgültige Wachstumstemperatur für die zu untersuchende Oberfläche eingestellt wurde. Die Wachstumsparameter (s.u.) für die zu untersuchenden Oberflächen wurden variiert und sind daher in den Präparationsabschnitten der einzelnen Oberflächen zu finden.

3.3 Wachstumsparameter

Als Wachstumsparameter werden diejenigen Parameter bezeichnet, die im Experiment verändert werden können und Einfluß auf die Oberfläche bzw. auf den epitaktischen Film haben.

Einer der wichtigsten Parameter ist die Temperatur der Probe, da hierdurch die Migration der Atome auf der Oberfläche und die Desorption von As kontrolliert werden kann. Die Desorption von Ga spielt unter den hier verwendeten Temperaturen keine große Rolle [88]. Insbesondere sind die Probentemperatur und deren Änderung entscheidend für die Beibehaltung einer Oberflächenstruktur nach dem Wachsen, das sogenannte ‘*Quenchen*’ einer Oberfläche.

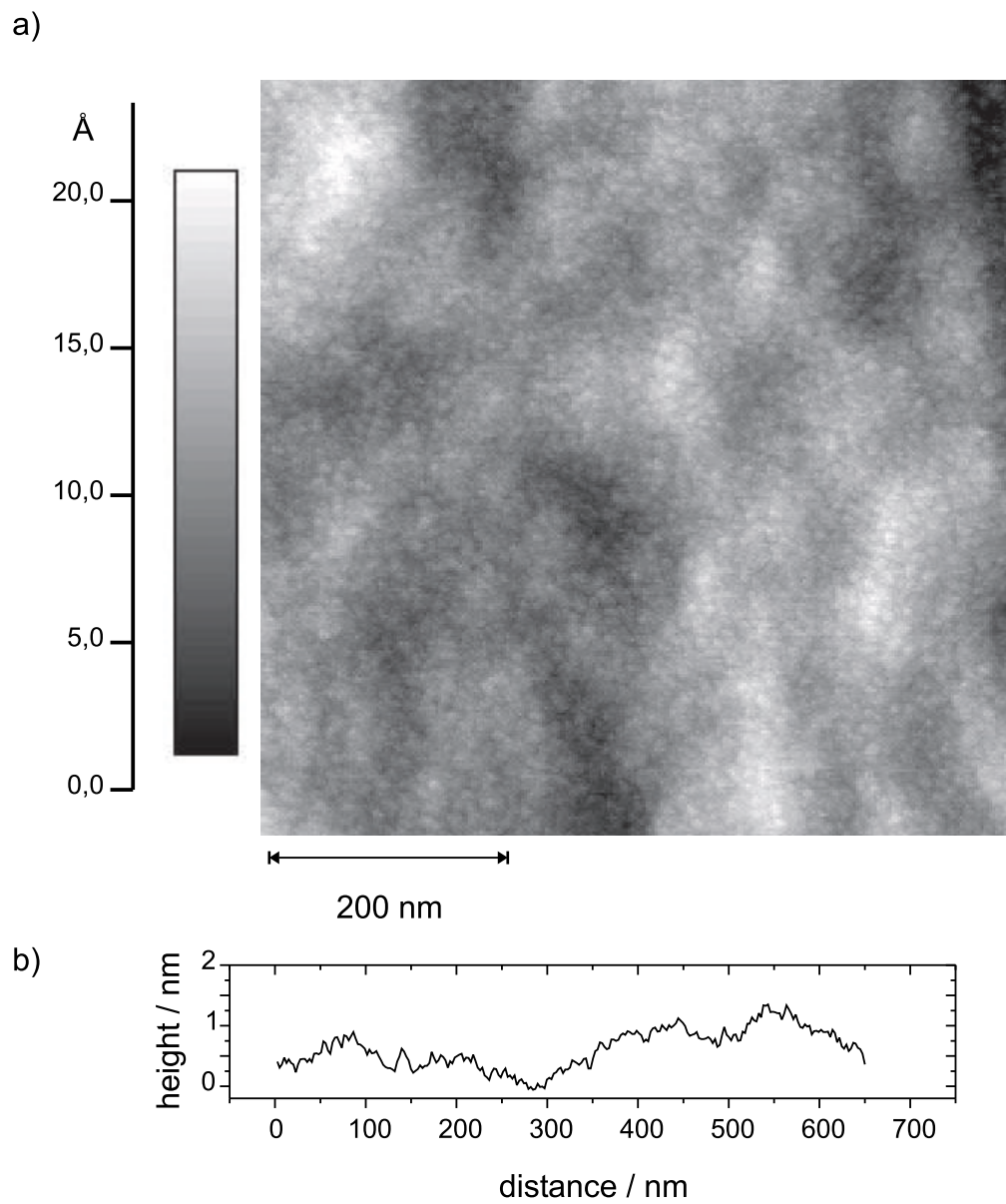


Abb. 3.8: a) STM-Bild einer mit 0,5 kV Ar^+ -Ionen bombardierten GaAs(001)-Probe. $U = -2,5$ V, $I = 0,1$ nA. b) Höhenprofil einer Raster-Linie.

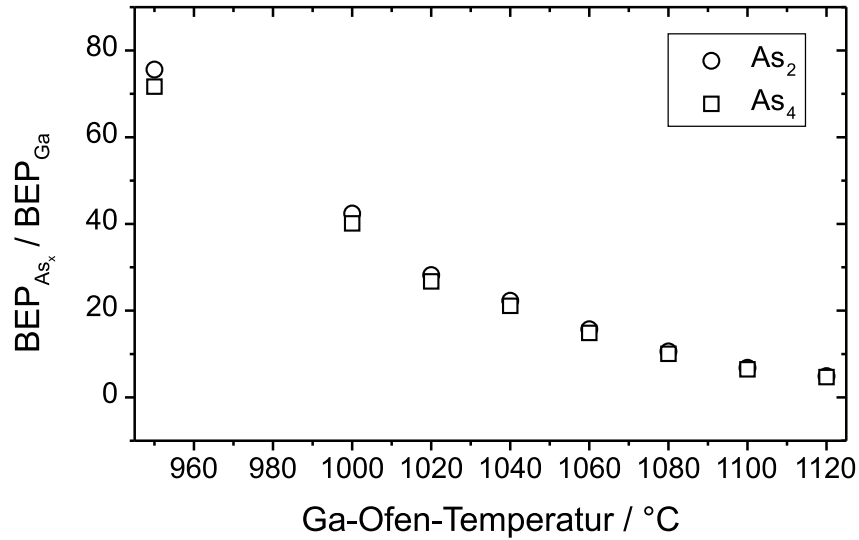


Abb. 3.9: Verhältnis vom BEP_{As_x} ($x = 2, 4$) zum BEP_{Ga} in Abhängigkeit von der Ga-Ofen-Temperatur. 440°C As-Ofen-Temperatur, 1100°C Cracker-Temperatur.

Der nächste wichtige Parameter ist die Wachstumsgeschwindigkeit. Die Wachstumsgeschwindigkeit hängt im wesentlichen vom Ga (bzw. In)-Fluß ab, da diese Atome einen Haftkoeffizient von 1 haben [89]. Die Wachstumsgeschwindigkeit hat nur einen geringen Einfluß auf die Stöchiometrie auf der Oberfläche, wohl aber auf die Morphologie. Auch für das Wachstum von InAs-*Quantum Dots* auf GaAs ist eine genaue Kenntnis der Wachstumsgeschwindigkeit notwendig.

Ein Parameter, der sowohl die Oberflächenstruktur wie auch die Morphologie beeinflusst, ist das sogenannte BEP-Verhältnis [58]. Das BEP-Verhältnis bezeichnet das Verhältnis vom Druck im Molekularstrahl des As zum Druck im Ga (bzw. In)-Molekularstrahl. Die Drücke in den Molekularstrahlen wurden mit Hilfe der schwenkbaren Meßröhre gemessen. Abb. 3.9 zeigt das BEP-Verhältnis von As zu Ga in Abhängigkeit von der Ga-Ofen-Temperatur, wobei der As-Fluß konstant gehalten wurde.

Probentemperatur

Die Probentemperatur wird durch ein Filament, das in die Bohrung des Probenträgers eingeführt wird, eingestellt. So kann über den Strom, der durch das Filament fließt, die Temperatur geregelt werden. Gemessen wurde die Temperatur durch ein Pyrometer, das sich außerhalb der Kammer befindet. Für die Temperatur-Eichmessungen, die

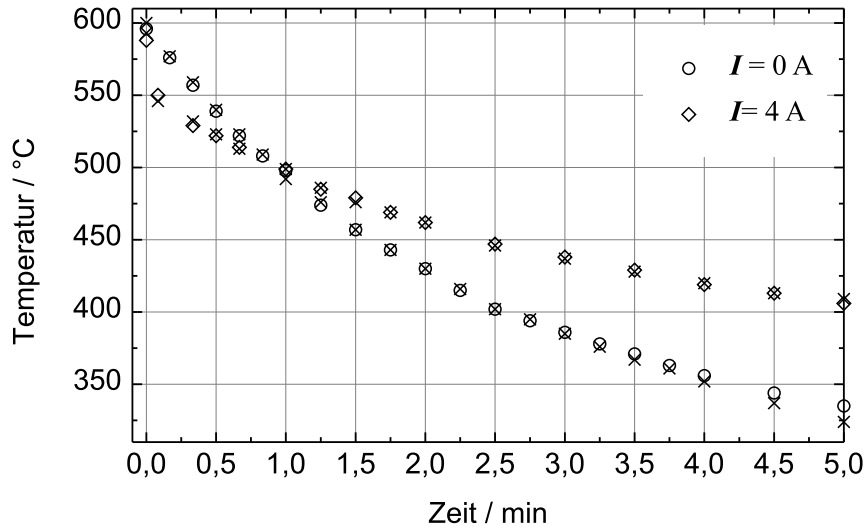


Abb. 3.10: Abkühlverhalten der Probe: Offene Kreise zeigen die Temperaturwerte einer Probe, bei der das Filament abgeschaltet wurde, offene Rauten die Kurve für die Probe, bei der das Filament mit 4 A weiterbetrieben wurde. Die Kreuze geben die Temperaturangabe eines Thermoelementes wieder.

hier vorgestellt werden, wurde an einem Probenträger zusätzlich ein Thermoelement neben der Probe angepunktet, so daß zwei Temperatur-Meßmethoden zur Verfügung standen.

Abb. 3.10 zeigt das Abkühlverhalten des Probenträgers in Abhängigkeit von der Zeit. Dazu war die Probe auf 600 °C geheizt (mit $I_{Filament} = 6,5$ A) worden und wurde im ersten Experiment abgekühlt, wobei das Filament abgeschaltet wurde. In einem zweiten Experiment wurde die Probe wieder von 600 °C abgekühlt, wobei das Filament weiterhin mit $I_{Filament} = 4$ A betrieben wurde. Diese Studie dient in Zusammenhang mit Messungen des As-Strahls dazu, die Wärmekapazität des Probenträgers zu überprüfen. Das ist notwendig, um zu klären, wie die Oberflächenstruktur einer Probe abgekühlt werden muß, um die Struktur bis auf Raumtemperatur erhalten zu können. So muß z.B. die Probe innerhalb von 30 s von der MBE-Kammer transferiert werden, um eine Ga-reiche Struktur quenchen zu können, da As oberhalb von 500 °C von der Oberfläche desorbiert. Ein langsamer Abkühlvorgang im As-Strahl führt zu einer As-reichen Struktur, da hierbei genügend As-Atome adsorbiert werden. Dazu muß die Temperatur der Probe bei gleichzeitiger Verminderung des As-Druckes gesenkt werden. Abb. 3.11 zeigt, wie der As-Druck als Funktion der Zeit beim Abschalten des Ofens abnimmt. Der BEP der As-Quelle läßt sich zwar mit Hilfe des Nadelventils regu-

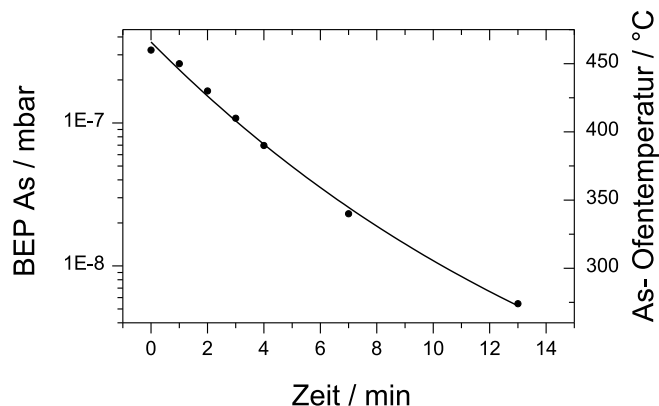


Abb. 3.11: Abkühlverhalten des As-Ofens bei offenem Nadelventil. Dargestellt ist der As-Druck im Molekularstrahl im Laufe der Zeit nach Abschalten des Ofens.

lieren, jedoch ist bei langsamer Abkühlung der Probe durch Abschalten des As-Ofens eine gleichmäßige Absenkung des As-Druckes auch auf diese Weise möglich, ohne daß etwa zu viel As auf der Oberfläche adsorbiert.

Wachstumsgeschwindigkeit

Zur Bestimmung der Wachstumsgeschwindigkeit wurden RHEED-Intensitätssoszillationen aufgenommen [61]. Gemessen wurden die Oszillationen auf der GaAs(001) β 2(2 × 4)-Oberfläche, da sich hier einfach Wachstumsparameter finden lassen, bei denen Frank-Van der Merwe Wachstum vorliegt.

Die RHEED-Intensitätssoszillationen für verschiedene Ga-Ofen-Temperaturen sind in Abb. 3.12 dargestellt. Die Oszillationsperiode $\Delta\tau$ gibt die Dauer des Wachsens von einer Monolage an. Eine Monolage heißt hierbei, daß eine Lage Ga und eine Lage As gewachsen wird. Die Stufenhöhe einer Monolage beträgt 2,8 Å, woraus die Wachstumsgeschwindigkeiten ermittelt werden können, die in Tab. 3.1 zusammengefaßt sind. Hieraus läßt sich aus der Depositionszeit auch die Schichtdicke bestimmen.

Die Wachstumsgeschwindigkeit von InAs wurde ebenfalls auf einer GaAs(001) β 2(2 × 4)-Oberfläche durch RHEED-Intensitätssoszillationen gemessen [90]. Dabei wurden $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Verbindungen gewachsen, da reines InAs auf GaAs aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten nicht im Frank-Van der Merwe-Modus aufwächst. Durch Abziehen der vorher ermittelten GaAs-Wachstumsgeschwindigkeiten läßt sich die Wachstumsgeschwindigkeit für InAs bestimmen. Abb. 3.13 zeigt die RHEED In-

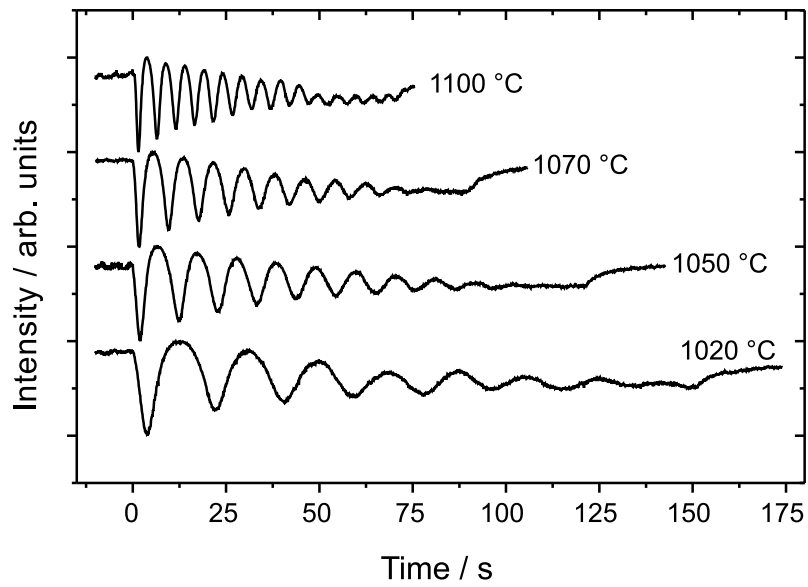


Abb. 3.12: RHEED-Intensitätssoszillationen gemessen auf der GaAs(001) β 2(2 \times 4)-Oberfläche. Die Ga-Quelle wurde zur Zeit $t = 0$ s geöffnet. Proben temperatur: 530 °C.

Ga-Ofen- Temperatur [°C]	BEP _{Ga} [1 \times 10 ⁻⁸ mbar]	$\Delta\tau$ [s]	Wachstums- geschwindigkeit [Å s ⁻¹]
1020	2,4	17,1	0,16
1050	4,0	10,5	0,27
1070	5,8	8,7	0,33
1100	9,4	5,7	0,49

Tabelle 3.1: Wachstumsgeschwindigkeiten aus RHEED-Intensitätssoszillationen

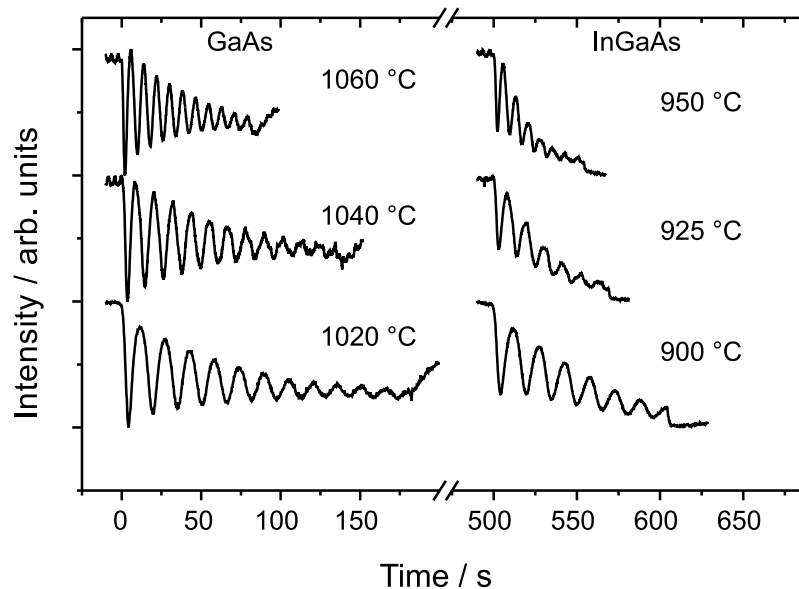


Abb. 3.13: GaAs- und InGaAs-RHEED-Intensitätsoszillationen zur Bestimmung der Wachstumsgeschwindigkeit von InAs. Die Ga-Quelle wurde zur Zeit $t = 0$ s, die In (zusammen mit Ga) wurde zur Zeit $t = 500$ s geöffnet. Proben temperatur: 520 °C.

tensitätsoszillationen für verschiedene Ga- und In-Ofen-Temperaturen, aus denen sich die Wachstumsgeschwindigkeiten berechnen lassen, die in Tab. 3.2 zusammengefaßt sind.

Die Proben temperatur betrug bei allen Messungen 520 °C. Aufgenommen wurden RHEED-Intensitätsoszillationen von GaAs und nach einer Wachstumsunterbrechung von 5 min wurden Oszillationen von InGaAs gemessen. In Abb. 3.13 entspricht die Zeit $t = 0$ s dem Öffnungszeitpunkt des Ga-Ofens, der Zeitpunkt $t = 500$ s dem Öffnungszeitpunkt des In- und Ga-Ofens zum Aufbringen der InGaAs-Schicht. Zwischen einer InGaAs-Schicht und einer neuen GaAs-Messung bei neuer Ofen-Temperatur wurden 30 Lagen GaAs bei einer Proben temperatur von 540 °C gewachsen und sodann 5 min unterbrochen, bevor die Temperatur für eine erneute Messung abgesenkt wurde.

3.4 Analyse

Im folgenden werden einige Details der Datenerfassung und Auswertung der Meßdaten kurz dargestellt.

Ga-Ofen- Temperatur	In-Ofen- Temperatur	$\Delta\tau$ GaAs	$\Delta\tau$ InGaAs	Wachstums- geschwindigkeit GaAs	Wachstums- geschwindigkeit InAs
[°C]	[°C]	[s]	[s]	[Å s ⁻¹]	[Å s ⁻¹]
1020	900	15,457	15,228	0,181	0,003
1040	925	11,572	10,992	0,242	0,013
1060	950	8,127	7,99	0,34	0,05

Tabelle 3.2: Bestimmung der Wachstumsgeschwindigkeiten von InAs aus RHEED-Intensitätsoszillationen, die an InGaAs-Schichten gemessen wurden

3.4.1 LEED

LEED eignet sich zur Bestimmung der Periodizitäten auf einer Oberfläche sowohl qualitativ als auch quantitativ. Zur quantitativen Bestimmung der Gitterabstände ist die genaue Kenntnis der Geometrie des Aufbaus notwendig. Abb. 3.14 zeigt die ideale Geometrie des Beugungsexperimentes, aus der sich die Gitterkonstante ermitteln läßt. Nach der kinematischen Beugungstheorie ergibt sich konstruktive Interferenz für Strahlen, die die Laue-Bedingung erfüllen. Die Laue-Bedingung läßt sich durch die Ewald-Konstruktion graphisch darstellen, so daß sich konstruktive Interferenz für

$$a^* = k_{\parallel} = (\vec{k}_0 - \vec{k}')_{\parallel} = k_0 \sin(\theta)$$

ergibt. k_0 ergibt sich hierbei aus der Energie des Elektronenstrahls, a^* bezeichnet den Betrag eines reziproken Gittervektors. Gemessen wird ein Abstand y zwischen den Reflexen (in Abhängigkeit der Energie der Elektronen), der sich nach Abb. 3.14 aus $y = r \cdot \sin(\theta)$ ergibt. r ist verknüpft mit der Geometrie des Aufbaus und ergibt sich daher aus

$$r = \frac{R}{\sin(\theta_0)},$$

wobei R den Radius (auf dem Foto) und θ_0 den Öffnungswinkel des Leuchtschirmes bezeichnet. θ_0 ist in unserem Fall 45° . Verknüpft man nun die obigen Ergebnisse, so erhält man für die gemessene Entfernung:

$$y = \frac{R}{\sin(45^\circ)} \cdot \frac{a^*}{k_0} = \frac{R}{\sin(45^\circ)} \cdot \frac{\lambda}{a \cdot \sin(\gamma)}$$

wobei a die gesuchte Gitterkonstante und λ die Wellenlänge des Elektronenstrahls

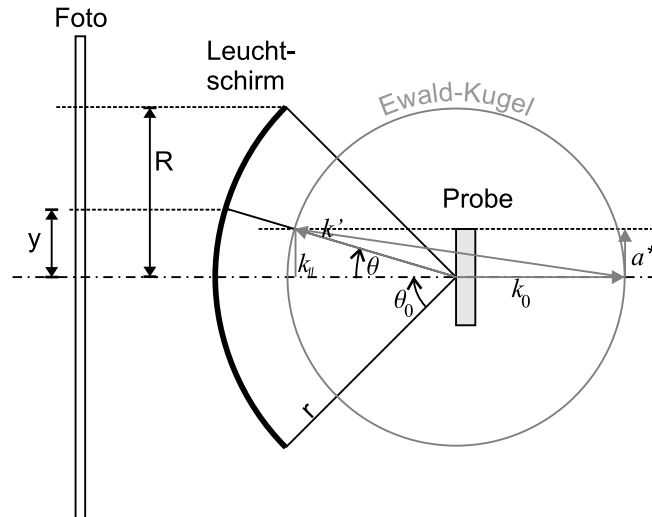


Abb. 3.14: Geometrie zur Datenerfassung in einem LEED Experiment.

bezeichnen. Der Winkel γ bezeichnet den von den Gittervektoren eingeschlossenen Winkel.

Die obige Gleichung gilt nur, wenn sich die Probe genau im Zentrum des Leuchtschirmes befindet. Das heißt, die Positionierung der Probe vor dem Schirm ist entscheidend für eine quantitative Auswertung der LEED-Daten. Um die experimentelle Ungenauigkeit zu bestimmen, wurde daher eine Eichmessung mit einer GaAs(110)-Oberfläche durchgeführt. GaAs(110) ist hierfür geeignet, weil die Oberfläche durch einfaches IBA zu präparieren ist. Darüber hinaus zeigt diese Oberfläche nur eine Relaxation und besitzt daher eine rechteckige Einheitszelle wie die *bulk-truncated*-Struktur, die in Abb. 3.15 skizziert ist. Die Maße der Einheitszelle sind $4,00 \times 5,65 \text{ \AA}^2$ [41]. Abb. 3.16 a–f) zeigt die aufgenommenen Reflexmuster dieser Probe für zunehmende Elektronenenergien. In Abb. 3.17 sind die aus 3.16 ermittelten Gitterkonstanten im Vergleich zu den berechneten Gitterkonstanten dargestellt. Die Abweichungen der Meßdaten liegen innerhalb der aufgrund von Abbildungsfehlern der Elektronenoptik zu erwartenden Fehlergrenzen.

3.4.2 STM

Der entscheidende Faktor in der Rastertunnelmikroskopie ist die Qualität der Spitze, mit der die Oberfläche abgerastert wird. Idealerweise sollte sie atomar scharf sein, d.h., sie sollte an ihrem Ende nur noch ein Atom haben, durch das das Tunneln vollführt

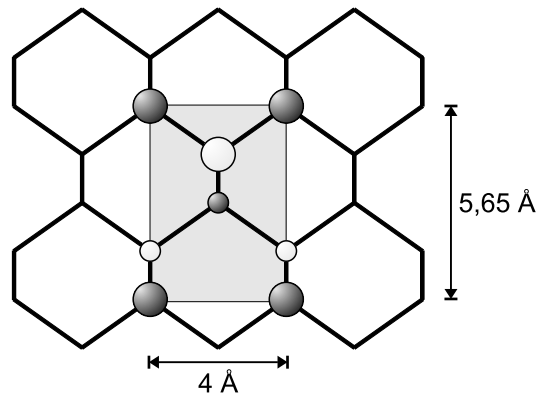


Abb. 3.15: Bulk-truncated Einheitszelle der GaAs(110)-Oberfläche. Ga-Atome sind durch dunkle, As-Atome durch helle Kugeln dargestellt. Tiefer liegende Atome sind durch kleinere Radien angedeutet.

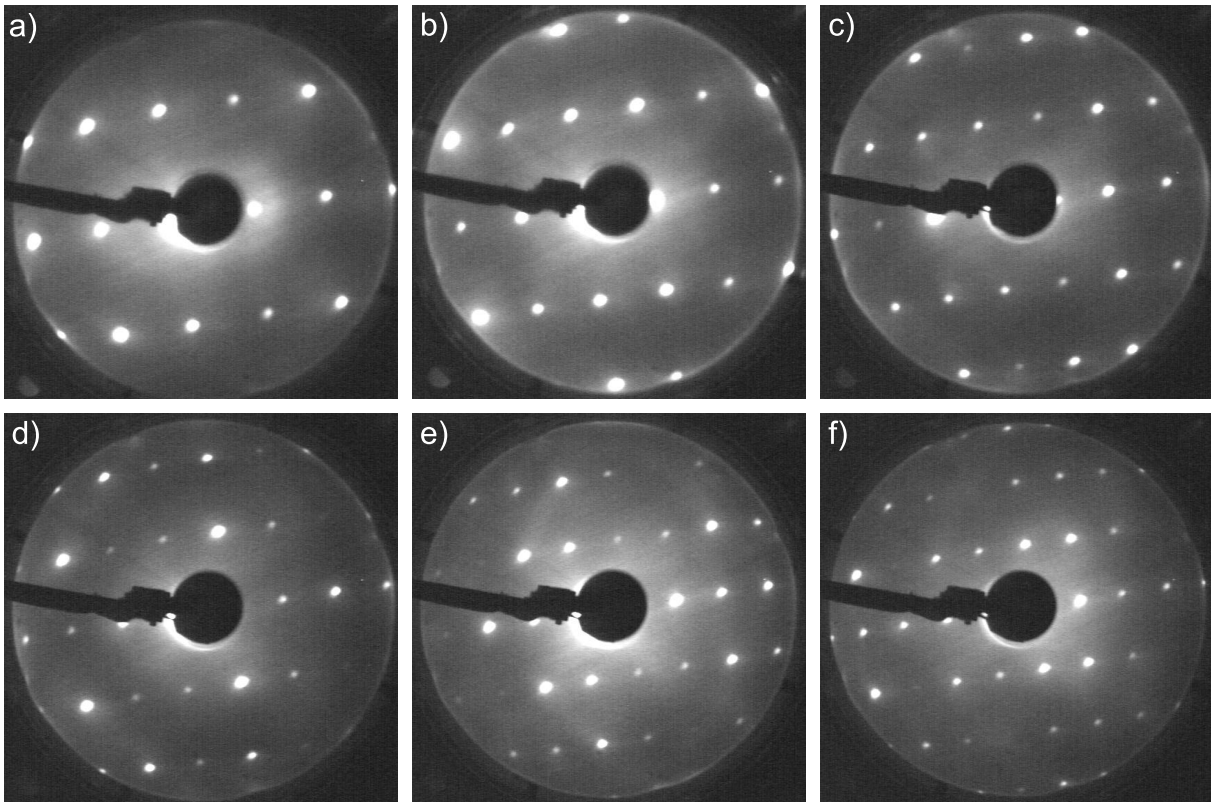


Abb. 3.16: LEED-Reflexmuster der GaAs(110)-Oberfläche bei Primärenergien von a) $E = 60$ eV, b) $E = 80$ eV, c) $E = 100$ eV, d) $E = 120$ eV, d) $E = 150$ eV, und f) $E = 170$ eV.

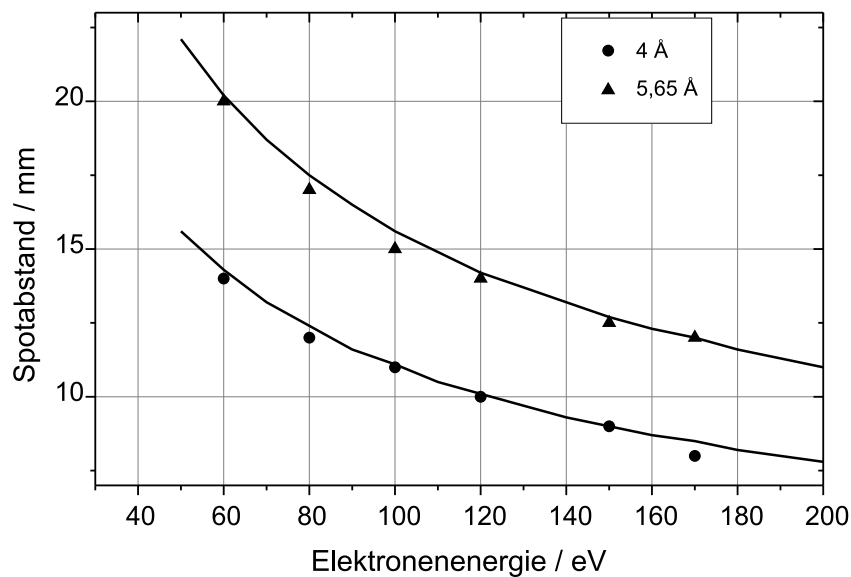


Abb. 3.17: Vergleich der experimentell bestimmten Abstände der Reflexe für die Gitterkonstanten der GaAs(110)-Oberfläche mit berechneten Werten (durchgezogene Linien).

wird. Das entscheidende Problem, das es zu lösen gilt, ist die Herstellung einer Spitze. Dazu haben sich im Laufe der Zeit einige Methoden durchgesetzt, von denen im Rahmen dieser Arbeit zwei verwendet wurden.

Bei der ersten Methode wird eine Spitze durch Ätzen eines polykristallinen W-Drahtes hergestellt. Geätzte Spitzen sind bereits kommerziell zu haben und müssen daher nicht selbst hergestellt werden. Abb. 3.18 zeigt eine elektronenmikroskopische Aufnahme einer solchen Spitze. Die nebenstehende hochauflösende Aufnahme zeigt, daß sie einen Krümmungsradius von 5 nm besitzt. Dieser Krümmungsradius ist allerdings immer noch viel zu groß, denn die Spitze sollte idealerweise nur noch aus einem einzelnen Atom bestehen. Des weiteren ist zu erkennen, daß die Spitze von einer etwa 10 nm dicken Oxidschicht (grauer Bereich) umgeben ist. Diese Oxidschicht (WO_3) muß im UHV entfernt werden, um ein stabiles Tunneln zu ermöglichen.

Eine Methode dafür besteht darin, die Spitze durch Elektronenstoß zu heizen und dadurch das Oxid zu verdampfen. Das WO_3 verdampft bereits bei 900°C [91]. Das Problem beim Heizen besteht nun darin, daß es keine Kontrolle dafür gibt, wann der Heizprozeß zu beenden ist, damit die Spitze nicht schmilzt. Beim Schmelzen entsteht ein relativ dicker Tropfen auf der Spitze, so daß der Krümmungsradius am Apex deut-

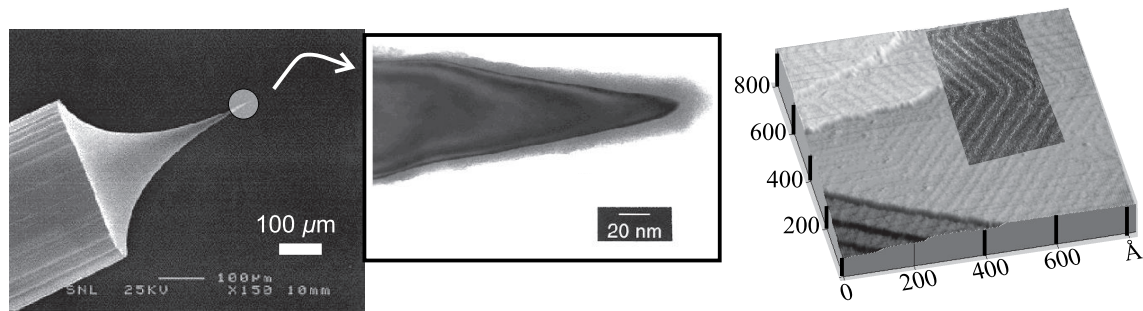


Abb. 3.18: Links und Mitte: Elektronenmikroskopische Aufnahmen von geätzten W-Spitzen (aus Ref.[95]). Rechts: STM-Bild der rekonstruierten Au(111)-Oberfläche. Die Rekonstruktion ('Fischgrätenmuster') auf der großen Terrasse ist durch eine kontrastreichere Grauskala hervorgehoben. $800 \times 800 \text{ \AA}^2$, $U = -0,5 \text{ V}$, $I = 0,2 \text{ nA}$.

lich größer wird.

Wir haben daher eine Methode zur Präparation einer geätzten W-Spitze angewendet, die von J. Wintterlin [92] vorgeschlagen wurde. Dazu wird die Spitze an eine Au-Oberfläche angenähert, an der eine Spannung von etwa -300 V gegenüber der Spitze anliegt. Wenn die Entfernung zwischen der Au Oberfläche und der Spitze klein genug wird, fließt ein Feldemissionsstrom. Die Spitze wird daraufhin weiter angenähert, bis der Strom plötzlich unterbrochen wird. Die genaue Ursache für das spontane Abreißen des Stromes ist bislang nicht bekannt. Die allgemeine Vorstellung, was hierbei passiert, ist, daß einige Schichten der Spitze durch das am Apex der Spitze enorme elektrische Feld abgerissen werden. Dadurch erhofft man sich, daß eine saubere scharfe Spitze zurückbleibt. Der Vorteil dieser Methode ist, daß der Strom zwischen Spitze und Au-Oberfläche bei nochmaliger Annäherung gemessen und dabei die exponentielle Änderung des Stromwertes bei einer Änderung des Abstandes zwischen Spitze und Probe nachgeprüft werden kann.

Wird als Au-Oberfläche ein Einkristall verwendet, so läßt sich darüber hinaus die Qualität der Spitze direkt überprüfen. Auf der rechten Seite von Abb. 3.18 ist ein STM Bild der von uns verwendeten Au(111)-Oberfläche abgebildet. Auf dem Bild sind Stufenkanten (Stufenhöhe = $2,3 \text{ \AA}$ [93]) zu sehen, mit deren Hilfe gleich die Höhenkalibrierung des Scanners vorgenommen werden kann. Ferner ist auf den Terrassen die typische Rekonstruktion der Au(111)-Oberfläche zu erkennen. Dieses 'Fischgräten'-Muster der Rekonstruktion eignet sich zum Kalibrieren der lateralen Einstellungen des Scanners. Die Abbildung der Au(111)-Rekonstruktion ist ein sehr strenger Test für ein STM, weil

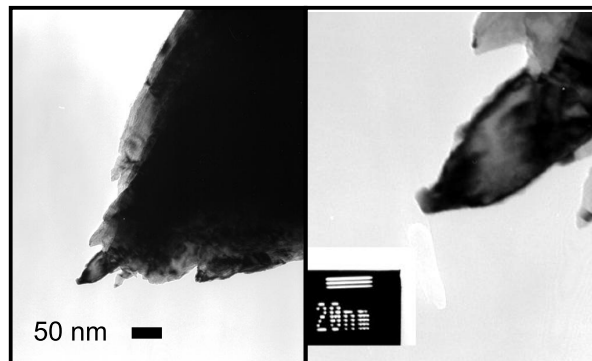


Abb. 3.19: Elektronenmikroskopische Aufnahmen von geknipsten Pt/Ir-Spitzen (aus Ref.[96]).

die atomare Korrugation, die das ‘Fischgräten’-Muster erzeugt, lediglich $0,15 \text{ \AA}$ beträgt [94]. Ein großer Nachteil dieser Präparationsmethode ist allerdings, daß sie sehr zeitintensiv ist. Teilweise wurden mehr als 10 h benötigt, um eine Spitze zu präparieren. Ein weiterer allgemeiner Nachteil von geätzten Spitzen ist, daß sie nicht wieder verwendet werden können, wenn die Spitze (‘aus Versehen’) gegen die Probe gefahren wurde.

Die zweite Methode, STM-Spitzen herzustellen, die im Rahmen dieser Arbeit angewendet wurde, ist etwas unkonventioneller Natur und weder reproduzierbar noch kontrollierbar (nichtsdestotrotz sehr erfolgreich!). Sie besteht einfach darin, einen polykristallinen W-Draht mit einer Kneifzange abzuknipsen. Dabei wird die Zange schräg angesetzt und während des Kneifens gezogen. W ist ein sehr sprödes Material, so daß die Hoffnung bei dieser Art der Spitzenherstellung darin besteht, daß viele mikroskopisch kleine Spitzen durch das Abreißen entstehen. Abb. 3.19 zeigt eine elektronenmikroskopische Aufnahme einer so erzeugten Spitze. (Das in den Aufnahmen gezeigte Material ist Pt/Ir, sollte aber einer W-Spitze ähneln.) Diese Spitzen müssen dann im UHV noch durch Elektronenbeschuß geheizt werden, um die Oxidschicht zu entfernen [91]. Dazu werden die Spitzen mit dem Präparationsmanipulator (siehe Abb. 3.6) etwa 1 mm vor dem Filament positioniert. Dann wird eine Spannung von 300 – 500 V zwischen Spitze und Filament angelegt und der Strom durch das Filament so geregelt, daß zwischen Filament und Spitze ein Strom von 2 – 3 mA fließt. Die Dauer des Heizens ist erfahrungsgemäß 20 – 45 s. Ein Nachteil dieser Methode ist sicherlich, daß keinerlei Kontrolle bei der Herstellung und Nachbehandlung im UHV vorliegt. Der Vorteil dieser Methode ist zum einen, daß die Spitzenpräparation lediglich einige Minuten

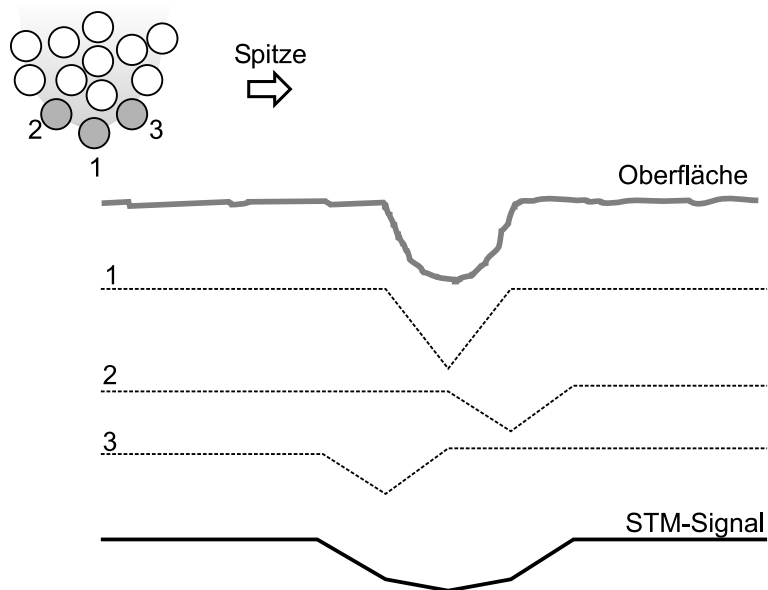


Abb. 3.20: Durch eine zu breite Spitze erzeugte falsche Abbildung der Oberfläche. Beim Rastern über den Graben hinweg werden Signale von mehreren Stellen (1, 2, 3) der Spitze aufgenommen. Die einzelnen Signale der Stellen 1, 2 und 3 sind untereinander schematisch dargestellt. Als Gesamtsignal erhält man die untere Linie, die sich aus den einzelnen Signalen zusammensetzt.

in Anspruch nimmt, zum zweiten (und das ist zweifellos der größere Vorteil), daß die Spitzen mehrere Mikrospitzen besitzen (siehe Abb. 3.19), so daß im Falle eines Zusammenstoßes zwischen Spitze und Probe meistens eine weitere Mikrospitze übrigbleibt, um bei erneuter Annäherung wieder messen zu können. Im Laufe der Zeit wurden fast nur geknipste Spitzen verwendet, da die Erfolgsquote mit etwa 80 % (guter Spitzen) als recht positiv zu bewerten ist.

Eine ungenügend scharfe Spitze kann zu falschen Abbildungen führen. Soll beispielsweise eine Grabenstruktur abgebildet werden, deren Breite in etwa mit der Breite der Spitze übereinstimmt, wird die Abbildung nicht den Konturen der Oberfläche folgen, sondern den Konturen, die sich durch den Radius der Spitze ergeben. Ein solches Szenario ist in Abb. 3.20 dargestellt. Die Spitze erzeugt Signale, die von ihren seitlichen Extremitäten herrühren, so daß die Breite und Tiefe des Grabens nicht korrekt wiedergegeben werden.

Ein ähnlicher Abbildungsfehler tritt auf, wenn die Rückstellregelung falsch eingestellt ist. Bei falscher Einstellung der Rückstellregelung reagiert der Scanner nicht

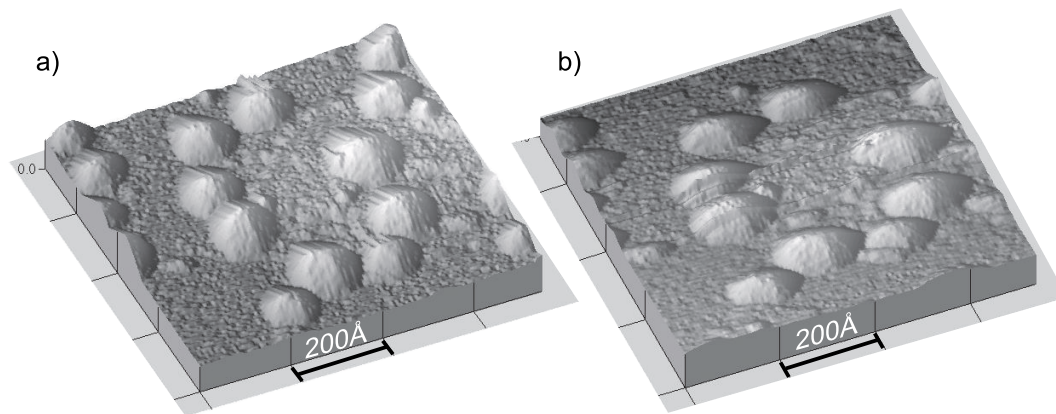


Abb. 3.21: Dreidimensionale Inseln, die mit zu geringer Empfindlichkeit der Rückstellregelung aufgenommen wurden. Die Form der Inseln scheint jeweils in Richtung der Rasterbewegung verlängert. a) Horizontale Rasterbewegung. b) Vertikale Rasterbewegung.

schnell genug auf Änderungen der Oberfläche. Auch dies soll an einem Beispiel erörtert werden. In Abb. 3.21 sind kleine InAs-Inseln dargestellt, die auf GaAs gewachsen wurden. Bei Abb. 3.21 a) wurde in vertikaler Richtung gerastert, bei Abb. 3.21 b) in horizontaler. In a) scheinen die Inseln von rundlicher (symmetrischer) Grundfläche zu sein, in b) sind sie hingegen in die Breite gezogen. Dieses ist mit einer zu langsamen Rückstellregelung zu erklären. Die Spitze ist längst über die Insel hinweg bewegt worden, ehe sie wieder auf die Substrathöhe abgesenkt wird. Daher scheinen die Inseln eine unterschiedliche Form zu besitzen, abhängig davon, welche Richtung die schnelle Rasterbewegung ist. Wird die Regelung jedoch zu stark eingestellt, kann es zu einer Übersteuerung führen, die sich durch Schwingungen bemerkbar macht. Dies tritt häufig an Stufenkanten auf, die daher einen Buckel auf der Oberseite aufweisen, und damit wird die Stufenhöhe nicht korrekt wiedergegeben.

Weitere Fehler können während des Meßvorganges aufgrund von Nichtlinearitäten des Piezos eintreten. So ist beispielsweise in Abb. 3.22 zu erkennen, daß die Reihen im oberen Bereich des Bildes gekrümmt verlaufen. Die Krümmung ergibt sich durch ein Wegdriften der Scanpiezos und ist keine Eigenschaft der Oberfläche. Das Bild zeigt die atomaren Reihen der GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion (vgl. Kap. 4.3). Ein solcher Fehler läßt sich nur dann erkennen, wenn von der Oberfläche viele Bilder aufgenommen werden. Zeigen sämtliche Bilder die gleichen Krümmungen, so ist das mit Sicherheit eine Eigenschaft der Oberfläche. In diesem Fall ist es nicht so. Keines der Bilder dieser

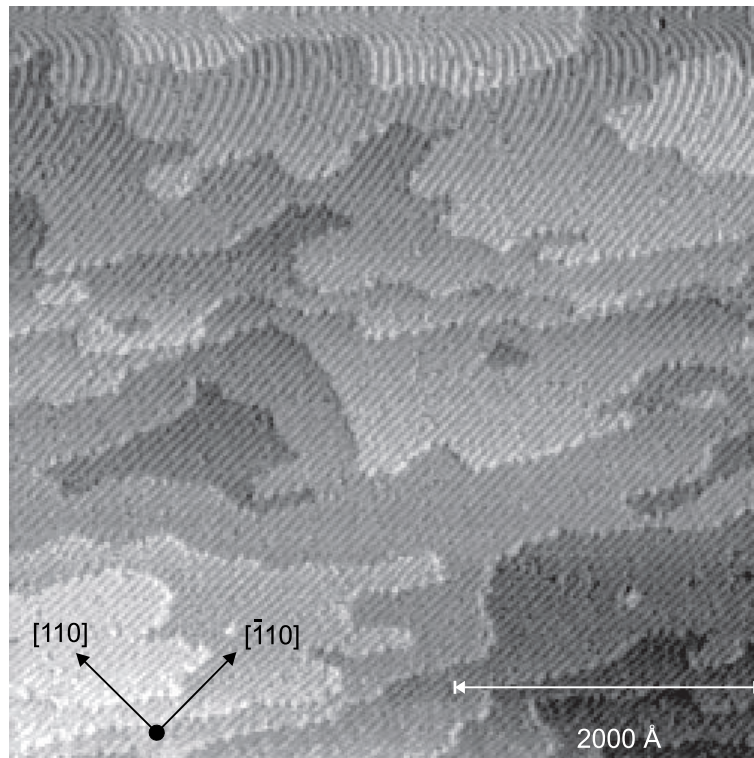


Abb. 3.22: STM-Bild der GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ -Oberfläche. Im Bild sind Terrassen zu sehen, auf denen atomare Reihen zu erkennen sind, die von der Rekonstruktion der Oberfläche herrühren. Das Bild demonstriert im oberen Bereich, daß die Piezodriften können und die atomaren Reihen einen krummlinigen Verlauf annehmen. $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$.

Oberfläche zeigte sonst diesen krummen Verlauf der Reihen.

Generell ist bei STM-Messungen immer zu beachten, daß eine Information der Oberfläche als Funktion der Abstände der Rasterpunkte wiedergegeben wird. Da die Auflösung der Spitze ein unkontrollierbarer Parameter ist, müssen die Abstände für jede Spitze neu geeicht werden. Nur dann werden Absolutwerte der Abstände auf der Oberfläche korrekt wiedergegeben.

Die Eichung des STM wurde mit Hilfe einer GaAs(110)-Oberfläche überprüft. Im oberen Bereich von Abb. 3.23 ist ein Übersichtsbild dargestellt, auf dem Terrassen zu erkennen sind und rechts daneben ein atomar aufgelöstes Bild, das auf einer Terrasse aufgenommen wurde. Anhand der gemessenen Höhe der Stufenkanten kann die Höheneinstellung überprüft werden. Problematisch wird es eher für die Größen parallel zur Oberfläche. Die Größe der Einheitszelle, wie sie sich aus der Messung ergibt, ist

3 Experimentelle Methoden

Bild	a)	b)	c)	d)	e)	f)	g)	h)
a [\AA]	5,97	7,17	5,82	5,76	6,97	6,69	6,76	5,94
b [\AA]	4,88	5,21	4,87	5,02	4,95	5,01	4,99	5,06

Tabelle 3.3: Gemessene Gitterkonstanten der GaAs(110) Oberfläche

$5,86 \times 4,85 \text{\AA}^2$. Die tatsächliche Größe der Einheitszelle ist $5,86 \times 4,85 \text{\AA}^2$. Die Messung wurde im Laufe des Tages wiederholt, und es ergaben sich immer wieder andere Größen, die sich teilweise um bis zu 20 % unterschieden haben. Einige Beispiele sind ebenfalls in der Abb. 3.23 a– h) eingefügt und die sich daraus ergebenden Größen der Einheitszelle in Tab. 3.3 zusammengefaßt. Dieses Ergebnis zeigt, daß das STM praktisch vor jeder Messung geeicht werden müßte, um Abstände korrekt angeben zu können. Da die Abstände der Einheitszelle beispielsweise mit Hilfe von LEED ermittelt werden können, ist es sinnvoller, die Einheitszelle im STM zu suchen und dann die Meßdaten entsprechend zu skalieren. Allerdings ist hierbei höchste Vorsicht geboten, da das STM nicht die Topographie der Oberfläche abbildet, sondern Ladungsdichten. So kann zum Beispiel die Größe eines As-Dimers um etwa 15 % größer abgebildet werden, als der geometrische Abstand der beiden As-Atome, aus denen das Dimer gebildet wird [97]. In Bildern, die keine atomare Auflösung aufzeigten, wie z.B. Übersichtsbilder von einigen $1000 \times 1000 \text{\AA}^2$, wurden viele Bilder aufgenommen und Abstände aus dem arithmetischen Mittel bestimmt.

Ein weiteres Merkmal von STM Messungen liegt in der Bearbeitung von Rohdaten. STM Meßdaten werden mit Hilfe eines Computers in topographische Abbildungen umgewandelt.

In Abb. 3.24 ist als Beispiel links eine Graustufen-Abbildung der Meßdaten gegenüber der bearbeiteten Version der Meßdaten einer Graphit-Oberfläche (HOPG, engl. *highly oriented pyrolytic graphite*) dargestellt. Hieraus wird deutlich, daß ein erheblicher Anteil an Datenverarbeitung notwendig ist, um die Informationen aus den Messungen hervorzuheben. Dabei ist allerdings stets zu beachten, daß nur Artefakte entfernt werden, die eindeutig nicht zur Oberfläche gehören. Solche Artefakte können sich zum Beispiel aus auf der Spitze adsorbierten Fremdatomen ausbilden, die in den Messungen zu Streifen führen können.

Ein weiterer möglicher Artefakt ergibt sich durch mechanische oder elektronische Schwingungen, die sich den Bildern überlagern. Solche Effekte lassen sich durch Ver-

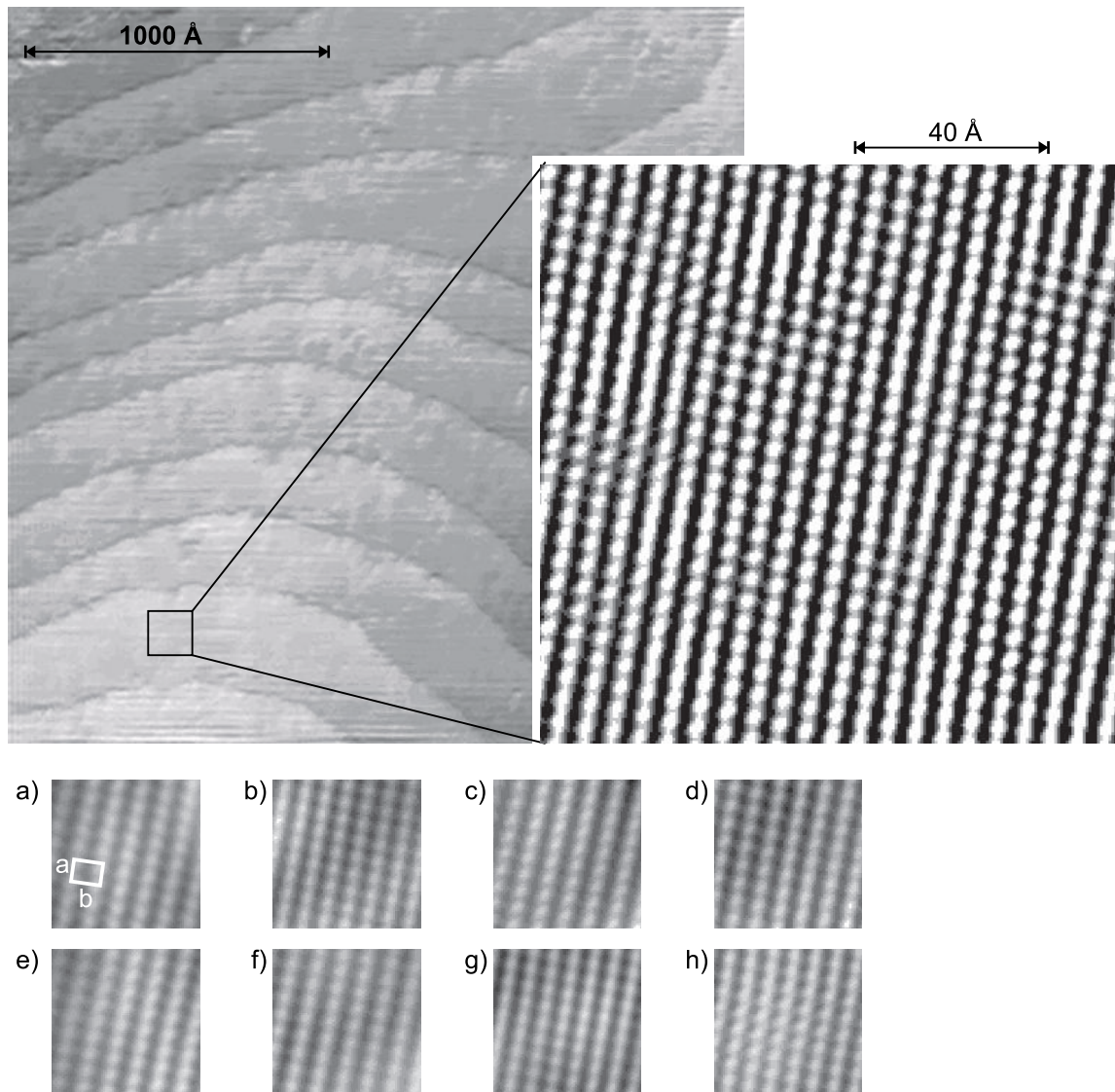


Abb. 3.23: STM-Bilder der GaAs(110)-Oberfläche zur Eichung des STM. *Links oben*: Übersichtsbild. $2500 \times 2500 \text{ \AA}^2$, $U = -2,25 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$. *Rechts oben*: Atomar aufgelöstes Bild auf einer Terrasse. $120 \times 120 \text{ \AA}^2$, $U = -3,5 \text{ V}$, $I = 0,24 \text{ nA}$. *Unten*: a-h) Bilder mit atomarer Auflösung, die mit derselben Spitze im Laufe des Tages aufgenommen wurden. $40 \times 40 \text{ \AA}^2$, $U = -3,5 \text{ V}$, $I = 0,24 \text{ nA}$.

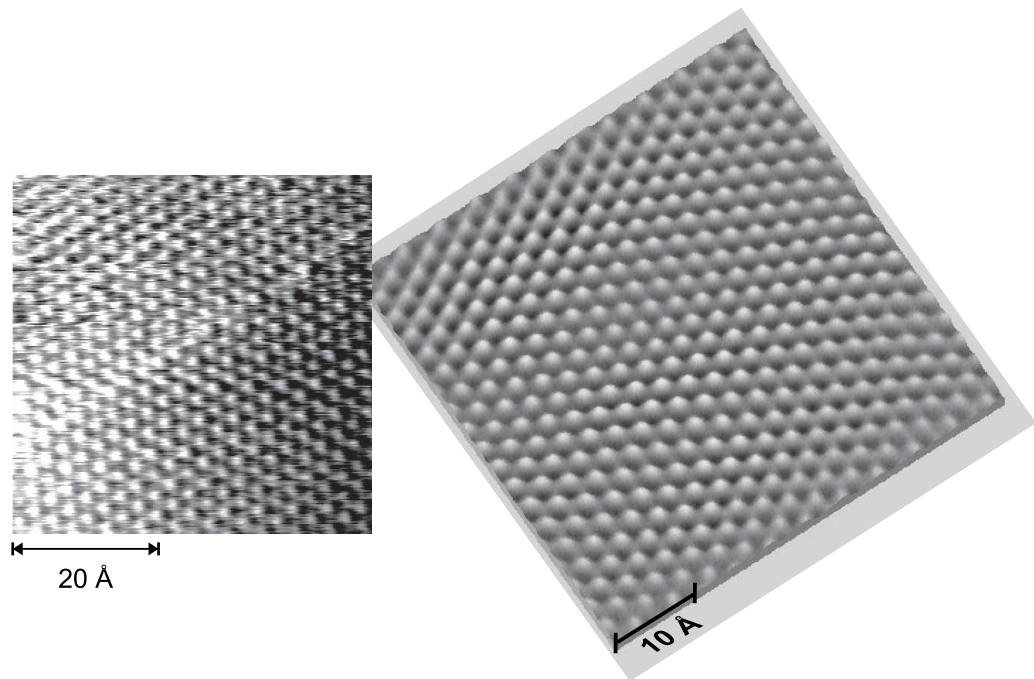


Abb. 3.24: STM-Bild einer Graphit (HOPG)-Oberfläche. *Links*: Graustufendarstellung der Meßdaten. *Rechts*: Bearbeitetes Bild derselben Meßdaten. $50 \times 50 \text{ \AA}^2$, $U = -0,05 \text{ V}$, $I = 1,3 \text{ nA}$.

gleich von Hin- und Rückbildern entdecken, die dann spiegelsymmetrisch erscheinen. Störende Frequenzen lassen sich meist durch eine Fourier-Analyse der Rasterlinien ermitteln und wegschneiden. Dabei besteht aber stets die Gefahr, daß auch tatsächlich von der Oberfläche stammende Signale ebenfalls gelöscht werden. Eine detaillierte Darstellung der gängigen Verfahren, um die Bilder verbessert darzustellen, ist in den Refn. [77, 98] zu finden.

4 Die GaAs(001)-Oberfläche

4.1 Einführung

Die GaAs(001)-Oberfläche ist nicht zuletzt aufgrund ihrer technologischen Bedeutung die am häufigsten untersuchte GaAs-Oberfläche. Nahezu alle auf GaAs basierenden Bauelemente werden auf (001)-orientierten Substraten hergestellt. Aus oberflächenphysikalischer Sicht ist sie eine höchst interessante Oberfläche, die auf unterschiedlichste Art und Weise rekonstruiert [29]. Ihre Oberflächenrekonstruktionen erstrecken sich von extrem As-reichen Phasen bis hin zu sehr Ga-reichen Phasen [99]. Diese sind zum Teil immer noch Gegenstand intensiver Forschung [100]. Die zahlreichen Rekonstruktionen können mit MBE durch Variation der Präparationsbedingungen hergestellt werden. Aus diesem Grund eignet sich die (001)-Oberfläche auch als Testfläche für eine MBE-Anlage und neue Untersuchungsmethoden. Daher wurden auch im Rahmen dieser Arbeit die GaAs(001)-Oberflächen untersucht, insbesondere wurden unterschiedliche MBE-Präparationsbedingungen und Abkühlungsverfahren der Präparationen nach dem Wachsen ausprobiert und anschließend mit dem UHV-STM untersucht. Darüber hinaus lassen sich aufgrund der zahlreichen Vergleichsmöglichkeiten mit der Literatur die STM-Daten kalibrieren. Ferner konnten Erfahrungswerte für Tunnelbedingungen für die verschiedenen Bindungskonfigurationen der Oberflächenatome gewonnen werden.

Dieses Kapitel dient in erster Linie dem Vergleich mit anderen Arbeiten und nicht dem Gewinn neuer Kenntnisse. Es werden daher einige ausgewählte Rekonstruktionen vorgestellt, aber auf eine umfassende Diskussion verzichtet. Ein genaues Studium der As-reichen GaAs(001)-Oberflächen war jedoch notwendig als Vorstudie für die Wachstumsuntersuchungen von InAs auf der GaAs(001)-Oberfläche.

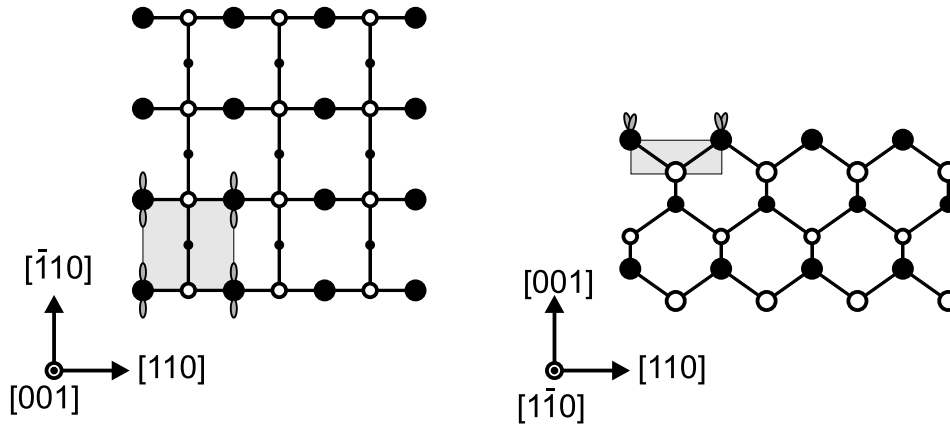


Abb. 4.1: Schematische Auf- und Seitenansicht der GaAs(001)-Oberfläche. Das grau unterlegte Quadrat gibt die Größe der Einheitszelle wieder. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

4.2 Oberflächengeometrie

Die bulk-truncated GaAs(001)-Oberfläche ist in Abb. 4.1 schematisch dargestellt. Ihre Einheitszelle ist quadratisch ($4 \times 4 \text{ \AA}^2$) und enthält nur Atome mit zwei hängenden Bindungen. Die Seitenansicht verdeutlicht ihre herausragende Orientierung im Kristall: Die Oberfläche schneidet stets eine Lage mit jeweils nur einem Element des Verbindungshalbleiters. In dieser Darstellung ist der Kristall so geschnitten, daß die As-Atome die oberste Lage bilden. Aufgrund der kovalenten Bindung des GaAs lassen sich bereits einige hilfreiche Aussagen bezüglich der Periodizität einer Rekonstruktion treffen. Im Falle einer doppelten Periode entlang $[\bar{1}10]$ (bzw. $[1\bar{1}0]$) ist davon auszugehen, daß sie von As-Dimeren verursacht wird. Eine Periodizität senkrecht dazu, d.h. entlang $[110]$ bzw. $[\bar{1}\bar{1}0]$, sollte auf Ga-Dimere schließen lassen. Beide Aussagen sind natürlich nur dann gültig, falls es nicht zur Bildung einer Doppellage (von gleichen Elementen) kommt.

4.3 GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$

4.3.1 Einführung

Die GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ - ist mit Abstand die am häufigsten untersuchte GaAs-Oberfläche. Trotzdem ist es erst im letzten Jahr (1999) erstmalig gelungen, ihre Struktur sowohl

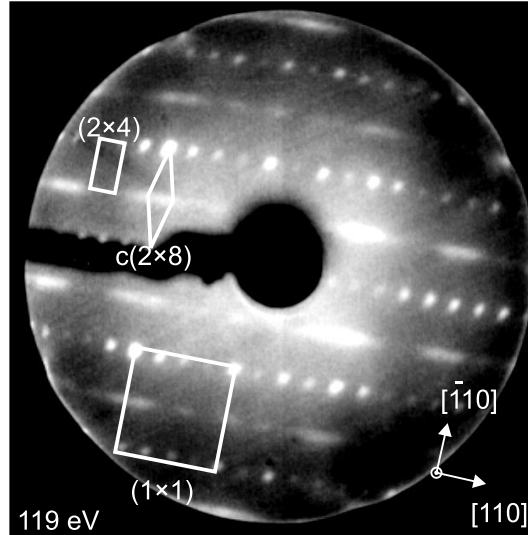


Abb. 4.2: LEED-Reflexmuster der GaAs(001) β $2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion. Die Einheitszellen der (1×1) -*bulk-truncated*, der rekonstruierten (2×4) - sowie $c(2 \times 8)$ -Strukturen sind durch weiße Linien markiert.

im Experiment und als auch theoretisch zu bestimmen [101]. Diese Veröffentlichung hat dementsprechend für sehr viel Furore gesorgt [102].

Die GaAs(001) β $2(2 \times 4)$ ist die gängige Wachstumsoberfläche für MBE und definiert quasi die Standard-Präparationsbedingungen für MBE-Wachstum von GaAs. Die Präparation dieser Oberfläche erfolgte in dieser Arbeit nach den im Kap. 3.2 beschriebenen Methoden.

4.3.2 LEED

Ein typisches LEED-Reflexmuster der GaAs(001) β $2(2 \times 4)$ ist in Abb. 4.2 gezeigt. Deutlich ist eine Vielzahl von scharfen Reflexen zu beobachten, die auf eine wohlgeordnete Struktur hinweisen. Allerdings sind die Überstruktureflexe der $2\times$ -Periode entlang $[110]$ verschmiert und erscheinen als Streifen. Diese Form der Überstruktureflexe läßt auf eine eindimensionale Unordnung entlang $[\bar{1}10]$ auf der Oberfläche schließen. Die Reflexe der $4\times$ -Periode erscheinen dagegen scharf. Diese Beobachtung läßt sich durch eine Koexistenz von (2×4) - und $c(2 \times 8)$ -Strukturen auf der Oberfläche erklären [103]. Abb. 4.3 zeigt ein schematisches Reflexmuster für eine (2×4) - (linke Seite) sowie eine $c(2 \times 8)$ -Struktur (rechte Seite). Treten beide Strukturen nebeneinander auf, so ergibt sich eine Situation, wie sie in der Mitte des Bildes zu sehen ist.

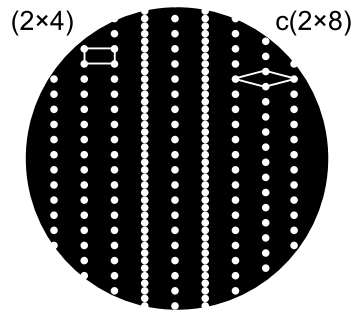


Abb. 4.3: Schematische Darstellung eines LEED-Beugungsbildes für eine $(2 \times 4)/c(2 \times 8)$ -Mischstruktur. Linkes Teilbild: (2×4) -Struktur; rechtes Teilbild: $c(2 \times 8)$ -Struktur; Mitte: Mischstruktur.

Während die Reflexe der $4 \times$ -Periode für beide Strukturen übereinstimmen, treten die Reflexe der $8 \times$ -Periode der zentrierten Struktur genau zwischen den $2 \times$ -Reflexen der (2×4) -Struktur auf. Die dichte Reflexfolge der $4 \times / 8 \times$ -Periode führt daher zum streifigen Erscheinen der Überstrukturreflexe im LEED-Beugungsbild.

Trotz des gemeinsamen Auftretens von (2×4) - und $c(2 \times 8)$ -Rekonstruktionen wird, wie auch in der Literatur üblich, im folgenden die einfache Notation (2×4) weiterverwendet werden. Es wird sich in den folgenden Abschnitten herausstellen, daß es sich ohnehin um die gleiche Struktur handelt, die lediglich zwei mögliche Anordnungen der gleichen Strukturelemente aufweist.

4.3.3 STM

Abb. 4.4 zeigt eine $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$ große Fläche der GaAs(001) β 2(2 \times 4)-Oberfläche. Das STM-Bild zeigt weit ausgedehnte Terrassen, auf denen auch einige ebenfalls sehr ausgedehnte Inseln zu beobachten sind. Die Stufenhöhe zwischen zwei Terrassen beträgt $2,8 \text{ \AA}$, was dem Höhenunterschied zwischen der ersten und dritten atomaren Lage entspricht (vgl. Abb. 4.1). Ein vergrößerter Ausschnitt einer Terrasse ist in Abb. 4.5 dargestellt. Auf diesem Bild lassen sich Reihen entlang $[\bar{1}10]$ erkennen, die im Abstand von 16 \AA angeordnet sind. Dieser Abstand entspricht genau der im Beugungsbild beobachteten vierfachen Periode. Die Ausrichtung der Reihen deutet bereits an dieser Stelle an, daß sie aus As-Dimeren gebildet werden, wie schon im einführenden Abschnitt (4.2) erwähnt wurde.

Die atomare Struktur läßt sich anhand des hochaufgelösten Bildes diskutieren,

4 Die GaAs(001)-Oberfläche

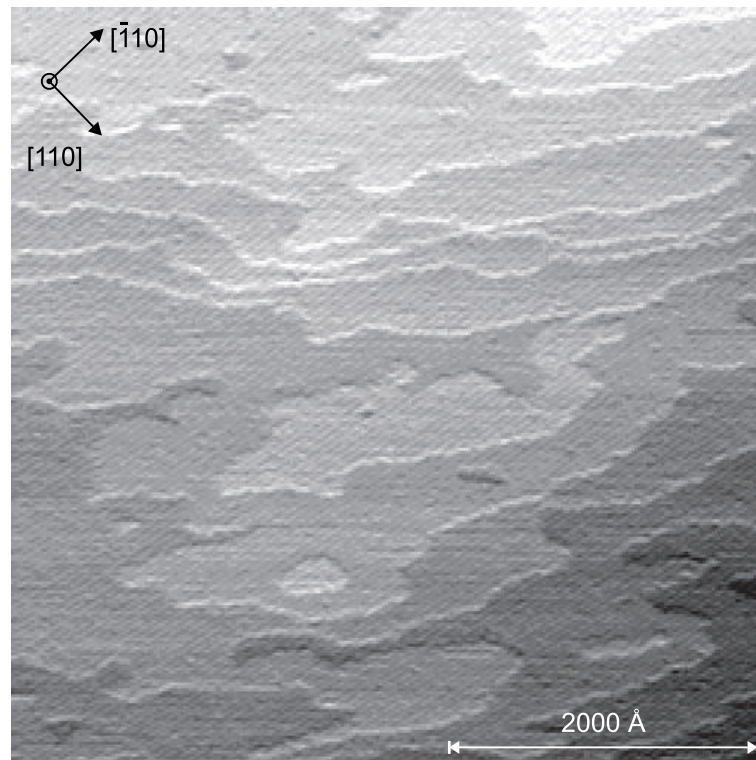


Abb. 4.4: STM-Bild der GaAs(001) $\beta 2 \times 4$ -Oberfläche. $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$.

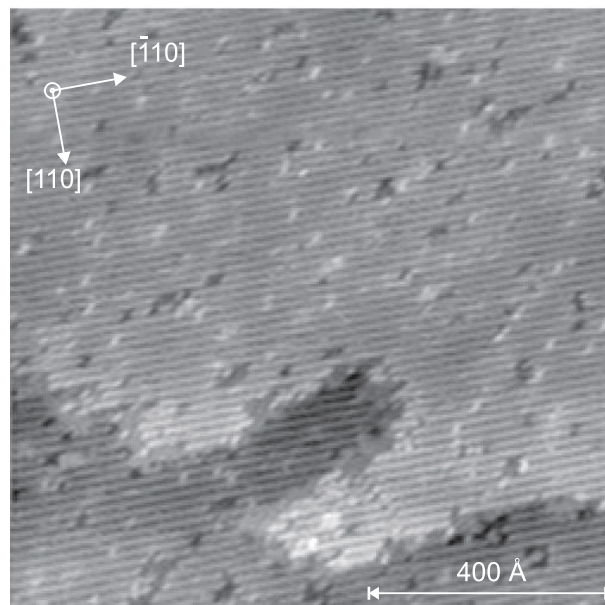


Abb. 4.5: STM-Bild einer Terrasse der GaAs(001) $\beta 2 \times 4$ -Oberfläche. $1000 \times 1000 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,11 \text{ nA}$.

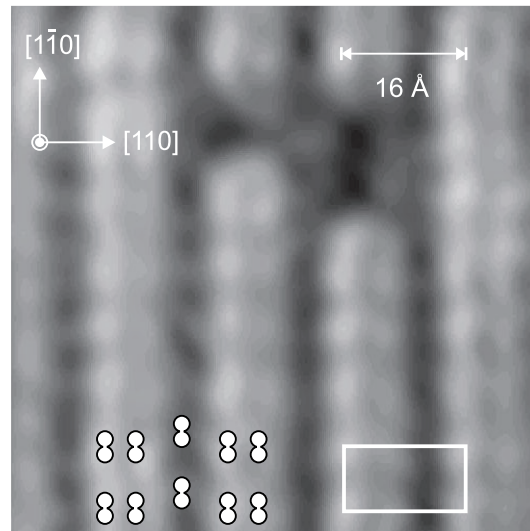


Abb. 4.6: Hochauflösendes STM-Bild der GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion. Die weißen Kreise geben schematisch die Position der As-Dimere wieder. Eine Einheitszelle ist mit einem weißen Rechteck markiert. $70 \times 70 \text{ \AA}^2$, $U = -2,65 \text{ V}$, $I = 0,11 \text{ nA}$.

das in Abb. 4.6 dargestellt ist. Hier ist die Struktur der Reihen zu erkennen. Sie werden gebildet aus zwei unmittelbar nebeneinander stehenden länglichen Buckeln, die entlang $[1\bar{1}0]$ im Abstand von 8 \AA angeordnet sind. Dieser Abstand entspricht genau der zweifachen Periodizität, die im Elektronenbeugungsbild beobachtet wurde. Sowohl die Abmessungen wie auch die Ausrichtung der Buckel lassen darauf schließen, daß die Buckel As-Dimere sind. Im Graben zwischen den Reihen ist ebenfalls eine zweifache Periodizität zu beobachten, was auf ein weiteres As-Dimer im Graben hindeutet.

4.3.4 Strukturmodell

Das Strukturmodell der GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Oberfläche geht auf Chadi [104] zurück und ist in Abb. 4.7 dargestellt. Das Modell besteht aus As-Dimeren, die zu Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ angeordnet sind. Dabei treten entlang $[110]$ in der obersten Lage zwei As-Dimere abwechselnd mit zwei Dimer-Fehlstellen auf. Durch diese Fehlstellen bildet sich ein Graben, in dem in der dritten Lage ein weiteres As-Dimer gebildet wird. Die Einheitszelle mißt $8 \times 16 \text{ \AA}^2$ und erstreckt sich in der Tiefe über drei atomare Lagen. Dieses Strukturmodell wurde bereits durch theoretische Rechnungen, die von mehreren Gruppen durchgeführt wurden, als Niederenergiefläche bestätigt und gegenüber anderen Modellen vorgezogen [97, 105, 106].

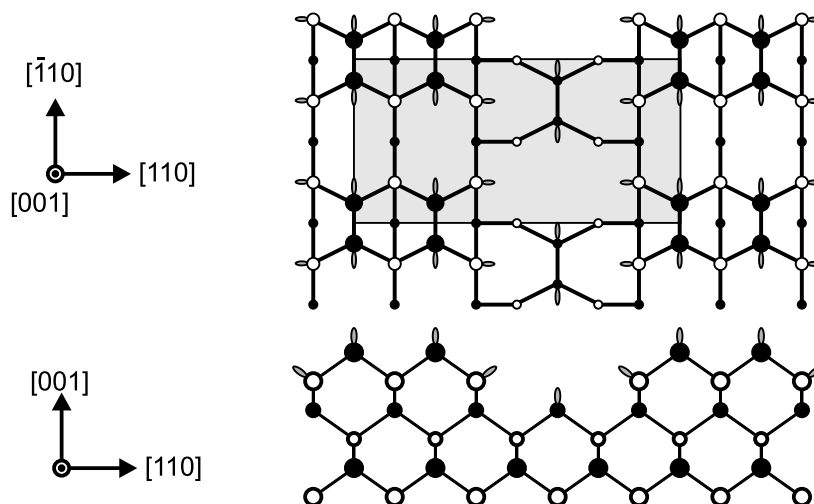


Abb. 4.7: Schematisches Strukturmodell der $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion von GaAs(001) nach Chadi [104]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

Auch die zentrierte Struktur $c(2 \times 8)$ läßt sich aus der $\beta 2(2 \times 4)$ herleiten. Durch das Verschieben einer Reihe von As-Dimeren der (2×4) -Struktur entlang $[1\bar{1}0]$ um eine Gitterkonstante entsteht eine Struktur der doppelten Periodizität, wie sie in Abb. 4.8 dargestellt ist. Pashley *et al.* [103] konnten basierend auf STM-Messungen das Entstehen der zentrierten Struktur durch Defekte in den Dimer-Reihen erklären. (Es sei an dieser Stelle allerdings angemerkt, daß die Autoren von einem Drei-Dimer-Modell ausgegangen sind.) Sie beobachteten Versetzungen von As-Dimer-Reihen um eine Gitterkonstante entlang $[110]$, wodurch die Reihen zusätzlich entlang $[1\bar{1}0]$ versetzt werden können. Dies führt dann dazu, daß benachbarte As-Dimere außer Phase geraten und die zentrierte Struktur doppelter Periodizität bilden.

Eine andere Möglichkeit ergibt sich durch Fehlstellen von As-Atomen. Fehlen in einer Reihe As-Atome, bilden sich die As-Dimere zwischen den nächstfolgenden As-Atomen. Diese Möglichkeit konnte im Rahmen dieser Arbeit weitaus häufiger beobachtet werden. Zunächst einmal sind in der Abb. 4.5 zahlreiche Defekte zu sehen, die sich durch die dunklen Stellen in den Reihen bemerkbar machen. Abb. 4.9 zeigt ein Bild, auf dem mehrere Defekte vergrößert dargestellt sind. Der große Defekt (Mitte links), der sich über zwei Reihen erstreckt, zeigt eine Stelle, an der die zweite und die dritte As-Dimer-Reihe außer Phase geraten. Die erste und die zweite Reihe zeigen die (2×4) -Struktur auf, wie anhand der markierten Einheitszelle erkennbar wird. Die

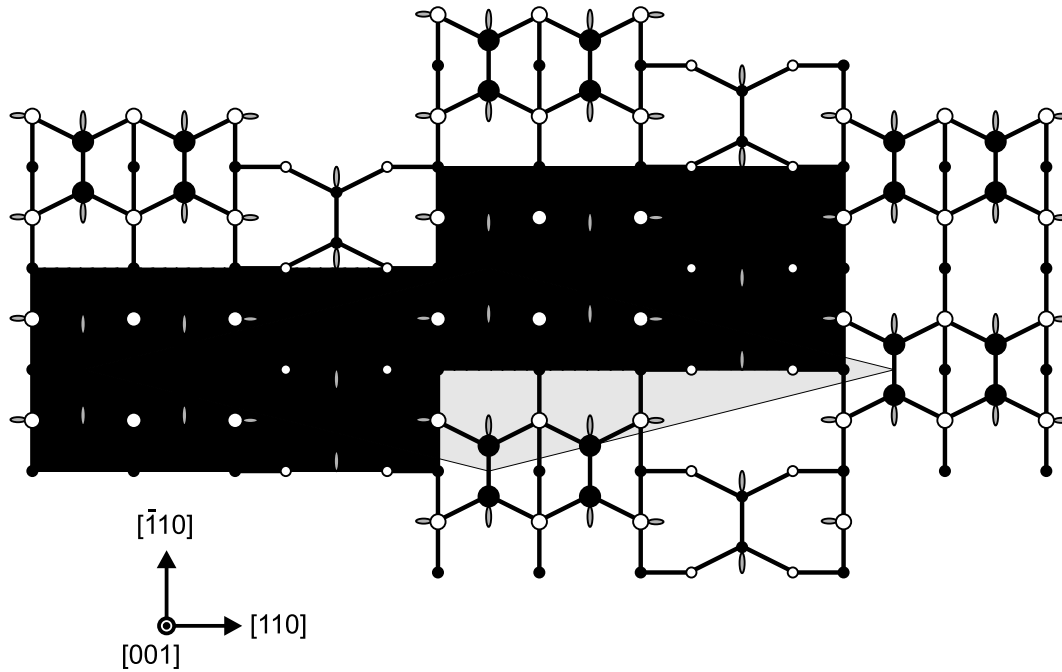


Abb. 4.8: Schematisches Strukturmodell der $\beta 2c(2 \times 8)$ -Rekonstruktion der GaAs(001)-Oberfläche. Das grau unterlegte Parallelogramm markiert die Einheitszelle. Die schraffierten Rechtecke zeigen die Einheitszellen der $\beta 2(2 \times 4)$ -Strukturen, aus denen sich durch eine Verschiebung entlang $[1\bar{1}0]$ die zentrierte Struktur ergibt. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

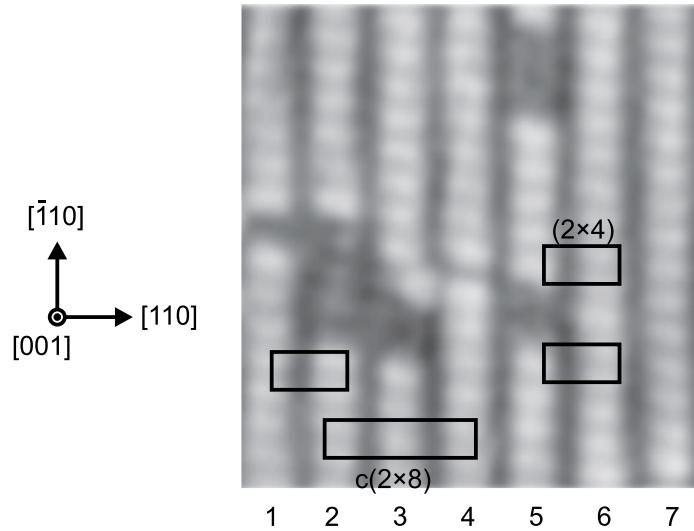


Abb. 4.9: Hochauflösendes STM-Bild der GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion. Die Defekte (dunkle Stellen) können zu einer Verschiebung der As-Dimer-Reihen führen, so daß die zentrierte Struktur mit einer $c(2 \times 8)$ -Periodizität entsteht. Die Einheitszellen beider Strukturen sind durch schwarze Linien gekennzeichnet. $80 \times 80 \text{ \AA}^2$, $U = -2,65 \text{ V}$, $I = 0,11 \text{ nA}$.

dritte Dimer-Reihe beginnt im Vergleich zur zweiten Dimer-Reihe allerdings etwas versetzt (4 \AA nach unten), was zu einer zentrierten Struktur führt. Im Bild oberhalb des großen Defektes zeigt die dritte Reihe eine Versetzung der Dimere entlang $[110]$. Diese Versetzung setzt sich allerdings nicht in der vierten Reihe fort, wie Pashley *et al.* [103] beobachtet haben, sondern es bildet sich eine Fehlstelle von As-Dimeren innerhalb der gleichen Reihe. Im Defekt der fünften Dimer-Reihe fehlen gleich zwei As-Dimere, so daß Reihen fünf und sechs nicht aus der Phase geraten, wie durch die markierten Einheitszellen angedeutet wird.

Insgesamt ist trotz dieser Unordnung die GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ eine sehr gut geordnete Oberfläche mit ausgedehnten Terrassen, weshalb sie für die technologischen Anwendungen von großer Bedeutung ist. Ein weiteres Merkmal dieser Rekonstruktion ist der sehr große Stabilitätsbereich [99]. Diese Rekonstruktion bleibt bei Variation der Wachstumsbedingungen (z.B. Temperatur und molekulare Flüsse) über weite Bereiche erhalten.

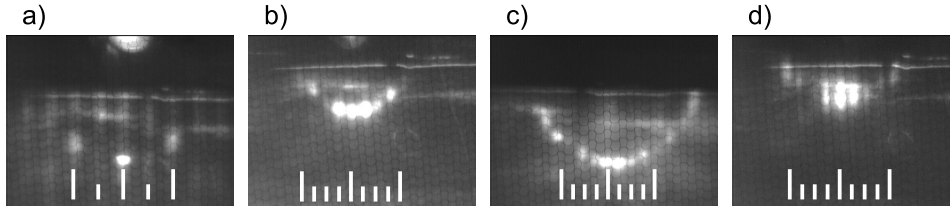


Abb. 4.10: RHEED-Reflexmuster der verschiedenen Phasen der GaAs(001)(2×4)-Oberfläche. a) Zweifache Periodizität im $[110]$ -Azimuth; Vierfache Periodizität im $[\bar{1}10]$ -Azimuth: b) $\alpha(2 \times 4)$, c) $\beta_2(2 \times 4)$, d) $\gamma(2 \times 4)$. Die Position der gebeugten Strahlen ist durch weiße Linien gekennzeichnet. $E = 14$ keV.

4.4 Weitere (2×4) -Strukturen

Neben der oben vorgestellten $\beta_2(2 \times 4)$ -Struktur sind weitere Modelle (2×4) vorgeschlagen worden, von denen zwei in den Abb. 4.11 und Abb. 4.13 skizziert sind. Der Grund für die Existenz verschiedener Strukturmodelle liegt zum einem darin, daß es theoretisch mehrere Modelle geben könnte, die mit der Elektronenzählregel im Einklang sind und daher stabil sein sollten. Ein weiterer Grund ist experimenteller Natur. Für die (2×4) -Struktur werden im RHEED-Beugungsmuster unterschiedliche Intensitäten in den Überstrukturreflexen beobachtet, die von präparativen Bedingungen abhängen. Daher wird zwischen drei verschiedenen Phasen der (2×4) -Struktur unterschieden. Zum Vergleich und für die weitere Diskussion sind in Abb. 4.10 die beobachtbaren RHEED-Intensitäten für die verschiedenen (2×4) -Phasen dargestellt.

Unter Ga-reichen Bedingungen, d.h. bei erhöhter Proben temperatur, wird beobachtet, daß die Intensität des $2/4$ -Reflexes sowie die des $3/4$ -Reflexes gegenüber dem $1/4$ -Reflex geringer ist. Erklärt wird diese Beobachtung dadurch, daß die Struktur ungeordneter wird. Die As-Dimer-Reihen werden kürzer, und es treten Versetzungen in den Dimer-Reihen auf, die zur Erniedrigung der RHEED-Reflexintensitäten führen. Darüber hinaus geht die Struktur in eine As ärmere Struktur über, die in Abb. 4.11 dargestellt ist und von Farrell und Palmstrøm [107] vorgeschlagen wurde. Wie die $\beta_2(2 \times 4)$ -Struktur besteht die $\alpha(2 \times 4)$ -Struktur aus As-Dimeren in der obersten Lage, die zu Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ angeordnet sind. Das As-Dimer im Graben ist allerdings hierbei nicht mehr vorhanden. Statt dessen wird ein Ga-Atom in der zweiten Lage adsorbiert, das eine Bindung zum nächsten Ga-Atom eingeht. Das zusätzliche Ga-Atom nimmt einen sp^2 -Hybridzustand an.

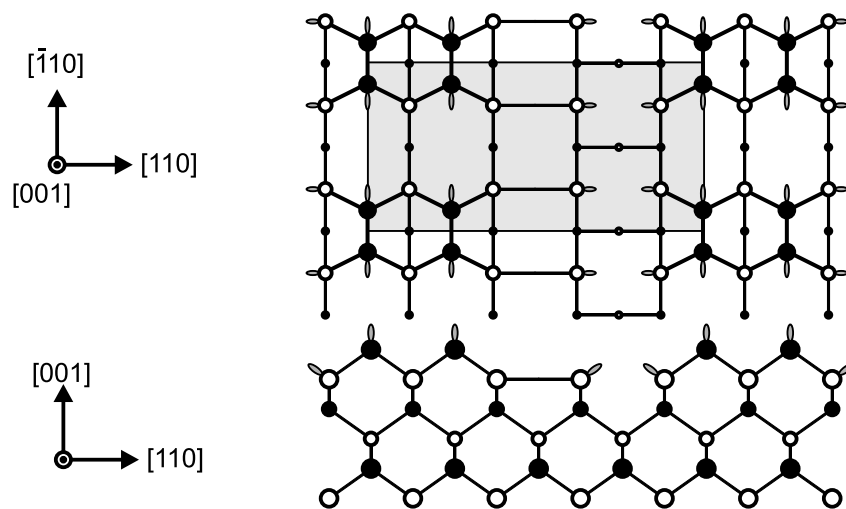


Abb. 4.11: Schematisches Strukturmodell einer $\alpha(2 \times 4)$ -Rekonstruktion der GaAs(001)-Oberfläche nach Farrell und Palmström [107]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

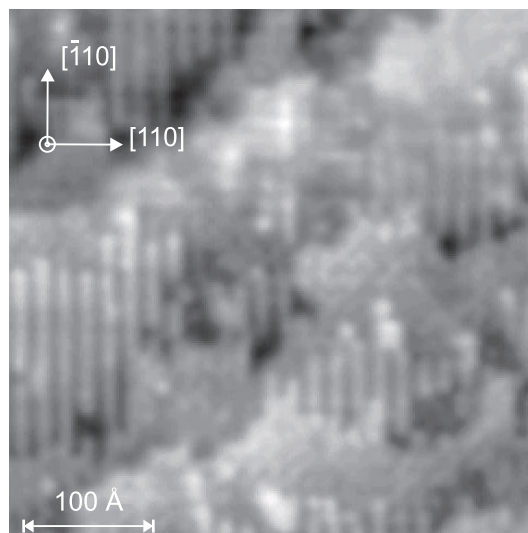


Abb. 4.12: STM-Bild der GaAs(001) $\alpha(2 \times 4)$ -Oberfläche. $450 \times 450 \text{ \AA}^2$, $U = -2,0 \text{ V}$, $I = 0,6 \text{ nA}$.

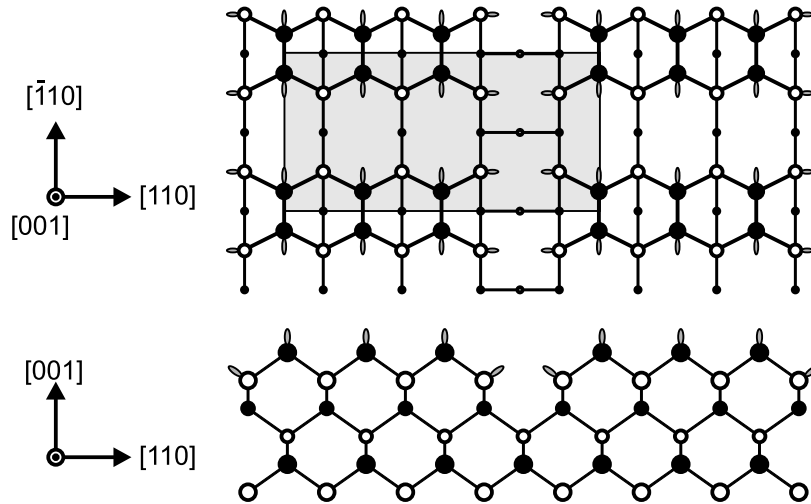


Abb. 4.13: Schematisches Strukturmodell der $\beta(2 \times 4)$ -Rekonstruktion von GaAs(001) nach Chadi [104]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

Ein STM-Bild dieser Phase ist in Abb. 4.12 dargestellt. Tatsächlich ist zu erkennen, daß die Dimer-Reihen sehr viel kürzer sind als in der $\beta 2(2 \times 4)$ -Phase. Zudem sind an den Stufenkanten Bereiche erkennbar, die offenbar ungeordnet sind. In diesen Bereichen treten Ga-Atome an die Oberfläche. Avery *et al.* [108] konnten zeigen, daß As-Dimere bevorzugt an den Stufenkanten desorbieren und daher diese Ga-reiche Bereiche an den Stufenkanten hinterlassen. Dieses Resultat wurde auch von Behrend *et al.* [109] an GaAs(001) mit STM und von Yamaguchi und Horikoshi [36] an InAs(001) mit RHEED- und Monte Carlo-Simulationen beobachtet.

Ein weiteres Strukturmodell, das in Konkurrenz zur $\beta 2(2 \times 4)$ -Struktur diskutiert wurde, ist das $\beta(2 \times 4)$ -Modell von Chadi [104], das in Abb. 4.13 dargestellt ist. Dieses Modell sollte die gleiche Phase wie die $\beta 2(2 \times 4)$ erklären, die im RHEED-Beugungsmuster gleiche Intensität für alle Überstruktureffekte aufweist. Das Strukturmodell enthält drei As-Dimere, die zu einer Reihe entlang $[1\bar{1}0]$ angeordnet sind und eine Dimer-Fehlstelle, die zu einem Graben zwischen den Dimer-Reihen führt. Dieses Modell galt lange Zeit als das korrekte Modell für die GaAs(001) (2×4) -Oberfläche. Allerdings zeigten sowohl Experimente [101, 110] als auch theoretische Rechnungen [101], daß dieses Modell in der Natur nicht existiert.

Für etwas As-reichere Präparationsbedingungen schlugen Farrell und Palmstrøm ein weiteres Modell vor, das mit $\gamma(2 \times 4)$ bezeichnet wurde [107]. Im RHEED-Reflexmuster

wird ähnlich wie in der α -Phase eine Verringerung der Intensität der Überstrukturreflexe beobachtet. Das Strukturmodell entsteht aus der $\beta(2 \times 4)$ -Struktur durch ein zusätzlich auf As-Atome adsorbiertes As-Dimer, dessen As-As-Bindung entlang $[110]$ gerichtet ist.

Hashizume *et al.* [110, 111] und Avery *et al.* [112, 113] konnten aus STM-Beobachtungen und dynamischen RHEED-Simulationen [110] allerdings die Abnahme in der Intensität des RHEED-Reflexmusters durch eine ungeordnete $\beta 2(2 \times 4)$ -Struktur erklären. Dabei treten eine Vielzahl von Versetzungen in den Dimer-Reihen auf und zusätzlich, anders als in der $\alpha(2 \times 4)$ -Phase, tritt der Graben zwischen den Dimer-Reihen in unterschiedlichen Breiten auf. Daher wird diese Phase zwar als Übergangsphase zwischen der (2×4) - und der $c(4 \times 4)$ -Rekonstruktion verstanden, jedoch nicht im Sinne des von Farrell und Palmstrøm [107] vorgeschlagenen Strukturmodells.

4.5 GaAs(001)c(4×4)

4.5.1 Präparation

Die GaAs(001)c(4×4)-Rekonstruktion ist die As-reichste Phase der GaAs(001)-Oberfläche. Sie kann präpariert werden, indem eine GaAs(001)(2×4)-Oberfläche im As-Strahl langsam abgekühlt wird. Der Übergang zur c(4×4)-Struktur kann mit Hilfe von RHEED verfolgt werden. Bei einer Proben temperatur von etwa 475 °C ist im $[1\bar{1}0]$ -Azimuth ein Übergang von einer 4×- zu einer 2×-Periodizität zu beobachten. Abb. 4.14 zeigt eine Serie von RHEED-Reflexmustern bei sinkender Temperatur für diesen Azimuth, die den Übergang deutlich belegt. Das Reflexmuster im $[110]$ -Azimuth zeigt weiterhin die zweifache Periodizität. Wird die Probe um 45° gedreht, erscheint ein Reflexmuster, das eine 4×-Periodizität aufweist.

4.5.2 LEED

Ein typisches LEED-Beugungsbild ist in Abb. 4.15 dargestellt. Das Bild zeigt sehr viele scharfe Reflexe, die auf eine sehr gute Oberflächenbeschaffenheit hindeuten. Die Einheitszellen der *bulk-truncated* und der rekonstruierten Einheitszellen sind durch die weißen Quadrate markiert. Hieraus läßt sich nun feststellen, daß die rekonstruierte Einheitszelle um 45° gegenüber der Einheitszelle der *bulk-truncated* Struktur rotiert

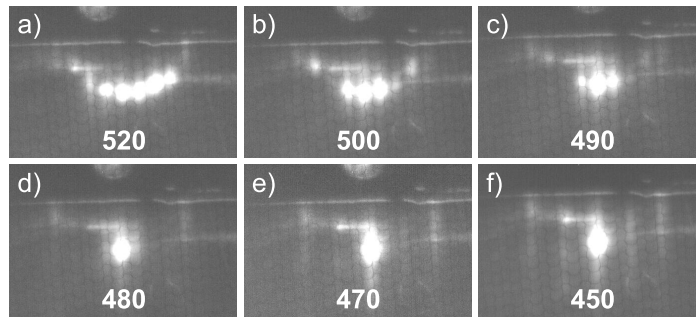


Abb. 4.14: Serie von RHEED-Reflexmustern bei abnehmender Temperatur im $[1\bar{1}0]$ -Azimuth. Die $4\times$ -Periode der $\beta 2(2 \times 4)$ -Struktur geht in eine $2\times$ -Periode über. Die Zahlen geben die Probestemperatur in $^{\circ}\text{C}$ an. $E = 13 \text{ keV}$.

ist. Daher sollte die Periodizität der Rekonstruktion korrekterweise mit $(\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^{\circ}$ bezeichnet werden. In der Literatur hat sich allerdings die kürzere $c(4 \times 4)$ -Notation durchgesetzt und soll auch hier weiterhin verwendet werden.

4.5.3 STM

Abb. 4.16 zeigt einen $500 \times 500 \text{ \AA}^2$ -Bereich der GaAs(001)c(4 × 4)-Oberfläche, wie sie mit einem STM abgebildet wird. Im Bild sind Terrassen zu erkennen, die durch $2,8 \text{ \AA}$ hohe Stufen getrennt werden. Auf den Terrassen sind rechteckige Gebilde erkennbar, die zu einem ‘Mauerwerkmuster’ angeordnet sind. In Abb. 4.17 ist ein STM-Bild dargestellt, das auf einer Terrasse aufgenommen wurde. Hier sind die ‘Bausteine’, die das ‘Mauerwerk’ zusammensetzen, deutlich zu sehen. Die Abmessungen der ‘Bausteine’ sind $8 \times 12 \text{ \AA}^2$. Das ‘Mauerwerk’ lässt sich durch eine $16 \times 16 \text{ \AA}^2$ große Einheitszelle aufbauen, die eine zentrierte Struktur kennzeichnet, aber nicht primitiv ist. Die primitive Einheitszelle ist gegenüber der zentrierten rotiert und nur halb so groß. Beide Einheitszellen sind in der Abbildung eingezeichnet.

4.5.4 Strukturmodell

Das Strukturmodell für die GaAs(001)c(4 × 4)-Rekonstruktion geht auf Biegelsen *et al.* [114] zurück und ist in Abb. 4.18 dargestellt. Das Modell geht aus der *bulk-truncated* (As-terminierten) Oberfläche hervor, indem zusätzlich jeweils Gruppen von drei As-Dimeren adsorbiert werden, um die hängenden Bindungen der darunterliegenden As abzusättigen. Diese Gruppen bilden die in den STM-Bildern beobachteten ‘Baustei-

4 Die GaAs(001)-Oberfläche

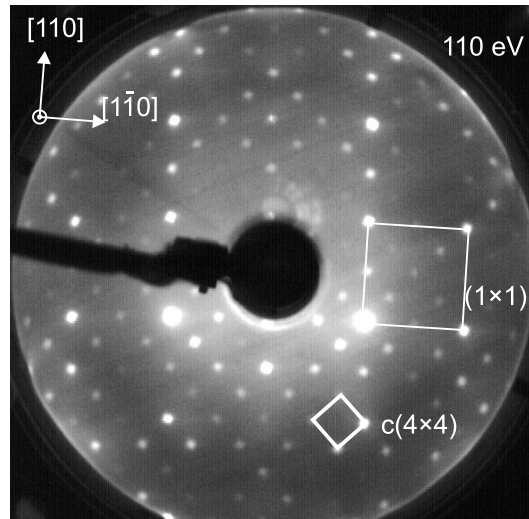


Abb. 4.15: LEED-Reflexmuster der GaAs(001)c(4 × 4)-Rekonstruktion. Die Einheitszellen der (1 × 1) *bulk-truncated*, sowie die der rekonstruierten c(4 × 4)-Struktur sind durch weiße Linien markiert.

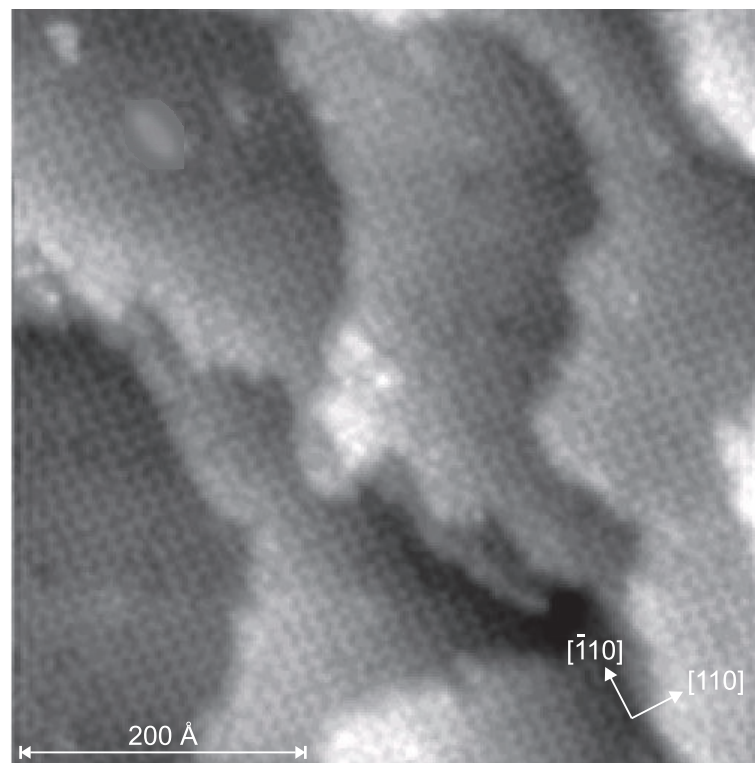


Abb. 4.16: STM-Bild der GaAs(001)c(4 × 4)-Oberfläche. $500 \times 500 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,2 \text{ nA}$.

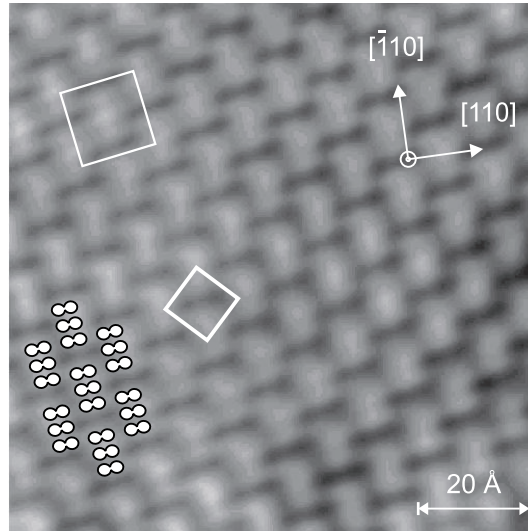


Abb. 4.17: Hochauflösendes STM-Bild der GaAs(001)c(4×4)-Oberfläche. Die weißen Kreise markieren die Positionen der As-Dimere. $98 \times 98 \text{ \AA}^2$, $U = -3.0 \text{ V}$, $I = 0,125 \text{ nA}$.

ne'. Auch dieses Strukturmodell wurde durch theoretische Gesamtenergierechnungen bestätigt [106, 115]. Darüber hinaus zeichnet es sich durch eine sehr geringe Oberflächenenergie aus, die für As-reiche Bedingungen sogar geringer ist als der berechnete Wert für eine Spaltfläche (bei GaAs sind es die $\{110\}$ -Flächen) [106]. Erwähnenswert ist bei dieser Oberfläche die geringe Anzahl von Defekten, verglichen mit der GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ -Struktur. Selten wurden in den Messungen Dimer-Fehlstellen beobachtet. Offenbar scheint dieses eine sehr stabile Bindungskonfiguration zu sein.

Der GaAs(001)c(4×4)-Oberfläche kommt innerhalb dieser Arbeit eine besondere Bedeutung zu, da sie als Startfläche für die Untersuchung von InAs auf GaAs verwendet wird. Technologisch ist diese Fläche ebenfalls von großer Bedeutung, da sie als Wachstumsfläche in der metallorganischen Gasphasen-Epitaxie bekannt ist [116].

4.6 GaAs(001)(2×6) und GaAs(001)(4×2)

4.6.1 Präparation

Wird die GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ -Oberfläche im UHV getempert, d.h. auf eine Temperatur oberhalb von $560 \text{ }^\circ\text{C}$ ohne Zugabe von As geheizt, können Ga-reiche Strukturen erzeugt werden. Der Grund hierfür liegt darin, daß die Desorptionstemperatur für As niedriger ist als die für Ga [117].

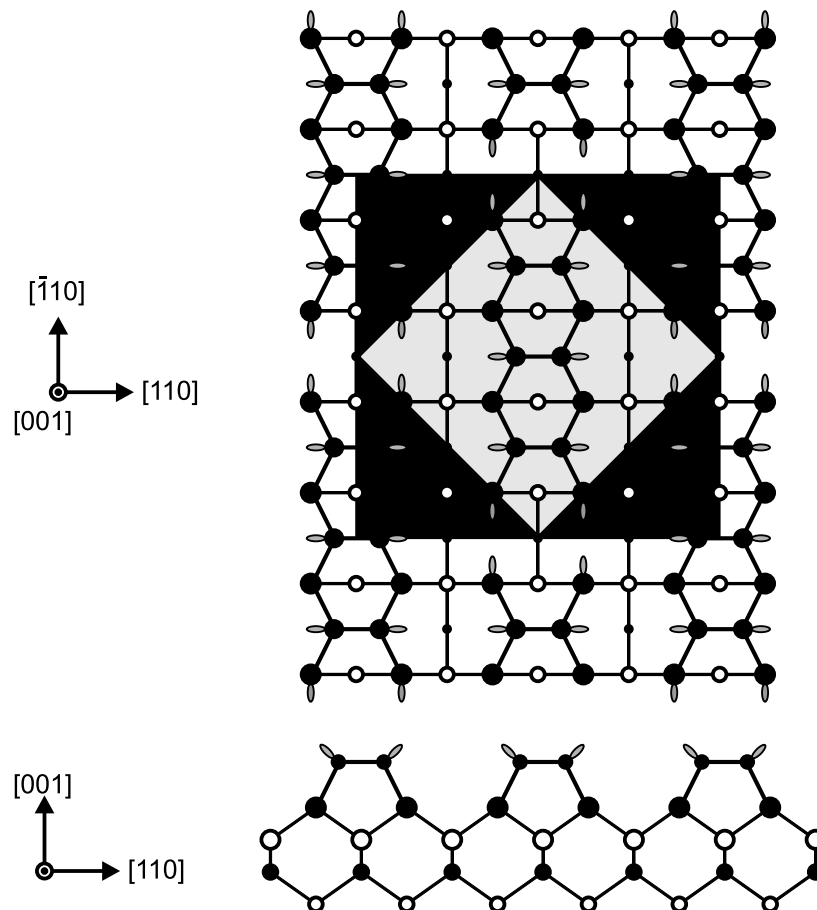


Abb. 4.18: Schematisches Strukturmodell der GaAs(001)c(4x4)-Rekonstruktion nach Biegelsen *et al.* [114]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die primitive, das straffierte Rechteck die zentrierte Einheitszelle. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

Das RHEED-Beugungsbild zeigt dabei im $[1\bar{1}0]$ einen Übergang von einer vierfachen zu einer sechsfachen Periode [29, 118]. Senkrecht hierzu bleibt die zweifache Periodizität des Beugungsbildes erhalten, ist allerdings deutlich schwächer ausgeprägt als das Beugungsbild der (2×4) -Oberfläche. Wird der Heizprozeß weitergeführt, zeigt das Beugungsbild eine vierfache Periodizität entlang $[110]$. Die Beugungsbilder zeigen diese zwei Periodizitäten in einem relativ kleinen Temperaturbereich. Zudem ist diese Herstellung Ga-reicher Phasen stets mit dem Risiko verbunden, daß sich Ga-Cluster (teilweise in der Literatur als *Ga-Droplets* bezeichnet) bilden und die Probe unbrauchbar machen [117]. Alle diese Beobachtungen haben dazu geführt, daß die Ga-reichen Strukturen teilweise kontrovers diskutiert wurden (siehe z.B. [100, 109, 114, 115, 119–126]).

Die Strukturmodelle für Ga-reiche Strukturen werden ständig erneuert, so daß die Diskussion wohl noch nicht an ihrem Ende angelangt ist [100, 126]. Sinn der hier gezeigten Untersuchung war es, eine Referenzuntersuchung zur GaAs(114)-Oberfläche zu haben, die auf die gleiche Art und Weise präpariert wurde (teilweise waren (001)- und (114)-orientierte Substrate auf demselben Probenhalter montiert). Die Ergebnisse sollen daher der Vollständigkeit halber hier dokumentiert werden.

4.6.2 LEED

Ein LEED-Reflexmuster für die Ga-reiche Phase ist in Abb. 4.19 dargestellt. Anhand dieses Bildes läßt sich auch die Problematik der Literatur erklären. Deutlich sichtbar sind Reihen von Reflexen, die auf eine vierfache Periodizität hindeuten und entlang $[1\bar{1}0]$ verlaufen. Die Reihen selbst haben einen Abstand, der nur einer Gitterkonstanten entspricht. In der senkrechten Richtung verlaufen Reihen von Reflexen, die eine sechsfache Periode aufweisen. Die Reihen haben wieder einen dem Realraum entsprechenden Abstand von nur einer Gitterkonstante. Ein solches LEED-Reflexmuster ließe sich durch eine Koexistenz von (4×1) - und (1×6) -Domänen erklären. Problematisch wird das Beugungsbild dadurch, daß zwischen den Reihen mit den scharfen Reflexen (in diesem Bild leider nur sehr schwach ausgeprägte) streifige Reflexe erscheinen. Daher ist die korrekte Periodizität anhand des Beugungsbildes nicht zu ermitteln.

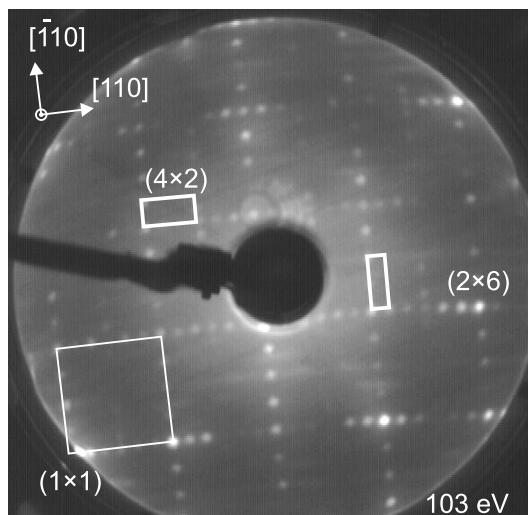


Abb. 4.19: LEED-Reflexmuster der Ga-reichen GaAs(001)(2×6)- und GaAs(001)(4×2)-Rekonstruktionen. Die Einheitszellen der (1×1)-*bulk-truncated*, die der rekonstruierten (2×6)- und (4×2)-Strukturen sind durch weiße Linien markiert.

4.6.3 STM

Abb. 4.20 zeigt ein typisches $1300 \times 1300 \text{ \AA}^2$ großes STM-Bild der Ga-reichen Struktur. Auf diesem Bild sind Terrassen zu erkennen, die von Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ durchsetzt sind. Im vergrößerten Ausschnitt, der in Abb. 4.21 gezeigt ist, läßt sich der Abstand der Reihen zu 24 \AA ermitteln. Die Reihen werden gebildet durch längliche Strukturen, die unregelmäßig um etwa 4 \AA versetzt erscheinen. Die Struktur zwischen den Reihen konnte in diesem Bild nicht aufgelöst werden. Der Abstand zwischen den Strukturen innerhalb einer Reihe beträgt 8 \AA . Aus den Abmessungen ist daher dieser Struktur eine (2×6)-Periodizität zuzuordnen. Die Abb. 4.22 zeigt ein STM-Bild, in dem eine Domänengrenze erkennbar ist. Die rechte untere Ecke des Bildes zeigt die o.g. (2×6)-Anordnung. Im linken Teil sind Reihen zu erkennen, die senkrecht zu den o.g. Reihen verlaufen. Der Abstand dieser Reihen beträgt lediglich 16 \AA . Dies ist in Übereinstimmung mit der vierfachen Periodizität im Elektronenbeugungsbild. Darüber hinaus ist der Kontrast, den diese Strukturen aufweisen, nicht so groß wie die Reihen der (2×6)-Struktur.

4.6 GaAs(001)(2×6) und GaAs(001)(4×2)

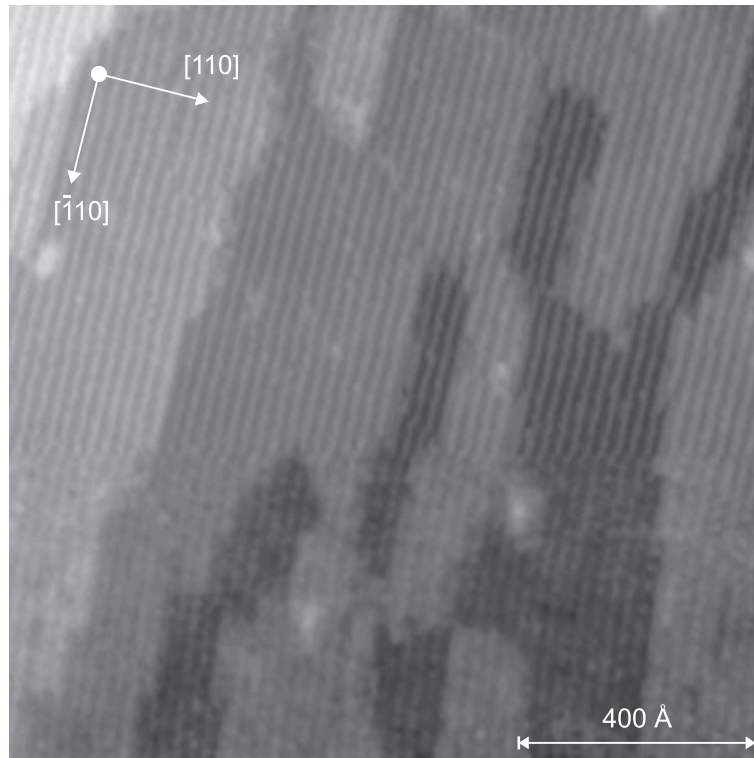


Abb. 4.20: STM-Bild der GaAs(001)(2 × 6)-Oberfläche. $1300 \times 1300 \text{ \AA}^2$, $U = -2,9 \text{ V}$, $I = 0,125 \text{ nA}$.

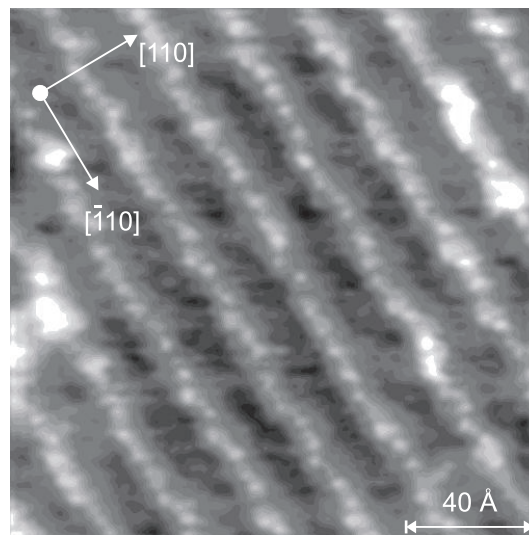


Abb. 4.21: Hochauflösendes STM-Bild der GaAs(001)(2 × 6)-Oberfläche. $180 \times 180 \text{ \AA}^2$, $U = -2,55 \text{ V}$, $I = 0,135 \text{ nA}$.

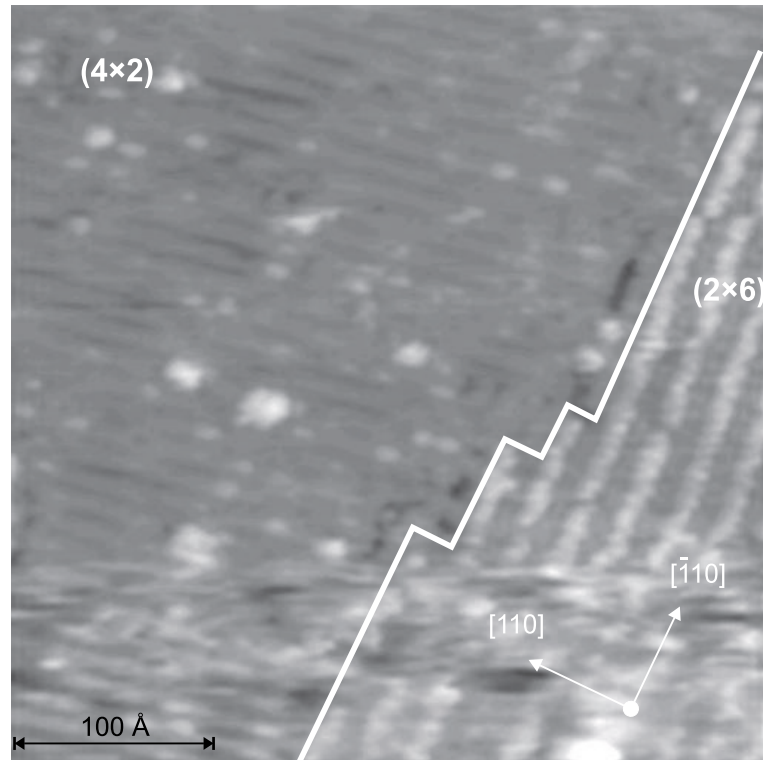


Abb. 4.22: STM-Bild einer Domänengrenze (weiße Linie). Links ist eine (4×2) -, rechts eine (2×6) -rekonstruierte Domäne der GaAs(001)-Oberfläche. $380 \times 380 \text{ \AA}^2$, $U = -2,9 \text{ V}$, $I = 0,125 \text{ nA}$.

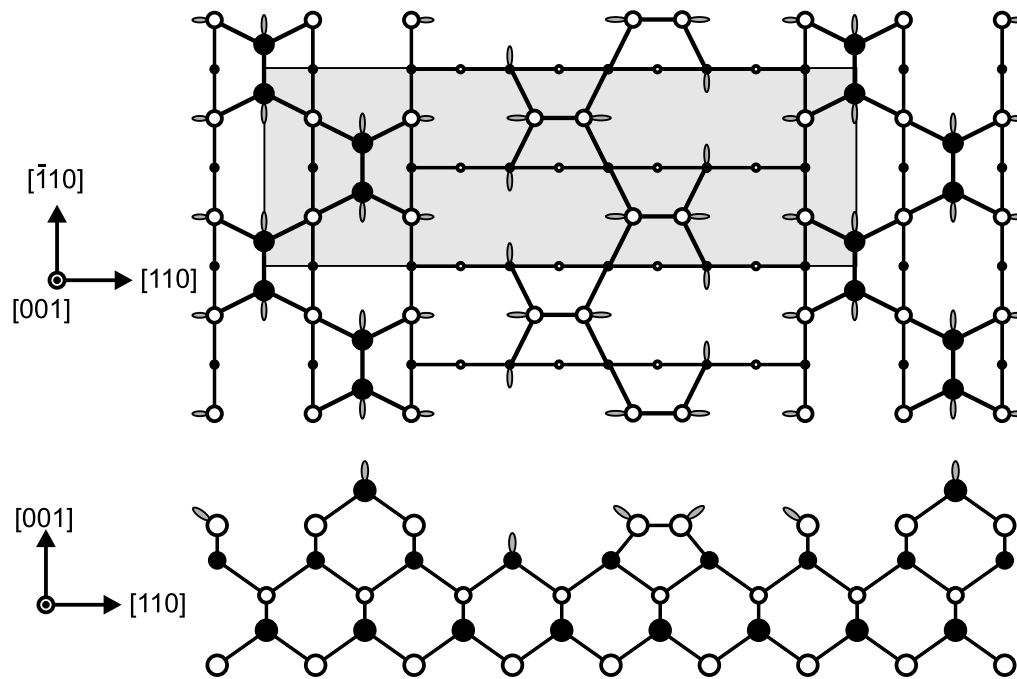


Abb. 4.23: Schematisches Strukturmodell der GaAs(001)(2×6)-Rekonstruktion nach Biegelsen *et al.* [114]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle. As-Atome sind durch schwarze, Ga-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

4.6.4 Strukturmodelle

Die hier gezeigten Bilder ähneln den Bildern, die von der Literatur her bekannt sind (vgl. z.B. Ref.[109]). Da es nicht gelungen ist, wesentlich bessere Auflösungen in den Bildern zu erzielen, sollen hier die bislang am meisten akzeptierten Modelle als Erklärung für die experimentellen Beobachtungen herangezogen werden. Ein Strukturvorschlag nach Biegelsen *et al.* [114] für die (2×6)-Rekonstruktion ist Abb. 4.23 gezeigt. Es besteht aus Reihen von zickzackförmig verlaufenden Reihen von As-Dimeren, die entlang $[\bar{1}10]$ angeordnet sind. Im Bereich zwischen den Reihen bilden sich Ga-Dimere, deren Bindungsachse entlang $[110]$ gerichtet ist. Die Ga-Dimere sind ebenfalls zu einer zickzackförmigen Kette angeordnet. Mit diesem Modell lassen sich die STM-Bilder erklären, allerdings nicht die Unordnung entlang einer As-Dimer-Reihe. In der Abb. 4.21 ist deutlich erkennbar, daß die Dimere nicht so regelmäßig angeordnet sind.

Die (4×2)-Struktur ist nach Xue *et al.* [123] das Pendant zur $\beta 2(2\times 4)$ -Rekonstruktion. Im Unterschied dazu sind aber Ga- und As-Atome vertauscht. Das heißt, die Reihen werden von Ga-Dimeren und Dimer-Fehlstellen gebildet. Für die (4×2)-Rekonstruktion

ist kürzlich ein völlig neues Strukturmodell zur Veröffentlichung eingereicht worden [100]. (Da der Strukturvorschlag aus der Abt. Theorie des Fritz-Haber-Instituts stammt, ist mir vorab eine Kopie des Manuskriptes zugekommen.) Sollte dieses Modell angenommen werden, wird es mit Sicherheit weitere Fragen aufwerfen und vermutlich Konsequenzen auch für andere Modelle nach sich ziehen.

Die Koexistenz von zwei (2×6) - und (4×2) - Domänen auf der Oberfläche kann zur Erklärung der Beugungsbilder herangezogen werden. Der Bereich zwischen den Reihen von Reflexen in den LEED-Bildern, der nur sehr undeutlich zu sehen ist, müßte aufgrund von Unregelmäßigkeiten der Rekonstruktionen streifig erscheinen, ähnlich wie die bereits erwähnte Unordnung der (2×4) -Struktur, die zur Ausbildung einer $c(2 \times 8)$ -Struktur führt.

Insgesamt läßt sich an dieser Stelle sagen, daß die Strukturmodelle die experimentellen Beobachtungen hinreichend genug erklären. Für eine detaillierte Diskussion und Teilnahme an der laufenden wissenschaftlichen Auseinandersetzung sollten STM-Bilder mit einer besseren Auflösung herangezogen werden.

4.7 Zusammenfassung

Anhand der GaAs(001)-Oberfläche konnten verschiedene Präparationsbedingungen erfolgreich getestet werden. Insbesondere konnten aufgrund der unterschiedlichen Rekonstruktionen die Quenchprozeduren ausprobiert werden. So wurden von der sehr As-reichen GaAs(001) $c(4 \times 4)$ über die GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ bis hin zu der Ga-reichen GaAs(001) (2×6) /GaAs(001) (4×2) hergestellt und untersucht. Das in die Apparatur neu integrierte STM konnte mit diesen Strukturen ebenfalls getestet werden. In der Literatur sind zahlreiche STM-Bilder publiziert worden, so daß ein Vergleich vorgenommen werden konnte. Die in der vorliegenden Arbeit erhaltenen STM-Bildern sind in sehr guter Übereinstimmung mit den bereits publizierten Bildern, so daß, erstens, die Präparation der Oberflächen gelungen ist und, zweitens, die Funktionsweise getestet und die Anwendbarkeit des Mikroskops gezeigt werden konnte. Darüber hinaus verhalfen die Strukturen der GaAs(001)-Oberflächen dem Sammeln von Erfahrungen, die für die Untersuchungen von hochindizierten Oberflächen nützlich waren.

Die Untersuchungen der GaAs(001) $c(4 \times 4)$ -Oberfläche dienten des weiteren als Vorstudie zur Untersuchung des Wachstums von InAs auf GaAs.

5 Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche

5.1 Einführung

Mit Beginn der Verwendung von hochindizierten GaAs-Oberflächen als Substrate für Quantenstrukturen wurde bei GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B eine regelmäßige Ordnung der Quantenstrukturen entdeckt [32]. Ferner wurden, wie auf der GaAs(001)-Oberfläche, erfolgreich selbstorganisierte InAs- und $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -*Quantum Dots* (QDs) gewachsen. Proben, die durch unterschiedliche Präparationsverfahren, wie MOVPE [127], MBE [128, 129], *Hydrogen-Assisted*-MBE [130], und *Gas-Source*-MBE [131], hergestellt wurden, zeigten Photolumineszenz-Linienbreiten, die wesentlich schmaler waren als vergleichbare Proben, die auf GaAs(001)-orientierten Substraten gewachsen wurden. Erklärt wurde dieser Effekt durch eine sehr viel homogenere Größenverteilung der QDs, die auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche gewachsen wurden. Des Weiteren wurde in AFM-Bildern (bei nicht überwachsenen Proben) eine regelmäßige Anordnung der $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Inseln gefunden. Xu *et al.* [132] konnten zeigen, daß diese Ordnung entscheidend vom In-Gehalt der abgeschiedenen $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Schicht abhängt. Zusätzlich wurde von Lee *et al.* [133] eine Anordnung von $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -QDs zu regelmäßigen Ketten beobachtet, die durch Mehrfachstapelung von *Quantum-Dot*-Schichten verursacht wird. Auch Laser, die als Laser-aktives Medium InAs-QDs enthalten, wurden bereits von mehreren Gruppen vorgestellt [134, 135]. All diese Beobachtungen offenbaren eine gewisse Besonderheit der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche, da ähnliche Ergebnisse auf der ‘konventionellen’ GaAs(001)-Oberfläche nicht in diesem Maße vorliegen.

Von besonderen Interesse für die vorliegende Arbeit sind die $\{113\}$ -Oberflächen, vor allem deshalb, weil sie auch zu den Oberflächen gehören, die als Facetten auf QDs identifiziert wurden [22, 23]. Die atomare Struktur der GaAs(113)A ist bereits bekannt [30, 31]. Die reine GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche und deren atomare Struktur wurden

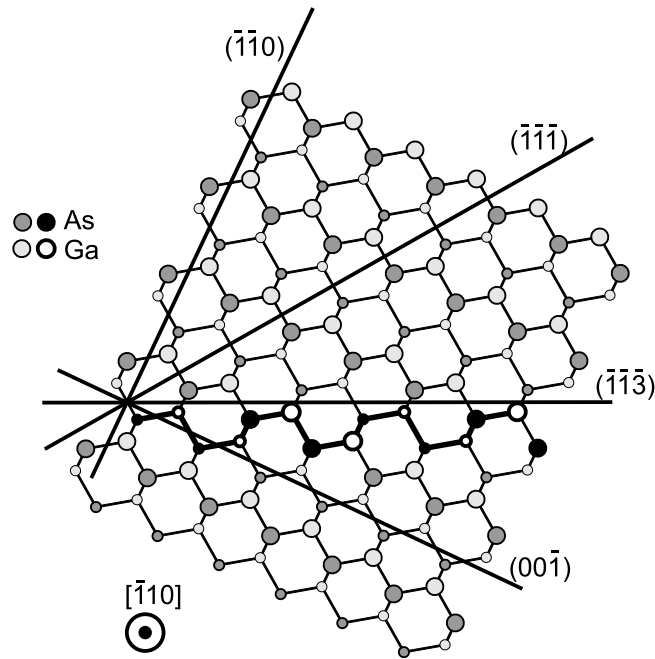


Abb. 5.1: Ausschnitt der $[1\bar{1}0]$ -Zone des GaAs-Kristalls. Die $(\bar{1}\bar{1}\bar{3})$ B-Oberflächenatome sind durch die dickeren Kreise markiert.

hingegen nur sehr wenig untersucht (s.u.). Ziel dieser Untersuchung war es daher, die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche unter verschiedenen MBE-Bedingungen zu präparieren und dadurch die atomare Anordnung der Rekonstruktionen zu ermitteln. Darauf aufbauend sollte ein tieferes Verständnis für den Wachstumsmechanismus der reinen Oberfläche erlangt werden, um dieses Wissen später auch für die Heterostruktur InAs/GaAs zu nutzen.

5.2 Oberflächengeometrie

Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche liegt in der kristallographischen $[1\bar{1}0]$ -Zone des GaAs-Kristalls zwischen der $(00\bar{1})$ - und der $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ B-Oberfläche. Zur Orientierung ist in Abb. 5.1 ein Ausschnitt der $[1\bar{1}0]$ -Zone des GaAs-Kristalls dargestellt, in dem die Lage der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche veranschaulicht wird. Der Neigungswinkel zur $(00\bar{1})$ -Oberfläche beträgt $25,24^\circ$, zur $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ B-Oberfläche beträgt er entsprechend $29,50^\circ$. Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche läßt sich durch zwei nicht äquivalente Schnitte aus dem Kristall erzeugen, die in Abb. 5.2 a) und b) schematisch in Auf- und Seitenansicht dargestellt sind. Um eine Unterscheidung treffen zu können, werden sie im folgenden mit B (Abb. 5.2 a))

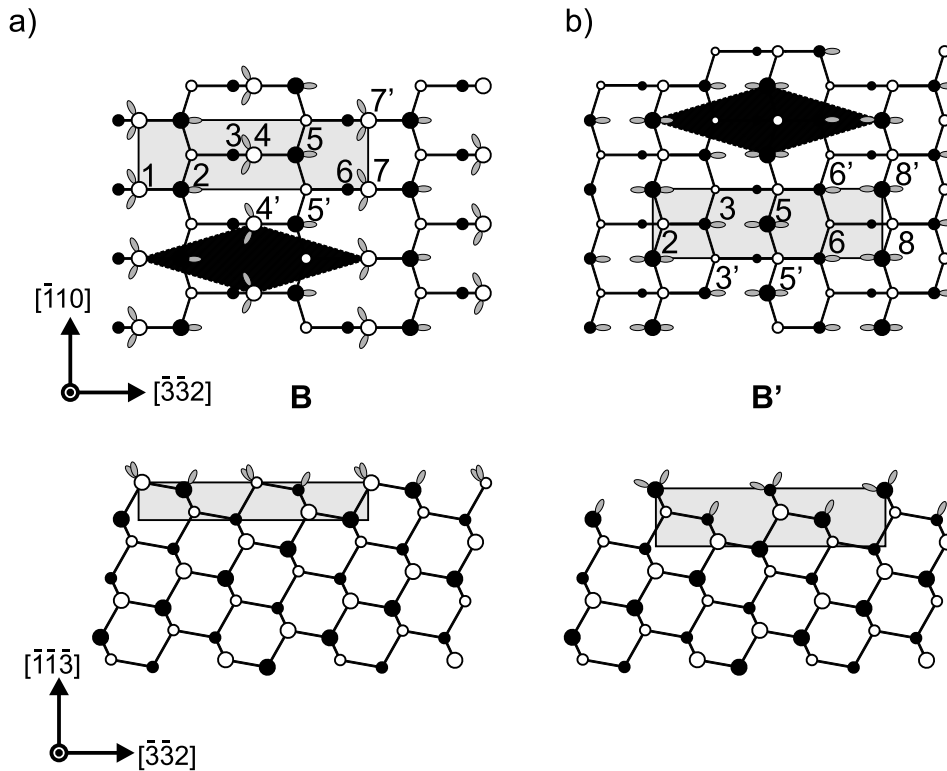


Abb. 5.2: Zwei nicht äquivalente Darstellungen der *bulk-truncated* Struktur der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche in schematischer Auf- und Seitenansicht. Bild a) zeigt die Ga-terminierte B-, b) die As-terminierte B'-Oberfläche. As-Atome sind durch schwarze Kreise, Ga-Atome durch weiße dargestellt.

und mit B' (Abb. 5.2 b)) bezeichnet. Die Einheitszelle der Oberfläche ist rhomboidisch. Sie ist durch die gestrichelte Raute in Abb. 5.2 dargestellt. Es wird sich jedoch als zweckmäßiger erweisen, eine flächenzentrierte Einheitszelle doppelter Größe zu verwenden, wie sie durch das grau unterlegte Rechteck markiert ist. Insbesondere in den Reflexmustern der Elektronenbeugungsmethoden werden die Periodizitäten dadurch klarer herausgestellt. Die so gewählte Einheitszelle mißt $13,34 \text{ \AA} \times 4,00 \text{ \AA}$ und umfaßt vier atomare Lagen.

Die Einheitszelle der B-Oberfläche (siehe Abb. 5.2 a)) enthält die gleiche Anzahl von Ga- und As-Atomen. Die Ga-Atome sind jedoch zweifach koordiniert, d.h. (001)-ähnlich mit zwei hängenden Bindungen, während die As-Atome in der zweiten Lage, ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-ähnlich, dreifach koordiniert sind. Die B'-Oberfläche (siehe Abb. 5.2 b)) ergibt sich durch einen Schnitt, der eine atomare Lage tiefer als die o.g. B-Oberfläche ansetzt. Die Einheitszelle enthält somit nur As-Atome. Dabei treten die As-Atome in der ersten

Lage zweifach koordiniert auf, d.h. (001)-ähnlich mit zwei hängenden Bindungen, und dreifach koordiniert, ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-ähnlich, in der dritten atomaren Lage.

Wie Gesamtenergierechnungen unter Anwendung der *tight-binding*-Näherung von Duke *et al.* [136] ergeben haben, zeigen beide Oberflächen metallischen Charakter auf. Interessanterweise zeigten neuere *ab-initio*-Gesamtenergierechnungen von Platen *et al.* [31], daß die B'-Oberfläche auch für Ga-reiche Bedingungen eine niedrigere Oberflächenenergie als die B-Oberfläche besitzt. (Man beachte, daß die B'-Oberfläche nur As-Atome mit hängenden Bindungen enthält). Allerdings liegt der absolute Wert der Oberflächenenergie mit $75 \text{ eV}/\text{Å}^2$ deutlich oberhalb der stabilen niedrigindizierten GaAs-Oberflächen [106, 115]. Diese Berechnungen legen nahe, daß die Oberflächenenergie durch Rekonstruktionen abgesenkt werden sollte, sofern die Oberfläche nicht in Facetten niedrigerer Energie zerfällt.

Eine bemerkenswerte Eigenschaft der $\{113\}$ -orientierten Flächen liegt ferner darin, daß sich die Oberflächen als Grenzfall von Vizinalflächen auffassen lassen. Aus der Seitenansicht (vgl. Abb. 5.2 unteres Bild) wird deutlich, daß sie in diesem Bild gerade noch aus einer ($00\bar{1}$)-orientierten Terrasse, d.h. einer Terrasse, die in dieser Richtung nur eine Einheitszelle enthält, und einer ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-Stufe besteht, bzw. in umgekehrter Weise aus einer ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-breiten Terrasse und einer ($00\bar{1}$)-hohen Stufe. Es ist daher völlig offen, ob eine Rekonstruktion eher den Prinzipien folgt, die von der (001)-orientierten Fläche bekannt sind, oder denjenigen der ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-Oberfläche.

Ausgehend von den *bulk-truncated* Geometrien lassen sich bereits einige Voraussagen darüber machen, auf welche Weise offene gebrochene Bindungen abgesättigt werden könnten. Die B-Oberfläche legt nahe, daß die Bindungen der Ga-Atome 4 und 4' sowie des As-Atoms 2 durch ein auf diesem Lochplatz adsorbiertes Ga- oder As-Atom abgesättigt werden können. Dadurch würden drei offene Bindungen durch eine einzige ersetzt, was dem Prinzip der Reduzierung der offenen Bindungen entsprechen würde. Entsprechendes gilt für die Atome 5, 7 und 7'. Die Periodizität dieser Rekonstruktion wäre demnach eine primitive (1×1)-Rekonstruktion. Dieselbe Periodizität ergäbe sich durch die Bildung eines As-Trimers, der ebenfalls an diesen Dreifach-Lochplatz binden könnte. Beide Konfigurationen würden einer Rekonstruktion entsprechen, wie sie für die GaAs $\{111\}$ -Oberflächen diskutiert wurden [137–146]. Die B'-Oberfläche legt hingegen nahe, daß ein As-Dimer an den Atomen 3, 3' und 5, 5' bindet, um die Bindungen der As-Atome abzusättigen (und analog für die Atome 6, 6', und 8, 8'). Der As-Dimer wäre entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung gebunden und würde eine zweifache Peri-

odizität in diese Richtung verursachen. Somit ergäbe sich eine (2×1) -Rekonstruktion auf der Oberfläche. Eine As-Dimerisierung ist aus den Rekonstruktionsmodellen der GaAs(001)-Flächen bekannt [28] (vgl. Kap. 4).

Wie in den folgenden Abschnitten näher beschrieben wird, verletzen alle o.g. Rekonstruktionsvorschläge die Elektronenzählregel [45–48] und sollten daher energetisch ungünstig sein (vgl. Abschnitt 5.5.5). Ferner wurde im Rahmen dieser Arbeit eine neue Rekonstruktion gefunden, die meines Erachtens die intuitive Vorstellung bei weitem übertrifft (vgl. Abschnitt 5.4).

5.3 Literatur zur GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche

Erste Untersuchungen der reinen GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberflächen wurden bereits im Jahr 1985 von Stiles und Kahn [147] vorgestellt. Dabei wurde die Oberfläche mit IBA präpariert und mit LEED untersucht. Das Beugungsmuster zeigte eine (1×1) -Periodizität auf, die durch Relaxation der Atome erklärt wurden. Für dieses Strukturmodell führte Chadi [148] empirische Gesamtenergierechnungen durch, die für die Oberfläche metallisches Verhalten aufzeigten. Auch wurden As-Adatome in Betracht gezogen, die einen Dreifach-Lochplatz einnehmen, wie bereits oben diskutiert wurde [136, 147].

Später wurde von Scholz *et al.* [149] die (1×1) -Struktur mit Hilfe von LEED und Photoemissionsspektroskopie bestätigt und darüber hinaus von der Existenz einer (2×2) -Rekonstruktion für MBE präparierte Proben berichtet. Die (2×2) -Struktur ergibt sich den Autoren zufolge durch alternierende Besetzung des Dreifach-Lochplatzes durch ein As-Atom. Bedauerlicherweise wird in Ref. [149] nicht näher auf dieses Modell eingegangen.

Setzer *et al.* [150] und Platen *et al.* [31] beobachteten die (1×1) -Struktur ausschließlich für IBA-präparierte Proben. Für MBE-präparierte Proben wurde hingegen ein Zerfall der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche in Facetten niedrigindizierter Flächen beobachtet.

Kawase *et al.* [151] beobachteten keine Facettierung, statt dessen jedoch eine (2×1) -Rekonstruktion auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. Dabei wurden die Proben in einem CVD-Reaktor gewachsen, mit einer schützenden amorphen As-Schicht versehen (*‘capping’*), durch die Luft transportiert und in eine UHV-Apparatur eingeschleust. In dieser Apparatur wurde die schützende As-Schicht durch Heizen der Probe desorbiert (*‘decapping’*). (Dabei befindet sich die Probe im As-Strahl eines MBE-As-Ofens, um die

Bildung von Ga-reichen Strukturen zu vermeiden). Basierend auf RHEED- und STM-Messungen schlugen die Autoren für die (2×1) -Rekonstruktion folgendes Strukturmodell vor: Ausgehend von der B'-Oberfläche wird durch Bildung von As-Dimeren, wie im vorhergehenden Abschnitt erläutert wurde, die zweifache Periode erzeugt. Ferner zeigen die STM-Bilder in Ref. [151], daß die Oberflächenmorphologie ähnlich der der GaAs(001)-Oberflächen ist. Die Oberfläche zeichnet sich durch ausgedehnte (2×1) -rekonstruierte Terrassen aus, die jeweils von monoatomaren Stufen getrennt werden. Auch von Pristovsek *et al.* [152] wurde eine ähnliche Oberflächenmorphologie in *ex-situ*-AFM-Messungen beobachtet, jedoch keine Hinweise auf Facettierung.

5.4 GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)

5.4.1 Präparation

Durch Beibehaltung der Probertemperatur nach dem Wachsen oberhalb von 500°C wurde die sich bereits beim Wachstum abzeichnende $8 \times$ -Periodizität im $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Azimuth erhalten. Gleichzeitig wurde der As-Strahl durch Schließen des Nadelventils des Ofens sowie durch Absenkung der Ofentemperatur abgeschaltet.

Die RHEED-Muster beim Wachstum nach der o.g. Prozedur sind in Abb. 5.3 a) bis d) dargestellt. In Abb. 5.3 b) ist auf diesem Bild nur ein sehr breiter $(0,0)$ -Reflex sichtbar, da die Überstruktureflecke nur sehr schwach und nur mit dem Auge erkennbar waren. In Abb. 5.3 d) hingegen ist die $8 \times$ -Periode deutlicher zu erkennen, die auf eine Periodizität von 32 \AA entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung auf der Oberfläche schließen läßt. Im senkrechten Azimuth zeigte das Beugungsbild sowohl während des Wachsens als auch danach eine einfache Periode auf, wie in Abb. 5.3 a) und c) zu sehen ist. Nach Erscheinen der (8×1) -Struktur im RHEED-Muster wurde die Probe auf ca. 300°C abgekühlt, und sobald der Hintergrunddruck in der Wachstumskammer 3×10^{-9} mbar unterschritten hatte, wurde die Probe in die Analysechamber transferiert. Die Probe wurde hier auf Raumtemperatur abgekühlt, bevor sie weiter untersucht wurde.

5.4.2 LEED

Das LEED-Muster in Abb. 5.4 a) zeigt eindeutig die bereits im RHEED beobachtete (8×1) -Periodizität. Zur besseren Erkennbarkeit sind im Beugungsbild sowohl die

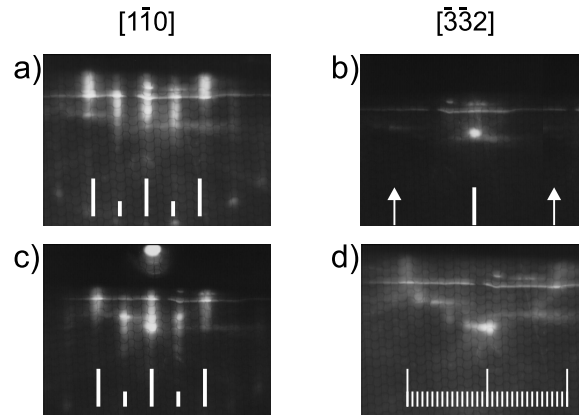


Abb. 5.3: RHEED-Reflexmuster der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. Während des Wachsens, im a) $[\bar{1}\bar{1}0]$ -, b) $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Azimuth. Nach dem Wachsen und Annealen, im c) $[\bar{1}\bar{1}0]$ -, d) $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Azimuth. Die Position der gebeugten Strahlen ist durch weiße Linien gekennzeichnet. $E = 13$ keV.

rekonstruierte wie auch die flächenzentrierte Einheitszelle markiert. Die Reflexe erscheinen sehr scharf, und es ist nur geringe Untergrundintensität zu sehen, was auf eine hervorragende Oberflächenqualität hindeutet. Zur Bestimmung der Größe der Einheitszelle wurden LEED-Bilder ausgewählt, die mit niedrigerer Primärstrahlenergie aufgenommen wurden, wie beispielhaft in Abb. 5.4 b) dargestellt ist, da in diesen Bildern die Überstrukturreflexe deutlicher voneinander getrennt erscheinen. Das Ausmessen der rekonstruierten Einheitszelle ergibt 32 \AA entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ - und 13 \AA entlang der $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Richtung, was in völliger Übereinstimmung mit den RHEED-Resultaten steht.

5.4.3 STM

Abb. 5.5 zeigt ein $2500 \times 2500 \text{ \AA}^2$ großes, dreidimensionales STM-Bild der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B (8×1)-Oberfläche. Auf dieser Skala sind ausgedehnte Terrassen erkennbar. Durch Analyse von Höhenprofilen ergibt sich die Stufenhöhe zwischen den Terrassen zu $1,7 \text{ \AA}$. Ein solches Höhenprofil ist in Abb. 5.6 dargestellt. Diese Höhendifferenz entspricht der Höhendifferenz zwischen der obersten und der dritten atomaren Lage der (113)-Oberfläche (vgl. Seitenansicht in Abb. 5.2). Auf den Terrassen sind Reihen zu erkennen, die entlang der $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Richtung verlaufen. Der Abstand zwischen den Reihen beträgt 32 \AA , was genau der beobachteten $8\times$ -Periodizität in den Elektronenbeugungsbildern entspricht.

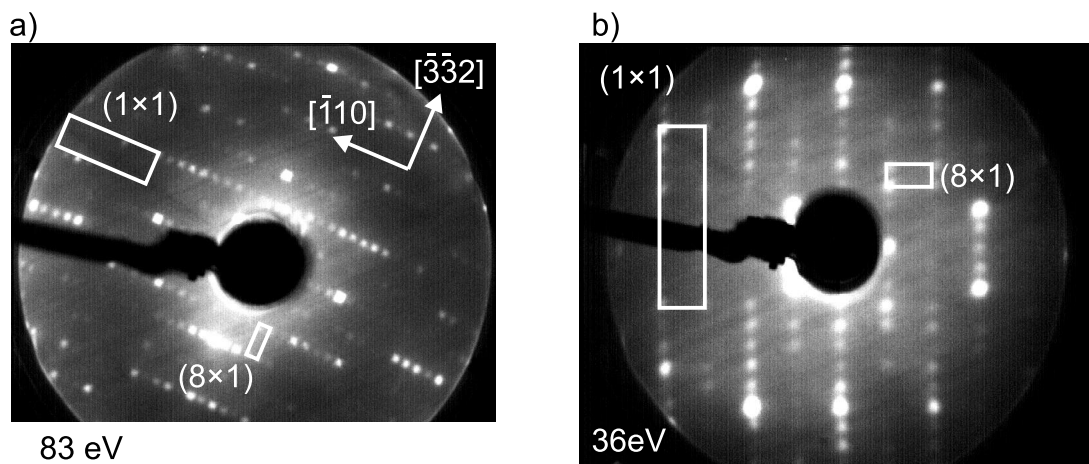


Abb. 5.4: LEED-Reflexmuster der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion. Rechteckige (1×1)-Einheitszelle sowie die (8×1) sind mit eingezeichnet. a) $E = 83$ eV. b) $E = 36$ eV.

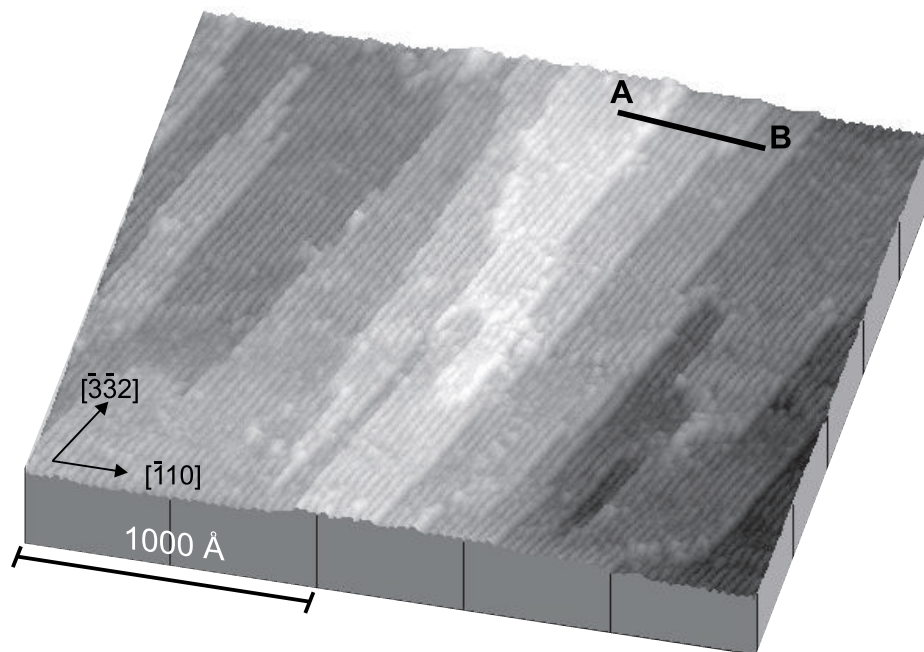


Abb. 5.5: STM-Bild der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche in dreidimensionaler Darstellung. $2500 \times 2500 \text{ \AA}^2$, $U = -2,8$ V, $I = 0,15$ nA.

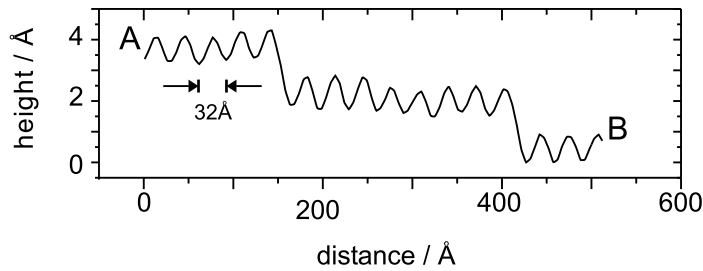


Abb. 5.6: Höhenprofil entlang $[110]$ (Linie AB) aus der Abb. 5.5. Die Stufenhöhe beträgt etwa $1,7 \text{ \AA}$, der Abstand zwischen den Reihen beträgt 32 \AA .

Ein hochauflösendes STM-Bild, in dem ein Ausschnitt mit einer Stufe dargestellt ist, zeigt Abb. 5.7. Zusätzlich ist in dieser Abbildung eine Vergrößerung des Bildes eingeschoben, die die atomare Anordnung der Reihen verdeutlicht. Die Reihen bestehen demnach aus zickzackförmig verlaufenden Reihen in zwei Ebenen. Die unten verlaufenden Reihen sind gegenüber den oben liegenden um etwa 3 \AA entlang $[\bar{3}\bar{3}2]$ Phasenverschoben. Der Höhenunterschied zwischen den Reihen beträgt $1,7 \text{ \AA}$, wie dem Höhenprofil in Abb. 5.8 zu entnehmen ist. Dieser Höhenunterschied entspricht genau der Stufenhöhe und, wie oben erwähnt, dem geometrischen Höhenunterschied von drei atomaren Lagen. Die tiefer liegenden Zickzackreihen werden durch einen etwa 1 \AA tiefen Graben getrennt, wodurch die gesamte Korrugation innerhalb der Rekonstruktion $2,7 \text{ \AA}$ beträgt.

5.4.4 Strukturmodell

Um die experimentellen Befunde zu erklären, wird ein Strukturmodell vorgeschlagen, das in Abb. 5.9 gezeigt ist. Die Rekonstruktion besteht demnach aus Ga-Dimeren, die in der ersten atomaren Lage und in der dritten Lage gebildet werden. Die Dimerbindung ist entlang $[1\bar{1}0]$ gerichtet, entlang der $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Richtung sind die Ga-Dimere zu Zickzackreihen angeordnet. Zwischen den unten verlaufenden Zickzackreihen verläuft ein Graben, in dem sich dreifach gebundene Ga-Atome in der fünften atomaren Lage und ebenfalls dreifach gebundene As-Atome in der sechsten Lage befinden. Insgesamt erstreckt sich die Rekonstruktion in der Tiefe über sechs atomare Lagen. Die geometrische Korrugation ergibt sich zu $3,4 \text{ \AA}$. Die Maße der grau unterlegten Einheitszelle sind $32,0 \text{ \AA}$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung und $13,3 \text{ \AA}$ entlang $[\bar{3}\bar{3}2]$.

Einen ersten Hinweis für die Stabilität und damit auch für die Gültigkeit eines

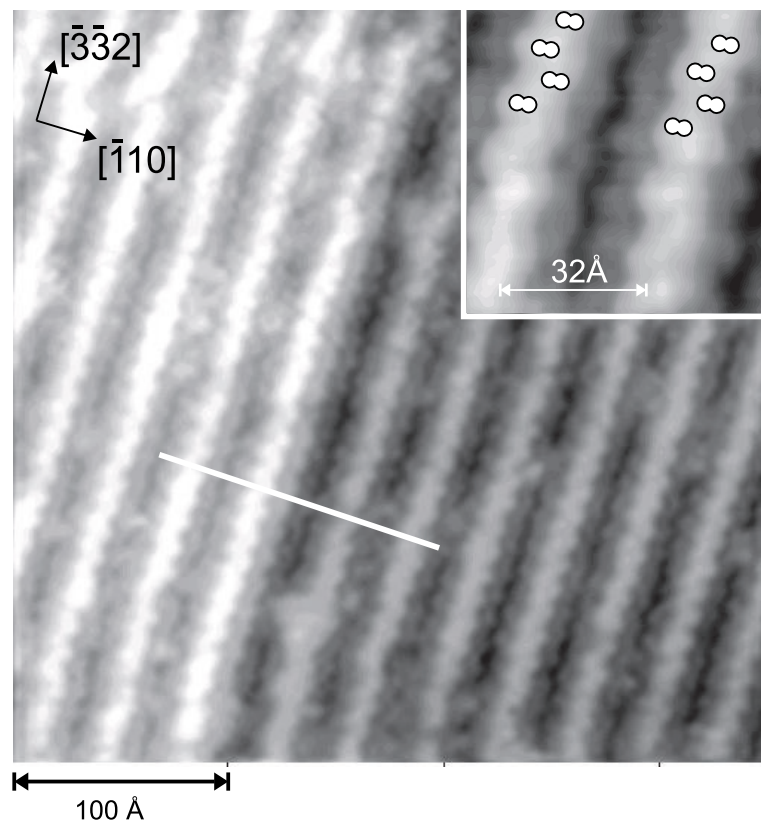


Abb. 5.7: Hochauflösendes STM-Bild einer Stufe parallel zur $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Richtung der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion. Der Einschub in der oberen rechten Ecke zeigt zwei Reihen in vergrößerter Darstellung. $350 \times 350 \text{ \AA}^2$, $U = -2,8 \text{ V}$, $I = 0,15 \text{ nA}$.

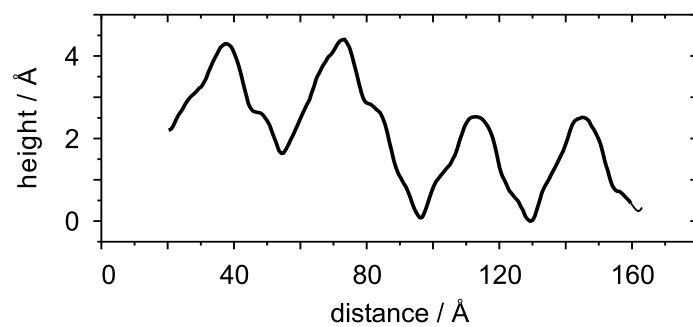


Abb. 5.8: Höhenprofil entlang der Stufe (weiße Linie) aus der Abb. 5.7. Die Stufenhöhe beträgt $1,7 \text{ \AA}$.

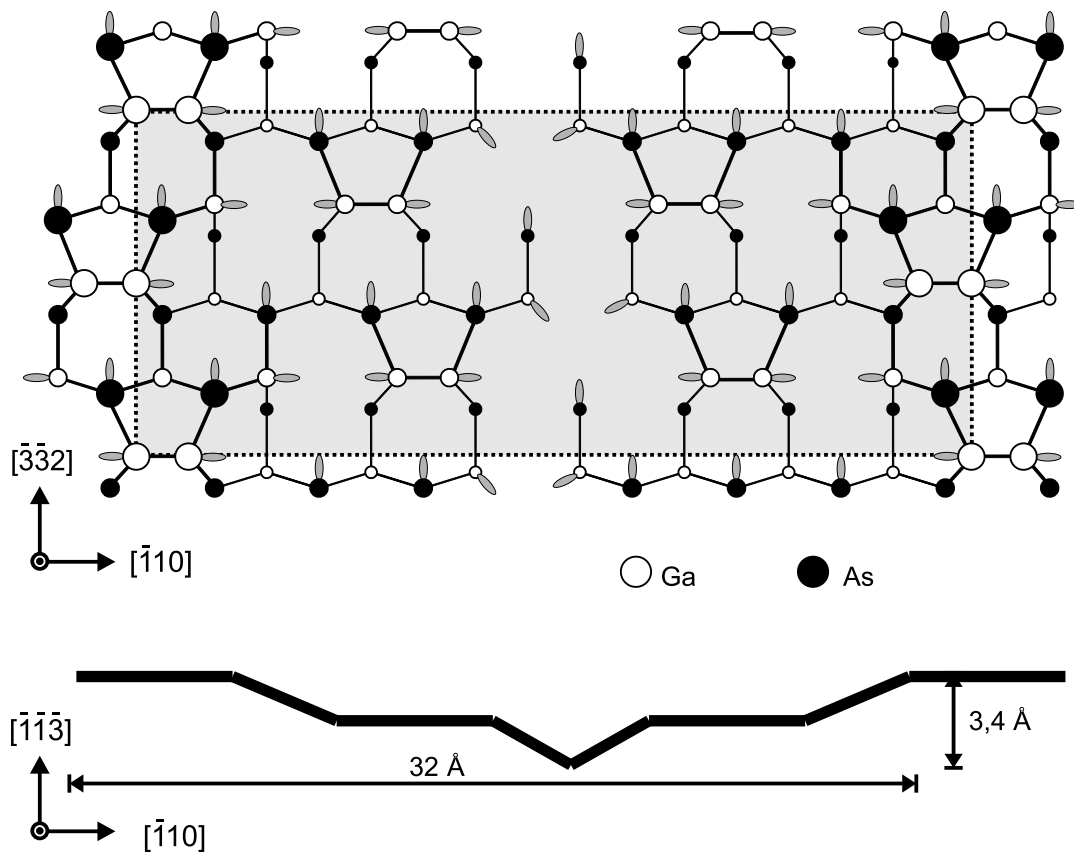


Abb. 5.9: Strukturmodell für die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion. Die untere schwarze Linie zeigt ein Höhenschema der Korrugation innerhalb der Einheitszelle an.

Strukturmodells ergibt sich durch Anwendung der Elektronenzählregel [45–48]. Hierzu werden alle Valenzelektronen derjenigen Atome gezählt, die keine Bindungskonfiguration eingehen, wie sie volumengebundene Atome besitzen. Im Bild der Elektronenzählregel zählen die Valenzelektronen der Ga-Atome zu $\frac{3}{4}$, die der As-Atome werden zu $\frac{5}{4}$ gezählt. Diese Elektronen werden dann verteilt in die zu füllenden Atomorbitale, so daß die hängenden Bindungen der Ga-Atome leer bleiben, die der As-Atome mit jeweils zwei Elektronen gefüllt werden. In der Einheitszelle der (8×1) -rekonstruierten GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche befinden sich 32 Ga-Atome, die 24 Elektronen beitragen, und 16 As-Atome, die 20 Elektronen beitragen. Diese 44 Elektronen müssen in die Orbitale der 6 Ga–Ga-Bindungen und in die 16 Orbitale der As-Atome verteilt werden. Nach dem Pauli-Prinzip können in jedem Orbital zwei Elektronen plaziert werden, wodurch sämtliche 22 Orbitale mit je zwei Elektronen gefüllt werden. Insgesamt sind alle Elektronen verteilt, so daß die Oberfläche halbleitend bleibt und damit stabil sein sollte.

5.4.5 Diskussion

Die Größe der Einheitszelle des Strukturmodells wurde naturgemäß nach der Größe der Einheitszelle der Überstruktureflexe der Elektronenbeugungsbilder gewählt, so daß umgekehrt die Elektronenbeugungsexperimente trivialerweise mit dem Modell übereinstimmen.

STM liefert eine Abbildung der elektronischen Zustandsdichte der Atome auf der abzubildenden Oberfläche am Ort der STM-Spitze, daher ist eine detaillierte Diskussion der STM-Bilder notwendig. Da die hier vorgestellten Bilder mit negativem Potential der Probe gegenüber der STM-Spitze aufgenommen wurden, werden gefüllte Zustände abgebildet, d.h., die Elektronen treten von der Probe an die STM-Spitze. Es ist deswegen davon auszugehen, daß die höchste Intensität von den gefüllten hängenden Bindungen der As-Atome herrührt. Das bedeutet, daß in den Abbildungen hier nicht die Ga-Dimere, die die topographisch höchstgelegenen Komponenten der Rekonstruktion sind, sondern die As-Atome von der zweiten Lage abgebildet werden.

Über die Tatsache, daß die As-Atome der zweiten Lage eine ähnliche Form haben, wie man sie von einem As-Dimer erwartet (vgl. Kap. 4), und nicht wie einzelne As-Atome (vgl. Abb. 3.23) abgebildet werden, kann man an dieser Stelle nur spekulieren: Die Dimer-Bindung ist kürzer als der Abstand zweier Ga-Atome im Volumen. Daher

ist zu vermuten, daß die As-Atome der zweiten Lage entlang $[\bar{1}10]$ relaxieren werden, so daß diese enger aneinanderrücken und es damit schwieriger wird, die Orbitale der einzelnen As-Atome getrennt abzubilden. Gesamtenergierechnungen sollten durchgeführt werden, um diese Aussage zu untermauern. Gestützt wird die Interpretation der Ergebnisse durch einen Vergleich mit Ergebnissen von Xue *et al.* [123]. Dort wurden die Ga-reiche $\beta 2(4\times 2)$ -Rekonstruktion der GaAs(001)-Oberfläche mit STM untersucht und theoretische Simulationen der STM-Bilder basierend auf *ab-initio*-Rechnungen durchgeführt. Es konnte gezeigt werden, daß bei Abbildungen der gefüllten Zustände die As-Atome der Lage unterhalb der Ga-Dimere abgebildet werden. Da in der GaAs(001) $\beta 2(4\times 2)$ -Oberfläche die As-Atome ähnlich gebunden sind wie im hier vorgestellten Strukturmodell der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche, ist sicherlich davon auszugehen, daß auch hier die As-Atome der zweiten Lage und, im Falle der tieferliegenden Zickzackreihe, die As-Atome der vierten Lage abgebildet werden.

Daß die Korrugation innerhalb der Einheitszelle, die nach dem Modell geometrisch $3,4\text{ \AA}$ beträgt, in den STM-Bildern mit $2,7\text{ \AA}$ nicht korrekt wiedergegeben werden konnte, läßt sich mit der endlichen Größe der STM-Spitze erklären. Die hier verwendete Spitze ist offenbar nicht scharf genug, um die Atome der untersten (sechsten) Lage zu erreichen. Statt dessen ist davon auszugehen, daß die Spitze, wenn sie über dem Graben zwischen den tieferliegenden Ga-Dimeren gerastert wird, bereits signifikante Strombeiträge durch die Seite erhält und sie daher von der Steuerung wieder hochgezogen wird (vgl. Kap. 3.4.2). (Die Bilder sind im Modus mit konstantem Stromwert aufgenommen worden.)

Das Strukturmodell der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche wird des weiteren durch Vergleiche mit experimentellen und theoretischen Befunden der GaAs(113)A-Oberfläche unterstützt. Auf dieser Oberfläche wurde bereits von Wassermeier *et al.* [30] eine (8×1)-Rekonstruktion gefunden, für die ein Strukturmodell vorgeschlagen wurde, das analog dem hier vorgestellten Strukturmodell der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche aufgebaut ist. Das heißt, das Strukturmodell der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche entsteht durch Vertauschen von Ga und As im GaAs(113)A(8×1)-Modell von Wassermeier *et al.* [30]. Die Gültigkeit des GaAs(113)A(8×1)-Modells wurde bereits auch theoretisch in Ref. [31] bestätigt. STM-Bilder der GaAs(113)A(8×1)-Oberfläche, die leere Zustände abbilden, sind praktisch identisch mit den hier vorgestellten STM-Bildern der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche, in denen gefüllte Zustände abgebildet wurden. Da auf den leeren Zustandsbildern der GaAs(113)A(8×1)-Oberfläche die (leeren) hängenden

Bindungen der Ga-Atome abgebildet werden, die äquivalente Positionen einnehmen, wird die Übereinstimmung des Strukturmodells für die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche mit den STM-Bildern weiterhin unterstützt.

Es ist eine bemerkenswerte Eigenschaft der $\{113\}$ -Oberfläche, daß sie eine Rekonstruktion besitzt, die sowohl auf der A-Seite wie auch auf der B-Seite auftritt. Im allgemeinen kann im Zinkblende-Kristall eine gegebene Oberfläche sowohl Anion-terminiert wie auch Kation-terminiert sein. Am anschaulichsten ist diese Unterscheidung am Beispiel der $\{111\}$ -Oberflächen zu erläutern. Wird der Kristall parallel zu einer $\{111\}$ -Ebene geschnitten, so enthält diese nur eine Ionensorte. Besteht sie aus den Kationen, wird diese A-Seite (bzw. Oberfläche) genannt, im Falle, daß sie nur die Anionen enthält, wird sie als B-Seite bezeichnet.

Daß eine analoge Rekonstruktion auf einer (polaren) Oberfläche auf der A- und auf der B-Seite auftritt, ist keineswegs trivial. Die GaAs(111)A-Oberfläche und die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-Oberfläche, die naturgemäß die einfachsten polaren Oberflächen darstellen, mögen hier als Beispiel dienen. Auf beiden Oberflächen wird eine Rekonstruktion mit (2×2)-Periodizität gefunden. Die atomare Anordnung auf den Oberflächen ist aber grundlegend verschieden. Während auf der GaAs(111)A(2×2)-Oberfläche die Rekonstruktion durch eine Ga-Vakanz [140] in jeder (2×2)-Einheitszelle gebildet wird, ist das entsprechende Modell einer As-Vakanz [139] auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B-Oberfläche energetisch sehr ungünstig. Statt dessen wird die Rekonstruktion der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B(2×2)-Oberfläche durch Bildung von einem As-Trimer und einem dreifachgebundenen As-Atom pro (2×2)-Einheitszelle aufgebaut [137, 140, 144, 145].

Die bislang einzige bekannte analoge Rekonstruktion auf GaAs ist die (001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion und (001) $\beta 2(4 \times 2)$ -Rekonstruktion [104]. Die Ursache für die Ausbildung dieser Rekonstruktionen auf GaAs(001)-Oberflächen ist allerdings mehr auf die Probenpräparation zurückzuführen als auf die Orientierung der Oberfläche. Auf der GaAs(001)-Oberfläche sind die As-Atome und die Ga-Atome äquivalent gebunden, d.h., sie sind stets zweifach gebunden, unabhängig davon, in welcher Richtung der Kristall geschnitten wird. Daher ist die hier gefundene GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion mit ihrem Pendant auf der GaAs(113)A-Oberfläche bislang einzigartig. Die Analogie der Rekonstruktionen ist allein auf die Orientierung bzw. die Polarität der Oberfläche zurückzuführen.

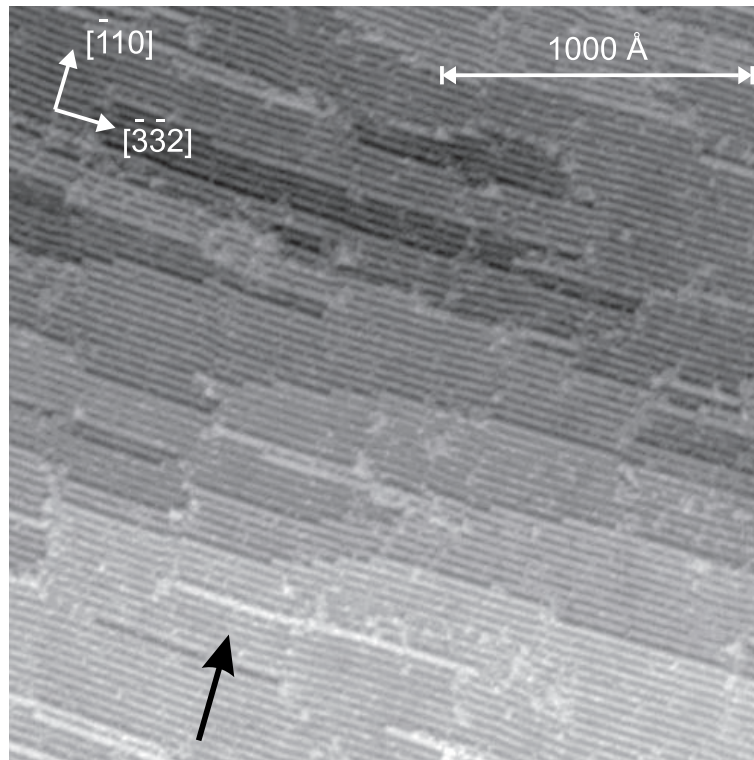


Abb. 5.10: STM-Bild der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion. Um die Anisotropie der Stufenkanten deutlicher hervorzuheben, ist hierbei die 1. Ableitung der Meßdaten gezeigt. Der Pfeil markiert eine '1D'-Insel. $2500\times 2500\text{ \AA}^2$, $U = -2,8\text{ V}$, $I = 0,13\text{ nA}$.

5.4.6 Morphologie

Bei Betrachtung des großen STM-Bildes der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche, das in Abb. 5.10 (und auch Abb. 5.5) dargestellt ist, fällt eine extreme Anisotropie der Stufenkanten ins Auge. Während Stufenkanten, die parallel zur $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Richtung verlaufen, extrem lang ausgedehnt sind, sind Stufenkanten senkrecht hierzu sehr kurz. Mit anderen Worten, die Reihen, die in der Abbildung zu sehen sind, enden so gut wie nie an demselben Punkt. Da Stufenkanten im allgemeinen wichtige Nukleationszentren beim Wachstum sind, suggeriert dieses Bild, daß das Wachstum primär entlang den Reihen verläuft.

Wir haben daher während des Wachstums die Intensität des (0,0)-RHEED-Reflexes zeitlich mit einer empfindlichen CCD-Kamera verfolgt. Das Ergebnis ist in Abb. 5.11 (*links*) aufgetragen. Die Intensität des Reflexes im $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Azimuth zeigt keine Oszillationen. Entlang der $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$ -Richtung sind hingegen deutliche Oszillationen zu sehen.

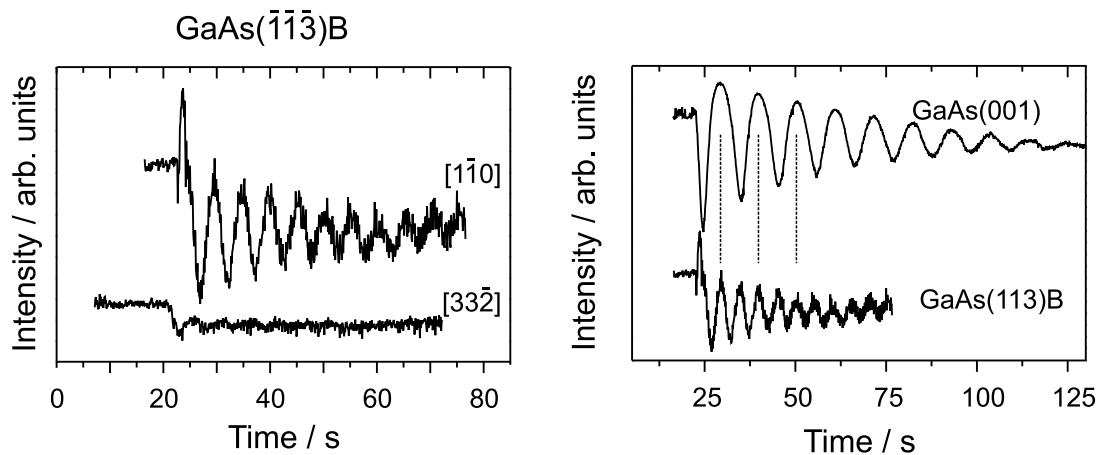


Abb. 5.11: Zeitliche Intensitätssoszillationen im (0,0)-RHEED-Reflex. *Links:* GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B- (8×1) -Oberfläche im $[\bar{1}\bar{1}0]$ - und im $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Azimuth. *Rechts:* Vergleich der Oszillationsperiode zwischen der GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ - und der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B (8×1) -Rekonstruktion.

Dieses Ergebnis läßt sich, wie in den einleitenden Kapiteln (vgl. Kap. 2.4.1 u. Kap. 3.3) dieser Arbeit ausführlich dargestellt wurde, wie folgt interpretieren: Wird die Probe so positioniert, daß der Elektronenstrahl parallel zur $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung der Probe verläuft, durchqueren die Reihen der Rekonstruktion die Kohärenzzone des Elektronenstrahls auf einer neu zu bildenden Terrasse in unterschiedlicher Zeit. Die Intensität des gebeugten Strahls nimmt daher ab. Wird die Terrasse komplett überwachsen, steigt die Intensität (idealerweise) auf ihren ursprünglichen Wert an, da die Ordnung hier maximal wird. Daraufhin beginnt eine neue Lage zu wachsen, so daß die Intensität wieder abnimmt usw. Wird die Probe so ausgerichtet, daß der Elektronenstrahl parallel zur $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Richtung verläuft, bleibt die Intensität nahezu konstant, weil auch die mittlere Terrassenbreite innerhalb der Kohärenzlänge des Strahls in dieser Richtung konstant bleibt. Das bedeutet, daß das Wachstum auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B (8×1) -Oberfläche durch 2D-Nukleation und entlang den Reihen, d.h. in $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Richtung, fortgesetzt wird. Ein ähnliches Wachstumsverhalten wurde auf der InAs(113)A-Oberfläche beobachtet [153].

Eine mögliche Erklärung für das Auftreten der sehr unterschiedlichen Stufenkanten kann mit Hilfe der Elektronenzählregel (ECR) gegeben werden. Dazu wurde von Paschley [47] vorgeschlagen, die ECR auf eindimensionale Inseln auf einer GaAs(001) (2×4) -

Oberfläche anzuwenden. Eindimensional bedeutet in diesem Fall, daß die Inseln in einer Richtung so kurz wie möglich konstruiert werden, wobei die Atome, sofern es möglich ist, in der gleichen Konfiguration auftreten sollen, wie sie innerhalb der rekonstruierten Oberfläche auftreten. In der anderen Richtung werden die Inseln als unendlich ausgedehnt betrachtet. Das gleiche Verfahren wurde von Geelhaar *et al.* [154] auf der GaAs(113)A(8×1)-Oberfläche angewendet, auf der eine ähnliche anisotrope Stufenstruktur gefunden wird wie auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche. Die Details der Konstruktion der Inseln sind in den Ref. [35, 154] gegeben. Hier soll nur das Ergebnis auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche vorgestellt werden.

Inseln, die in $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Richtung unendlich ausgedehnt sind, können so konstruiert werden, daß alle Atome in gleicher Konfiguration auftreten, wie sie in der (8×1)-Rekonstruktion vorkommen, wodurch die ECR erfüllt werden kann. Für Inseln, die entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ ausgedehnt sind, müssen Oberflächen-Atome eingeführt werden, die mit zwei hängenden Bindungen verbleiben. Die Elektronen können nicht auf die Orbitale verteilt werden, so daß die Oberfläche halbleitend wird, d.h., solche Inseln erfüllen nicht die ECR. Da zusätzlich ein generelles Rekonstruktionsprinzip besagt, daß die Anzahl der hängenden Bindungen in den Rekonstruktionen minimiert werden sollen, sind Atome auf der Oberfläche mit zwei hängenden Bindungen energetisch sehr ungünstig.

Insgesamt läßt sich durch die Anwendung der ECR auf eindimensionale Inseln folgern, daß Strukturen, die entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ wachsen, energetisch ungünstig sind und daher nicht auftreten. Somit sind Stufenkanten, die entlang $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ verlaufen, weit ausgedehnt.

Daß die o.g. Inseln nicht nur theoretischer Natur sind, sondern auch tatsächlich beobachtet werden, läßt sich in Abb. 5.10 erkennen. Dort ist eine solche Insel durch einen Pfeil markiert und in Abb. 5.12 vergrößert dargestellt. Diese Insel wird gebildet, indem die Lücke zwischen zwei oben liegenden Zickzackreihen durch eine zusätzliche Zickzackreihe aufwärts und eine weitere Zickzackreihe abwärts aufgefüllt wird. Schematisch ist die Insel durch die Höhenlinie unterhalb des Höhenprofils des STM-Bildes verdeutlicht.

Ein weiterer interessanter Aspekt kann auch anhand der RHEED-Intensitätssoszillationen diskutiert werden. Vergleicht man die Periode der RHEED-Intensitätssoszillationen auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche mit der Periode der RHEED-Intensitätssoszillationen auf der GaAs(001) $\beta 2(2\times 4)$ -Oberfläche (vgl. Abb. 5.11 (*rechts*), die unter denselben Wachstumsbedingungen aufgenommen wurden, so ist die Periode auf der GaAs(001)- $\beta 2(2\times 4)$ -Oberfläche fast doppelt so lang wie die der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. Der

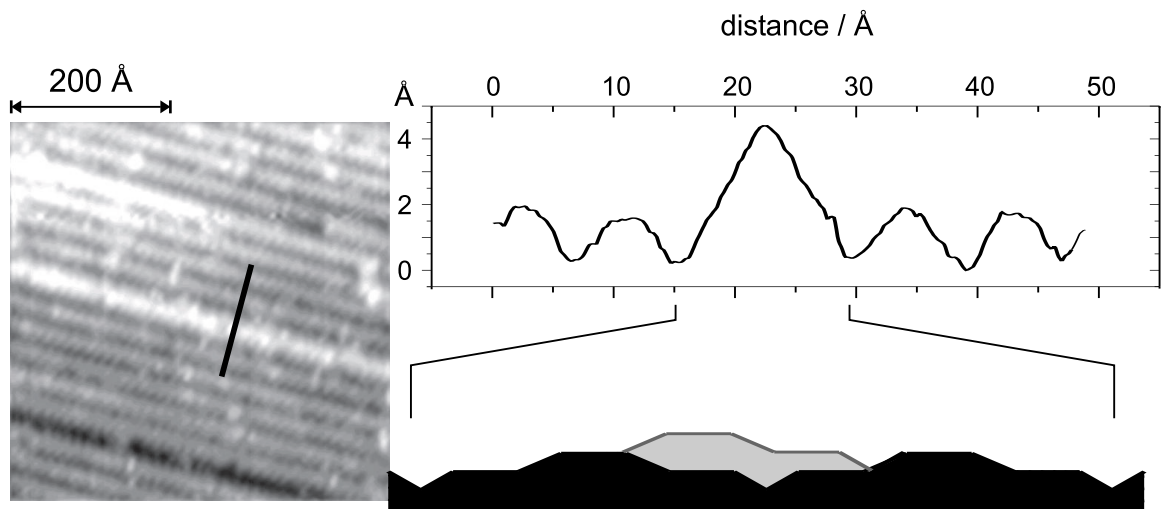


Abb. 5.12: Eindimensionale Insel. *Links*: STM-Bild, $500 \times 500 \text{ \AA}^2$, $U = -2,6 \text{ V}$, $I = 0,14 \text{ nA}$.
Rechts oben: Höhenprofil entlang der schwarz markierten Linie des STM-Bildes.
Rechts unten: Modell der Insel im Querschnitt. Die gestreifte Fläche kennzeichnet die Oberfläche, die graue Fläche zeigt den Querschnitt der Insel.

Grund hierfür liegt darin, daß die Stufenhöhe auf der GaAs(001) $\beta 2(2\times 4)$ -Oberfläche $2,8 \text{ \AA}$ beträgt, während sie auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche nur $1,7 \text{ \AA}$ beträgt. Der interessante Gesichtspunkt des Vergleiches besteht darin, daß es offenbar gerechtfertigt ist, die Wachstumsgeschwindigkeit und damit auch die abgeschiedene Menge eines Materials (über die Wachstumsdauer), die vorher auf die ‘konventionelle’ GaAs(001)-Oberfläche bestimmt wurde, auf diese hochindizierte Oberfläche zu übertragen. Dieses scheinbar triviale Ergebnis wurde zwar bislang stets, insbesondere bei Veröffentlichungen über InAs-QDs auf GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Substraten, verwendet, ist allerdings noch nie explizit gezeigt worden.

5.4.7 Vergleich mit GaAs(113)A(8×1)

Wie im vorhergehenden Abschnitt bereits erwähnt wurde, geht das Strukturmodell der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion aus dem Modell der GaAs(113)A(8×1) durch Vertauschen der As- und Ga-Atome hervor, wobei die Struktur beibehalten wird. In diesem Abschnitt soll die Morphologie der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche mit der Morphologie der GaAs(113)A(8×1)-Oberfläche verglichen werden. Zum besseren Verständnis sind ein LEED-Reflexmuster in Abb. 5.13 und ein STM-Bild in Abb. 5.14 dargestellt. Da eine genaue Untersuchung der GaAs(113)A-Oberfläche nicht Gegenstand dieser Arbeit war, soll hier nicht näher darauf eingegangen werden. Die Probenpräparation folgte den in Ref. [35, 81] beschriebenen Vorschriften. Dort ist ebenfalls eine detaillierte Beschreibung der Struktur zu finden.

Vergleicht man zunächst die LEED-Bilder beider Oberflächen, so ist naturgemäß die Periodizität identisch, die Reflexe des Beugungsbildes der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion sind sehr viel schärfer als die vom Beugungsbild der GaAs(113)A(8×1)-Rekonstruktion. Die Schärfe der LEED-Reflexe spiegelt direkt die Morphologie der Oberfläche wider: Je schärfer die Reflexe, desto größer die geordneten Bereiche der Oberfläche. In diesem Falle gibt die Schärfe die Terrassengröße wieder. Es ist also demnach zu erwarten, daß die Terrassen auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche sehr viel ausgedehnter sind als die der GaAs(113)A(8×1)-Oberfläche.

Dieses Ergebnis wird tatsächlich durch die STM-Bilder bestätigt. Es sei noch betont, daß LEED sehr viel zuverlässigere Aussagen über die Morphologie erlaubt, da es über sehr große Bereiche auf der Oberfläche mittelt. STM hingegen stellt eine sehr lokale Methode dar. Trotzdem lassen sich mit den Ausschnitten der Oberflächen, die

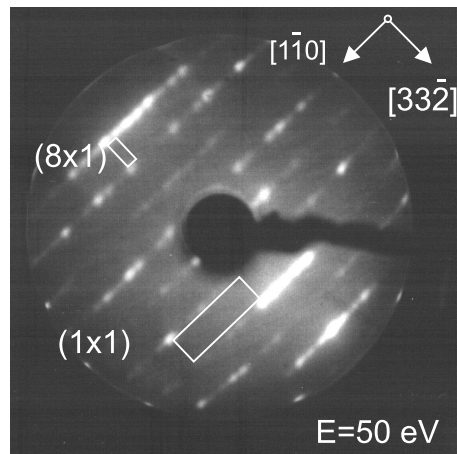


Abb. 5.13: LEED-Reflexmuster der GaAs($11\bar{3}$)A(8×1)-Rekonstruktion. Rechteckige (1×1)-Einheitszelle sowie die (8×1) sind mit eingezeichnet. $E = 50 \text{ eV}$.

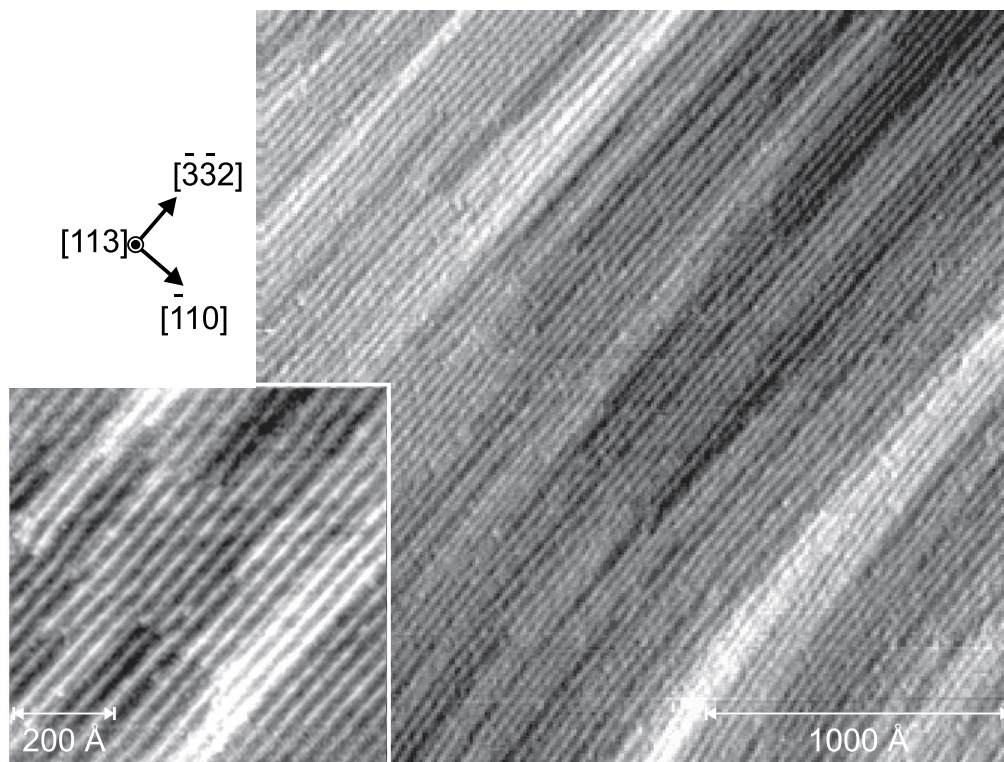


Abb. 5.14: STM-Bild der GaAs($11\bar{3}$)A(8×1)-Rekonstruktion. Großes Bild: $2500 \times 2500 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$. Kleines Bild: $700 \times 700 \text{ \AA}^2$, $U = -2,6 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$.

durch die STM-Bilder wiedergegeben sind, einige Vergleiche anstellen. Auf der A-Seite sind die Terrassenlängen entlang $[1\bar{1}0]$ sehr kurz. Selten sind Terrassen zu finden, deren Breite sich über mehr als 5 Einheitszellen erstreckt. Vielmehr erkennt man ein stetiges Auf- und Abstapeln von Zickzackreihen, die der Oberfläche eine wellige Morphologie geben.

Ein solches Stapeln ist auf der B-Seite nicht zu erkennen. Die Terrassenbreiten sind üblicherweise über mehr als 10 Einheitszellen ausgedehnt. Beide Oberflächen zeigen die anisotrope Stufenstruktur, daher ist anzunehmen, daß allein die Ausbildung der Ga-Dimere für die Morphologie verantwortlich ist. Offenkundig scheinen die Ga-Dimere Inkorporationsplätze für ankommende Teilchen zu blockieren, so daß sie praktisch nur jeweils am Kopf einer Reihe eingebaut werden können. Das wiederum hat zur Folge, daß die Ausbildung von Ga-Dimeren als sehr stabiles Strukturelement auf der Oberfläche angesehen werden sollte.

5.5 GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B As-reiche Phase

5.5.1 Präparation

Die Herstellung von InAs-, bzw. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -*Quantum Dots* auf GaAs-Substraten nach dem Stranski-Krastanow-Wachstumsmodus verlangt nach etwas niedrigeren Wachstumstemperaturen als denen, die beim Wachstum reiner GaAs-Filme verwendet werden. Der Grund hierfür liegt in der niedrigeren Desorptionstemperatur von In im Vergleich zum Ga. Daher wurde der Einfluß einer Temperaturabsenkung nach dem Wachsen auf die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B bei gleichzeitiger Beibehaltung des As-Flusses untersucht. Von der GaAs(001)-Oberfläche ist bekannt, daß die beim MBE-Wachstum ausgebildete $\beta 2(2 \times 4)$ über der ungeordneten (2×4) -Phase, der sogenannten $\gamma(2 \times 4)$ -Struktur, bei einer Temperatur von etwa 475 °C in die sehr As-reiche wohlgeordnete $c(4 \times 4)$ -Rekonstruktion übergeht (vgl. Kap. 4.5). Auch ist eine Untersuchung von As-reichen Phasen einer Oberfläche nützlich, um die Ergebnisse mit denen von Proben vergleichen zu können, die mit CVD-Verfahren hergestellt wurden [116]. Wie eingangs erwähnt, wurde bereits von Kawase *et al.* [151] über eine mit MOVPE präparierte (2×1) -Struktur auf GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B berichtet.

Diese Prozedur wurde ebenfalls mit der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B durchgeführt. Hierfür wurde nach dem Wachsen die Probenheizung so eingestellt, daß die Proben temperatur mit

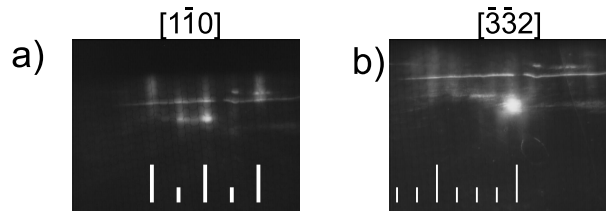


Abb. 5.15: RHEED-Reflexmuster der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche nach *Annealing* im As-Strahl. a) $[1\bar{1}0]$ -Azimuth, b) $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Azimuth. Die Position der gebeugten Strahlen ist durch weiße Linien gekennzeichnet. $E = 13$ keV.

etwa 1 K s^{-1} auf 450°C abgesenkt wurde. Der As-Fluß wurde indessen konstant gehalten. Bei einer Temperatur von etwa 470°C ändert sich das RHEED-Beugungsmuster, wie in Abb. 5.15 dargestellt ist. (Das RHEED-Beugungsmuster beim Wachstum wurde bereits in Abb. 5.3 a) und c) vorgestellt). Im $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Azimuth (vgl. Abb. 5.15 b)) geht die achtfache Periode in eine zweifache Periode über, was auf die Bildung einer Rekonstruktion mit zweifacher Periodizität entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung auf der Oberfläche hindeutet. Senkrecht hierzu bleibt die einfache Periode im Beugungsbild erhalten (vgl. Abb. 5.15 a)).

Die Proben temperatur wurde einige Minuten auf 450°C gehalten und danach auf Raumtemperatur abgesenkt, wobei simultan die Temperatur des As-Ofens abgesenkt wurde. Bei einem Hintergrunddruck von 3×10^{-9} mbar wurde die Probe in die Analysekammer transferiert, in der sie weiter untersucht wurde.

5.5.2 LEED

Ein typisches LEED-Beugungsmuster der As-reichen Phase ist in Abb. 5.16 gezeigt. Das Beugungsbild zeigt überwiegend eine (1×1) -Periodizität, dennoch ist die aus dem RHEED-Beugungsmuster erwartete zweifache Periodizität entlang der $[1\bar{1}0]$ als Streifen zwischen den Reflexreihen zu erkennen. Ein streifiges LEED-Reflexmuster zeugt von Unordnung der zweifachen Periodizität entlang $[\bar{3}\bar{3}2]$. Die Intensität der LEED-Reflexe variiert sehr stark mit der Energie und es ist relativ viel Untergrundintensität zu erkennen, so daß insgesamt ein hohes Maß an Unordnung auf dieser Oberfläche zu erwarten ist. Auch durch unterschiedliche Herstellungsverfahren, wie z.B. langsames oder schnelleres Abkühlen der Probe sowie ein schnelles Transferieren der Proben nach dem Übergang von der $8\times$ - in die $2\times$ -Periode im RHEED, konnten letztendlich

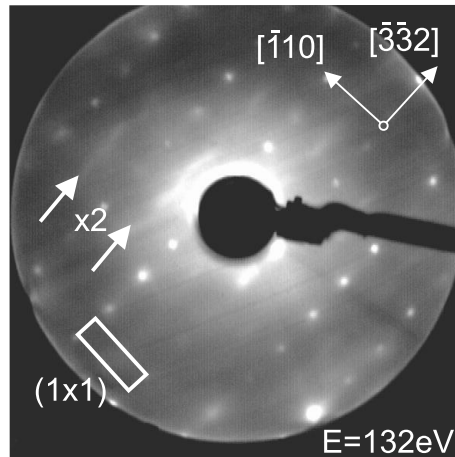


Abb. 5.16: LEED-Reflexmuster der As-reichen Phase der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. Die Pfeile markieren die Positionen einiger Reflexe, die auf eine zweifache Periodizität entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ deuten, die rechteckige bulk- (1×1) Einheitszelle ist durch ein weißes Rechteck gekennzeichnet. $E = 132 \text{ eV}$.

das LEED-Ergebnis nicht wesentlich verbessern. Das deutet darauf hin, daß es sich bei dieser Struktur um eine eingefrorene, nicht stabile Phase handeln könnte.

5.5.3 STM

Ein STM-Bild eines $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$ großen Ausschnitts der As-reichen Phase ist in Abb. 5.17 gezeigt. In diesem Bild sind einige Terrassen zu erkennen, die durch 1.7 \AA hohe Stufen getrennt werden. Die Stufenhöhe entspricht der Stufenhöhe der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B (8×1) -Oberfläche. Die Morphologie der Oberfläche ähnelt der der GaAs(001)-Oberflächen (vgl. Kap. 4). Um so erstaunlicher ist es, daß die Beugungsbilder eher von minderer Qualität waren. Ein hochauflösendes Bild, das die atomare Struktur innerhalb einer Terrasse zeigt, ist in Abb. 5.18 dargestellt. Hieraus läßt sich nun erkennen, daß die erwartete Unordnung auf dieser Skala tatsächlich vorhanden ist. Auf einer Terrasse ist eine Vielzahl von relativ kleinen Inseln und Löchern, die bis zu der darunter liegenden Lage reichen. Trotz der Unordnung sind allerdings Reihen entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ zu erkennen, die etwa $6,5 \text{ \AA}$ voneinander entfernt verlaufen. Dieser Abstand entspricht der in den RHEED-Beugungsbildern beobachteten einfachen Periodizität. Zwar ist die Länge der Einheitszelle in der $[\bar{3}\bar{3}\bar{2}]$ -Richtung $13,3 \text{ \AA}$; da es sich um eine flächenzentrierte Einheitszelle handelt, ist in den RHEED-Bildern lediglich eine Periode zu beobachten, die gerade der Hälfte der (1×1) -Einheitszelle entspricht. Die zweifache Periodizität im

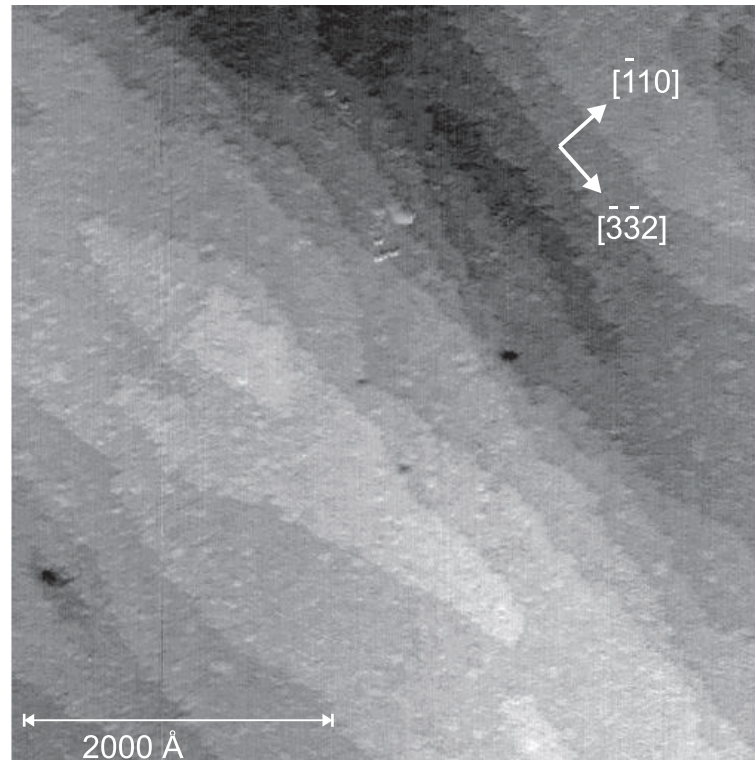


Abb. 5.17: STM-Bild der As-reichen Phase der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$, $U = -2,8 \text{ V}$, $I = 0,125 \text{ nA}$.

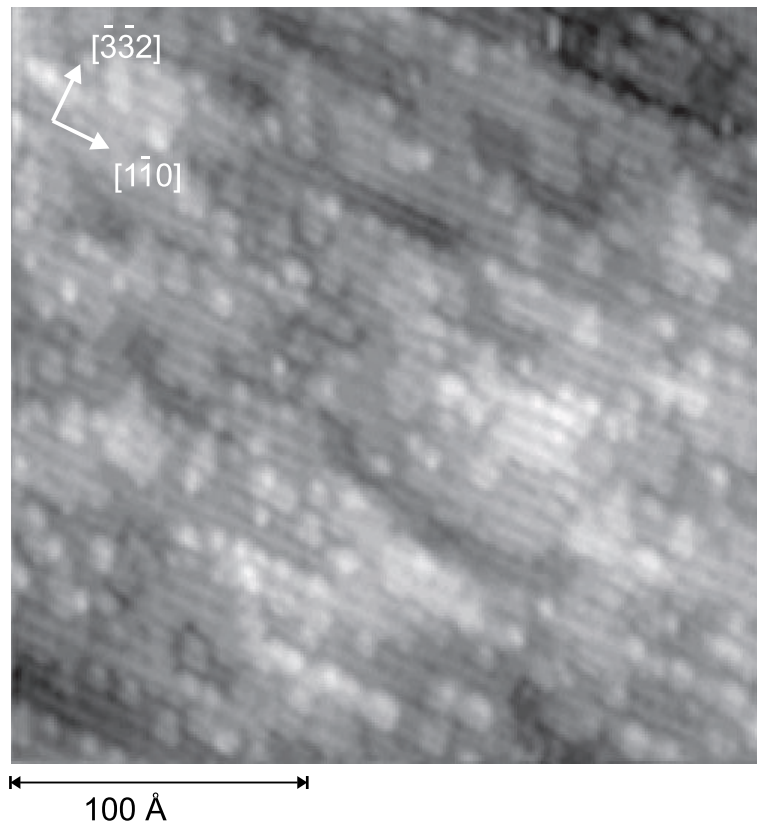


Abb. 5.18: Hochauflösendes STM-Bild der As-reichen Phase der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. $250 \times 250 \text{ \AA}^2$, $U = -3,25 \text{ V}$, $I = 0,12 \text{ nA}$.

dazu senkrechten Azimuth ist nicht ohne weiteres zu erkennen. Hierauf soll im nächsten Abschnitt näher eingegangen werden. Insgesamt gesehen, zeigt diese As-reiche Oberfläche keine besonders gut geordnete Struktur auf, wie zum Beispiel die bereits diskutierte (8×1) -Rekonstruktion.

5.5.4 Diskussion

Um die Anordnung der Atome in der As-reichen Phase zu erklären, wurden aus verschiedenen STM-Messungen Bereiche vergrößert, anhand derer sich die atomare Struktur erklären ließe. Diese sind in Abb. 5.19 a) bis c) zusammengestellt. In Abb. 5.19 a) verlaufen zwei Reihen von längeren Strukturen entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung, die durch einen $1,7 \text{ \AA}$ tiefen Graben getrennt sind. Der Abstand der Reihen beträgt etwa 13 \AA , der Abstand der längeren Strukturen innerhalb der Reihen beträgt 8 \AA . Aus der Form sowie der kristallographischen Richtung ist zu erwarten, daß diese Reihen von As-

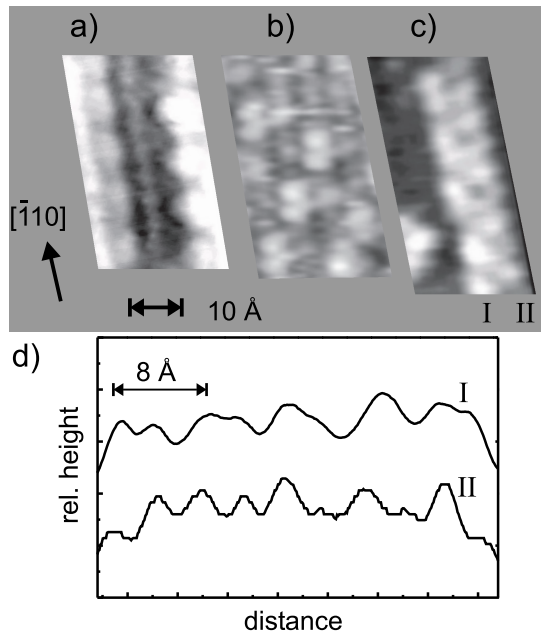


Abb. 5.19: Hochauflösende STM-Bilder der As-reichen Phase der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche.
 a) Zwei As-Dimer-Reihen entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$. b) (1×1) -Domäne durch As-Adatome.
 c) Kombination einer As-Dimer-Reihe und einer As-Adatom-Reihe. d) Höhenprofile entlang den in c) mit I (As-Dimer-Reihe) und II (As-Adatom-Reihe) gekennzeichneten Reihen.

Dimeren gebildet werden. Gestützt wird diese Zuordnung ferner durch die Polarität der Spannung, mit der dieses Bild aufgenommen wurde (gefüllte Zustände). Reihen von As-Dimeren in $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung erklären die beobachtete zweifache Periodizität des RHEED-Beugungsbildes im $[\bar{3}\bar{3}2]$ -Azimuth. Diese Reihen sind weder besonders lang ausgedehnt, noch treten viele geordnet nebeneinander auf. Daher kommt das streifige Erscheinen der zweifachen Periodizität im LEED-Reflexmuster zustande.

Der Ausschnitt in Abb. 5.19 b) zeigt Reihen von Atomen, die im Abstand von $6,5 \text{ \AA}$ entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung verlaufen. Daß die Reihen von As-Atomen gebildet werden, ergibt sich zum einen aus der Tatsache, daß gefüllte Zustände abgebildet werden, und zum anderen aus den geometrischen Abmessungen. Diese unterscheiden sich von As-Dimeren, in dem sie eine Periode entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung von lediglich 4 \AA aufweisen. Im Gegensatz zu den As-Dimeren treten diese Reihen in einem Abstand von $6,5 \text{ \AA}$ auf, so daß es sich hierbei um Reihen von As-Adatomen handeln sollte, die in dem Dreifach-Lochplatz (vgl. Abb. 5.2 a)) eingebaut sind. Im nächsten Abschnitt wird ein dazu gehörender Strukturvorschlag näher beschrieben.

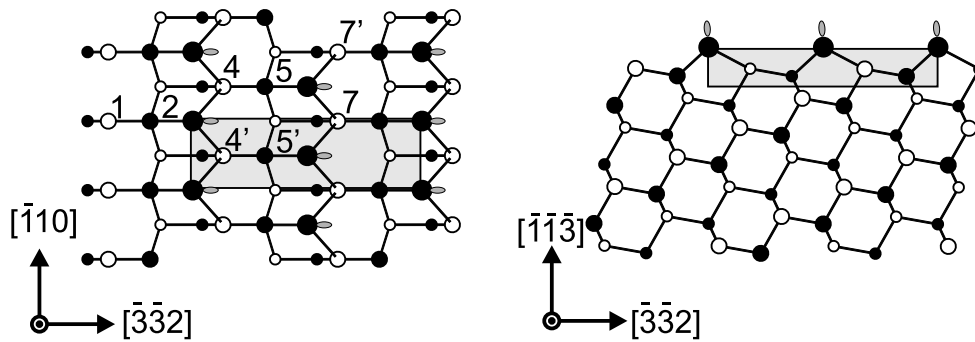


Abb. 5.20: Schematisches Strukturmodell einer (1×1) -Rekonstruktion der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B. As-Adatom-Modell von Stiles und Kahn [147]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle, die As-Adatome sind durch die etwas größere Kreise gekennzeichnet.

Des weiteren sind hier einige helle Kokon-förmige Gebilde zu sehen, die auf den Atomreihen zusätzlich adsorbiert sind. Diese Objekte sind mit Sicherheit adsorbierte As-Dimere, die daher zur darüberliegenden Lage zu zählen sind. Abb. 5.19 c) zeigt schließlich eine Insel, die aus einer As-Dimer-Reihe (links, Reihe I) und einer Reihe As-Atomen (rechts, Reihe II) besteht. In Abb. 5.19 d) sind die dazu gehörigen Liniennprofile entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung dargestellt. Deutlich ist in dieser Abbildung der Unterschied zwischen den As-Dimeren und den As-Atomen zu erkennen: Während die As-Dimere aus einem Objekt mit zwei Maxima bestehen (Linie I), die durch die gefüllten hängenden Bindungen des Dimers hervorgerufen werden, werden die Atomreihen aus einzelnen im Abstand von 4 \AA stehenden Maxima gebildet (Linie II).

5.5.5 Strukturmodelle

Die STM-Beobachtungen können zum Teil anhand bereits in der Literatur existierender Strukturvorschläge für die As-reiche Phase erklärt werden, die im folgenden diskutiert werden. Die (1×1) -Struktur wurde bereits in der ersten Arbeit zur GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)-Oberfläche von Stiles und Kahn [147] eingeführt und ist in Abb. 5.20 schematisch dargestellt. Dieses Modell geht aus der *bulk-truncated* Struktur (B) durch den Einbau eines zusätzlichen As-Atoms hervor, das an den 2, 4 und 4' bindet (Dreifach-Lochplatz). Da es dreifach gebunden ist, behält es noch eine hängende Bindung.

Die Anwendung der Elektronenzählregel [45–48] liefert folgende Ladungsverteilung: Pro Einheitszelle ist nur ein As-Adatom vorhanden, das an einer Bindung zu einem

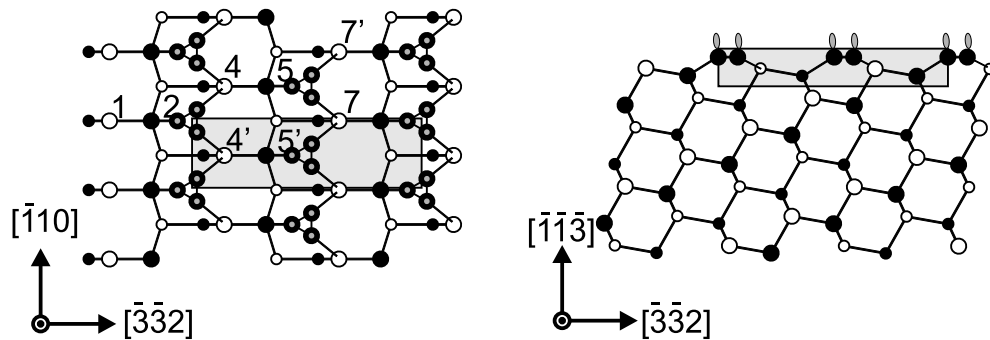


Abb. 5.21: Schematisches Strukturmodell einer (1×1) -Rekonstruktion der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. As-Trimer-Modell. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle.

weiteren As-Atom beteiligt ist. Daher sind $3\frac{3}{4}$ Elektronen auf zwei Orbitale zu verteilen, d.h., dieses Modell hat $\frac{1}{4}$ Elektronenladung zu wenig, um die Zählregel zu erfüllen. Diese fehlende Ladung könnte erklären, weshalb die Bereiche mit As-Adatomen auf der Oberfläche nicht besonders ausgedehnt sind. Ferner sollten durch den Einbau von Defekten, d.h. Löchern und Inseln, auf den Terrassen zusätzliche hängende Bindungen von Ga-Atomen gebildet werden, die Ladung abgeben könnten.

Eine weitere (1×1) -Struktur könnte durch Bildung von As-Trimeren konstruiert werden, wie in Abb. 5.21 dargestellt ist. Dabei ist ein Trimer am gleichen Platz gebunden wie das o.g. As-Adatom. Die Anwendung der Elektronenzählregel ergibt, daß dieses Modell ebenfalls $\frac{1}{4}$ Ladung zu wenig besitzt, sollte daher prinzipiell ebenso möglich sein wie das Adatom-Modell von Stiles und Kahn [147]. Ein Vergleich mit dem As-Trimer-Modell der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)B(2×2)-Oberfläche zeigt allerdings, daß die Bindungslänge der As-Atome im Trimer etwa $2,37 \text{ \AA}$ beträgt [145]. Der Abstand zwischen zwei Trimeren entspricht dem zweifachen der Gitterkonstanten. In der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(1×1)-Einheitszelle wären zwei benachbarte Trimere lediglich eine Gitterkonstanten voneinander getrennt, so daß aufgrund dieser räumlichen Abmessungen ein Trimer-Modell auszuschließen ist.

Das dritte Modell, das eine (1×1) -Struktur hervorrufen würde, ist in Abb. 5.22 dargestellt. Es geht aus dem As-Adatom-Strukturmodell hervor, wobei das vierfach gebundene As-Atom, das am Adatom bindet, seine Rückbindung zum Ga-Atom aufbricht. Dadurch entsteht ein 'reines' As-Dimer, dessen As-As-Bindung entlang $[\bar{3}\bar{3}2]$ gerichtet ist. Die rekonstruierte (1×1) -Einheitszelle beinhaltet somit ein As-Dimer und ein dreifach gebundenes Ga-Atom. Im Bild der Elektronenzählregel müssen daher

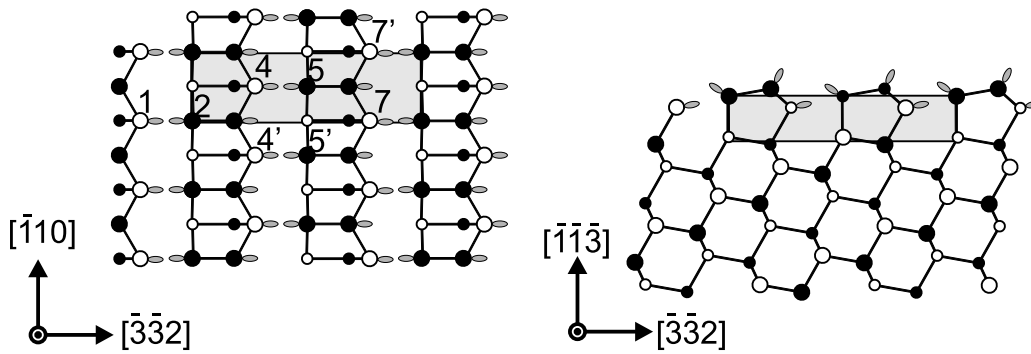


Abb. 5.22: Schematisches Strukturmodell einer (1×1) -Rekonstruktion der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. As-Dimer-Modell. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle.

$5\frac{3}{4}$ Elektronenladungen auf das As-As-Bindungsorbital und auf die zwei hängenden Bindungen des As-Dimers verteilt werden. Das heißt, $\frac{1}{4}$ Ladung fehlt diesem Rekonstruktionsmodell. Auch hier könnte die fehlende Ladung durch Defekte und Stufen aufgebracht werden, wodurch ladungsabgebende Ga-Atome an die Oberfläche treten sollten.

Prinzipiell kann auch dieses Modell gegenüber den anderen Modellen nicht ausgeschlossen werden und würde ebenfalls die STM-Bilder wie folgt erklären: Dadurch, daß die As-Dimere gegenüber der Oberfläche geneigt sind, wäre es möglich, daß überwiegend eine hängende Bindung des As-Dimers abgebildet wird. Daher wären die As-Dimere als Reihen von einzelnen Objekten entlang $[1\bar{1}0]$ in den STM-Bildern zu sehen. Gegen den Strukturvorschlag spricht allerdings die zu erwartende Instabilität, die aufgrund von stark veränderten Bindungslängen und -winkeln entstehen könnte. Ein Blick auf die Seitenansicht des Modells (vgl. Abb. 5.22) zeigt, daß mit diesem Modell erhebliche Bindungswinkeländerungen verbunden sein könnten. Um diese Vermutung zu stützen, müßten allerdings z.B. eine LEED-Strukturanalyse und/oder theoretische Rechnungen durchgeführt werden, da die Bindungsgeometrie aus den hier zur Verfügung stehenden experimentellen Daten nicht zugänglich ist.

Das nächste Modell, das zur Erklärung der experimentellen Beobachtungen herangezogen werden kann, ist ein Strukturvorschlag von Kawase *et al.* [151]. Dieses Modell ist in Abb. 5.23 skizziert. Es geht aus der *bulk-truncated* B'-Struktur hervor, indem auf den Atomen 3, 3', 5 und 5' ein As-Dimer gebunden wird. Die As-Dimer-Bindung verläuft entlang der $[1\bar{1}0]$ und erklärt die STM-Beobachtungen, die auf As-

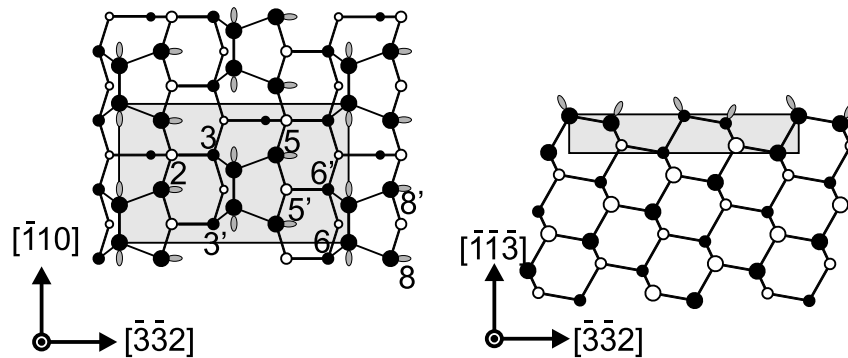


Abb. 5.23: Schematisches Strukturmodell einer (2×1) -Rekonstruktion der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche. As-Dimer-Modell von Kawase *et al.* [151]. Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle.

Dimer-Reihen entlang dieser Richtung schließen ließen. Ferner zeigt dieses Modell eine (2×1) -Periodizität auf, die in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Elektronenbeugungsbildern steht.

Die Einheitszelle enthält zwei As-Dimere, die an As-Atome gebunden sind, und vier dreifach gebundene As-Atome. Daher sind nach der Elektronenzählregel 35 Elektronen auf 18 Orbitale zu verteilen. Somit fehlen auch in diesem Strukturvorschlag Ladungen, die durch den Einbau von Defekten aufgebracht werden müßten.

Letztendlich ist ein Modell denkbar, das abwechselnd As-Dimer-Reihen und Reihen von As-Adatomen entlang $[1\bar{1}0]$ enthält. Ein solcher Strukturvorschlag ist in Abb. 5.24 dargestellt. Eine solche Mischstruktur wurde tatsächlich in den STM-Bildern beobachtet (vgl. Abb. 5.19 c) Die Anwendung der Elektronenzählregel ergibt allerdings auch für dieses Strukturmodell eine fehlende Elektronenladung pro Einheitszelle.

5.5.6 Fazit

Für die As-reiche Phase konnte kein Modell gefunden werden, das die Elektronenzählregel befriedigt. Aufgrund der in den Experimenten beobachteten fehlenden Ordnung auf atomarer Ebene ist zu vermuten, daß diese Phase in der Tat keine stabile Rekonstruktion aufweist. Vielmehr scheint diese Phase eine Mischung darzustellen, die sowohl (1×1) -rekonstruierte Domänen enthält, wie auch vereinzelt As-Dimer-Reihen, die entlang $[1\bar{1}0]$ verlaufen und die beobachtete zweifache Periodizität in den Elektronenbeugungsexperimenten verursachen. Bei allen vorgeschlagenen Strukturmodellen fehlen Ladungen. Daher ist der Einbau von Defekten nötig, um Ga-Atome mit hän-

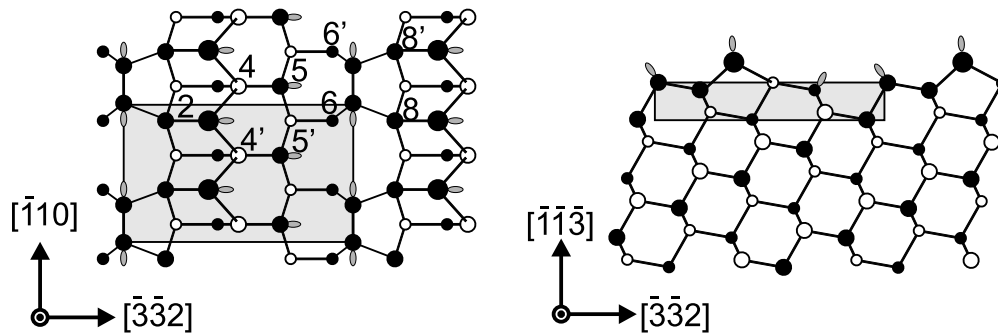


Abb. 5.24: Schematisches Strukturmodell einer (2×1) -Rekonstruktion der $\text{GaAs}(\bar{1}\bar{1}\bar{3})\text{B}$ -Oberfläche. Mischstruktur aus As-Adatom und As-Dimer (entlang $[\bar{1}10]$). Das grau unterlegte Rechteck markiert die Einheitszelle.

genden Bindungen an die Oberfläche hervortreten zu lassen. Solche Ga-Atome können ihre überschüssige Ladung an die Umgebung abgeben und somit für die notwendige Ladungsneutralität sorgen. Defekte, die Ga-Atome an die Oberfläche treten lassen, sind bevorzugt bei den As-Adatom-Reihen zu finden. Diese sind nämlich an darunter liegende Ga-Atome gebunden. Die As-Dimere sind hingegen an weitere As-Atome gebunden; daher muß ein Defekt bis zur dritten atomaren Lage reichen. Dies bestätigt sich im STM-Bild der Abb. 5.19 a), das einen 1.7 \AA tiefen Graben zwischen zwei As-Dimer-Reihen zeigt. Somit weist der Einbau von Defekten in den As-Adatom-Domänen auf eine niedrigere Korrugation der Oberfläche.

Weitere Strukturmodelle mit mehr Ga-Atomen bzw. Ga-Dimeren sind aufgrund der präparativen As-reichen Bedingungen auszuschließen. Des weiteren kann das Modell von Scholz *et al.* [149, 155] mit alternierenden As-Adatomen ausgeschlossen werden, da aus den STM-Bildern eindeutig geschlossen werden konnte, daß die zweifache Periodizität durch Dimerisierung von As-Atomen verursacht wurde.

5.6 Übergang zwischen den Phasen

Bereits anhand der RHEED-Muster konnte geschlossen werden, daß die tatsächliche Wachstumsfläche (bei MBE) die (8×1) -Rekonstruktion ist. Das legt den Schluß nahe, daß die As-reiche Phase lediglich durch zusätzliche Adsorption von As-Atomen gebildet wird. Um den Übergang zur As-reichen Phase zu studieren, wurde eine Probe innerhalb einiger Minuten unter As-Fluß abgekühlt und sehr schnell transferiert. Dabei war die achtfache Periodizität im RHEED-Muster nahezu verlorengegangen, die

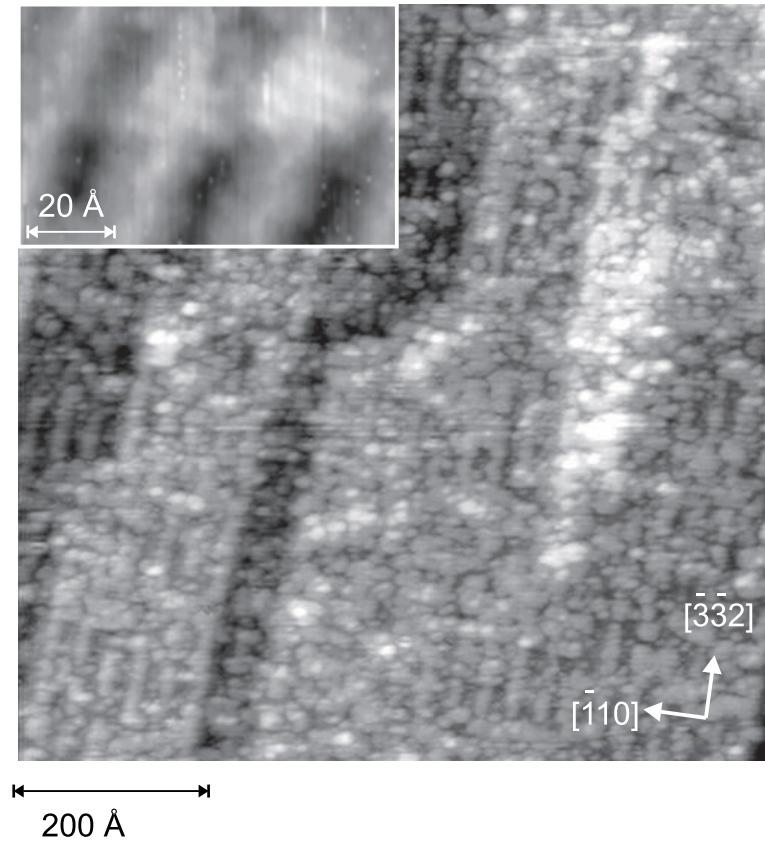


Abb. 5.25: STM-Bild des Übergangs der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Rekonstruktion in die As-reiche Phase. $600 \times 600 \text{ \AA}^2$, $U = -2,8 \text{ V}$, $I = 0,14 \text{ nA}$. Der Einschub zeigt As-Strukturen, die senkrecht zu den Ga-Zickzackketten gebildet werden.

zweifache war allerdings noch nicht zu beobachten. Im LEED-Muster waren nur die Grundgitterreflexe zu beobachten. Ein STM-Bild dieser Oberfläche ist in Abb. 5.25 dargestellt. Deutlich ist in diesem Bild der Verlauf von Zickzackreihen der (8×1)-Rekonstruktion zu erkennen. Auf dieser Rekonstruktion sind sehr viele kleine, relativ ungeordnete Gebilde zu erkennen, deren Struktur genauer im Einschub oben links im Bild erkennbar wird.

Auf den Zickzackreihen bilden sich kurze Reihen, die in senkrechter Richtung verlaufen. Dieses legt den Schluß nahe, die Reihen mit As-Dimeren zu identifizieren. Offenbar handelt es sich bei der As-reichen Phase somit um eine Phase, bei der die (8×1)-Struktur durch As überwachsen wird. Ein möglicher Weg von der (8×1)-Struktur in die As-reiche Phase soll anhand der Abb. 5.26 skizziert werden. Es sei dabei betont, daß diese Vorstellung nicht etwa durch eine Rechnung unterstützt wird.

Vielmehr geht es darum aufzuzeigen, daß es prinzipiell möglich ist, ohne Hinzufügen von Ga-Atomen von der (8×1) -Struktur in die As-reiche Phase überzugehen. Zunächst werden die oben liegenden Ga-Dimere durch As-Dimere ersetzt und die daraus heraustretenden Ga-Atome in den Graben eingebaut. Die neue Position der Ga-Atome ist in Abb. 5.26 a) mit einem Pfeil gekennzeichnet. Daraufhin wird eine As-Lage eingebaut, die die Ga-Dimere der unten liegenden Zickzackreihen aufbrechen (Abb. 5.26 b)). Schließlich werden auf dieser As-Lage As-Dimere adsorbiert (Abb. 5.26 c). Der Übergang von der (8×1) - in die (2×1) -Struktur ist somit ohne Hinzufügen von Ga-Atomen möglich, obwohl sich die (8×1) -Struktur über 6 Atomlagen erstreckt.

Ein ähnliches Verhalten zeigt auch die GaAs(113)A(8×1)-Rekonstruktion. Moriarty *et al.* [156] beobachteten bei Proben, die nach dem Wachsen im As-Strom abgekühlt und anschließend ‘gecappt’ wurden, eine auftretende Unordnung der (8×1) -Rekonstruktion. STM-Messungen zeigten, daß die achtfache Periodizität durch zusätzlich adsorbierte As-Dimere gestört wurde, die den Graben zwischen den unteren As-Dimeren ausfüllten. Dadurch ergaben sich geringere Periodizitäten ($2 \times$, $3 \times$ und $5 \times$) entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung. Die zweifache Periode ergibt dann eine rekonstruierte (113)A-Oberfläche, die wie die hier vorgestellte GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(2×1) aus As-Dimerreihen gebildet wird.

5.7 Zusammenfassung und Ausblick

Die durch MBE präparierte GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche zeigte zwei stabile Phasen, die durch unterschiedliche Prozeduren nach dem Wachsen erhalten wurden.

Die Rekonstruktion, die bereits während des MBE-Wachsens gebildet wird, zeigt eine (8×1) -Periodizität und ist der (8×1) -Struktur der GaAs(113)A-Oberfläche analog, d.h., beide Strukturen werden durch die gleichen Komponenten, aber mit vertauschten Elementen gebildet. Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche zeigt eine extrem anisotrope Stufenstruktur, die auf 2D-Nukleation und Wachstum entlang $[\bar{3}\bar{3}2]$ zurückgeführt werden konnte. Die Morphologie der Oberfläche zeigte ausgedehnte Terrassen, und im Gegensatz zur GaAs(113)A ist keine Welligkeit beobachtet worden.

Wird die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1) im As-Strahl abgekühlt, geht sie in eine As-reiche Phase über. Diese Phase ist auf atomarer Skala im hohen Maße ungeordnet, zeigt allerdings auf einer mesoskopischen Skala ausgedehnte Terrassen und monoatomare Stufen. Die Rekonstruktion wird hauptsächlich durch zwei Komponenten aufgebaut,

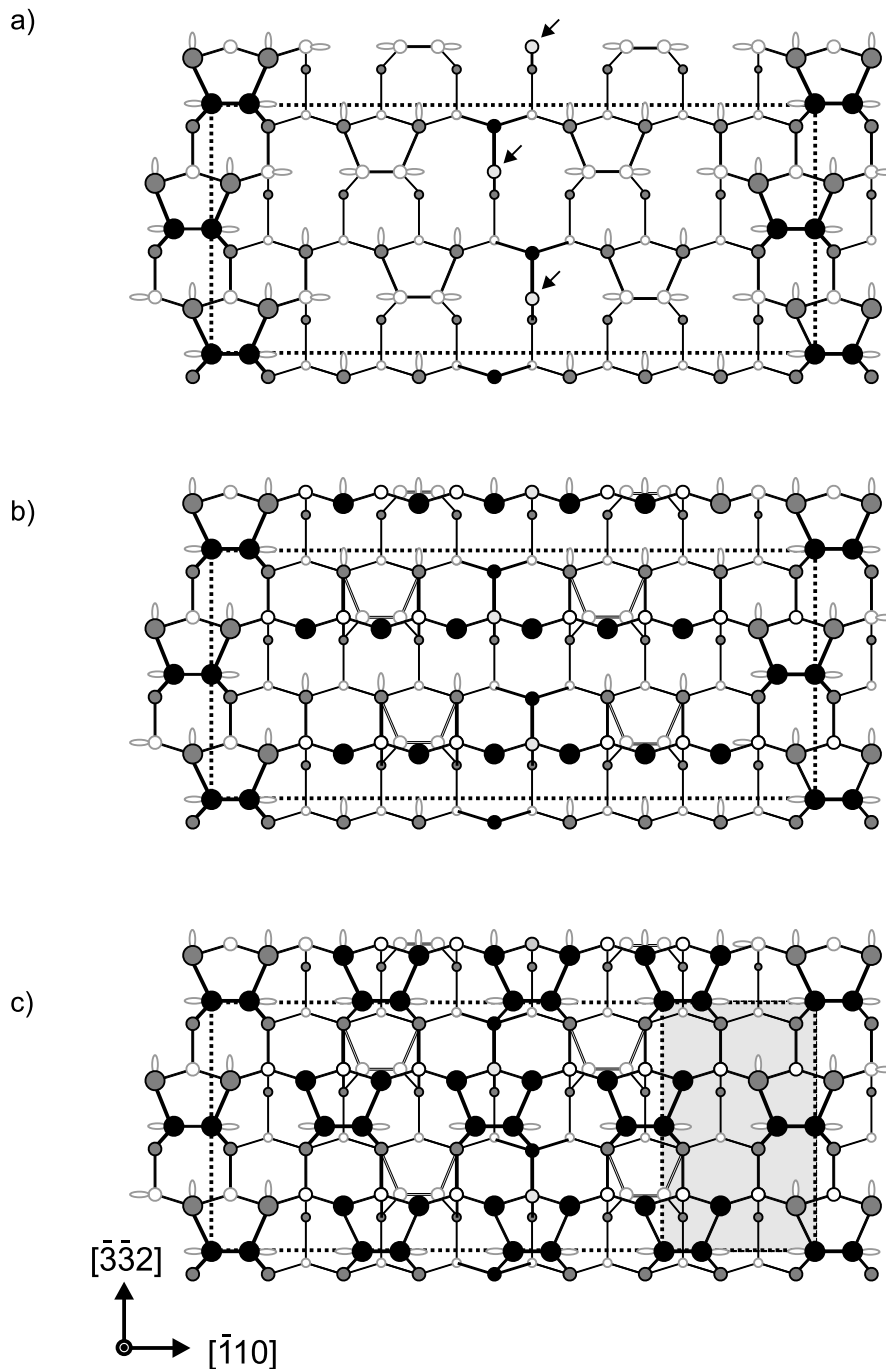


Abb. 5.26: Schematische Darstellung des Überganges von der (8×1) -Struktur in die (2×1) -Struktur von Kawase *et al.* [151]: a) Zunächst werden die Ga-Dimere durch As-Dimere ersetzt. Die daraus losgelösten Ga-Atome können im Graben an der Position, die durch die Pfeile markiert wird, eingebaut werden. b) Im Bereich zwischen den Dimer-Zickzackketten können As-Atome eingebaut werden, wobei gleichzeitig die verbleibenden Ga-Dimere aufgebrochen werden. c) Auf dieser neuen As-Schicht adsorbieren weitere As-Dimere, wobei die charakteristischen Reihen senkrecht zu den Zickzackketten entstehen.

die eine Mischphase bilden. Zum einen existieren Reihen von As-Dimeren, die entlang $[1\bar{1}0]$ angeordnet sind, zum anderen werden Bereiche auf der Oberfläche gefunden, auf denen eine (1×1) -Rekonstruktion durch adsorbierte, dreifach koordinierte As-Atome gebildet wird. Beide Rekonstruktionsvorschläge für die As-reiche Phase, die auf STM-Beobachtungen basieren, erfüllen nicht die Elektronenzählregel und zeigen aufgrund dessen eine Vielzahl von Defekten (2D-Inseln und Löcher) auf den Terrassen. Offenbar kann eine Oberfläche durch Absättigung der gebrochenen Bindungen eine stabile Phase erreichen, ohne daß der halbleitende Zustand eingenommen wird. Es genügt anscheinend, eine lokale Kompensation der überschüssigen Ladungen durch Defekte zu erreichen, um die Oberfläche gegenüber einer Facettierung zu stabilisieren.

Im Hinblick auf $\text{InAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs-Heterostrukturen sollte $\text{GaAs}(\bar{1}\bar{1}\bar{3})\text{B}$ eine sehr geeignete Oberfläche sein, um interessante selbstordnende Effekte zu finden. Sowohl die As-reiche Phase mit ihrer hohen Zahl von Defekten, die als potentielle Nukleationszentren angesehen werden können, als auch die (8×1) -Rekonstruktion mit einer bevorzugten Wachstumsrichtung könnten zur Erklärung der bereits gefundenen Phänomene für die Anordnung von $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Inseln herangezogen werden. Im laufenden Projekt soll dies weiter verfolgt werden.

Des weiteren könnte die Ga-reiche Phase interessant für das Wachstum von verspannten InAs-Filmen sein. Die Ga-reiche Phase wurde bei verhältnismäßig niedrigen Temperaturen gefunden. Von der GaAs(001)-Oberfläche ist bekannt, daß InAs auf der Ga-reichen GaAs(001) $(4 \times 2)/c(8 \times 2)$ pseudomorph aufwächst, ohne daß dreidimensionale Inseln gebildet werden [157, 158]. Ga-reiche Rekonstruktionen auf der GaAs(001)-Oberfläche sind aufgrund der hohen Substrattemperaturen schwieriger herzustellen, weil stets die Gefahr der Ga-Tropfenbildung besteht. Im Fall der $\text{GaAs}(\bar{1}\bar{1}\bar{3})\text{B}(8 \times 1)$ ist diese Gefahr gerade wegen der niedrigen Temperatur minimiert. Daher wäre es interessant zu erforschen, ob es gelingt, eine In-stabilisierte Rekonstruktion auf der Oberfläche zu erhalten und damit zweidimensionales Wachstum zu erreichen. Solche Schichten haben in der Optoelektronik großes Anwendungspotential [159].

6 Die GaAs(114)A-Oberfläche

6.1 Einführung

Auf (114)-orientierte GaAs-Substrate wurden diverse Heterostrukturen untersucht [160–163] und auch bereits *Quantum-Well*-Laser gewachsen [164]. Von den Autoren wurde dabei oftmals erwähnt, daß die Grenzschicht zwischen den unterschiedlichen Materialien atomar abrupt und extrem flach sei [162]. Das äußerte sich in den optoelektronischen Bauelementen dadurch, daß ihre Linienbreiten in der Photolumineszenzspektroskopie vergleichbar waren mit denjenigen der besten auf GaAs(001)-Substraten gewachsenen Bauelementen. Erklärt wurde dieses Phänomen durch die Annahme, die GaAs(114)-Oberfläche sei eine extreme (001)-Vizinalfläche [161]. Ihre (001)-orientierten Terrassen seien nur wenige Einheitszellen breit, wodurch stets ein Stufenflußwachstum auf dieser Oberfläche herrsche (vgl. Kap. 2.3.2). Die Ausbildung der Mikroterrassen haben dann zur Folge, daß die Dicke der Heterostrukturen im Mittel über sehr große Bereiche gleich ist.

Dies soll anhand der Abb. 6.1 näher erläutert werden. Die GaAs(001)-Oberfläche zeichnet sich durch ausgedehnte Terrassen und 2D-Inseln aus (vgl. Kap. 4). Daher gibt es bei darauf gewachsenen Heterostrukturen eine Dickenänderung von einer Monolage ($2,8 \text{ \AA}$) in Bereichen, bei denen z.B. eine Insel auf der unteren Grenzfläche existiert. Diese Insel ist weit ausgedehnt und bewirkt demnach, daß hier ein *Quantum-Well* (QW) entsteht, der eine geringere Dicke aufweist als die Bereiche neben der Insel. Dadurch wird hier die *Confinement*-Energie, die von der Dicke des QW abhängt, anders sein als für Bereiche neben der Insel. Das Ergebnis ist dann, daß sich die Lumineszenzlinien für ein solches Bauteil aus vielen Energien entsprechend der Dickenfluktuation im QW zusammensetzen [165].

Dem Modell nach sieht die Situation auf einer GaAs(114)-Fläche anders aus. Hier

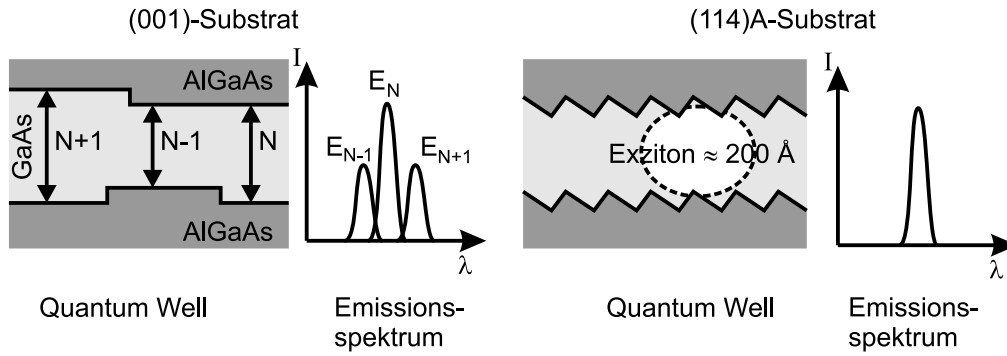


Abb. 6.1: Vergleich der Emissionsspektren von *Quantum Wells*, die auf einem GaAs(001)- (links) und auf GaAs(114)-Substrat (rechts) gewachsen wurden. Das Emissionsspektrum der (001)-orientierten Probe setzt sich aus mehreren Linien entsprechend der Dickenfluktuation des *Quantum Wells* zusammen. Die Dickenfluktuation auf der GaAs(114)-Probe ist viel kleiner als der Ausdehnungsradius des Exzitons. Aus diesem Grunde spielt die Dickenfluktuation keine Rolle, was sich in nur einer Emissionslinie widerspiegelt. Nach Ref. [161].

sind die Mikroterrassen, die ausgebildet werden, sehr viel kleiner als der Ausdehnungsradius eines Exzitons. Dadurch ergibt sich über die Struktur hinweg eine gleichbleibende *Confinement*-Energie für die Exzitonen. Somit setzt sich die Emissionslinie eines Bauelementes aus nur einer Energie zusammen.

Diese Vorstellung, die GaAs(114)-Oberfläche sei ein Grenzfall einer (001)-Vizinalfläche, beruht ausschließlich auf Untersuchungen von Heterostrukturen. Daß diese Vorstellung nicht nur für Grenzflächen von Heterostrukturen von Bedeutung ist, sondern auch für die Form von dreidimensionalen Strukturen, die sich auf verspannt gewachsenen Materialien bilden, wurde von Ponchet *et al.* [166] in Betracht gezogen. Die Bildung von dreidimensionalen Strukturen, um die Verspannungsenergie zu erniedrigen, geht auf Kosten einer größeren Oberfläche und damit einer Erhöhung der Oberflächenenergie. Daher sollten die neu entstandenen Oberflächen, die die dreidimensionalen Strukturen umhüllen, möglichst Niedrigenergieflächen sein. Da die GaAs(001)-Oberfläche eine niederenergetische Oberfläche ist, ist den Autoren zufolge die Bildung von (114)-Facetten mit der o.g. Treppenstruktur als Seitenflächen der dreidimensionalen Strukturen energetisch günstig, um die Verspannung abzubauen. Tatsächlich sind (114)-orientierte Flächen als Seitenflächen von InAs-Inseln experimentell beobachtet worden [22]. Darüber hinaus ist die Vorstellung der extremen Vizinalfläche ebenfalls für das Wachstum

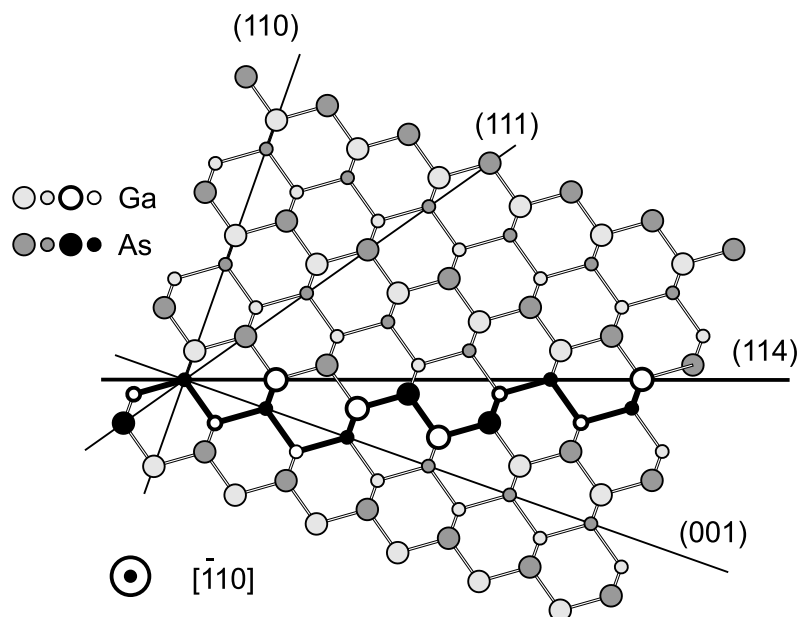


Abb. 6.2: Ausschnitt der $[1\bar{1}0]$ -Zone des GaAs-Kristalls. Die (114)-Oberflächenatome sind durch die dickeren Kreise markiert.

von *Quantum Dots* (QDs) interessant, da von einigen Autoren die Nukleation von QDs an Stufenkanten beobachtet wurde [14, 15, 167].

Das Motiv dieser Studie war die Präparation der GaAs(114)-Oberfläche unter verschiedenen MBE-Bedingungen, um dadurch erstens die Struktur der Oberfläche aufzuklären und zweitens zu prüfen, ob sich diese Oberfläche für das Wachsen von *Quantum Dots* eignen würde.

6.2 Oberflächengeometrie

Die Lage der GaAs(114)A-Oberfläche in der kristallographischen $[1\bar{1}0]$ -Zone ist in Abb. 6.2 dargestellt. Sie ist von der (001) um $19,5^\circ$ geneigt in Richtung der (111)A-Fläche. In der Tat wirft diese Orientierung im Kristall die Frage auf, ob die GaAs(114)-Oberfläche als eigenständige Oberfläche stabil ist oder ob sie im Sinne einer Vizinalfläche in eine Treppenstruktur zerfällt, die aus (001)-orientierten Terrassen und (111)A-Stufen besteht. Eine solche hypothetische Struktur ist in Abb. 6.3 verdeutlicht. Vom Siliziumkristall ist bekannt, daß (114) die erste von der (001)-Orientierung ausgehende Oberfläche in der $[1\bar{1}0]$ -Zone ist, die eine eigenständige Rekonstruktion aufweist [168].

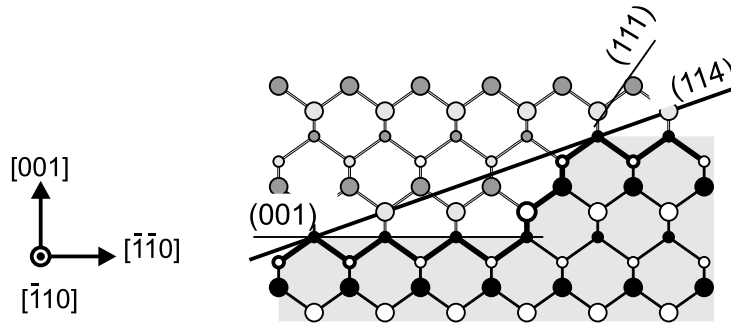


Abb. 6.3: Alternative Darstellung der (114)-Oberfläche. Demnach besteht die (114)-Fläche aus (001)-orientierten Terrassen und zweifachen (111)-Stufen.

Die *bulk-truncated* Struktur ist in Abb. 6.4 in Auf- und Seitenansicht dargestellt. Die Einheitszelle der *bulk-truncated* Struktur ist durch das grau unterlegte Rechteck markiert. Diese Einheitszelle mißt 4 \AA in $[1\bar{1}0]$ -Richtung und 17 \AA entlang $[\bar{2}\bar{2}1]$. Interessanterweise ist die GaAs(114)-Oberfläche stöchiometrisch, d.h., in jeder atomaren Lage ist die gleiche Anzahl von Ga- und As-Atomen vorhanden, wie anhand der gestrichelten Linien in der Seitenansicht zu erkennen ist. Die Einheitszelle enthält zwei zweifach koordinierte As-Atome, ein zweifach koordiniertes Ga-Atom, d.h. (001)-ähnlich gebundene Atome, und zwei dreifach koordinierte Ga-Atome. Somit ist zu vermuten, daß im Falle einer stabilen Rekonstruktion, die GaAs(114) eher den Rekonstruktionsprinzipien folgen wird, die für die GaAs(001)-Rekonstruktionen typisch sind (vgl Kap. 4 und Ref. [28]).

Analog zur GaAs(001)-Oberfläche läßt die *bulk-truncated* Struktur vermuten, daß die As-Atome 1 und 1' bzw. 7 und 7' Dimere bilden könnten, um die Anzahl der hängenden Bindungen zu reduzieren und damit die Oberflächenenergie zu senken. Ferner ist diese Geometrie bereits dafür verantwortlich, daß es zu einfachen und zentrierten Strukturen kommen kann, wie es von der GaAs(001)(2×4)/ $c(2 \times 8)$ -Struktur her bekannt ist. In aufeinander folgenden Einheitszellen könnte sich das As-Dimer aus den As-Atomen 7 und 9 (7' und 8) bilden, um so die zentrierte Struktur hervorzurufen.

6.3 Literatur zur GaAs(114)-Oberfläche

Erste Vorstellungen der Oberflächenstruktur der GaAs(114)-Oberfläche gehen auf eine Arbeit von Shimomura *et al.* [160] zurück. Sie schlossen aus den RHEED-Reflexmustern beim Wachsen von Heterostrukturen auf GaAs(114)-Substraten, daß durch Dimerisie-

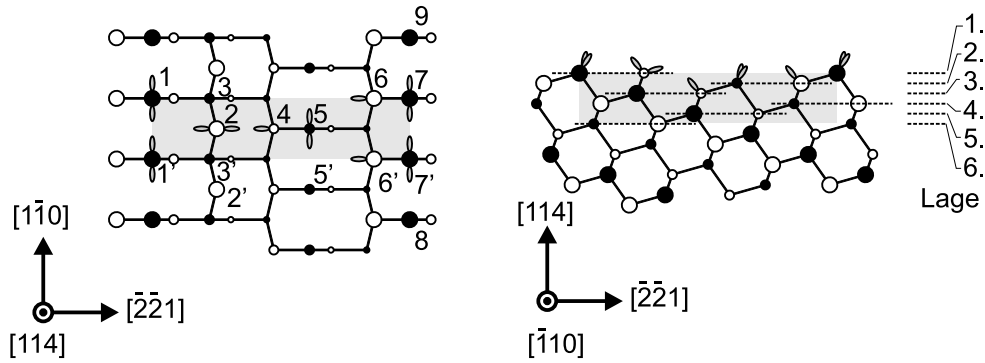


Abb. 6.4: Schematische Auf- und Seitenansicht der *bulk-truncated* Struktur der GaAs(114)-Fläche. As-Atome sind durch schwarze Kreise, Ga-Atome durch weiße dargestellt.

nung von As-Atomen auf der Oberfläche eine zweifache Periode gebildet wird. Darüber hinaus zeigten die hergestellten Heterostrukturen sehr geringe Halbwertsbreiten in Photolumineszenzmessungen, so daß auf eine sehr flache Grenzfläche der Heterostruktur geschlossen wurde. Daraus entwickelten die Autoren folgendes Strukturmodell für die GaAs(114)-Oberfläche: Die Oberfläche zerfällt in (001)-orientierte Terrassen, die drei As-Dimere enthalten und durch eine doppelte (111)A-Stufe getrennt werden. Dieses Strukturmodell wird aufgrund der Ähnlichkeit mit der GaAs(001) $\beta(2 \times 4)$ [104] mit $\beta(2 \times 1)$ bezeichnet und ist in Abb. 6.5 dargestellt.

Tsuda *et al.* [169] konnten dieses Strukturmodell mit Hilfe von hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)-Aufnahmen im wesentlichen bestätigen. Eine numerische Simulation der TEM-Aufnahmen zeigte allerdings, daß die Terrassenbreite häufig geringer war als das Drei-Dimer-Modell von Shimomura *et al.* [160].

Yamada *et al.* [170] fanden in *ex-situ*-STM Messungen ebenfalls eine (2×1) -Rekonstruktion auf der Oberfläche. Die von den Autoren untersuchten Proben wurden mit MBE gewachsen, anschließend mit einer schützenden amorphen As-Schicht versehen, durch die Luft transportiert und in eine UHV-STM-Apparatur eingeschleust. In dieser Apparatur wurde die schützende As-Schicht durch Heizen der Probe desorbiert und mit dem STM untersucht. Die Oberfläche zeigte eine flache, wohlgeordnete Struktur auf, in der Reihen von As-Dimeren entlang $[1\bar{1}0]$ beobachtet wurden. Sie schlossen aus den STM-Bilder auf eine (2×1) -Rekonstruktion, die analog zur GaAs(001) $\alpha(2 \times 4)$ [107] gebildet wird und daher mit $\alpha(2 \times 1)$ bezeichnet wurde. Das GaAs(114) $\alpha(2 \times 1)$ -Modell ist in einer schematischen Darstellung in Abb. 6.6 gezeigt. Hiernach wird durch zwei eng benachbarte As-Dimer-Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ und durch ein zusätzlich adsor-

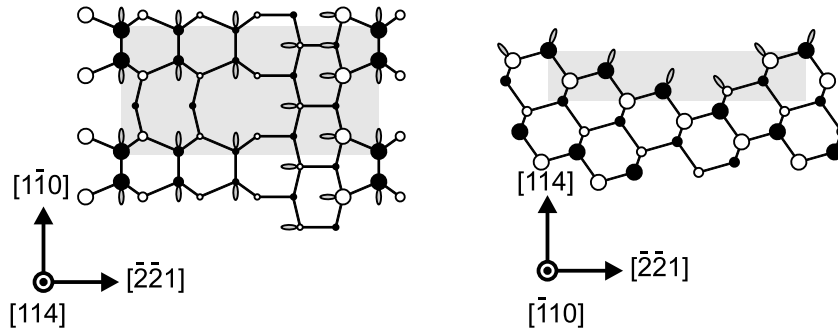


Abb. 6.5: GaAs(114) $\beta(2 \times 1)$ -Strukturmodell von Shimomura *et al.* [160]

biertes Ga-Atom die Struktur gebildet. Dieses Ga-Adatom bindet an die As-Atome, die in Abb. 6.4 durch 5 und 5' und an das Ga-Atom, das mit 6' in der *bulk-truncated* Struktur gekennzeichnet ist.

Platen *et al.* [171] untersuchten die GaAs(114)-Oberfläche mit LEED und Photoemissionsspektroskopie und beobachteten eine zentrierte $c(2 \times 2)$ -Periodizität auf der Oberfläche. Ferner schlossen sie aus *Core-Level-Shifts* (Rumpfniveau-Verschiebungen) in Photoemission auf Ga-Ga-Bindungen auf der Oberfläche, so daß sie dieses $\alpha(2 \times 1)$ -Strukturmodell unterstützten.

In einer weiteren Arbeit von Yamaguchi *et al.* [172] wurde die MBE-präparierte GaAs(114)-Oberfläche *in situ* mit STM untersucht. Sie fanden zwei Rekonstruktionen auf der Oberfläche, die sich durch die präparative Vorgeschichte unterscheiden. Proben, die unmittelbar nach dem Wachsen untersucht wurden, zeigten eine (2×1) -Struktur auf, für die die Autoren ein Strukturmodell vorschlugen, das analog zur GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ [104] gebildet wird. Dieses Modell wird daher mit $\beta_2(2 \times 1)$ bezeichnet und ist in Abb. 6.7 dargestellt. (Auf dieses Modell wird in den folgenden Abschnitten näher eingegangen.) Die STM-Aufnahmen zeigten, daß diese Struktur auf atomarer Skala sehr rauh ist und Mikrofacetten bildet, die (113)- und (115)-orientiert

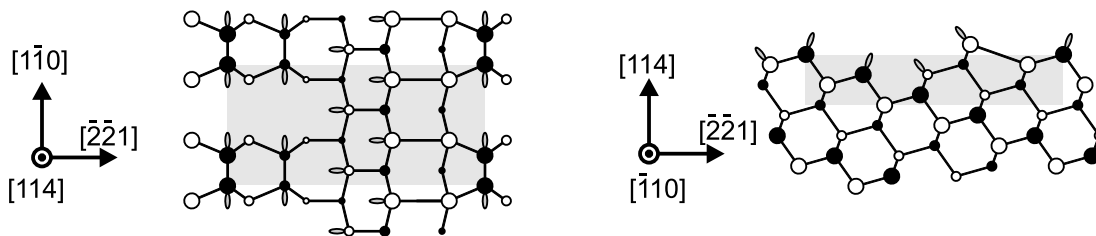


Abb. 6.6: GaAs(114) $\alpha(2 \times 1)$ -Strukturmodell von Yamada *et al.* [170]

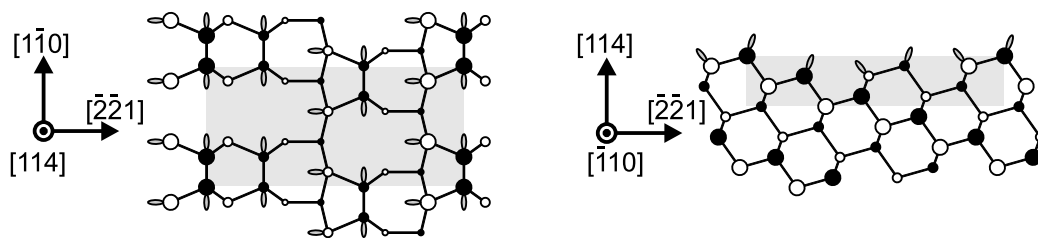


Abb. 6.7: GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)$ -Strukturmodell für die As-reiche Phase von Yamaguchi *et al.* [172].

sind. Diese rauhe Oberfläche wurde in weiteren Experimenten im Vakuum getempert, wodurch eine zweite Oberflächenrekonstruktion beobachtet wurde. Die STM-Bilder dieser Rekonstruktion glichen denen, die von Yamada *et al.* [170] beobachtet wurden. Allerdings wurden diese Bilder anders interpretiert. Für diese (2×1) -Rekonstruktion schlugen die Autoren zwei Modelle vor, die in Abb. 6.8 a) und b) dargestellt sind. Hiernach wird die Rekonstruktion von einzelnen As-Dimer-Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ gebildet, wobei im Raum zwischen den Dimer-Reihen Ga-Ga-Bindungen und As-Atome mit zwei hängenden Bindungen vorkommen. Aufgrund der gebildeten Ga-Ga-Bindungen wäre dieses Modell auch mit den Photoemissionsdaten im Einklang, allerdings wird in Ref. [171] kein Bezug darauf genommen. Fraglich bleibt bei diesem Modell die Stabilität, da es As-Atome mit zwei hängenden Bindungen enthält. Bislang sind für GaAs-Oberflächen keine Strukturen bekannt geworden, die Atome mit einer solchen Bindungskonfiguration enthalten.

Um die Vielzahl von sich teilweise widersprechenden experimentellen Beobachtungen aufzuklären, wurde die GaAs(114)-Oberfläche im Rahmen dieser Arbeit mit STM und Elektronenbeugung untersucht. Des weiteren konnte in Zusammenarbeit mit Peter Kratzer [173] von der Abt. Theorie des Fritz-Haber-Instituts mit Hilfe von *ab-initio*-Rechnungen der Gesamtenergie die Struktur der GaAs(114)-Oberfläche bestimmt werden.

6.4 GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)/\beta 2c(2 \times 2)$

6.4.1 Präparation

Die Präparation der Oberfläche mit MBE erfolgte bei einer Wachstumstemperatur von 560°C . Niedrigere Temperaturen ergaben keine zufriedenstellenden Ergebnisse.

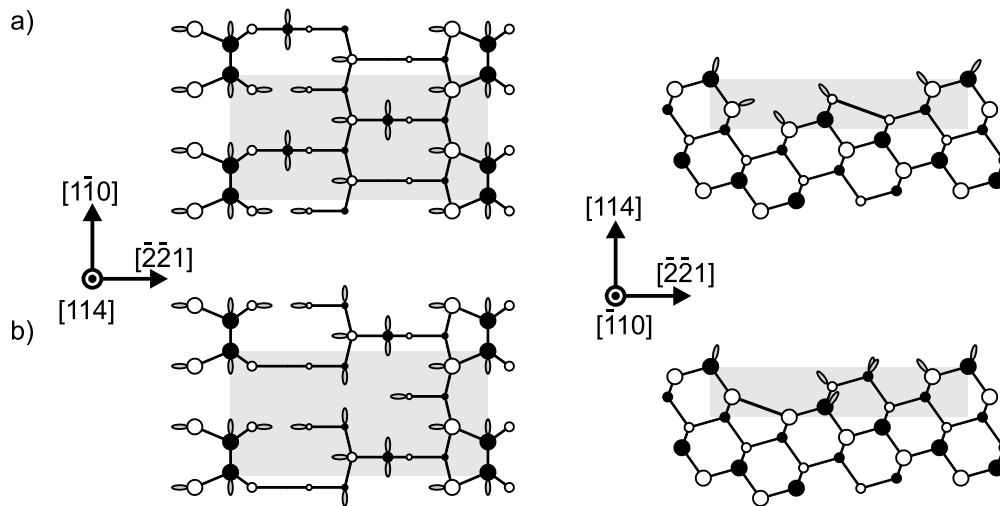


Abb. 6.8: Strukturmodelle für die durch Tempern erhaltene Ga-reiche Phase. a) Modell 1. b) Modell 2. Nach Yamaguchi *et al.* [172].

Die Intensität der beobachteten RHEED-Reflexe während des Wachsens waren sehr gering, und es lagen keine eindeutigen Hinweise auf eine Überstruktur vor (vgl. Abb. 6.9). In den Reflexen im $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Azimuth war eine sehr schwach ausgebildete zweifache Periodizität (leider nur auf dem RHEED-Schirm und nicht auf dem Foto) zu beobachten, was auf Dimerisierung von As-Atomen hindeutete. Im $[1\bar{1}0]$ -Azimuth war vor dem Wachsen ein scharfes RHEED-Reflexmuster zu erkennen, das auf dreidimensionale Strukturen auf der Oberfläche hindeutete. Beim Wachsen ging das Reflexmuster in ein für glatte Oberflächen typisches streifiges Muster über. Die Intensität der einzelnen Reflexe fiel jedoch sehr unterschiedlich aus. Die Probe wurde nach dem Wachsen unter geringem As-Druck abgekühlt und schnell in die Analysechamber transferiert.

6.4.2 LEED

Ein typisches LEED-Reflexmuster ist in Abb. 6.10 dargestellt. Die Intensität der Reflexe ist sehr unterschiedlich und verändert sich stark mit der Energie. Auch sind die Reflexe relativ breit, so daß ein gewisses Maß an Unordnung auf der Oberfläche zu erwarten ist. Dennoch ist es möglich, durch Variation der Energie die Position aller Reflexe zu bestimmen und durch Normierung auf eine Energie ein vollständiges Reflexmuster zu erhalten. Auf diese Weise wird auf eine $c(2 \times 2)$ -Periodizität auf der Oberfläche geschlossen. Ein weiteres Merkmal des Reflexmusters ist das ‘sichelförmige’ Erscheinen mancher Reflexe bei bestimmten Energien. Eine solche ‘Sichel’ ist in

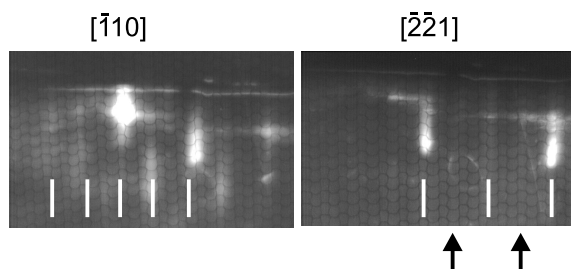


Abb. 6.9: RHEED-Reflexmuster der GaAs(114) β 2(2×1)-Oberfläche. Der Elektronenstrahl ist im a) $[\bar{1}10]$ -, b) $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Azimuth gerichtet. Die Position der gebeugten Strahlen ist durch weiße Linien gekennzeichnet. Die Pfeile in b) markieren die Position der zweifachen Periode. $E = 14$ keV.

Abb. 6.10 durch einen Pfeil markiert. Abb. 6.11 zeigt eine Serie von Ausschnitten des LEED-Reflexmusters bei verschiedenen Energien. Es ist dabei zu erkennen, daß die Ursache für das Erscheinen als ‘Sichel’ eine Aufspaltung der Reflexe entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung ist. Eine solche Aufspaltung läßt auf regelmäßige Stufen auf der Oberfläche schließen. Aus der Energiedifferenz von etwa 40 eV, bei der die Reflexe einzeln erscheinen und aufgespalten sind, läßt sich eine Stufenhöhe von $3,8 \text{ \AA}$ ermitteln (vgl. auch Ref. [82]). Darüber hinaus erscheinen die Reflexe entlang der $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Richtung ausgeschmiert, was auf eine Unordnung bzw. unregelmäßige Stufenbildung in diese Richtung hinweist. Die Auflösung der LEED-Optik ist allerdings unzureichend, um zuverlässige Aussagen über diesen Punkt zu treffen.

6.4.3 STM

Abb. 6.12 zeigt einen $500 \times 500 \text{ \AA}^2$ -Ausschnitt, dem ein Höhenprofil entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ (vgl. Abb. 6.13) entnommen wurde. Hieraus läßt sich eine regelmäßige Stufenfolge erkennen, deren Stufenhöhe etwa 4 \AA beträgt. Dieses ist in sehr guter Übereinstimmung mit der beobachteten Aufspaltung der LEED-Reflexe.

Die atomare Struktur auf einer Terrasse läßt sich aus dem hochauflösenden STM-Bild in Abb. 6.14 ersehen. Auf diesem Bild sind Reihen von Buckeln zu erkennen, die entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ verlaufen. Der Abstand der Reihen beträgt 17 \AA , was der Länge der (1×1) -Einheitszelle in $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Richtung entspricht. Die Buckel haben eine längliche Form und sind im Abstand von 8 \AA angeordnet. Bei genauer Betrachtung des STM-Bildes läßt sich neben den eben erwähnten Buckeln eine weitere Erhebung erkennen. Diese zweite Struktur liegt etwas niedriger und wird daher etwas kleiner abgebildet als

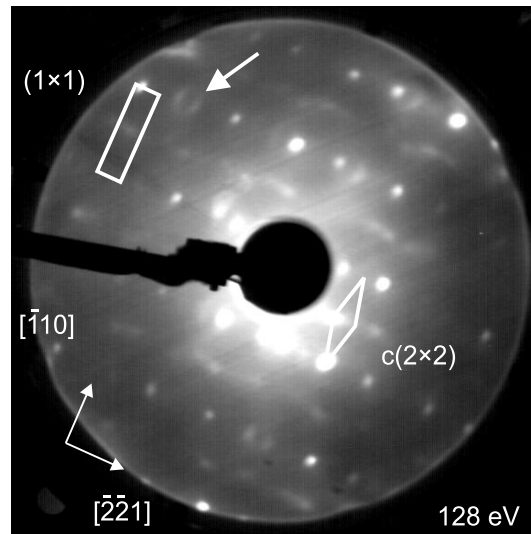


Abb. 6.10: LEED-Reflexmuster der GaAs(114) $c\beta 2(2 \times 2)$ -Rekonstruktion. Rechteckige (1×1) Einheitszelle sowie die $c(2 \times 2)$ - (Raute) sind mit eingezeichnet. Der Pfeil im oberen linken Bildrand markiert ein aufgespaltenen Reflex. $E = 128$ eV.

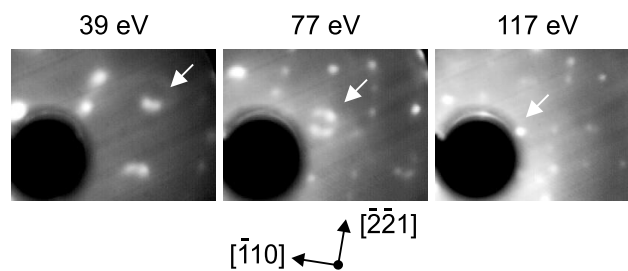


Abb. 6.11: Serie von LEED-Reflexmustern bei steigender Energie des Elektronenstrahls. Der Pfeil markiert einen Reflex, der aufspaltet und am Ende der Serie punktförmig wird.

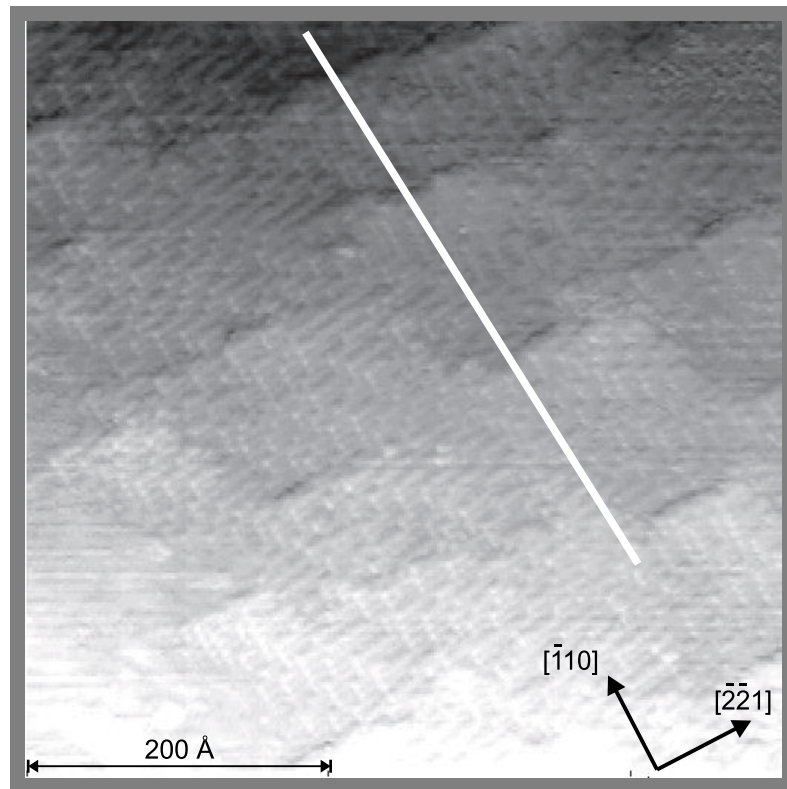


Abb. 6.12: STM-Bild der GaAs(114) $\beta_2c(2 \times 2)$ -Oberfläche. $500 \times 500 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$.

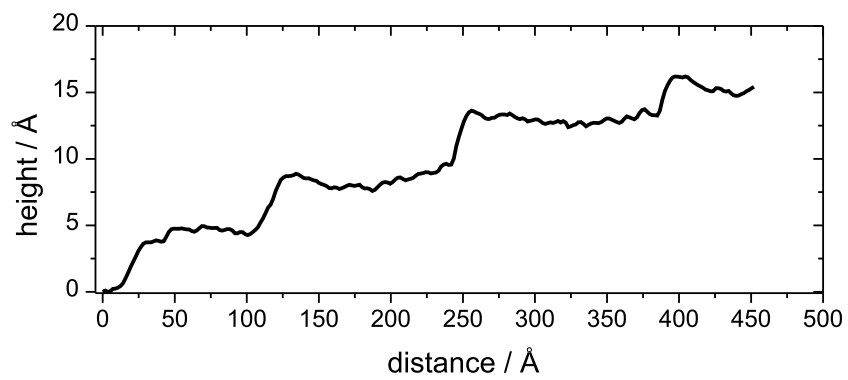


Abb. 6.13: Höhenprofil entlang $[\bar{1}10]$ aus Abb. 6.12. Die Stufenhöhe beträgt etwa 4 \AA .

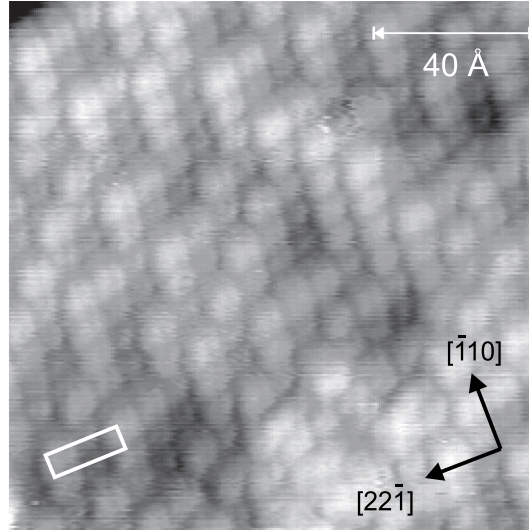


Abb. 6.14: Hochauflösendes STM-Bild auf einer Terrasse der GaAs(114) $\beta 2c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion. $130 \times 130 \text{ \AA}^2$, $U = -2,625 \text{ V}$, $I = 0,125 \text{ nA}$.

die oben liegenden Buckel. Sie besitzen allerdings die gleichen Abmessungen entlang $[1\bar{1}0]$ und treten ebenfalls mit einer Periode von 8 \AA auf. Im Bereich zwischen den Reihen ist wieder eine periodisch auftretende Struktur zu erkennen. Diese liegt auf etwa gleicher Höhe mit den niedrigeren Buckeln der Reihen, treten allerdings um etwa 4 \AA entlang $[1\bar{1}0]$ gegenüber den Buckeln der Reihen versetzt auf. Die Einheitszelle, die die Struktur beschreibt, ist rechteckig und hat die Abmessungen $8 \times 17 \text{ \AA}^2$. Dies entspricht einer (2×1) -Rekonstruktion auf der Oberfläche. Eine Einheitszelle ist in Abb. 6.14 eingezeichnet. Ferner sind benachbarte Reihen erkennbar, deren bildende Buckel entlang $[1\bar{1}0]$ Phasenverschoben sind. Damit verdoppelt sich die Länge der Einheitszelle entlang $[\bar{2}21]$, und die korrekte Beschreibung der Periodizität auf der Oberfläche ist eine $c(2 \times 2)$. Dies ist genau die Periodizität, die sich aus den LEED-Reflexmustern ableiten ließ.

Auffällig ist bei dem Bild, daß es nicht nur Bereiche gibt, die eine $(2 \times 1)/c(2 \times 2)$ -Periode aufweisen, sondern daß auch eine regelmäßige Stapelung von Reihen auftritt. Diese Stapelung wird in der dreidimensionalen Darstellung in Abb. 6.15 deutlich. Es tritt eine Auf- und Abstapelung von Reihen auf, die nicht symmetrisch ist. Die Höhenprofile, die in Abb. 6.16 a) und b) dargestellt sind, zeigen für die Stapelung A einen Höhenunterschied von etwa $1,2 \text{ \AA}$ zwischen den Reihen auf und einen Höhenunterschied von $0,5 \text{ \AA}$ für B. Die resultierenden Orientierungen für die daraus entstehenden

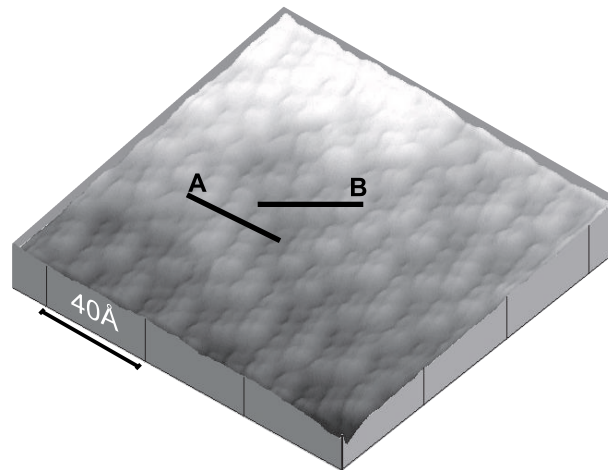


Abb. 6.15: Dreidimensionale Darstellung eines hochauflösenden STM-Bildes der GaAs(114) $\beta 2c(2 \times 2)$ -Struktur. Die Stapelung der atomaren Reihen ergeben Mikrofacetten der Orientierung (113) (Linie A) und (115) (Linie B). $130 \times 130 \text{ \AA}^2$, $U = -2,625 \text{ V}$, $I = 0,125 \text{ nA}$.

Mikrofacetten sind (113) und (115).

6.4.4 Strukturmodell und Diskussion

Das Strukturmodell, das die experimentellen Beobachtungen am besten beschreibt, ist das auf Yamaguchi *et al.* [172] zurückgehende $\beta 2(2 \times 1)$ -Modell für die GaAs(114)-Oberfläche. Abb.6.17 zeigt ein schematisches Modell für die sich daraus ergebende zentrierte Struktur. Die Reihen werden gebildet durch nebeneinander stehende As-Dimere. Dazu bildet sich im Bereich zwischen den Reihen eine weitere Reihe von As-Dimeren, die aber gegenüber den Doppel-Dimer-Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ Phasenverschoben ist.

Es sei hier angemerkt, daß es in den hier vorgestellten STM-Bildern zum ersten Mal gelungen ist, alle drei As-Dimere, die die Einheitszelle bilden, abzubilden. Zwar ist in Ref. [172] dieses Modell vorgeschlagen worden, aber nicht alle Dimere konnten aufgelöst werden. Daher lagen keine eindeutigen Beobachtungen vor, die begründen könnten, daß speziell dieses Modell gegenüber anderen vorzuziehen wäre.

Das GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)$ -Modell entspricht dem GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Modell von Chadi[104]. Der Unterschied zu der GaAs(001)-Oberfläche liegt darin, daß aufgrund der Verkipfung von (114) gegenüber (001) der As-Dimer, der auf GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ im Graben gebildet wird, nach oben rückt, d.h., er wird auf der GaAs(114)-Oberfläche

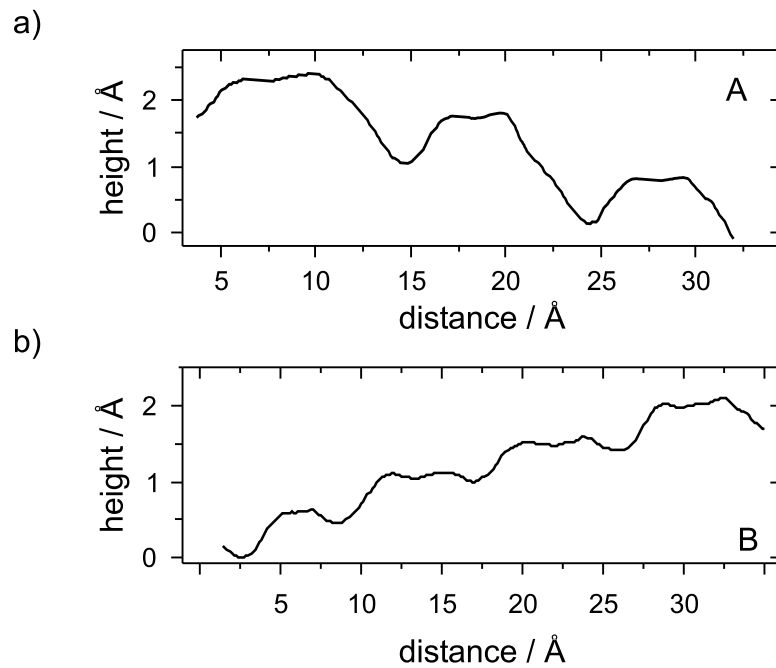


Abb. 6.16: Höhenprofil entlang der mit a) A und mit b) B gekennzeichneten Linien in Abb. 6.15. Die Höhendifferenz zwischen den As-Dimer-Reihen in A entspricht einer doppelten (111)-Stufe, in B einer einfachen (111)-Stufe.

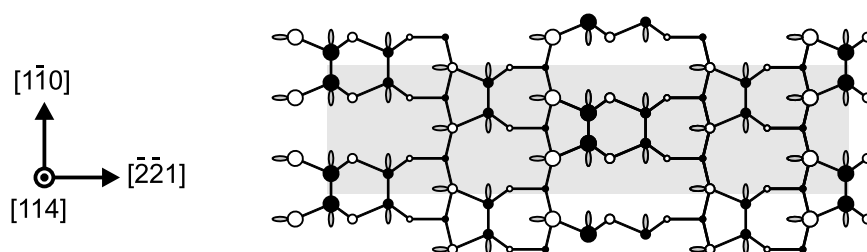


Abb. 6.17: Strukturmodell für die GaAs(114) $\beta 2c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion. Nach Yamaguchi *et al.* [172].

eine Doppellage höher gebildet als bei der GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion. Somit ist die Korrugation innerhalb der Einheitszelle geringer als die der GaAs(001) $\beta 2(2 \times 4)$ -Oberfläche. Dies geht allerdings auf Kosten von längeren Bindungslängen, da die Einheitszelle der GaAs(114)-Oberfläche etwa 1 \AA in $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Richtung länger ist als die der GaAs(001)-Oberfläche. Diese Streckung der Bindungen kann als mögliche Ursache für das Auftreten der Stapelung von den Dimer-Reihen angesehen werden. Im allgemeinen tendieren Oberflächen dazu, dichter gepackt zu sein als das Volumenmaterial. Die Streckung von Bindungslängen in der GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)/\beta 2c(2 \times 2)$ -Struktur führt zu einer sehr offenen Struktur. Dem wirkt das Stapeln von Dimer-Reihen entgegen, d.h., die Struktur wird dichter gepackt.

Die beobachtete Asymmetrie der Stapelung läßt sich anhand der Abb. 6.18 a) und b) erklären. Die Stapelung A, d.h. abwärts von links nach rechts in der Abbildung, die zur Ausbildung einer (113)-orientierten Mikrofacette führt, läßt sich durch Stapeln von zwei unmittelbar benachbarten As-Dimer-Reihen aufbauen, die durch eine zweifache (111)-Stufe getrennt werden (Abb. 6.18 a)). Die Stapelung B wird durch Stapeln von nebeneinander verlaufenden Dimer-Reihen erreicht, die durch eine einfache (111)-Stufe getrennt werden. Die Orientierung dieser Mikrofacette ist (115) (Abb. 6.18 b)). Interessanterweise kommt es nicht zur Ausbildung einer rekonstruierten (113)-Facette. Vermutlich liegt dies daran, daß die Fläche, die von einer solchen Mikrofacette eingenommen wird, zu klein ist, um eine rekonstruierte (113)-Facette zu bilden (vgl. Kap. 5). Ein anderer möglicher Grund wäre, daß die Bildung der Mikrofacette keine thermodynamisch stabile Struktur ist, sondern einen kinetischen Effekt beim Wachstum als Ursache hat.

Es ist anhand dieser STM-Bilder zu vermuten, daß Tsuda *et al.* [169] nicht die (114)-Oberfläche nach Shimomuras Modell [160] in den hochauflösenden TEM-Aufnahmen gesehen haben. Sie schlossen durch Vergleich der experimentellen TEM-Bilder mit numerisch generierten TEM-Bildern, daß die Oberfläche in (001)-Terrassen mit drei nebeneinander auftretenden As-Dimeren zerfällt. Die *in-situ*-STM-Bilder hier zeigen jedoch, daß immer nur zwei As-Dimere auftreten. Durch einen Schnitt senkrecht zu den Dimer-Reihen kann aber durchaus auf eine dachartige Struktur geschlossen werden. Wie bereits erwähnt, ist sie asymmetrisch aus (113)- und (115)-orientierten Seitenflächen, wie eine hypothetische dach- bzw. treppenartige Struktur nach Shimomuras Modell, das aus (001) und (111) bestehen würde.

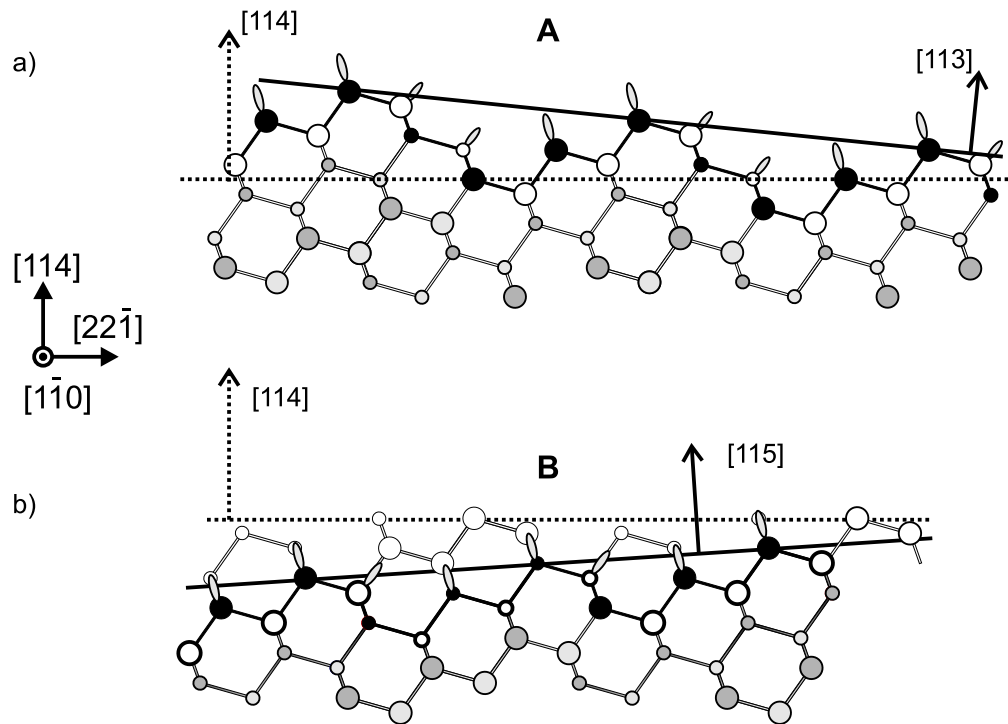


Abb. 6.18: Schematische Darstellung der Stapelung von As-Dimer-Reihen im Querschnitt. Bild a) zeigt As-Dimer-Reihen, die durch eine doppelte (111)-Stufe getrennt werden und zu einer (113)-orientierten Mikrofacette führt (Höhenlinie A in Abb. 6.15). Bild b) zeigt die Stapelung von As-Dimer-Reihen mit einer einfachen (111)-Stufe, was zu einer (115)-orientierten Mikrofacette führt (Höhenlinie B in Abb. 6.15). Die grau schattierten Kreise repräsentieren die volumengebundenen Atome, die schwarzen und dunkel umrandeten Kreise die Atome der gestapelten Struktur. Die weißen Atome in Bild b) kennzeichnen die Positionen der Atome der (114)-*bulk-truncated* Struktur.

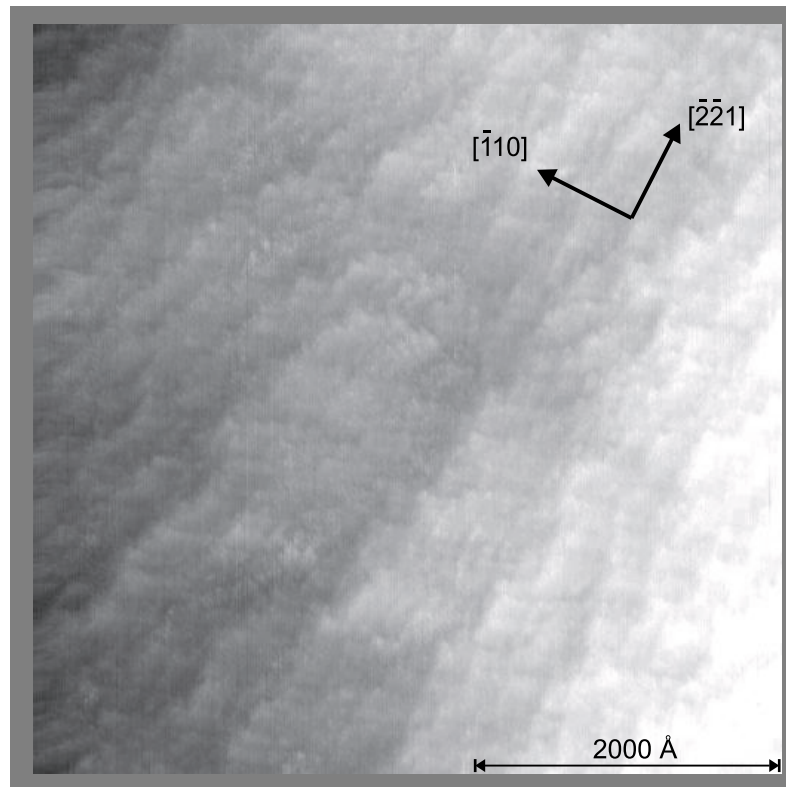


Abb. 6.19: STM-Bild der GaAs(114) β 2c(2 × 2)-Oberfläche. $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,1 \text{ nA}$.

6.4.5 Morphologie

Ein STM-Bild eines $2500 \times 2500 \text{ \AA}^2$ großen Ausschnitts der GaAs(114)-Oberfläche ist in Abb. 6.19 gezeigt. In diesem Bild sind zahlreiche Terrassen zu erkennen, die entlang $[\bar{1}10]$ verlaufen. Die mittlere Terrassenbreite beträgt lediglich etwa 150 \AA und läßt vermuten, daß der Wafer gegenüber der (114)-Orientierung stark verkippt ist. Daher wurden Laue-Aufnahmen des Wafers, die in Abb. 6.20 gezeigt sind, angefertigt, um die exakte Orientierung festzustellen. Diese ergaben allerdings einen Verkippfungswinkel, der kleiner als $0,5^\circ$ sein sollte. Mit einer Stufenhöhe von $3,8 \text{ \AA}$ ergibt sich für einen Verkippfungswinkel von $0,5^\circ$ geometrisch eine mittlere Terrassenbreite von 435 \AA . Daher muß geschlossen werden, daß es an anderer Stelle des Wafers aufwärtsgerichtete Stufen geben sollte. Dieses Ergebnis zeigt die lokale Einschränkung von STM-Untersuchungen auf.

LEED ist hingegen eine über die Oberfläche mittelnde Methode. Präparationen mit etwas schnelleren Wachstumsraten und anschließend schnelleren Abkühlraten zeigten

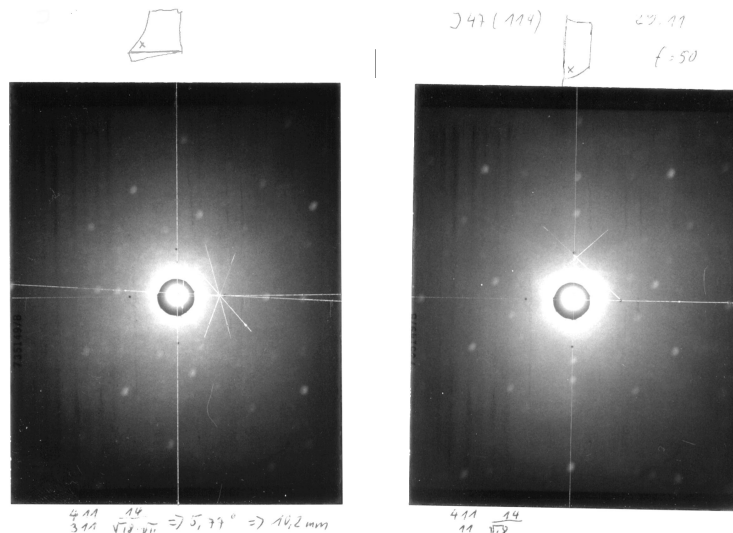


Abb. 6.20: Laue-Aufnahmen zur Bestimmung der genauen Orientierung des Wafers. Es wurden Aufnahmen von zwei Proben gemacht, die aus zwei verschiedene Bereichen des Wafers herausgebrochen wurden. Die Orientierung ergibt sich durch einen Vergleich der Positionen der Beugungsreflexe mit berechneten Beugungsbildern für exakte Orientierung.

keine eindeutige Aufspaltung der Reflexe, sondern lediglich eine Verbreiterung der Reflexe entlang $[1\bar{1}0]$. Dabei erschienen die Reflexe gleichzeitig in $[1\bar{1}0]$ und in $[\bar{1}10]$ unscharf und hatten eine längliche Form bzw. die o.g. sichelförmige Gestalt. Diese Beobachtung läßt auf auf- und abwärtsgerichtete Stufen schließen, da im Falle periodisch angeordneter auf- und abwärtsgerichteter Stufen eine Aufspaltung in drei scharfe Reflexe zu erwarten wäre [174]. Diese kurze Terrassenbreite scheint sich, wie bereits aus der Literatur bekannt wurde, für die Grenzfläche von Heterostrukturen sehr positiv auf die Qualität der Bauelemente auszuwirken.

Im Gegensatz zu der bisherigen Erklärung, die GaAs(114)-Oberfläche sei als eine Vizinalfläche von GaAs(001) anzusehen, konnte hier gezeigt werden, daß die GaAs(114)-Oberfläche eine eigenständige Rekonstruktion besitzt. Dennoch scheint die Oberfläche lediglich etwa 150 \AA breite Terrassen entlang $[1\bar{1}0]$ zu bilden und teilweise auf diesen Terrassen eine Korrugation auf atomarer Skala aufzuzeigen. Diese Korrugation läßt sich durch Auf- und Abwärtsstapeln von As-Dimer-Reihen verstehen.

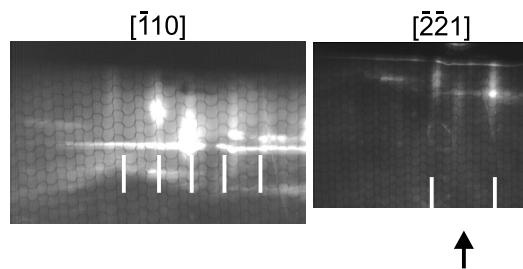


Abb. 6.21: RHEED-Reflexmuster der GaAs(114) $\alpha_2(2 \times 1)$ -Oberfläche. Der Elektronenstrahl ist im a) $[\bar{1}10]$ -, b) $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Azimut gerichtet. Die Position der gebeugten Strahlen ist durch weiße Linien gekennzeichnet. Bild b) zeigt lediglich den (0,0)- und den $(\bar{1}0)$ -Reflex des ersten Laue-Kreises. Der Pfeil in b) markiert die Position der zweifachen Periode. $E = 14 \text{ keV}$.

6.5 GaAs(114) $\alpha_2(2 \times 1)$

6.5.1 Präparation

Die oben beschriebene Struktur wurde unter As-reichen Bedingungen erhalten. Auch ein Tempern der Probe nach dem Wachsen unter As-Fluß brachte die gleiche Struktur. Daher wurde die Proben nach dem Wachsen ohne Zugabe von As ca. 5 min bei 560°C getempert. Die RHEED-Reflexmuster (vgl. Abb. 6.21) wurde intensiver und im $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Azimut zeigte sich die zweifache Periode deutlicher. Eine solche Präparationsmethode (UHV-Tempert) ist bekannt, um die Ga-reiche Strukturen der GaAs(001) zu erhalten [123] (vgl. Kap. 4). Es ist daher zu erwarten, daß auch auf der GaAs(114)-Oberfläche eine Ga-reichere Struktur entsteht.

6.5.2 LEED

Ein typisches LEED-Reflexmuster einer im UHV getemperten Probe ist in Abb. 6.22 gezeigt. Deutlich ist ein qualitativer Unterschied gegenüber dem Reflexmuster der As-reichen Präparation zu erkennen. Dieses LEED-Reflexmuster zeigt sehr viele scharfe Reflexe und keine aufgespaltenen Reflexe wie die As-reiche Struktur. Es sind Reihen von scharfen Reflexen im Wechsel mit streifigen Reflexe zu sehen. Der Abstand zwischen den scharfen Reflexen innerhalb einer Reihe entspricht einem Abstand im Realraum von 17 \AA , was der Länge der *bulk-truncated* Einheitszelle in $[\bar{2}\bar{2}1]$ -Richtung entspricht.

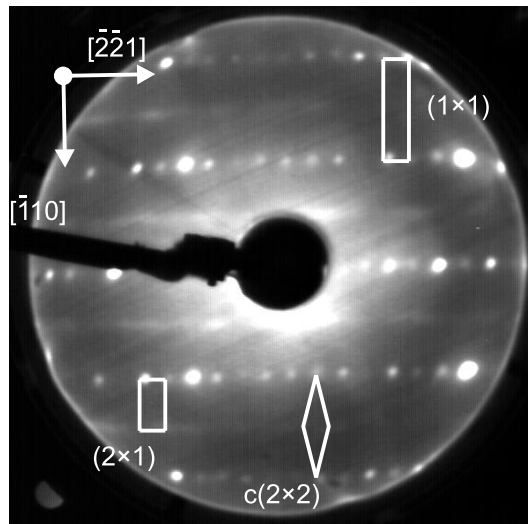


Abb. 6.22: LEED-Reflexmuster der UHV-getemperten GaAs(114)-Oberfläche. Die (1×1) -Einheitszelle der *bulk-truncated* Struktur, die rechteckige (2×1) -, sowie die raute-förmige $c(2 \times 2)$ -Einheitszellen der Rekonstruktion sind durch weiße Linien markiert. $E = 117$ eV.

Senkrecht hierzu entspricht der Abstand zwischen einer Reihe von scharfen Reflexen und einer mit streifigen 8 \AA , was auf eine zweifache Periode in diese Richtung hindeutet. Daher ist wie im Falle der As-reichen Struktur auf eine (2×1) -Rekonstruktion auf der Oberfläche zu folgern. Das streifige Erscheinen der Überstrukturereflexe läßt auf eine eindimensionale Unordnung entlang $[1\bar{1}0]$ schließen. Eine solche Unordnung ist auch von der GaAs(001)(2×4)-Oberfläche bekannt. Hierbei tritt neben der (2×4) -Struktur eine $c(2 \times 8)$ auf. Das resultierende LEED-Reflexmuster zeigt ebenfalls streifige Überstrukturereflexe auf (vgl. Kap. 4.3). Analog läßt sich aus dem streifigen Erscheinen der Überstrukturereflexe auf eine Mischstruktur schließen, die sowohl (2×1) - wie auch $c(2 \times 2)$ -rekonstruierte Domäne enthält.

6.5.3 STM

Ein STM-Bild der im UHV getemperten Oberfläche ist in Abb. 6.23 dargestellt. Es sind Reihen von längeren Strukturen entlang $[1\bar{1}0]$ zu erkennen, die im Abstand von 17 \AA angeordnet sind. Die länglichen Strukturen, die die Reihen bilden, haben einen Abstand von 8 \AA zueinander, was der zweifachen Periode des Beugungsbildes entspricht. Bei genauer Betrachtung der länglichen Strukturen ist zu erkennen, daß sie

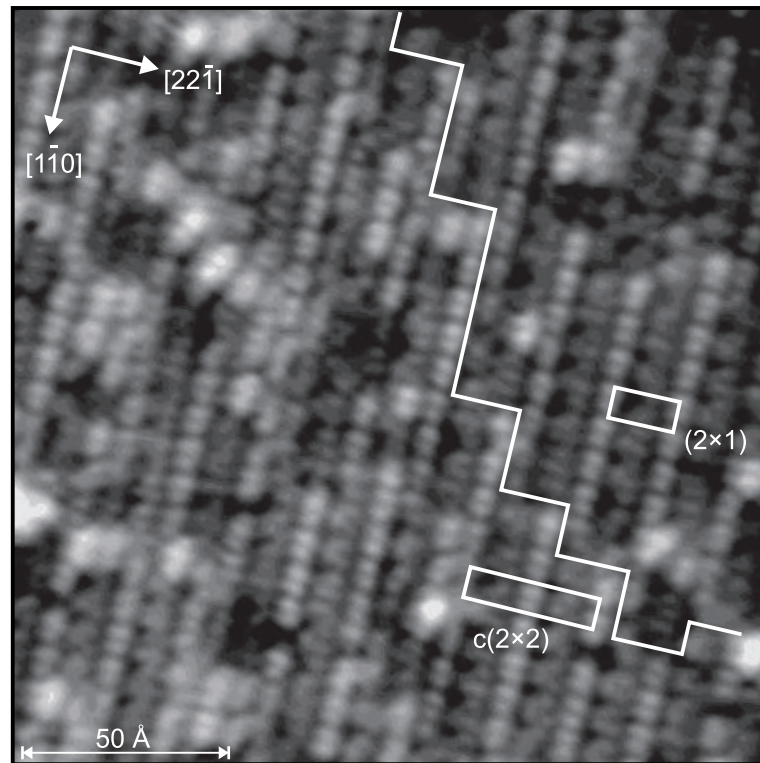


Abb. 6.23: STM-Bild der $(114)\alpha 2(2 \times 1)$ -Oberfläche. Eine Stufenkante sowie die Einheitszellen mit (2×1) - und $c(2 \times 2)$ -Periodizität sind durch weiße Linien markiert. $180 \times 180 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,2 \text{ nA}$.

sich aus zwei einzelnen Maxima zusammensetzen. Auf diesem Bild sind mehrere Terrassen zu erkennen, deren Stufenhöhe $1,5 \text{ \AA}$ beträgt. Um gleichförmigen Kontrast auf dem gesamten Bild zu haben, wurde eine lineare Steigung abgezogen, so daß sich die Stufenkanten nur schwer erkennen lassen. Daher wurde eine Stufenkante mit einer weißen Linie markiert. Auch im Bereich zwischen den Reihen ist eine gewisse regelmäßige Struktur erkennbar. Von einer Reihe ausgehend in Richtung $[\bar{2}\bar{2}1]$ ist ein Bereich zu erkennen, in dem Löcher (schwarze Bereiche) auftreten, die ebenfalls eine zweifache Periode aufweisen. Weiter entlang $[\bar{2}\bar{2}1]$ folgt dann ein Bereich, in dem die Intensität gleichmäßig verteilt ist.

6.5.4 Strukturmodell und Diskussion

Das hier gezeigte STM-Bild ist den Bildern aus Ref. [170, 172] sehr ähnlich. In jenen Arbeiten sind allerdings unterschiedliche Modelle vorgeschlagen worden, so daß eine Interpretation notwendig ist, die das Bild und damit die Oberflächenstruktur korrekt beschreiben. In diesem Abschnitt sollen daher verschiedene Modelle diskutiert und miteinander verglichen werden. Zunächst einmal sind aufgrund der Form, der kristallographischen Richtung und der Tatsache, daß gefüllte Zustände abgebildet wurden, die länglichen Strukturen As-Dimeren zuzuordnen. Dabei wurden nebeneinander eindeutig nur einzelne As-Dimere abgebildet, so daß das $\alpha(2 \times 1)$ -Modell von Yamada *et al.* [170], das zwei nebeneinander stehende As-Dimere beinhaltet, auszuschließen ist. Es kommen also nur Modelle in Frage, bei denen einzelne As-Dimere zu Reihen entlang $[1\bar{1}0]$ angeordnet werden. Bemerkenswert ist bei dem hier gezeigten STM-Bild, daß offenbar die einzelnen hängenden Bindungen des As-Dimers jeweils getrennt aufgelöst wurden. Eine solche Auflösung ist meines Wissens noch nicht einmal für die oft untersuchte GaAs(001)(2 \times 4) gelungen.

Der Bereich zwischen den As-Dimer-Reihen ist schwieriger zuzuordnen, da hier keine eindeutigen Strukturen gefunden wurden, die sich mit einer atomaren Anordnung identifizieren lassen. Aufgrund des geringen Kontrastes ist allerdings davon auszugehen, daß dieser Bereich von Ga-Atomen dominiert wird, da gefüllte Zustände abgebildet wurden. Darüber hinaus ist von Platen *et al.* [171] auf die Bildung von Ga–Ga-Bindungen auf der GaAs(114)-Oberfläche hingewiesen worden, wie die *Core-Level Shifts* in Photoemission gezeigt haben. Die von Yamaguchi *et al.* [172] entwickelten Modelle besitzen in der Tat Ga–Ga-Bindungen. Zudem erfüllen beide Modelle die

Elektronenzählregel (ECR): Im Modell 1 (vgl. Abb. 6.8 a)) können 16 Elektronen (6 Ga-Atome, sowie 2 Ga-Atome, die die Ga–Ga-Bindung bilden, liefern jeweils $\frac{3}{4}$ Elektronen, und die 4 As-Atome liefern $2 \times \frac{5}{4}$ Elektronen) auf 8 Orbitale verteilt werden, so daß alle hängenden Bindungen der As-Atome sowie die As–As- und Ga–Ga-Bindungen (mit je zwei Elektronen) gefüllt werden, während die hängenden Bindungen der Ga-Atome leer verbleiben. Analog sind im Modell 2 (vgl. Abb. 6.8 b)) 16 Elektronen auf die 8 Orbitale zu verteilen, um die ECR erfüllen zu können. Allerdings kommen in beiden Modellen As-Atome vor, die jeweils zwei hängende Bindungen haben. Im Bild der ECR sind diese hängenden Bindungen mit je zwei Elektronen gefüllt. Sie müßten daher erheblich mehr zum Kontrast in den STM-Bildern beitragen. Außerdem besagt eines der Prinzipien der Bildung von Oberflächenrekonstruktionen, daß die Anzahl der hängenden Bindungen minimiert werden soll. Beide Modelle sollten daher energetisch ungünstiger sein als Strukturvorschläge, in denen Atome vorkommen, die dreifach gebunden sind und daher nur eine hängende Bindung besitzen. Es ist demnach zu vermuten, daß beide Modelle die Struktur der UHV-getemperten GaAs(114)-Oberfläche nicht korrekt beschreiben.

Ein weiteres mögliches Strukturmodell ist in Abb. 6.24 gezeigt und soll, der systematischen Notation für die (2×4) -Modelle der GaAs(001)-Oberfläche folgend, als $\zeta(2 \times 1)$ -Modell bezeichnet werden. Dieses Modell geht aus der *bulk-truncated* Struktur hervor, indem die oben liegenden As-Atome einen As-Dimer bilden und das zweifach gebundene Ga-Atom (Atom 2 in Abb. 6.4) eine Bindung mit seinem benachbarten Ga-Atom (4 in Abb. 6.4) eingeht. Schließlich adsorbiert ein zusätzliches Ga in einem Dreifach-Lochplatz, um die offenen Bindungen der weiteren As-Atome (5 und 5' in Abb. 6.4) und des Ga-Atoms (6' in Abb. 6.4) abzusättigen. Somit besitzt dieses Modell die benötigte (2×1) -Periodizität, erniedrigt die Anzahl der hängenden Bindungen und weist die Ga–Ga-Bindung auf, die aus den Photoemissionsmessungen erwartet wird. Auch die ECR wird mit diesem Strukturmodell befriedigt: Es müssen 14 Elektronen (4 Ga-Atome liefern jeweils $\frac{3}{4}$, 8 Ga-Atome, die die Ga–Ga-Bindung bilden, liefern jeweils weitere $\frac{3}{4}$, und 2 As-Atome liefern jeweils $2 \times \frac{5}{4}$ Elektronen) auf 7 Orbitale verteilt werden, so daß alle hängenden Bindungen der As-Atome sowie die As–As- und Ga–Ga-Bindungen (mit je zwei Elektronen) gefüllt werden, während die hängenden Bindungen der Ga-Atome leer verbleiben. Eine Schwierigkeit tritt jedoch beim Vergleich mit dem STM-Bild auf. Das STM-Bild zeigt eindeutig eine anisotrope Intensitätsverteilung innerhalb der As-Dimer-Reihen auf. Das Modell hat zwischen

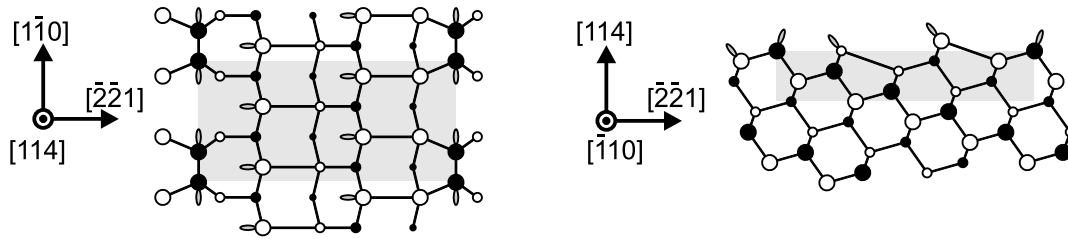
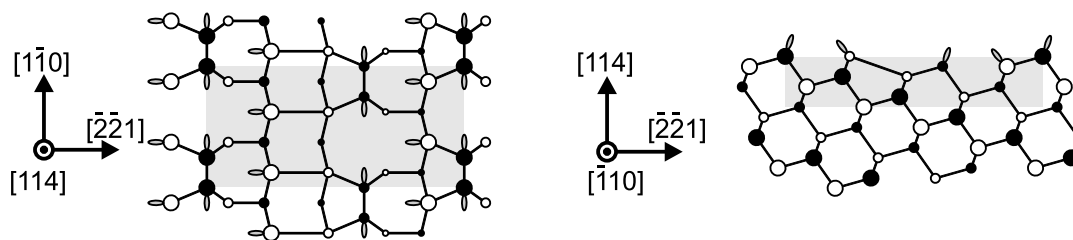


Abb. 6.24: Strukturmodell der GaAs(114) $\zeta(2 \times 1)$ -Rekonstruktion.

den As-Dimer-Reihen eine äquivalente Struktur. Somit sollte die beobachtete Intensität innerhalb der As-Dimer-Reihen homogen verteilt sein. Es gibt demnach keinen Grund, eine zweifache Periodizität aufzuzeigen.

Für die bisher vorgestellten Strukturmodelle sind lediglich qualitative Aussagen über ein mögliches Aussehen der Strukturen in STM-Bildern gemacht worden. Streng genommen kann aber keines bevorzugt werden. Ferner erfüllen alle die ECR, und damit läßt sich nicht vorhersagen, welches Strukturmodell stabiler sein sollte. Mirbt *et al.* [175] haben eine weitere Zählregel aus *ab-initio*-Gesamtenergierechnungen abgeleitet, die helfen soll, zwischen verschiedenen Modellen dasjenige mit der niedrigsten Oberflächenenergie vorauszusagen. Mit dieser Zählregel wird ein Parameter ‘ X ’ durch Abzählen der hängenden Bindungen der Anionen, der Anion–Anion- und der Kation–Kation-Bindungen bestimmt. Das Strukturmodell mit minimalem Wert für X soll dann im Vergleich mit den anderen Modellen die niedrigste Oberflächenenergie aufweisen. Die Anwendung der ‘ X -Regel’ ergibt im Ga-reichen Regime für beide Modelle von Yamaguchi *et al.* [172] einen Wert $X_{CR} = 3,5$ für das $\zeta(2 \times 1)$ -Modell einen Wert $X_{CR} = 1,5$. Daher sollte das letztere Modell eine niedrigere Oberflächenenergie als die Modelle von Yamaguchi *et al.* [172] aufweisen. Das GaAs(114) $\zeta(2 \times 1)$ -Modell sollte den anderen Modellen daher vorgezogen werden.

Aufgrund der oben beschriebenen Schwierigkeiten, die für die Strukturvorschläge auftreten, wenn über ein mögliches STM-Bild nachgedacht wird, wurde ein weiteres Modell in Betracht gezogen. Dieser Strukturvorschlag ist in Anlehnung an das $\alpha 2(2 \times 4)$ -Strukturmodell für die InAs(001)-Oberfläche entwickelt worden und soll daher $\alpha 2$ bezeichnet werden [176]. Eine schematische Darstellung des GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$ -Modells ist in Abb. 6.25 gezeigt. Bemerkenswerterweise geht es aus der *bulk-truncated* Struktur hervor, ohne daß Atome hinzugefügt werden müssen. Wie bei den Modellen zuvor bilden die oben liegenden As-Atome (1 und 1’ in Abb. 6.4) ein Dimer und die

Abb. 6.25: Strukturmodell der GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$ -Rekonstruktion.

etwas tiefer liegenden As-Atome (5 und 5' in Abb. 6.4) ein weiteres As-Dimer. Darüber hinaus bindet das zweifach gebundene Ga-Atom (2 in Abb. 6.4) an das benachbarte Ga-Atom (4 in Abb. 6.4). Somit enthält das Modell einzelne As-Dimer-Reihen und die geforderten Ga–Ga-Bindungen, um die Photoemissionsexperimente [171] zu erklären. Mit diesem Strukturmodell läßt sich ferner die anisotrope Intensitätsverteilung des Bereiches innerhalb der As-Dimer-Reihen erklären. Aufgrund eines weiteren etwas tiefer angeordneten As-Dimers in diesem Bereich ist eine zweifache Periode in der Intensität der STM-Bilder zu erwarten, wie sie auch in den oben liegenden As-Dimer-Reihen vorliegt. Das $\alpha 2(2 \times 4)$ -Modell ist (wie die *bulk-truncated* Struktur) stöchiometrisch, erfüllt daher automatisch die ECR. Allerdings läßt sich die 'X-Regel' nicht so einfach anwenden, da aufgrund der Stöchiometrie die oben verwendete Ga-reiche Näherung nicht mehr gültig ist [175]. Daher ist ein energetischer Vergleich mit dem GaAs(114) $\zeta(2 \times 1)$ Modell nicht ohne weiteres möglich.

Um die Gültigkeit des $\alpha 2(2 \times 1)$ -Modellvorschlags zu prüfen, wurden in Zusammenarbeit mit P. Kratzer *ab-initio*-Rechnungen für dieses und weitere Modelle durchgeführt. Dabei wurde die Gesamtenergie mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie berechnet,

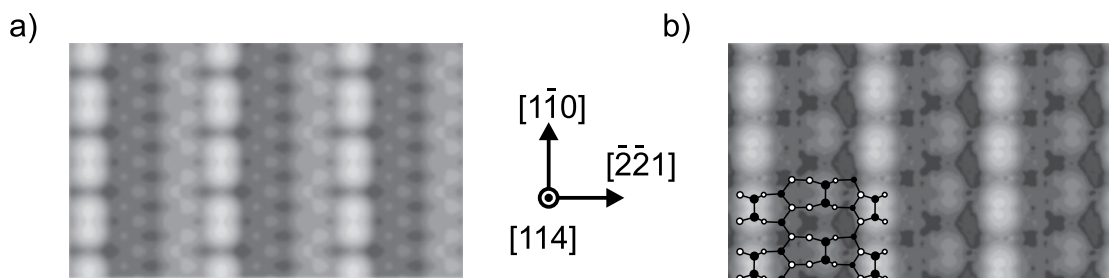


Abb. 6.26: Simulierte STM-Bilder auf der Basis von elektronischen Gesamtenergierechnungen. a) GaAs(114) $\zeta(2 \times 1)$, b) GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$. Die hellen länglichen Strukturen sind Zustände, die von den As-Dimeren herrühren.

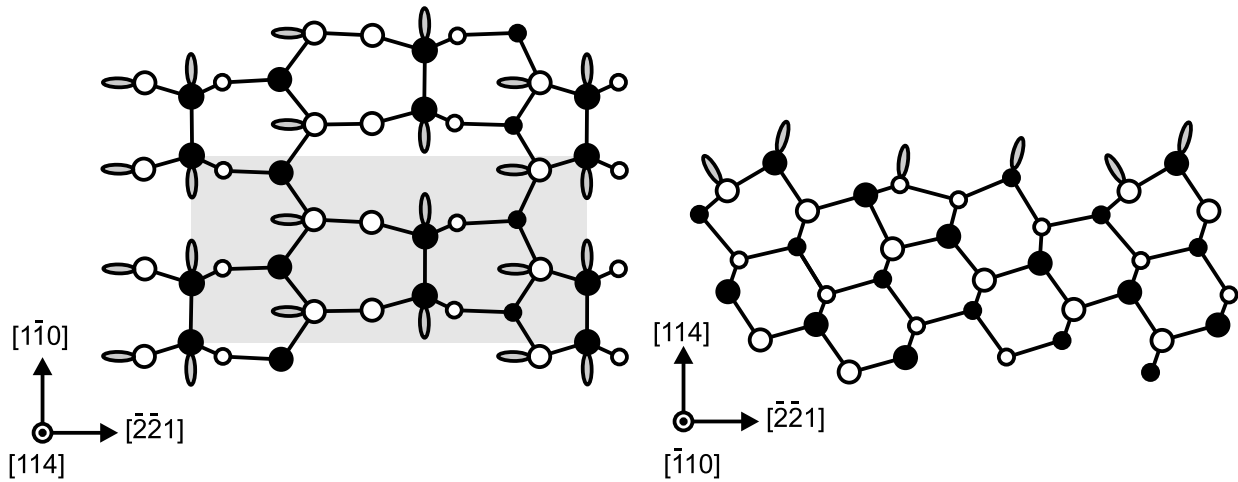


Abb. 6.27: Struktur der GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$ -Rekonstruktion. Die relaxierte Positionen der Atome sind in diesem Bild maßstabsgerecht eingezeichnet. Die schematisch eingezeichneten hängenden Bindungen kennzeichnen dreifach gebundene Oberflächenatome.

aus der sich dann die Oberflächenenergie ermitteln läßt [44, 88]. Für das $\zeta(2 \times 1)$ -Modell ergab die Rechnung einen Wert von $57 \text{ meV}/\text{\AA}^2$ [177], das $\alpha 2(2 \times 1)$ ergab einen geringeren Wert von $53 \text{ meV}/\text{\AA}^2$ [178]. Dieser Wert ist mit den Oberflächenenergien bekannter niedrigindizierter GaAs-Oberflächen vergleichbar. Bei der Berechnung der Gesamtenergie wird auch eine Relaxation der Atome zugelassen, so daß eine optimale Bindungsgeometrie als Ergebnis herauskommt. Sowohl für die $\zeta(2 \times 1)$ als auch für die $\alpha 2(2 \times 1)$ wurde dieses durchgeführt. Hieraus lassen sich weiterhin in Abhängigkeit der Tunnelparameter mögliche STM-Bilder simulieren, die in Abb. 6.26 a) und b) gezeigt sind. Deutlich ist der Unterschied in der Topographie zwischen den Modellen zu erkennen. Während das $\zeta(2 \times 1)$ -Modell zwischen den As-Dimeren in zwei Bereichen gleichmäßig verteilte Intensität aufweist, ist im $\alpha 2(2 \times 1)$ eine anisotrope Verteilung zu erkennen. Der Grund für diese Anisotropie läßt sich anhand des Strukturmodells in Abb. 6.27 erklären, in der die optimierten, relaxierten Atompositionen eingezeichnet sind, wie sie aus der Rechnung herauskommen.

Zunächst wird die dunkle Seite mit den Löchern (in der Simulation links von dem oben liegenden As-Dimer her gesehen) erzeugt. Dies geschieht zum einen dadurch, daß zwischen dem oben liegenden As-Dimer und dem As-Dimer in der Mitte ein Graben durch die sp^2 -Konfiguration der Ga-Atome entsteht, die am Dimer gebunden sind. Zum anderen dadurch, daß die As-Atome, die ein Dimer bilden, zueinander relaxieren,

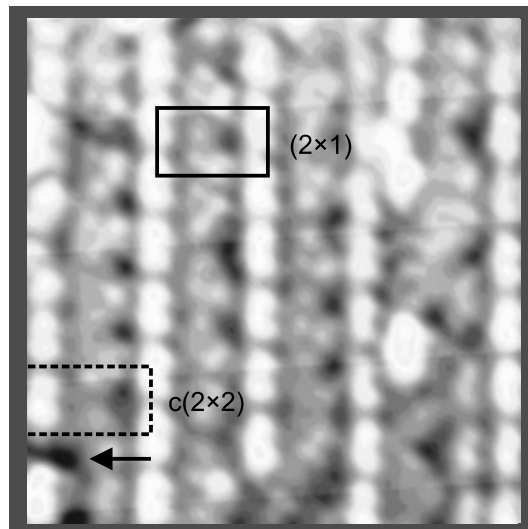


Abb. 6.28: Hochaufgelöstes STM-Bild der GaAs(114) α $2c(2 \times 2)$ -Oberfläche. Der Pfeil im unteren rechten Bildrand markiert eine As-Fehlstelle, wodurch eine Domäne mit zentrierter Struktur entsteht. $80 \times 80 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,2 \text{ nA}$.

so daß eine zweifache Periodizität erscheint. Auf der homogenen Seite (rechts neben den oben verlaufenden Dimer-Reihen) ist die Intensität gleichmäßig verteilt, da das As-Atom (3 in Abb. 6.4) von seinem dreifach gebundenen Ga-Bindungspartner (2 in Abb. 6.4) zur Oberfläche hingezogen wird. Dadurch entsteht eine sehr flache Bindungskonfiguration, die in der Topographieabbildung gleichmäßig erscheint. Zum besseren Überblick ist in Abb. 6.26 ein Modell maßstabsgerecht in die Simulation eingezeichnet.

Zum Vergleich mit den experimentellen Daten ist in Abb. 6.28 ein vergrößerter hochaufgelöster Ausschnitt eines STM-Bildes dargestellt. Deutlich ist die Übereinstimmung mit der Simulation zu erkennen. Darüber hinaus sind in der Messung zum Teil Störungen in den Löchern zu erkennen. Dies läßt sich durch das Fehlen eines As-Atoms in dieser Lage verstehen, so daß sich ein As-Dimer versetzt ausbildet. Dasselbe gilt für die Entstehung einer zentrierten $c(2 \times 2)$ -Einheitszelle, wie in der Abbildung durch einen Pfeil markiert ist. Fehlt in einer As-Dimer-Reihe ein As-Atom, wird das As-Dimer mit dem nächstmöglichen As-Atom gebildet, so daß nebeneinander verlaufende As-Dimer-Reihen nicht mehr in Phase sind, sondern die zentrierte Struktur der doppelten Periodizität bilden.

Insgesamt ist aufgrund der guten Übereinstimmung zwischen der berechneten Struk-

tur und den experimentellen Daten sowie der geringen Oberflächenenergie die korrekte Struktur der UHV-getemperten GaAs(114)-Oberfläche durch das $\alpha 2(2 \times 1)$ -Modell beschrieben.

6.6 Zusammenfassung und Ausblick

Die mittels MBE präparierte GaAs(114)-Oberfläche zeigte eine auf atomarer Skala relativ rauhe Rekonstruktion. Die Struktur der Oberfläche zeigte im LEED-Reflexmuster eine $c(2 \times 2)$ -Periodizität. Mit Hilfe von STM-Daten konnte das GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)/\beta 2c(2 \times 2)$ -Strukturmodell von Yamaguchi *et al.* [172] bestätigt werden. Allerdings zeigte sich sowohl im LEED-Reflexmuster wie auch in hochauflösenden STM-Bildern, daß die Oberfläche Mikrofacetten der Orientierungen (113) und (115) ausbildet.

Durch Tempern der GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)/\beta 2c(2 \times 2)$ -Oberfläche im UHV (ohne Zugabe von As) wurde eine weitere Struktur gefunden. Das Strukturmodell für diese (in Anlehnung an die InAs(001) $\alpha 2(2 \times 4)$ [176]) mit GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$ bezeichnete Rekonstruktion wurde durch eine vergleichende Studie der experimentellen Daten mit *ab-initio*-Rechnungen der Gesamtenergie bestimmt. Ihre Oberflächenenergie wurde zu $53 \text{ meV}/\text{\AA}^2$ berechnet, was innerhalb der Werte liegt, die für niedrigindizierte GaAs-Oberflächen bekannt sind.

Im Hinblick auf das Wachstum von InAs-QDs scheint die GaAs(114)-Oberfläche keine geeignete Oberfläche zu sein, da die Wachstumstemperaturen, bei denen Oberflächen mit guter Qualität präpariert werden konnten, viel zu hoch ist, um genügend In anlagern zu können. Bei As-reichen Bedingungen nach dem Wachsen nahm die Rauigkeit auf der Oberfläche erheblich zu, so daß auf dieser Oberfläche wohl kaum ordnende Effekte bei InAs-Inseln beobachtet werden können. Anders ist die Situation für eine Ga-reiche Präparation. Hier wurde ein Übergang zu einer sehr flachen Struktur beobachtet. Es ist zu vermuten, daß diese GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$ -Struktur für die gute Qualität der Heterostrukturen auf GaAs(114)-Substraten verantwortlich ist. Ferner könnte sich diese Struktur als Substrat für die epitaktische Deposition von Eisen- und Cobalt-Filmen eignen, da für die ferromagnetischen Eigenschaften Ga-reiche Strukturen vorzuziehen sind [179, 180]. Magnetische Filme auf halbleitenden Substraten haben insbesondere in der Technologie der Speichermedien ein enormes Anwendungspotential [181].

7 InAs-Inseln auf GaAs(001)

7.1 Einführung

Nicht ganz zwei Dekaden sind seit den ersten Berichten vom Übergang vom zweidimensionalen (2D) zum inselförmigen dreidimensionalen (3D)-Wachstum von InAs auf einem GaAs(001)Substrat vergangen [182]. Diese zu jener Zeit für Heterostrukturen unerwünschte Clusterbildung von InAs auf GaAs(001) wurde kurze Zeit später von Goldstein *et al.* [183] genauer untersucht mit dem Ergebnis, daß diese Cluster tatsächlich kristallin waren, und darüber hinaus, daß die Photolumineszenzlinien der Heterostrukturen, in denen InAs-Cluster eingebettet waren, gegenüber Heterostrukturen ohne Cluster zu niedrigeren Energien verschoben und sehr intensiv waren.

Mit Beginn der 90er Jahre wurde dieser Wachstumsmechanismus daher als Möglichkeit in Betracht gezogen, *Quantum Dots* (QDs) herzustellen. So wurde zunächst durch InAs-Wachstum auf GaAs(001)-Vizinalflächen von Brandt *et al.* [13] gezeigt, daß in der Tat InAs-QDs an den Stufenkanten entstehen. Später wurde – nahezu zeitgleich von Leonard *et al.* [14] und von Moison *et al.* [15] – erstmals von selbstorganisiert wachsenden QDs auf nominell orientierten GaAs(001)-Substraten berichtet. Durch Photo- bzw. Kathodolumineszenzspektroskopie an einzelnen QDs konnten Marzin *et al.* [184] und Grundmann *et al.* [185] die theoretisch vorhergesagte δ -förmige Zustandsdichte der QDs tatsächlich experimentell nachweisen. Diese Ergebnisse haben sehr viel Beachtung gefunden und für eine rasante Entwicklung der selbstorganisiert wachsenden QDs gesorgt. Heutzutage sind auf diesem Gebiet sehr viele Gruppen an der Erforschung von selbstorganisiert wachsenden QDs beteiligt, so daß ein allgemeiner Überblick über den Stand der Forschung den Rahmen dieser Arbeit bei weitem sprengen würden. Ein solcher Überblick findet sich beispielsweise in Ref. [9].

Das Ziel der hier präsentierten Untersuchung liegt nicht in der Erforschung der

Auswirkungen der Wachstumsparameter auf die Bildung oder die elektronischen Eigenschaften von QDs (siehe dazu z.B. Ref. [186–194]). Vielmehr wurde der Schwerpunkt auf die Form von selbstorganisiert wachsenden QDs gelegt. Motiviert wurde diese Schwerpunktlegung zum einen dadurch, daß bereits von vielen Forschungsgruppen hochindizierte Oberflächen als Facettenseiten der QDs beobachtet worden sind (s.u.). Somit bestand die Hoffnung, die in unserer Gruppe gewonnenen Erkenntnisse über hochindizierte Oberflächen zur Aufklärung der Form von QDs verwenden zu können [28]. Zum anderen dadurch, daß die Form von QDs eine grundlegende Bedeutung hat. Die Geometrie der QDs ist ein entscheidender Parameter zum Modellieren der elektronischen Struktur, d.h. für die Berechnung der elektronischen Zustände in den QDs [195–197]. Darüber hinaus ist die Form und die Bestimmung der die QDs umgebenden Facetten von großer Wichtigkeit für ein tieferes Verständnis der Mechanismen, die zur Ausbildung von selbstorganisiert wachsenden QDs führen.

7.2 Hintergrundinformationen

Bislang ist eine Reihe von Arbeiten veröffentlicht worden, die sich mit der Bildung von selbstorganisiert wachsenden QDs befassen (vgl. Ref.[9]). Eine der ersten Arbeiten auf diesem Gebiet war eine Untersuchung des Wachstums von Ge auf Si(100) von Eaglesham und Cerullo [198]. Die Autoren versuchen, die Bildung von QDs mit Hilfe eines kohärenten Stranski-Krastanow-Wachstumsmodus zu beschreiben. Kohärent wird der Modus bezeichnet, weil die beobachteten dreidimensionalen (3D)-Inseln keine Versetzungen aufweisen, wie bis dahin vom klassischen Stranski-Krastanow-Modus angenommen worden war [199]. (Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß der Begriff einer Insel, bzw. 3D-Insel, in diesem Zusammenhang eine kristalline 3D-Insel bezeichnet, deren Ausmaße in etwa mit der Größenordnung der de Broglie-Wellenlänge der Ladungsträger übereinstimmt, so daß sie, eingebettet in einem Material größerer Bandlücke, als QD angesehen werden kann).

Guha *et al.* [200] untersuchten das System InAs/GaAs mit Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und stellten fest, daß die Verspannungsenergie teils vom Substrat und teils von den 3D-Inseln aufgenommen wird. Theoretisch konnte daraufhin gezeigt werden, daß der Energiegewinn E_{insel} der Bildung von 3D-Inseln gegenüber einem gleichmäßig verspannten Film im wesentlichen durch drei Terme beschrieben

werden kann:

$$E_{insel} = E_{kanten} + \Delta E_{oberfl} + E_{relax} \quad .$$

Dabei gibt ΔE_{oberfl} den Energieaufwand der aufzubringenden Oberflächenenergie und E_{kanten} den der Kanten an. E_{relax} gibt den Energiegewinn durch Relaxation des Materials im Volumen der Inseln wieder [9]. Dieser Energiegewinn kann dazu führen, daß die Bildung von 3D-Inseln energetisch bevorzugt wird, d.h., dem kohärenten Stranski-Krastanow-Wachstumsmodus entspricht [201].

Diese Beschreibung vermag allerdings eine insbesondere für die Technologie wichtige Beobachtung nicht zu erklären, nämlich die Größenverteilung der Inseln. Da in erster Näherung der Oberflächenterm in der obigen Gleichung quadratisch, der Relaxationsterm kubisch (Volumen) von der Kantenlänge einer Insel abhängt, sollten zwei kleinere Inseln energetisch ungünstiger sein als eine große Insel mit dem gleichem Volumen. Daher sollten große Inseln immer größer werden, kleinere hingegen auf Kosten der großen Inseln verschwinden. Dieses Phänomen ist seit langer Zeit unter dem Namen Ostwald-Reifung bekannt [202]. Beim Wachstum von InAs-Inseln auf GaAs(001) wird allerdings stets eine sehr schmale Größenverteilung der Inseln beobachtet (vgl. Abschnitt 7.5.1). Von technologischer Relevanz ist diese Eigenschaft vor allem deshalb, weil die *Confinement*-Energie von der Größe (und Form) der Inseln abhängt. Mit *Confinement*-Energie wird der Energiebeitrag bezeichnet, der sich aufgrund der Lokalisierung der Ladungsträger ergibt. Daher ist eine einheitliche Größe für die Herstellung z.B. von QD-Lasern wünschenswert, damit möglichst viele QDs Licht mit derselben Frequenz emittieren.

Weitere experimentelle Ergebnisse zeigten, daß die kohärente Stranski-Krastanow-Beschreibung unzureichend ist. Der Übergang vom 2D- zum 3D-Wachstums wird zwischen 1,5 und 2,0 ML InAs gefunden [203–205]. Darüber hinaus wird beobachtet, daß beim Einsetzen des Inselwachstums die benetzende Schicht ausgedünnt wird [15, 206], d.h. es findet ein maßgeblicher Teilchenfluß von der Benetzungsschicht zu den Inseln statt. Diese Prozesse werden im Rahmen der Stranski-Krastanow-Beschreibung nicht erfaßt.

Aufgrund der soeben geschilderten Problematik sind einige Versuche gestartet worden, um eine korrekte Beschreibung der Mechanismen zu finden, die zur Ausbildung der Inseln führen. Sie unterscheiden sich vor allem darin, das Wachstum mit Hilfe von kinetischen Effekten [27, 207–209] oder im Rahmen einer Gleichgewichtsthermodyna-

mik [18, 210–213] zu erklären. Ihnen allen gemein ist, daß die Form der Inseln bzw. ihre Seitenfacetten als entscheidende Parameter in die Rechnungen eingehen [31].

7.3 Experimentelle Bestimmung der Form

Die exakte Form eines QDs experimentell zu ermitteln ist ein sehr schwieriges Problem. Problematisch ist es insbesondere deswegen, weil die eigentlichen QDs vergraben liegen und daher nicht ohne weiteres zugänglich sind.

Eine Möglichkeit besteht darin, die QDs mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM bzw. HRTEM, die hochauflösende Variante, vgl. z.B. Ref.[214]) zu untersuchen. Dabei können Abbildungen einer Aufsicht wie auch eines Schnittes gemacht werden. Ein grundlegendes Problem dieser Methode besteht darin, daß nicht nur die Atome zum Kontrast des Bildes beitragen, sondern auch das den QDs umgebende Spannungsfeld. Dadurch können TEM-Bilder dazu führen, die tatsächliche Größe der QDs zu überschätzen, bzw. ihre Form falsch zu interpretieren [215]. Ruvimov *et al.* [19] und Grundmann *et al.* [216] konnten das Spannungsfeld-Problem durch besondere Abbildungsmethoden unterdrücken und schlossen auf pyramidenförmige QDs mit quadratischer Grundfläche. Die Seitenflächen wurden durch Aufnahmen im Querschnitt als $\{011\}$ -Facetten ermittelt. Andere Autoren interpretieren ihre TEM-Bilder als linsenförmige QDs [217, 218]. Liao *et al.* [219] zeigten auf, daß auch linsenförmige Inseln mit runder Grundfläche eine quadratische Grundfläche in den TEM-Aufnahmen zeigen können. Es bleibt also fraglich, inwieweit TEM-Bilder tatsächlich die Form der QDs korrekt wiedergeben.

Eine sehr elegante Methode wurde von Wu *et al.* [220] angewendet. Sie untersuchten gespaltene QD-Proben mit STM. Dadurch gelang es ihnen, nicht nur Schnitte von QDs mit atomarer Auflösung, sondern auch die Verteilung einzelner In-Atome in der Umgebung der QDs abzubilden. Weil die unterschiedlichen Band-Energien von GaAs und InAs ebenfalls zum Tunnelstrom beitragen, erscheinen InAs-Bereiche kontrastreicher, so daß eine Unterscheidung der Materialien möglich ist. Diese Methode wurde ebenfalls von weiteren Gruppen angewendet [21, 25, 221–223]. Flebbe *et al.* [21] schlossen aus ihren Schnittbildern auf Pyramidenstümpfe mit $\{110\}$ - sowie $\{111\}$ -orientierten Facettenseiten. Eisele *et al.* [25] untersuchten gestapelte InAs-QD-Schichten, die mit metallorganischer Gasphasenepitaxie gewachsen wurden, und gaben die Form der QDs ebenfalls als Pyramidenstumpf an. Allerdings fanden sie eine quadratische Grundfläche

mit $\{102\}$ -Seitenfacetten. An diesen Studien wird die Problematik der Formbestimmung deutlich. Es kann lediglich ein Querschnitt durch die QDs abgebildet werden. Die genaue Stelle, wo der Schnitt ansetzt, bleibt stets unbekannt. Daher ist es schwierig, die exakte Form zu ermitteln. Im allgemeinen kann es mehrere mögliche Formen geben, die einen gleichen $\langle 110 \rangle$ -Querschnitt haben [21].

RHEED stellt eine indirekte Methode zur Bestimmung der Form dar. Die Facettenseiten der Inseln erzeugen streifige Reflexe, die gegenüber der Oberflächennormalen des Substrates geneigt sind. Aus diesem Neigungswinkel sowie aus der azimuthalen Ausrichtung der Probe gegenüber dem Elektronenstrahl läßt sich die Facettenorientierung bestimmen [71, 224]. So beobachteten Nabetani *et al.* [24] im $[1\bar{1}0]$ -Azimuth \vee -förmig angeordnete Streifen, die einen Winkel von 55° einschlossen. Daraus schlossen die Autoren, die Inseln seien Pyramiden mit rechteckiger Grundfläche und zwei $\{113\}$ -orientierten Seitenflächen. Die anderen zwei Seitenflächen konnten nicht identifiziert werden. Lee *et al.* [26] beobachteten ebenfalls diese Reflexe im RHEED-Reflexmuster der Inseln, aber zweifeln die Interpretation von Nabetani *et al.* [24] an. Sie untersuchten das Reflexmuster der QDs in verschiedenen azimuthalen Richtungen und zeigten, daß nur entlang $[3\bar{1}0]$ und $[1\bar{3}0]$ Beugungsstreifen zu erkennen sind, die tatsächlich von den Seitenfacetten verursacht werden. Aus dem Winkel der Beugungsstreifen schlossen die Autoren auf pyramidenförmige Inseln mit rautenförmiger Grundfläche und $\{136\}$ -orientierten Seitenflächen.

Sehr verbreitet ist die Untersuchung der Form von InAs-Inseln mit dem Rasterkraftmikroskop (AFM, engl. *Atomic Force Microscope*). Dabei wird das Wachstum von QDs nach der Bildung der Inseln unterbrochen, und danach die Probe auf Raumtemperatur abgekühlt (siehe z.B. [15, 188, 203]). Allerdings erscheinen nahezu alle QDs in den AFM-Abbildungen linsenförmig und eher flach. So geben Moisson *et al.* [15] als Facettenseiten $\{410\}$ -Flächen an. Der Grund hierfür liegt darin, daß die Größe der AFM-Spitzen in etwa mit der Größe der Inseln übereinstimmen. Somit werden die geometrischen Ausmaße der AFM-Spitze ebenfalls zum Bild beitragen (vgl. dazu Kap. 3, Abb. 3.20). Gong *et al.* [225] berechneten für den Durchmesser einer Insel einen Meßfehler von 25 % für den Fall, daß der Radius der AFM-Spitze einen Apexradius von 10 nm hat.

Zuverlässigere Daten lassen sich hingegen mit dem STM aufnehmen. Hierfür muß allerdings, wie im Falle des AFM, das Wachstum unterbrochen werden, um die Inseln untersuchen zu können. Des weiteren ist eine direkte UHV-Verbindung zwischen

dem STM und der Wachstumskammer notwendig, um Verfälschungen der Meßdaten durch Oxidation an Luft zu vermeiden. Daher gibt es nicht sehr viele Gruppen, die die apparativen Möglichkeiten haben, eine solche Untersuchung durchführen zu können. Joyce *et al.* [22] untersuchten InAs-Inseln mit einem STM und fanden $\{11n\}$ ($n=3, 4, 5$)-Facetten als umhüllende Seitenflächen. Die Zuordnung basierte allerdings auf den Neigungswinkeln und wurde nicht aufgrund der atomaren Anordnung auf den Facetten getroffen. Hasegawa *et al.* [23] und Xue *et al.* [226] fanden in ihren STM-Untersuchungen ebenfalls $\{113\}$ - und $\{114\}$ -orientierte Facetten. Darüber hinaus konnten sie in manchen Inseln tatsächlich atomar aufgelöste Strukturen erkennen und schlossen aufgrund dessen auf $\{125\}$ -orientierte Facetten.

Wie eingangs erwähnt, ist die experimentelle Bestimmung der Facetten in der Tat ein schwieriges Problem und führte zu unterschiedlichen Interpretationen. Ein wichtiges Ergebnis vieler Studien ist die Beobachtung von Facetten mit hohen Millerschen Indizes. Dies steht im Gegensatz zu der in vielen theoretischen Berichten weit verbreiteten Annahme, daß die umhüllenden Facetten niedrigindizierte Flächen sein sollten, weil nur diese tatsächlich Flächen mit niedriger Oberflächenenergie seien.

7.4 Präparation

Das Ziel der Experimente dieser Arbeit war, die Form, die die InAs-Inseln auf GaAs(001) annehmen, zu untersuchen. Die experimentellen Bedingungen wurden daher so gewählt, daß sich die Resultate mit denen bereits existierender Publikationen vergleichen lassen konnten.

Zunächst wurde eine 50 nm dicke Schicht GaAs bei einer Proben temperatur von 560 °C gewachsen. Daraufhin wurde die Proben temperatur auf 450 °C abgesenkt, wobei die As-Quelle angeschaltet blieb. Wie mit RHEED festgestellt werden konnte, geht dabei die GaAs(001)-Oberfläche von der $\beta 2(2 \times 4)$ - in die $c(4 \times 4)$ -Phase über. Die Probe wird für etwa 10 min auf dieser Temperatur gehalten, um eine glatte Oberfläche zu erhalten. Diese Temperatur wurde gewählt, weil sie zum einen für das Wachstum von InAs-QDs im mittleren Temperaturbereich liegt, in dem die überwiegenden Resultate anderer Forschungsgruppen erzielt wurden, zum anderen aber auch, weil die Temperatur der Probe anhand des Übergangs von der $\beta 2(2 \times 4)$ - in die $c(4 \times 4)$ -Phase sehr genau feststellbar ist. Hiernach wurde InAs mit einer Wachstumsrate von $0,05 \text{ \AA s}^{-1}$ abgeschieden. Diese (relativ) langsame Wachstumsrate wurde gewählt, um die Diffu-

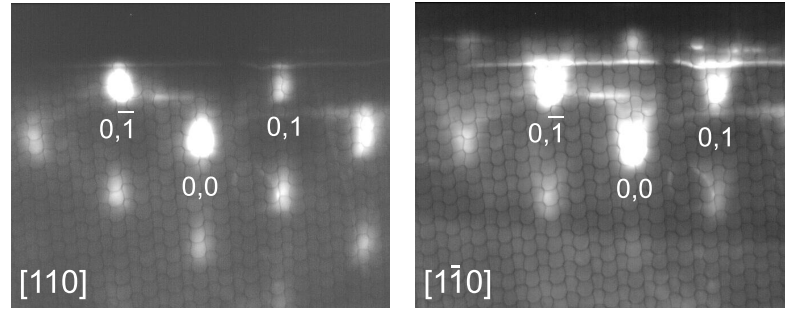


Abb. 7.1: RHEED-Reflexmuster unmittelbar nach dem 3D-Wachstum von InAs auf GaAs(001). Links: $[110]$ -Azimuth. Rechts: $[\bar{1}10]$ -Azimuth. $E = 13 \text{ keV}$.

sion der Atome auf der Benetzungsschicht zu erhöhen und dadurch ein gleichmäßiges Wachsen der Inseln zu gewährleisten [189]. Das As_2 :In-Verhältnis betrug 40.

Das RHEED-Reflexmuster im $[\bar{1}10]$ -Azimuth zeigt im Laufe der Zeit einen Übergang von der $2\times$ - der $c(4 \times 4)$ -Rekonstruktion in eine $3\times$ -Periode, was mit der Ausbildung der Benetzungsschicht verknüpft ist. Nach dem Aufbringen von $1,8 (\pm 0,2)$ Lagen InAs zeigt das Reflexmuster ziemlich abrupt den Übergang zum dreidimensionalen Wachstum an, indem es von einem streifigen in einem punktförmigen Muster übergeht. In Abb. 7.1 ist das RHEED-Reflexmuster zu sehen, wie es bereits nach der Bildung der 3D Inseln erscheint. Darüber hinaus ist ein Unterschied in beiden azimuthalen Richtungen zu erkennen. Während die Reflexe entlang $[110]$ punktförmig erscheinen, zeigt das Reflexmuster im $[\bar{1}10]$ -Azimuth zusätzlich noch streifige Reflexe, die von den Seitenflächen der Inseln herrühren. Jeweils zwei streifige Facettenreflexe gehen von den punktförmigen Reflexen aus und erscheinen daher \vee -förmig. Dabei ist die Spitze des Keils zum Substrat gerichtet (in der Literatur wird häufig der englische Begriff *chevron* für das keilförmige Erscheinen der Beugungsreflexe verwendet). Der eingeschlossene Winkel der streifigen Reflexe beträgt in etwa 50° , was auf $\{113\}$ - oder $\{114\}$ -orientierte Facetten hindeuten könnte. Eine genauere Winkelangabe kann nicht gegeben werden, weil die azimuthale Orientierung der Probe mit Hilfe des Manipulators nur auf etwa $\pm 1^\circ$ genau ist.

Unmittelbar nach dem Übergang vom 2D- zum 3D-Wachstum wurde die Probe in die Analyse kammer transferiert. Es wurde dabei beachtet, daß der Transfervorgang sehr schnell verlief, d.h. innerhalb etwa 15–30 s, um den Wachstumszustand tatsächlich einfrieren zu können. In der Analyse kammer wurde die Probe auf Raumtemperatur abgekühlt, bevor sie mit dem STM untersucht wurde.

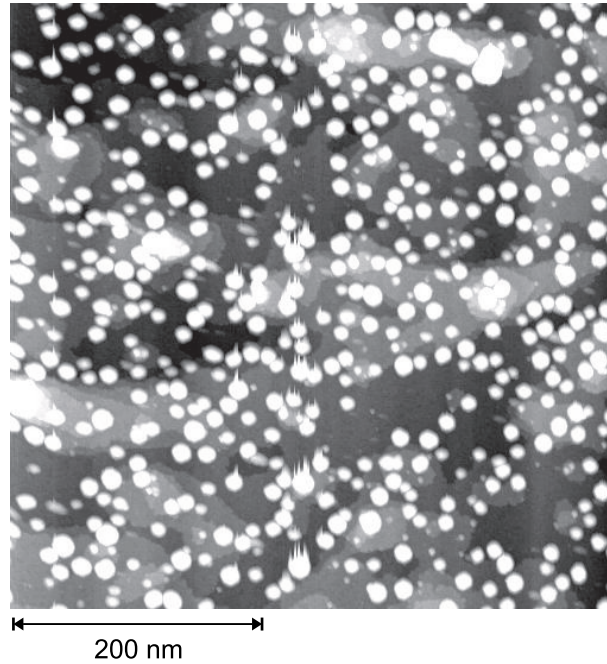


Abb. 7.2: Übersichts-STM-Bild einer InAs-QD-Probe. Die Dichte der Inseln beträgt $1,9 \times 10^{11}/\text{cm}^2$. $500 \times 500 \text{ nm}^2$, $I = 0,19 \text{ nA}$, $U = -2,25 \text{ V}$.

7.5 Eigene STM-Messungen

7.5.1 Übersichtsbilder

Abbildung 7.2 zeigt ein $500 \times 500 \text{ nm}^2$ großes STM-Bild einer Probe, auf der InAs-Inseln gewachsen wurden. Die dreidimensionalen InAs-Inseln sind in dieser Graustufendarstellung als weiße Kreise zu erkennen. Dieser Ausschnitt enthält 489 Inseln, was einer Inseldichte von $1,9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ entspricht. Die Größe der Inseln, bzw. die Verteilung des Inselndurchmessers, ist in Abb. 7.3 in einem Balkendiagramm dargestellt. Die bereits angesprochene scharfe Größenverteilung ist deutlich erkennbar. Nahezu die Hälfte (46 %) aller Inseln haben einen Durchmesser von $125 \pm 10 \text{ \AA}$. Die mittlere Höhe der Inseln beträgt 22 \AA . Diese Werte entsprechen den z.B. in den Ref. [14, 22] angegebenen, so daß sichergestellt ist, daß sich die weiteren Ergebnisse mit denen von ‘echten’ InAs-QDs, d.h. in GaAs vergrabenen Inseln, vergleichen lassen.

Interessant ist zu erwähnen, daß die InAs-Inseln dazu tendieren, sich an der unteren Seite der Stufenkanten anzulagern. Um dies verdeutlicht darzustellen, wird in Abb. 7.4 ein STM-Bild gezeigt, dessen Rasterlinien differenziert (1. Ableitung) wurden. Dadurch wird erreicht, daß die Stufenkanten hervorgehoben werden. Darüber hinaus wurden die

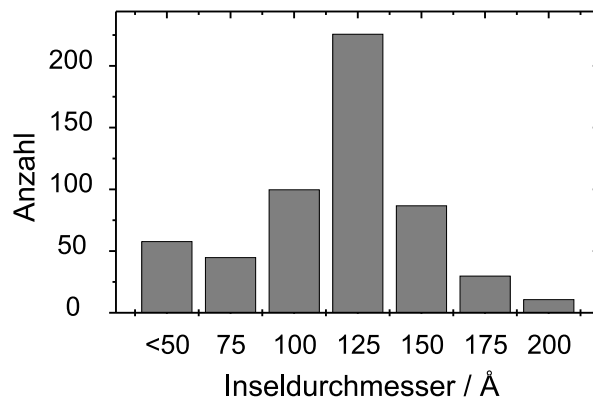


Abb. 7.3: Histogramm der Inseldurchmesser. Als Inseldurchmesser wurde das arithmetische Mittel zwischen der Länge entlang $[110]$ und entlang $[1\bar{1}0]$ genommen.

Graustufen so eingestellt, daß die darunter liegende InAs-Benetzungsschicht zu sehen ist. Diese Beobachtung ist im Einklang mit der Untersuchung des InAs-Wachstums auf (001)-Vizinalflächen von Ikoma und Ohkouchi [227]. Dort wurde ebenfalls eine Anlagerung von InAs-Inseln in der unteren Terrasse an Stufenkanten beobachtet. Auffällig bei diesem Bild ist ebenfalls, daß Inseln, die mitten auf einer Terrasse stehen, tendenziell kleiner sind (siehe Pfeil) als jene, die an den Stufenkanten stehen. Das würde entweder bedeuten, daß sich solche Inseln langsamer bilden, oder aber, daß sich diese Inseln auflösen, um mehr Material für die größeren Inseln bereitzustellen.

7.5.2 Form der Inseln

Die Form der InAs-Inseln kann mit Hilfe des STM sehr genau ermittelt werden. Dazu ist allerdings eine Auflösung der Spitze bis hinunter zu atomaren Dimensionen erforderlich. Die gemessenen Abstände und Höhenunterschiede der Inseln lassen sich anhand der Benetzungsschicht überprüfen bzw. kalibrieren. Mit Hilfe der Rekonstruktion in der Benetzungsschicht können darüber hinaus die Orientierungen parallel zur Oberfläche genau ermittelt werden.

In allen hier vorgestellten Bildern war die Auflösung hoch genug, um die atomare Struktur der Benetzungsschicht abbilden zu können. Ferner wurde die Richtung der schnellen Rasterbewegung gewechselt, um sicherzustellen, daß die Messungen nicht durch Abbildungsfehler der Spitze beeinflusst wurden. Abb. 7.5 zeigt als Beispiel eines der Bilder, die zur Untersuchung der Form der Inseln in Betracht gekommen sind.

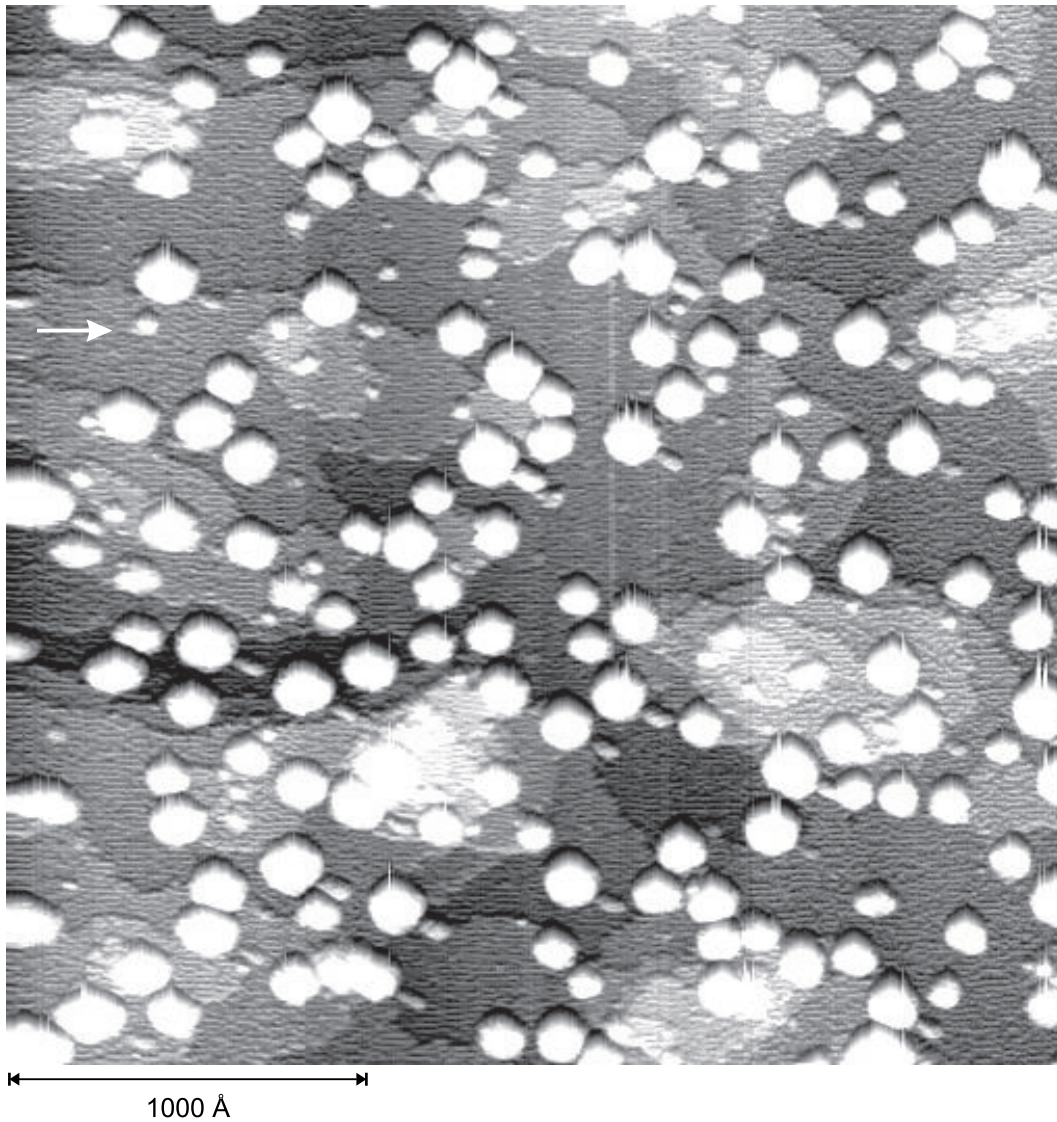


Abb. 7.4: 1. Ableitung eines STM-Bildes mit InAs-Inseln auf GaAs(001). Das Bild zeigt die bevorzugte Anlagerung der Inseln in der unteren Terrasse an den Stufenkanten. Der Pfeil (links im Bild) markiert eine kleine Insel, die mitten auf einer Terrasse steht. $3000 \times 3000 \text{ \AA}^2$, $I = 0,15 \text{ nA}$, $U = -2,75 \text{ V}$.

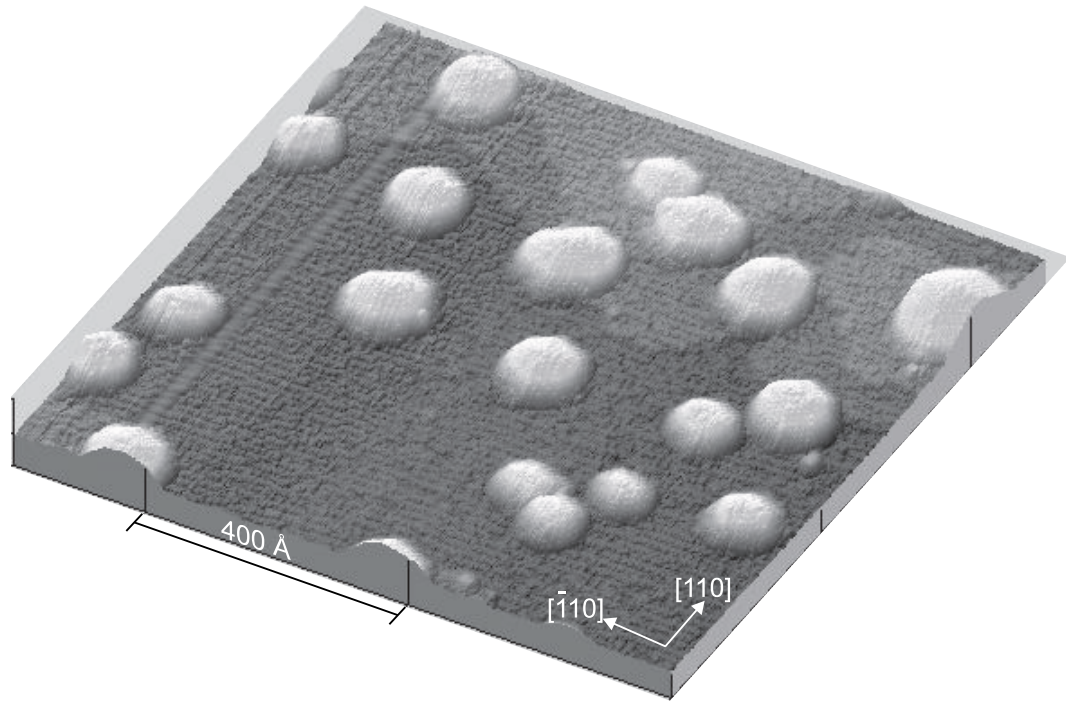


Abb. 7.5: Übersichtsbild der InAs-Inseln in dreidimensionaler Darstellung, die mit atomarer Auflösung aufgenommen wurden. $1000 \times 1000 \text{ \AA}^2$, $I = 0,15 \text{ nA}$, $U = -2,75 \text{ V}$.

Zusätzlich sind natürlich auch kleinere Bilder aufgenommen worden, um mehr Meßpunkte für eine Insel zu haben. Die Gesamtanzahl der untersuchten Inseln war 53. Die aus diesen Inseln ermittelte Höhe der Inseln ist $28 \pm 4 \text{ \AA}$. Die Länge der Inseln entlang $[110]$ beträgt $136 \pm 20 \text{ \AA}$ und $127 \pm 20 \text{ \AA}$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung.

In Abb. 7.6 sind Höhenprofile im $[110]$ - und im $[1\bar{1}0]$ -Azimuth einer Insel, die repräsentativ für viele in der Abb. 7.5 gezeigten Inseln ist, dargestellt. Hier wird ein Unterschied der Querschnitte zwischen den beiden Richtungen deutlich. Der Querschnitt entlang $[1\bar{1}0]$ hat eine halbrunde Form. Daraus würde sich eine linsenförmige Insel ergeben, deren untere Flanke steiler verläuft als die zur Spitze hin. Der Winkel der steileren Flanke beträgt $36,1^\circ$. Hieraus ließe sich auf $\{110\}$ -Flächen, die einen Winkel von $35,3^\circ$ zum (001) -Substrat haben, als Seitenfacetten der Inseln schließen. Der Querschnitt entlang der $[110]$ -Richtung hat eine gleichmäßige Steigung und läuft oben spitz zusammen. Der Winkel zwischen den Flanken und dem Substrat beträgt $21,3^\circ$. Daraus ließe sich auf pyramidenförmige Inseln mit $\{114\}$ -orientierten Seitenfacetten schließen. Die $\{114\}$ -Flächen stehen in einem Winkel von $19,5^\circ$ zum (001) -Substrat. Auch $\{113\}$ -Facetten könnten in Betracht gezogen werden, da sie im Winkel von $25,2^\circ$

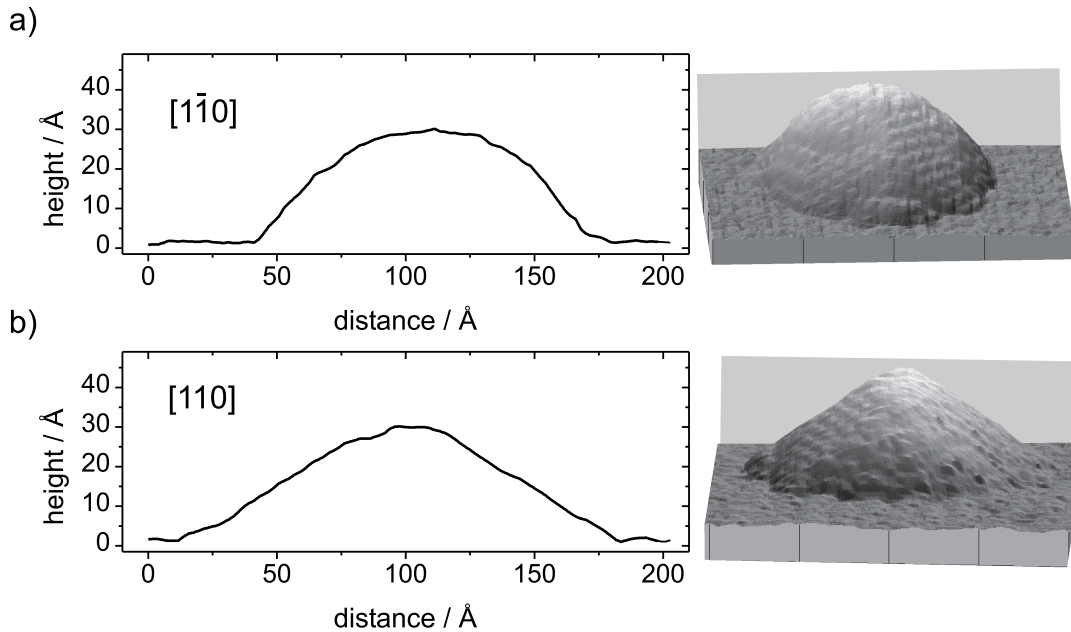


Abb. 7.6: Höhenprofile einer InAs-Insel. a) Entlang $[1\bar{1}0]$, b) entlang $[110]$. Rechts sind die entsprechenden perspektivischen Darstellungen der Inseln gezeigt.

zum Substrat stehen. Aus den Beugungsreflexen des RHEED-Musters konnte man bereits auf diese Orientierungen schließen.

Der Vorteil einer STM-Untersuchung kommt nun zum Tragen. Weil die Inseln zusätzlich in der Aufsicht betrachtet werden können, kann die azimuthale Orientierung der Facetten gegenüber dem Substrat bestimmt werden. Die Ausrichtung einer Facette parallel zur Substratoberfläche, d.h. die Orientierung der Schnittgerade zwischen der Facette und der (001)-Oberfläche, kann mit Hilfe der Rekonstruktion der Benetzungsschicht ermittelt werden. Um die azimuthale Orientierung der Facetten hervorzuheben, ist in Abb. 7.7 neben der typischen Graustufen-STM-Darstellung, eine Isocontour-Abbildung dargestellt. Die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen verlaufen jeweils parallel zu den Rahmen der Abbildungen. Die Isocontour-Darstellungen wurden erhalten, indem die Punkte gleicher Höhe miteinander verbunden wurden. Die Höhendifferenz zweier Graustufen wurde entsprechend der Höhe einer Monolage mit $2,8 \text{ \AA}$ gesetzt.

Die Inseln scheinen eher rundlich zu sein; dennoch sind einige recht gerade verlaufende Linien zu erkennen, die auf die Ausbildung von Facetten hindeuten. Diese sind insbesondere auf der oberen und unteren Seite, d.h. entlang $[1\bar{1}0]$, des Bildes zu erkennen. Zur Verdeutlichung ist in der linken Abbildung eine weiß gestrichelte Linie eingezeichnet. Insgesamt sind in den Bildern vier ausgeprägte Facettenseiten zu er-

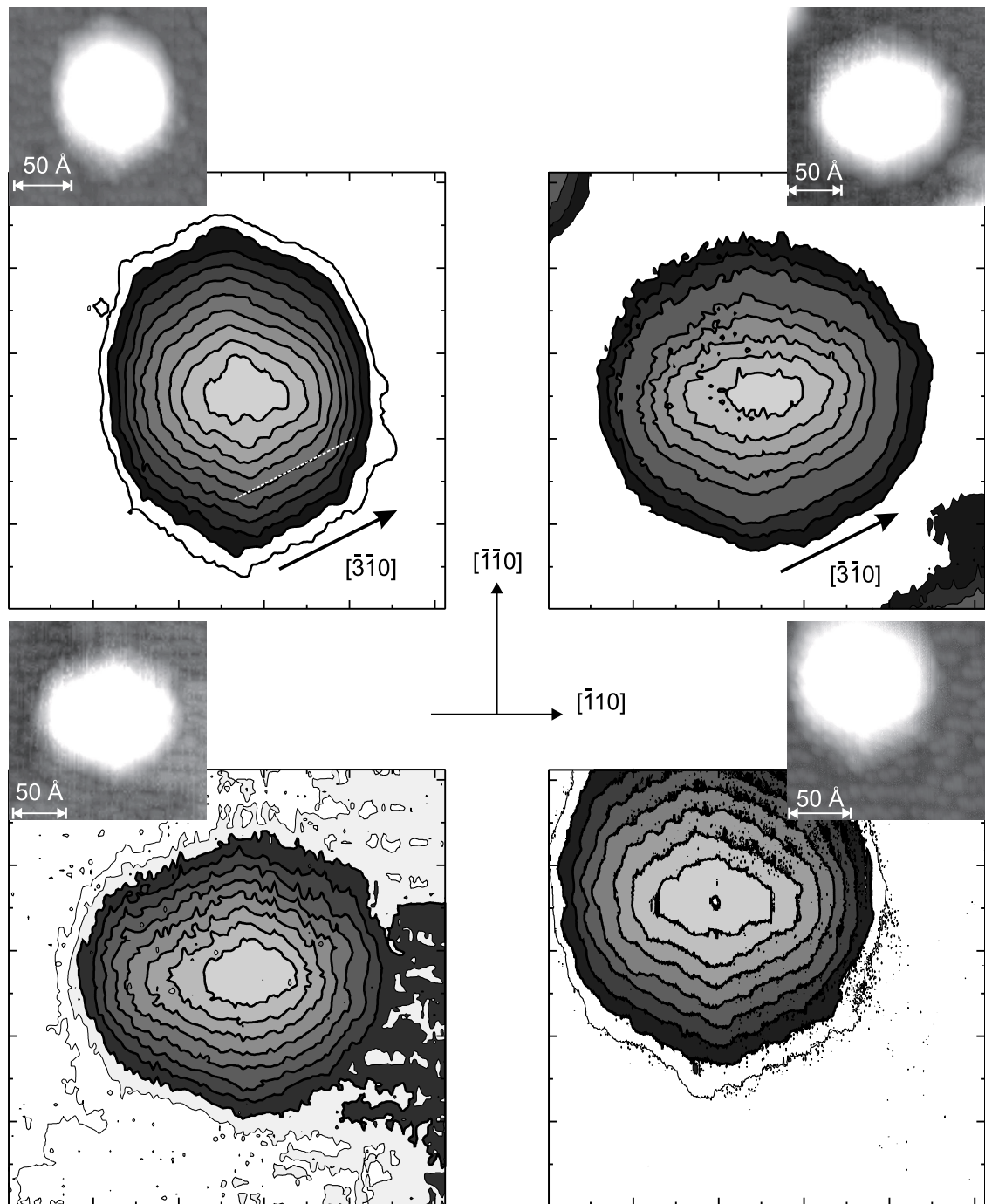


Abb. 7.7: Isocontour-Bilder der STM-Messungen. Die jeweiligen Meßdaten sind links bzw. rechts oben eingefügt.

kennen. Die azimuthale Orientierung dieser Seitenfacetten ist allerdings gegenüber der $[1\bar{1}0]$ -Richtung geneigt. Das könnte ein Hinweis auf $\{101\}$ -orientierte Facetten sein, jedoch beträgt der Winkel zwischen der Schnittgeraden von (001) und $\{101\}$ und der $[1\bar{1}0]$ -Richtung 45° (vgl. Abb. 7.9). Der Winkel zwischen der Schnittgeraden der Facettenseiten der Inseln und der $[1\bar{1}0]$ -Richtung beträgt $24 \pm 2^\circ$. Die Fehlerangabe bezieht sich hierbei nicht auf den Meßfehler von einer Insel, sondern auf eine statistische Schwankung, die sich aufgrund aller untersuchten Inseln ergeben hat. Dabei wurden jedoch bei allen Inseln diese ausgeprägten Seitenfacetten beobachtet.

Die zur $[110]$ parallel laufenden Facetten der Inseln scheinen keiner ausgeprägten Orientierung zu folgen. Die Inseln scheinen in dieser Richtung rundlich zu sein; daher ist zu vermuten, daß auf diesen Seiten mehrere Facetten zu finden sind. Aus den geometrischen Abmessungen und der Orientierung könnten sie aus $\{110\}$ - und $\{11n\}B$ ($n=1, 2$)-Facetten gebildet werden.

7.6 Diskussion und Vergleich mit der Literatur

Die STM-Bilder der Inseln und die daraus entnommenen Daten sind nur teilweise im Einklang mit existierenden Modellen für QDs. Zwar kann anhand der ermittelten Inseldichte und der Größe der Inseln geschlossen werden, daß die in dieser Arbeit hergestellten Inseln in guter Übereinstimmung mit den freiliegenden Inseln sowie mit den QDs sind, die von der Literatur her bekannt sind. Die gefundene Form der Inseln befindet sich allerdings teilweise im Widerspruch zu den experimentellen Daten anderer Arbeiten.

Die beobachtete Anisotropie in den Höhenprofilen der Inseln wurde bereits in einer ersten TEM-Arbeit von Guha *et al.* [200] gefunden. In jener Arbeit wurden vergrabene Inseln, d.h. QDs, untersucht. Dies spricht dafür, daß die Anisotropie ein Effekt des Wachstums ist und nicht erst bei der in dieser Arbeit angewendeten Unterbrechung des Wachstums – etwa beim Abkühlen der Inseln – auftritt. Auch Lee *et al.* [228] beobachteten unterschiedliche Querschnitte der Inseln, gaben aber für beide Richtungen ein dreieckiges Profil an. Ruvimov *et al.* [19] und Liao *et al.* [219] untersuchten den Querschnitt der QDs nur in einer $\langle 110 \rangle$ -Richtung, daher kann hier kein Vergleich gezogen werden. Die Querschnitts-STM-Bilder von Flebbe *et al.* [21] lassen leider auch keinen Vergleich zu, da die Orientierung der Spaltfläche nicht bekannt ist. Dennoch sind die beobachteten Winkel der Flanken der Inseln in guter Übereinstimmung mit

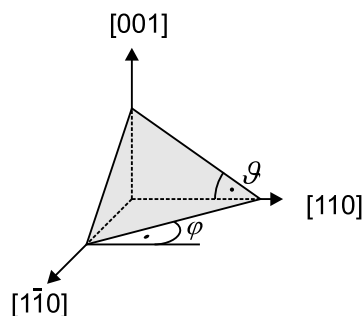


Abb. 7.8: Definition der Winkelbezeichnungen in Tab. 7.1. Die Facette ist durch die graue Fläche schematisch angedeutet.

den bereits existierenden Arbeiten.

Darüber hinaus läßt sich mit Hilfe dieser Höhenprofile der Unterschied in den RHEED-Reflexmuster qualitativ verstehen. Während die RHEED-Reflexe im $[1\bar{1}0]$ -Azimuth (vgl. Abb. 7.1) deutlich keilförmige Satelliten aufzeigten, die auf Facetten hindeuten, waren die Reflexe im $[110]$ -Azimuth punktförmig. Der Grund hierfür liegt darin, daß, wenn der Elektronenstrahl parallel zur $[110]$ -Richtung gestellt wird, die runde Form zum Beugungsmuster beiträgt. Die Elektronen werden daher in keine ausgezeichnete Richtung gebeugt. Anders sieht die Situation im senkrechten Fall aus. Wird der Elektronenstrahl parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung gestellt, tragen die ausgeprägten Facetten zum Beugungsbild bei, so daß Facettenreflexe tatsächlich zu sehen sind.

Die azimuthale Orientierung der Seitenfacetten der Inseln kann nach Liao *et al.* [219] nicht aus Aufsichts-TEM-Abbildungen entnommen werden. Daher bleibt lediglich der Vergleich mit den RHEED-Arbeiten an QDs und anderen STM-Arbeiten an nicht überwachsenen Inseln. Das zunächst einmal erstaunlichste Ergebnis ist, daß die ausgeprägten Facetten offenkundig Flächen sind, die hohe Millersche Indizes haben. Allerdings ist die Bestimmung der Facettenorientierung, d.h. die Millerschen Indizes der Facetten, mit der Information der Winkel der azimuthalen Orientierung der Facetten aufgrund der zu großen Schwankung nicht ohne weiteres möglich.

Aus den hier bestimmten Winkeln läßt sich eine Reihe von Richtungen der Schnittgeraden der Facetten und des (001)-orientierten Substrats ermitteln. Die Richtungen der Schnittgeraden der Facetten im Zusammenhang mit den Winkeln aus den Querschnitten (s.o.) ergeben dann mögliche Facettenorientierungen. Einige Orientierungen nebst zugehörigen geometrisch berechneten Winkeln sind in Tab. 7.1 zusammengefaßt. Dabei wurde nur eine Facettenorientierung berücksichtigt, da die anderen symmetrisch

Azimuth φ	Schnitt- gerade	Polarwinkel ϑ	Seiten- facette
18,435°	[120]	24,227°	[125]
21,801°	[370]	25,239°	[3 7 15]
22,38°	[5 12 0]	25,68°	[5 12 25]
23,199°	[250]	24,227°	[2 5 11]
24,44°	[380]	24,586°	[3 8 17]
26,565°	[130]	25,239°	[136]
26,565°	[130]	22,002°	[137]

Tabelle 7.1: Geometrische Lage und mögliche Orientierungen der beobachteten Facetten

zu $[110]$ und $[1\bar{1}0]$ liegen. Der Azimuth- φ und der Polarwinkel ϑ sind in der Tabelle auf die $[110]$ -Richtung bezogen. Ihre räumliche Lage ist in Abb. 7.8 gezeigt. Wie man anhand der Tabelle unschwer erkennen kann, lassen sich mit allen dort aufgeführten Facetten die hier gewonnen experimentellen Daten erklären.

Zum besseren Verständnis der weiterführenden Diskussion sind in Abb. 7.9 Graustufenabbildungen von verschiedenen Modellen dargestellt. Die Rahmen der Bilder sind dabei parallel zu $\langle 110 \rangle$ ausgerichtet. Die Größe der Modelle wurde so gewählt, daß die Länge der Inseln entlang $[1\bar{1}0]$, d.h. die horizontale Richtung in Abb. 7.9, 120 \AA beträgt.

Experimentell wurden auch von anderen Gruppen hochindizierte Facettenseiten beobachtet. Lee *et al.* [26] haben mit Hilfe von RHEED auf $\{136\}$ -Facetten der QDs

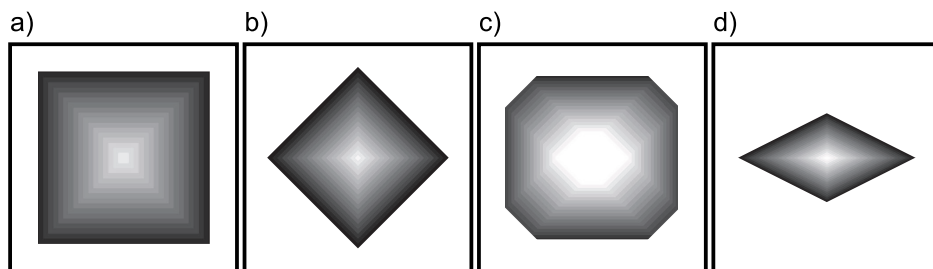


Abb. 7.9: Graustufenabbildungen von bereits vorgeschlagenen Modellen für die InAs-Inseln. a) $\{111\}$, b) $\{110\}$, c) Kombination aus $\{110\}$ - und $\{111\}$ -Facetten (nach Pehlke *et al.*, Ref.[212]) und d) $\{136\}$ -Facetten. Die einzelnen Bilder sind jeweils $150 \times 150 \text{ \AA}^2$ groß und sind entlang $\langle 110 \rangle$ ausgerichtet.

geschlossen. Diese Facettenorientierungen sind ebenfalls mit den in dieser Untersuchung ermittelten Winkeln im Einklang. Joyce *et al.* [22] beobachteten in einer STM-Untersuchung indes $\{11n\}$ ($n=3, 4, 5$)-orientierte Facetten. Diese Orientierungen sind mit den hier vorgestellten STM-Bildern jedoch nicht vereinbar. Die $\{113\}$ - und $\{114\}$ -orientierten Facetten würden zwar zu den beobachteten polaren Winkeln passen, nicht aber zur Verkipfung in azimuthaler Richtung. Die $\{11n\}$ -Flächen sollten Schnittgeraden aufzeigen, die jeweils parallel zu den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen verlaufen. Sie würden in der Isocontour-Darstellung dem $\{111\}$ -Modell der Abb. 7.9 ähneln. Die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen können auf der planaren Probe zweifelsfrei anhand der Rekonstruktion in der Benetzungsschicht identifiziert werden. Die Isocontour-Bilder zeigen aber eindeutig eine Verkipfung der Facetten gegenüber $\langle 110 \rangle$. In Arbeiten der Forschungsgruppe von Sakurai [23, 226] werden ebenfalls $\{113\}$ - und $\{114\}$ -orientierte Facetten in STM-Bildern beobachtet. Dabei wurde berichtet, daß die größeren Inseln eher $\{113\}$ - als $\{114\}$ -orientierte Facetten aufweisen. Die $\{113\}$ -Zuordnung für die Facettenorientierung erfolgte aus atomaren Strukturen in den STM-Bildern. Die Facetten zeigten regelmäßige Anordnungen von Buckeln, die As-Dimeren zugeordnet wurden und entlang den $\langle \bar{2}11 \rangle$ -Richtungen verliefen. Hieraus wurde schließlich von den Autoren auf $\{113\}$ -orientierte Facetten geschlossen. Da die bekannten atomaren Strukturen der rekonstruierten GaAs(113)- und InAs(113)-Oberflächen jedoch entlang $\langle 332 \rangle$ verlaufen [30, 35, 153], wurde der Verlauf der atomaren Strukturen entlang den $\langle \bar{2}11 \rangle$ -Richtungen durch die Verspannung der Inseln erklärt, eine Erklärung, die weder eindeutig noch besonders überzeugend ist. Allerdings wurden von denselben Autoren auch Inseln mit Facetten beobachtet, die ebenfalls mit Hilfe atomarer Strukturen als $\{125\}$ -Facetten identifiziert wurden. Diese Facettenorientierungen würden sehr wohl mit den hier vorgestellten Beobachtungen übereinstimmen.

Sowohl $\{136\}$ - als auch $\{125\}$ -orientierte Facetten würden die hier gemachten experimentellen Beobachtungen erklären. Anhand der bislang präsentierten Daten kann allerdings keine Unterscheidung vorgenommen werden, welche Orientierungen die Facetten der InAs-Inseln tatsächlich aufzeigen. Interessanterweise scheinen Oberflächen aufzutreten, die bisher völlig unbekannt sind, und daher können keine weiterführenden Schlußfolgerungen hinsichtlich der Mechanismen, die zur Bildung der Inseln führen, gezogen werden.

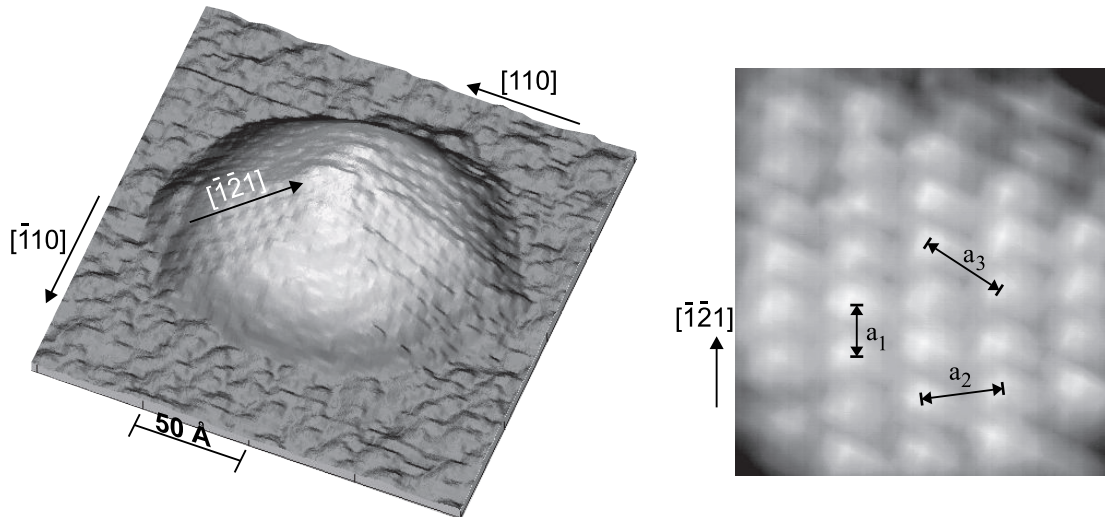


Abb. 7.10: *Links*: Dreidimensionale Darstellung einer InAs-Insel, auf deren Seitenfacetten atomare Strukturen zu erkennen sind. *Rechts*: Vergrößerte Darstellung einer Facette. $I = 0,15 \text{ nA}$, $U = -2,75 \text{ V}$.

7.7 Atomare Struktur der Facetten

7.7.1 STM auf den Facetten

Das STM ermöglicht, Oberflächen mit atomarer Auflösung abzubilden. Im Rahmen der Untersuchungen von InAs-Inseln ist es tatsächlich gelungen, atomare Strukturen auf den Facettenseiten abzubilden und daraus die Orientierungen, d.h. die Millerschen Indizes dieser Facetten, eindeutig zu bestimmen.

Bereits in Abb. 7.5 ist zu erkennen, daß die Inseln eine Struktur aufweisen, die auf die atomare Anordnung der Atome hinweist. Abb. 7.10 (*links*) zeigt eine dreidimensionale Abbildung einer Insel, auf der Reihen von Buckeln in den Facetten zu sehen sind. Eine der Facetten ist auf der rechten Seite des Bildes vergrößert dargestellt. Dazu wurde dem Ausschnitt eine lineare Steigung abgezogen, um einen gleichbleibenden Kontrast für das gesamte Bild zu erhalten.

Die Buckel sind im Abstand a_1 von $6,5 \pm 0,1 \text{ \AA}$ zu regelmäßigen Reihen angeordnet. Der Winkel zwischen der Verbindungslinie einer solchen Reihe und der Substratoberfläche beträgt $26^\circ \pm 2^\circ$. Die Abstände a_2 und a_3 betragen jeweils $9,0 \pm 0,3 \text{ \AA}$ und $10,5 \pm 0,2 \text{ \AA}$. Die Einheitszelle der Struktur ist offensichtlich schiefwinklig. Der von einer zu a_1 und einer zu a_2 parallelen Richtung eingeschlossene Winkel beträgt

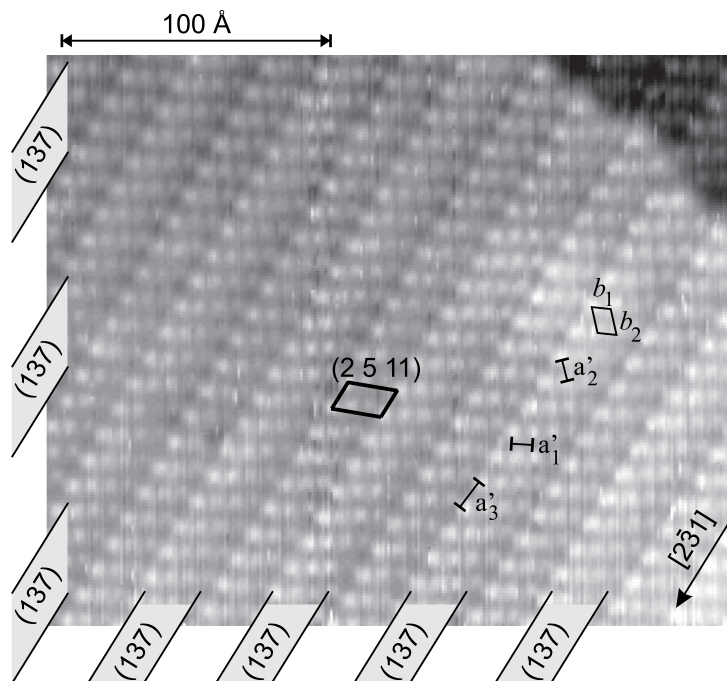


Abb. 7.11: STM-Bild innerhalb der sphärischen Mulde. Das Bild zeigt eine leicht verkippte GaAs(2 5 11)-Oberfläche. $I = 0,2 \text{ nA}$, $U = -3,0 \text{ V}$.

$82,4^\circ \pm 0,7^\circ$. Aufgrund der As-reichen Präparationsbedingungen und weil das Bild mit negativer Probenspannung aufgenommen wurde, d.h., gefüllte Zustände abgebildet wurden, ist es naheliegend, diese Buckel As-Dimeren zuzuordnen. Eine solche Anordnung von As-Dimeren ist allerdings auf keiner bisher untersuchten Oberfläche gefunden worden. Daher kann keine eindeutige Zuordnung einer Fläche vorgenommen werden.

7.7.2 Bestimmung der Facettenorientierung

Die exakte Bestimmung der Facettenorientierung der Inseln ist mit Hilfe von Experimenten, die von Lutz Geelhaar [35] an derselben Apparatur durchgeführt wurden, möglich geworden. Er hat Vizinalflächen von GaAs(113)A untersucht und konnte mit den dabei erhaltenen Resultaten die Struktur der Facetten aufklären.

Um Vizinalflächen von GaAs(113)A zu untersuchen, wurde eine sphärische Mulde in ein (113)-orientiertes Substrat gefräst [229]. Innerhalb dieser Mulde wurde eine stabile Oberfläche entdeckt, deren Orientierung durch Vergleich mit Referenzproben nominell orientierter Substrate daraufhin als GaAs(2 5 11) identifiziert werden konnte [35, 230]. Die (2 5 11)-Fläche ist $10,025^\circ$ gegen die (113)-Fläche (in $[18 \bar{1}5 \bar{1}]$ -Richtung)

	a_1 Å	a_2 Å	a_3 Å	Winkel $(a_1, a_2)/^\circ$
Insel (exp.)	$6,5 \pm 0,1$	$9,0 \pm 0,3$	$10,5 \pm 0,2$	$82,4 \pm 0,7$
(137) (geom.)	6,9	8,9	10,6	82,6

Tabelle 7.2: Vergleich der experimentell auf den Facetten der Inseln ermittelten Werte und der geometrischen Werte der (137)-Oberfläche

geneigt. Die GaAs(2 5 11)-Oberfläche besitzt eine stabile (1×1) -Rekonstruktion, deren schiefwinklige Einheitszelle drei As-Dimere enthält. Die Rekonstruktion erfüllt die Elektronenzählregel und wurde bereits mit Hilfe von *ab-initio*-Rechnungen als Niederenergiefläche bestätigt [35, 230]. Sie ist bisher die erste stabile GaAs-Oberfläche, die sich innerhalb des stereographischen Dreiecks befindet.

Ein STM-Bild dieser Oberfläche, das auf der Mulde aufgenommen wurde, ist in Abb. 7.11 dargestellt. Eine $(2 \ 5 \ 11)$ -Einheitszelle ist in der Mitte des Bildes eingezeichnet. Die Buckel, die im Bild zu sehen sind, sind die As-Dimere, aus denen die Rekonstruktion der $(2 \ 5 \ 11)$ -Fläche gebildet wird. Die drei As-Dimere der Einheitszelle sind leicht gegen die $(2 \ 5 \ 11)$ -Oberflächennormalen verkippt und geben der Oberfläche ein streifiges Erscheinen in den STM-Bildern. Diese Streifen verlaufen entlang $[2\bar{3}1]$ und sind durch einen kleinen Graben getrennt, worauf wieder ein Streifen mit einer Serie von drei As-Dimeren folgt. Die Oberflächennormale der Streifen ist (137)-orientiert, stellen jedoch keine Facettierung in (137)-Flächen dar. Sie sind Teil der rekonstruierten GaAs(2 5 11)-Oberfläche. Auf diesem Bild, das in der sphärischen Mulde aufgenommen wurde, sind Streifen mit drei As-Dimeren im Wechsel mit Streifen, die vier As-Dimere enthalten. Der Grund hierfür liegt darin, daß es sehr schwierig war, die Position der STM-Spitze innerhalb der Mulde genau zu ermitteln. Es ist daher davon auszugehen, daß eine Stelle abgebildet wurde, die leicht gegen die $(2 \ 5 \ 11)$ -Fläche verkippt gewesen ist.

Der Zusammenhang der GaAs(2 5 11)-Oberfläche mit den Facetten der InAs-Inseln liegt nun darin, daß die Abstände der As-Dimere in diesen (137)-Streifen mit den Abständen der Buckel auf den Facetten übereinstimmen. Die geometrischen Abstände a'_1 , a'_2 und a'_3 betragen jeweils $6,9 \text{ \AA}$, $8,9 \text{ \AA}$ und $10,6 \text{ \AA}$. Sie sind in Abb. 7.11 ein-

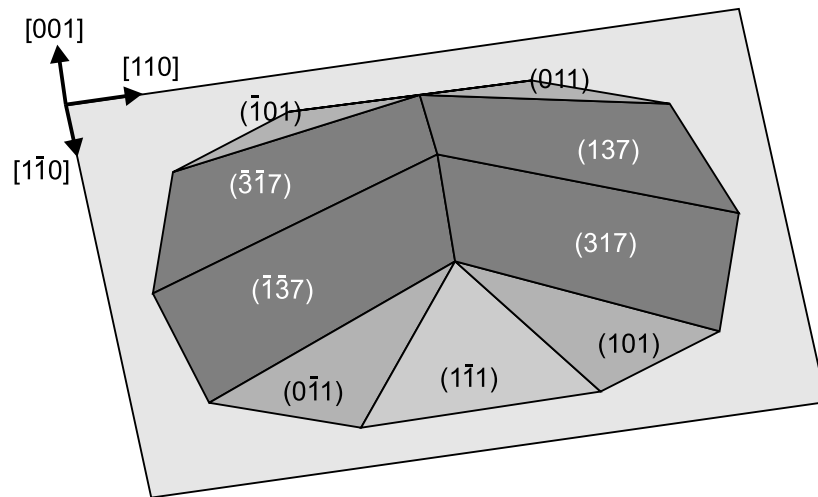


Abb. 7.12: Dreidimensionales Modell für eine InAs-Insel.

gezeichnet. Die Einheitszelle der (137) -Fläche wird gebildet durch die Vektoren b_1 und b_2 , deren Längen gerade a'_1 und a'_2 entsprechen (vgl. Abb. 7.11). Der von b_1 und b_2 eingeschlossene Winkel beträgt $82,6^\circ$. Diese Werte sind den im vorhergehenden Abschnitt auf den Inselfacetten gemessenen Werten in Tab. 7.2 gegenübergestellt.

Aufgrund der Übereinstimmung der Ergebnisse aus der Mulde wird den Facetten der InAs-Inseln die Orientierung $\{137\}$ zugeordnet. Eine detaillierte Diskussion und der Vergleich zwischen $\{137\}$, $\{136\}$ und $\{125\}$ werden in Ref.[35] geführt. Die wesentlichen Argumente für die Eindeutigkeit der hier geführten Bestimmung der Facettenorientierung sind erstens, daß die Einheitsvektoren der Einheitszelle nur diskrete Werte annehmen und daher die Bestimmung über die Abstände der Strukturen auf den Facetten möglich machen, und zweitens, daß Abstände nur zwischen Atomen gemessen werden, die sich in derselben Bindungskonfiguration befinden, d.h. zwischen gleichgebundenen As-Dimeren.

Als Ergebnis dieser Studien wird als Modell für eine InAs-Insel dasjenige in Abb. 7.12 vorgeschlagen. Es wird aus mindestens 10 Facetten gebildet, wobei die dominierenden vier Facetten die Orientierung $\{137\}$ haben. Die eingezeichneten $\{110\}$ - und $\{111\}$ -Facetten konnten aufgrund der fehlenden atomaren Struktur nicht identifiziert werden. Sie wurden lediglich aus den Abmessungen der InAs-Inseln und den Winkeln der Isocontour-Abbildungen bestimmt.

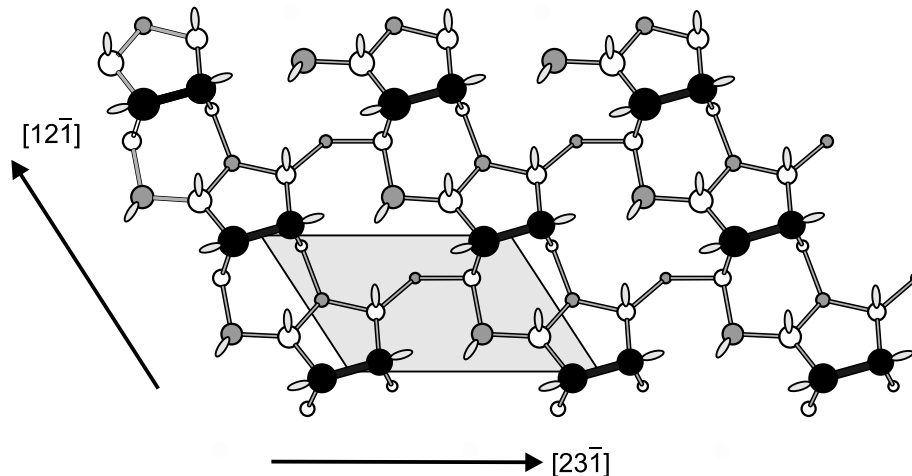


Abb. 7.13: Modell für die rekonstruierte InAs(137)-Oberfläche. Die As-Dimere sind durch schwarze Kreise und eine dicke Bindung hervorgehoben. Die übrigen As-Atome sind durch graue, In-Atome durch weiße Kreise dargestellt.

7.8 Diskussion

Die Tatsache, daß die Seitenfacetten eher ungewöhnliche Millersche Indizes aufweisen, mag verblüffen. Allerdings wurde bereits in früheren Arbeiten auf die Möglichkeit eingegangen, daß auf hochindizierten Facetten die Verspannung besser abgebaut werden kann als auf niedrigindizierten Facetten [166]. Darüber hinaus wurde gezeigt, daß hochindizierte GaAs-Oberflächen durchaus Oberflächenenergien besitzen können, die im Bereich der niedrigindizierten Oberflächen liegen [31].

Die tatsächliche Überraschung liegt allerdings darin, daß eine Oberfläche als Facette gefunden wurde, die vermutlich nicht stabil ist. Die Experimente in der Mulde [229] und auf den planaren Substraten [35, 230] haben zweifelsfrei belegt, daß die stabile Oberfläche die GaAs(2 5 11) ist. Die (137)-Oberfläche mit der Rekonstruktion, wie sie innerhalb der Streifen auf der GaAs(2 5 11) und auch auf den Facetten der InAs-Inseln auftritt, ist in Abb. 7.13 dargestellt. Die Anwendung der Elektronenzählregel ergibt, daß $7\frac{3}{4}$ Elektronen (1 As-Atom, 1 As-Dimer und 2 In-Atome) auf die 4 Orbitale (3 hängenden Bindungen von As und die As-As-Bindung des As-Dimers) verteilt werden müssen. Das heißt, es fehlt $\frac{1}{4}$ Ladung pro Einheitszelle und sollte aufgrund dessen nicht stabil sein.

Die Bindungsgeometrie auf der (137)-Oberfläche scheint jedoch eine Besonderheit

aufzuweisen. Im Vergleich mit der stabilen GaAs(2 5 11) unterscheiden sich diese Oberflächen von der Anzahl der in einer Reihe entlang $\langle 121 \rangle$ verlaufenden As-Dimeren. Die GaAs(2 5 11)-Oberfläche besitzt 3 As-Dimere entlang einer Reihe, worauf ein Graben mit einer Versetzung der As-Dimer-Reihe folgt, in dem sich ein zusätzliches dreifach gebundenes Ga-Atom befindet, das die fehlende Ladung ausgleicht. Wie bereits erwähnt, ist eine Folge dieser Grabenstruktur und der Versetzung in den Dimer-Reihen, daß die STM-Bilder der GaAs(2 5 11) ein streifiges Aussehen erlangen. Die Streifen selbst verlaufen entlang $\langle 231 \rangle$, und ihre Oberflächennormale ist parallel zu $\langle 137 \rangle$. Die $\langle 137 \rangle$ hat keine Streifen, d.h., sie besteht aus einer entlang $\langle 121 \rangle$ unendlichen Reihe von As-Dimeren. Auf dem STM-Bild (vgl. Abb. 7.11) der Mulde sind viele solcher Streifen zu sehen, die außer drei auch vier As-Dimere in einer Reihe entlang $\langle 121 \rangle$ zeigen. Eine Oberfläche mit Streifen, die vier Dimere enthalten, hat die Orientierung (5 13 29) und scheint zumindest in kleinen Bereichen stabil zu sein. Das gibt Anlaß zur Spekulation, ob die $\langle 137 \rangle$ -Oberfläche, die quasi aus einem ‘unendlich ausgedehnten Streifen’ bestehen würde, zumindest semistabil sein sollte.

Darüber hinaus sind in den Experimenten auf der GaAs(2 5 11) Streifen entdeckt worden, die lediglich zwei As-Dimere enthielten. Das Außergewöhnliche dieser Streifen lag nun darin, daß sie sich über mehrere 100 Å erstreckten, ähnlich wie die 4 As-Dimer-Streifen in Abb. 7.11. Die Oberfläche, die hypothetisch aus Streifen besteht, die zwei As-Dimere enthalten, hätte die Orientierung (3 7 15). Die Besonderheit dieser Oberfläche ist wiederum, daß sie in kleineren Facetten auf der rekonstruierten GaAs(113)A, als Folge der Stapelung von As Zickzack-Ketten, auftritt (vgl. Ref. [35] und Kap. 5). Die GaAs(3 7 15) erfüllt jedoch auch nicht die Elektronenzählregel.

Das Auftreten dieser $\{3\ 7\ 15\}$ -Bereiche auf der GaAs(2 5 11)-Oberfläche hat theoretische Rechnungen, die P. Kratzer durchgeführt hat, motiviert, deren verblüffendes Ergebnis darin lag, daß sich die Oberflächenenergie von GaAs(2 5 11) und GaAs(3 7 15) um lediglich $2\text{ meV}/\text{Å}^2$ unterscheiden. Daher ist die GaAs(3 7 15) als semistabil zu betrachten.

Aus diesen Ergebnissen könnte man zunächst folgern, daß diese offenbar spezielle Bindungsgeometrie relativ unempfindlich gegenüber Störungen der As-Dimer-Anordnung ist. Das heißt, daß, falls innerhalb einer Dimer-Reihe eine Versetzung entlang $\langle 231 \rangle$ auftritt, sich die Oberflächenenergie nicht sehr viel ändern würde. Tatsächlich sind auf manchen Facetten der Inseln solche Störungen in den Reihen zu beobachten. Eine solche Störung ist in Abb. 7.14 mit Pfeilen markiert. Es wäre daher

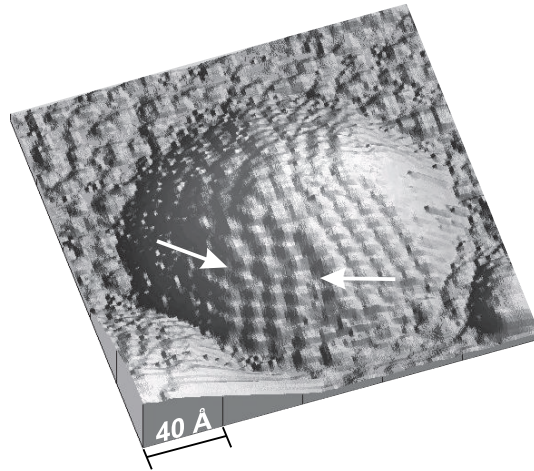


Abb. 7.14: STM-Bild einer Insel auf deren $\{137\}$ -Facette eine Störung der As-Dimer-Reihen zu beobachten ist. $I = 0,2 \text{ nA}$, $U = -2,3 \text{ V}$.

denkbar, daß die Möglichkeit, solche Störungen aufnehmen zu können, ohne eine allzu große Änderung in der Oberflächenenergie für den Abbau von Verspannungsenergie relevant sein könnte. Eine genauere theoretische Begründung für diesen Hinweis wäre sicherlich sehr aufschlußreich.

Des weiteren könnte die angenommene Semistabilität der $\{137\}$ und hierzu ähnlicher Oberflächen ein möglicher Grund für die beobachtete scharfe Größenverteilung der Inseln sein. Falls die $\{137\}$ -Facetten zu groß werden, wäre es vorstellbar, daß die Oberflächenenergie zu stark anwächst. Dadurch wäre die Balance aus dem Energiegewinn durch die Relaxation im Inselvolumen und die aufzubringende Oberflächenenergie gestört. Die Folge wäre, daß es tatsächlich eine optimale Inselgröße geben müßte, wie es im Experiment offenbar der Fall ist. Diese Größe zu quantifizieren ist jedoch nicht möglich, da die Oberflächenenergie der InAs(137)-Oberfläche bislang nicht bekannt ist.

Die Frage, die es noch zu klären gilt, ist, warum eigentlich keine stabile Oberfläche als Seitenfacette auftritt, wie es nach dem Gleichgewichtsthermodynamischen Ansatz zu erwarten wäre [18, 212]. Offenbar spielt die Wachstumskinetik eine entscheidende Rolle in der Bildung der Inseln. Werden Inseln unterschiedlicher Größe miteinander verglichen, so fällt auf, daß auf den kleineren Inseln die $\{137\}$ deutlich dominieren. In Abb. 7.15 ist eine kleine Insel dargestellt. In der nebenstehenden Isocontour-Abbildung erkennt man, daß die Insel tatsächlich entlang $[1\bar{1}0]$ länger ist als entlang $[110]$. Die größeren Inseln, die in Abb. 7.7 gezeigt sind, sind wesentlich runder, d.h., der Anteil an

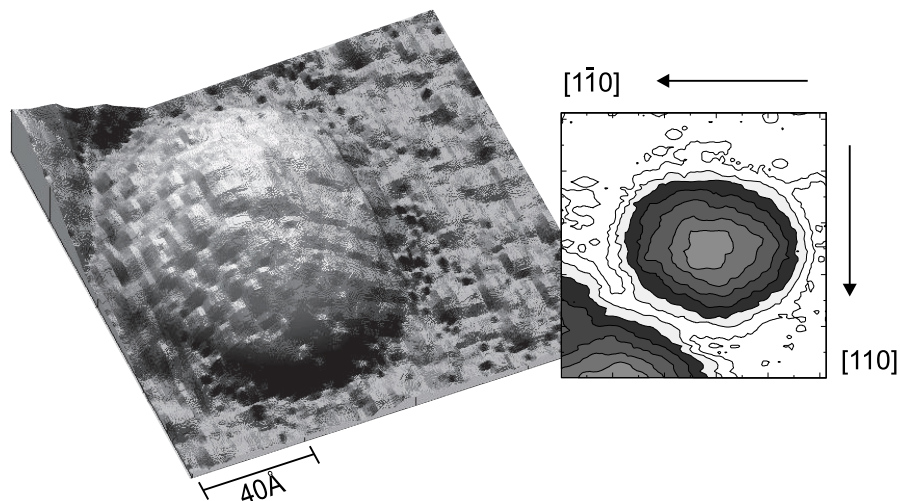


Abb. 7.15: STM-Bild einer kleineren InAs-Insel. Länge $_{[110]}$ = 92 Å, Länge $_{[1\bar{1}0]}$ = 118 Å, Höhe = 17 Å. $I = 0,2 \text{ nA}$, $U = -2,3 \text{ V}$.

{110}-Flächen ist für diese Inseln größer. Bell *et al.* [231] haben in ihren Wachstumsuntersuchungen am InAs/GaAs-System herausgefunden, daß das InAs-Wachstum gemäß der Rekonstruktion auf GaAs aufwächst. Ähnlich wie es im Falle der Homoepitaxie der Fall ist, ist demnach die schnelle Wachstumsrichtung die $[1\bar{1}0]$ -Richtung [63, 232]. Damit läßt sich erklären, daß zumindest am Anfang des Wachstums die Inseln entlang $[1\bar{1}0]$ bevorzugt wachsen.

Wenn die Inseln aber größer und größer werden, nimmt die Verspannung zu. Darauf könnte das Material reagieren, indem es sich entlang $[010]$ und $[100]$ ausbreitet, d.h., es sollte sich eine {110}-Facette ausbilden, da die $[010]$ - und $[100]$ -Richtungen gerade die ‘weichen’ Richtungen der (001)-Oberfläche sind [211]. Die (137)-Oberfläche schneidet die (001)-Oberfläche gerade entlang $[3\bar{1}0]$, was 22° gegenüber $[1\bar{1}0]$ verkippt ist. Somit wäre $[3\bar{1}0]$ gerade ein Kompromiß, nämlich ziemlich genau die Hälfte, zwischen der schnellen Wachstumsrichtung $[1\bar{1}0]$ und der weichen $[100]$ -Richtung. Daraufhin kommt sicherlich die angenommene Semistabilität der (137) zum Tragen, da die aufzubringende Oberflächenenergie nach Möglichkeit gering sein sollte.

Diese Erklärungen basieren lediglich auf Beobachtungen, die sich aus der Form der Inseln ergeben haben. Die tatsächliche Diskussion über die Bildung der Inseln ist damit noch längst nicht abgeschlossen. Sehr interessant wäre es, weitere Versuche bei unterschiedlichen Wachstumsparametern zu unternehmen. Insbesondere wäre eine systematische Untersuchung der Form der Inseln in Abhängigkeit der Wachstumsraten

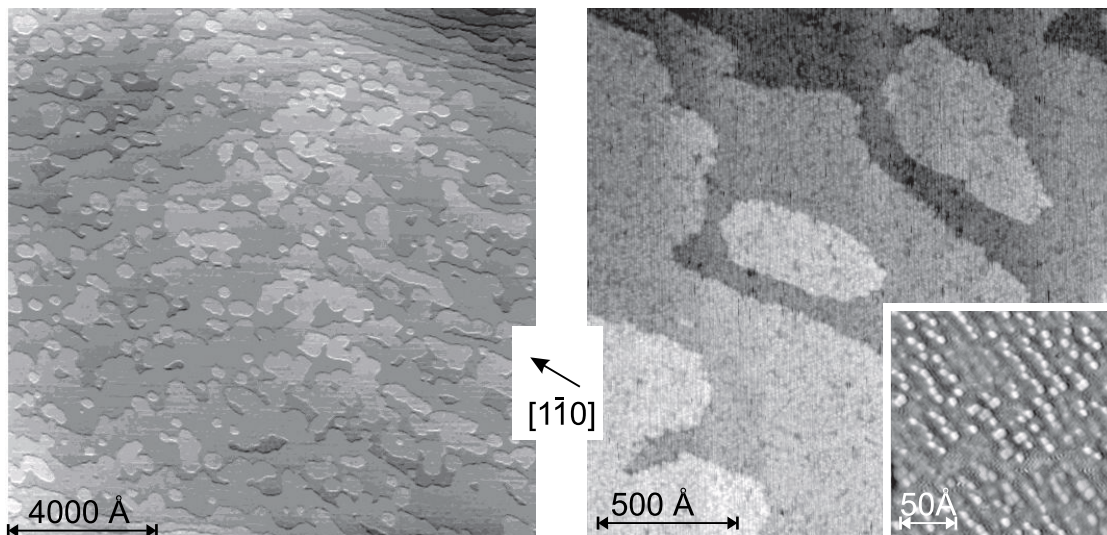


Abb. 7.16: Übersichts-STM-Bilder einer mit einem 1 ML dicken InAs-Film überwachsenen GaAs(001)c(4 × 4)-Oberfläche. *Links:* $1,5 \times 1,5 \mu^2$, $U = -3,0 \text{ V}$, $I = 0,15 \text{ nA}$. *Rechts:* $2000 \times 2000 \text{ \AA}^2$, $U = -2,6 \text{ V}$, $I = 0,16 \text{ nA}$. Der Einschub zeigt einen Ausschnitt, auf dem die atomare Anordnung zu erkennen ist. $U = -2,9 \text{ V}$, $I = 0,14 \text{ nA}$.

und Temperatur wünschenswert, um den Zusammenhang zwischen den kinetischen Effekten und den thermodynamischen Phänomenen besser zu verstehen.

7.9 Die Benetzungsschicht

7.9.1 Einführung

Vor dem Übergang zum dreidimensionalen Inselwachstum von InAs auf GaAs(001) wächst ein InAs-Film pseudomorph verspannt auf dem Substrat. Eine Studie über die Benetzungsschicht kann zum einen helfen, den Verspannungsabbau innerhalb des Filmes zu untersuchen. Zum anderen kann der pseudomorph wachsende zweidimensionale Film mit der Benetzungsschicht, die beim Inselwachstum vorhanden ist, verglichen werden. Dieser Vergleich könnte im Hinblick auf den Teilchenaustausch zwischen den Inseln beim Reifungsprozeß, der über die Benetzungsschicht ablaufen sollte, interessant sein.

Wir haben daher eine $1(\pm 0,2)$ -ML (Monolage) dicke Schicht InAs auf GaAs(001) unter identischen Wachstumsbedingungen gewachsen, wie sie für die dreidimensionale

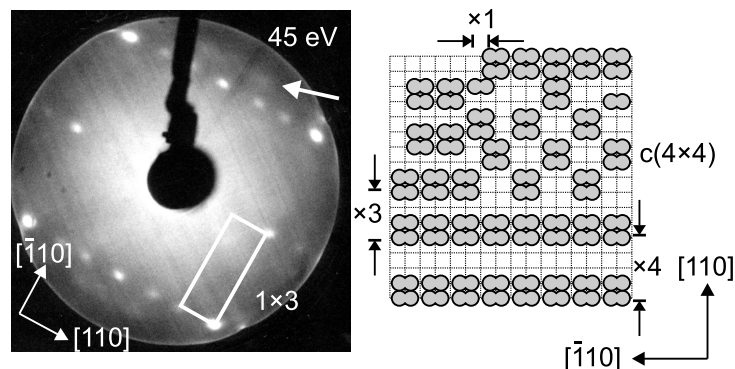


Abb. 7.17: Links: LEED-Reflexmuster einer 1 ML dicken InAs-Schicht auf GaAs(001). Die Periodizität ist (1×3) , wobei sich zusätzlich eine schwach ausgebildete $c(4 \times 4)$ -Periodizität (s. Pfeil) andeutet. $E = 45 \text{ eV}$. Rechts: Schematisches Modell zur Entstehung der dreifachen Periodizität im LEED-Muster. Dargestellt sind die Positionen der As-Dimere.

Inseln gegeben waren. Das RHEED-Reflexmuster zeigte, wie im Falle des Inselwachstums, einen Übergang der zweifachen in eine schwach ausgebildete dreifache Periodizität, wenn der Elektronenstrahl parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung gestellt wurde.

7.9.2 STM und LEED

In Abb.7.16 werden zwei Übersichts-STM-Bilder der InAs Schicht gezeigt. Auf diesem Ausschnitt sind sehr viele kleinere zweidimensionale Inseln zu sehen, deren Ausmaße in etwa $500 - 1000 \text{ \AA}$ entlang $[1\bar{1}0]$ und etwa $200 - 500 \text{ \AA}$ betragen. Bei größeren zweidimensionalen Inseln ist die Anisotropie, d.h. die Verlängerung der Inseln entlang $[1\bar{1}0]$, sehr viel ausgeprägter. Diese Beobachtung ist im Einklang mit STM-Untersuchungen von Bressler-Hill *et al.* [235, 236], in denen die Nukleation von Submonolagen InAs auf GaAs(001) bei 450°C studiert wurde. Auch Heitz *et al.* [237] untersuchten detailliert das Wachstum von InAs auf GaAs(001) vor dem Übergang zum Inselwachstum. Diese Autoren fanden ebenfalls große zweidimensionale Inseln, deren Ausdehnung entlang $[1\bar{1}0]$ größer war als in der dazu senkrechten Richtung.

Unklarheit herrscht über die atomare Anordnung dieser Struktur. Das Problem liegt meist darin, daß es schwierig ist, atomar aufgelöste Bilder der Benetzungsschicht zu erhalten. Daher bleiben die meisten Aussagen über die atomare Anordnung eher spekulativ. Die Periodizität der InAs-Struktur läßt sich hingegen mit LEED recht gut bestimmen. Das LEED-Reflexmuster der InAs-Schicht zeigt eine (1×3) -Rekonstruktion

an, wie sie in Abb. 7.17 (*links*) zu sehen ist und sich bereits im RHEED-Beugungsmuster angedeutet hat. Darüber hinaus sind, allerdings nur sehr schwach, Reflexe zu erkennen, die auf eine $c(4 \times 4)$ Rekonstruktion hindeuten (siehe Pfeil). Die Reflexe sind relativ breit und ausgeschmiert, was auf ein hohes Maß an Unordnung auf dieser Oberfläche schließen läßt.

Die atomare Struktur der InAs-Schicht scheint der $\text{GaAs}(001)\gamma(2 \times 4) [110]$ ähnlich zu sein. In Abb. 7.16 ist ein kleiner Ausschnitt mit größerer Auflösung gezeigt. Dort sind Reihen von As-Dimeren entlang $[1\bar{1}0]$ zu sehen, die eine große Anzahl von Versetzungen $[110]$ aufweisen und damit nur lokal eine (2×4) -Ordnung haben. Die resultierende dreifache Periodizität des Beugungsbildes läßt sich anhand der schematischen Skizze der Abb. 7.17 (*rechts*) erklären. Die länglichen Strukturen sollen dabei die Positionen von As-Dimeren darstellen. Um das Auge besser zu führen, ist unter den Dimeren ein Rechteck-Muster eingezeichnet, das die Gitterabstände anzeigen soll. Die unterste Reihe zeigt eine Doppelreihe von As-Dimeren, die eine Periode von vier Gitterabständen haben soll. Die nächstfolgende Reihe ist um einen Gitterabstand nach unten (in $(\bar{1}\bar{1}0)$ -Richtung) versetzt, so daß sich ein dreifacher Abstand ergibt. Sind in einer solchen Reihe wieder einige Dimere entlang der $(1\bar{1}0)$ -Richtung versetzt, können sich auch $c(4 \times 4)$ -Bereiche ausbilden. Diese werden anders als auf der $\text{GaAs}(001)c(4 \times 4)$ von lediglich zwei nebeneinander stehenden As-Dimeren gebildet und können daher in der gleichen Ebene entstehen wie die Dimer-Reihen. Senkrecht dazu läßt sich die einfache Periodizität durch eine Versetzung von benachbarten Dimer-Reihen entlang $(\bar{1}10)$ erklären (vgl. Abb. 7.17 (*rechts* oben)). Die gesamte Unordnung in der atomaren Struktur könnte dann das beobachtete Elektronenbeugungsbild plausibel machen.

7.9.3 Diskussion

Über die atomare Anordnung dieser Struktur gibt es in der Literatur sehr unterschiedliche Interpretationen der experimentellen Befunde. Bressler-Hill *et al.* [235] berichten von einer In-stabilisierten und lokalen (4×4) - und $c(4 \times 4)$ -Anordnung der InAs-Schicht. Eine (2×4) -Struktur wird von Grandjean *et al.* [238] beobachtet. Beide Befunde sind mit der hier beobachteten Struktur im Einklang, wobei nirgendwo auf der Oberfläche eine langreichweitige Ordnung beobachtet wurde. Zudem zeigten die Elektronenbeugungsexperimente keine vierfache Periodizität auf, so daß die Ordnung tatsächlich lokal nur sehr eingeschränkt vorhanden sein muß.

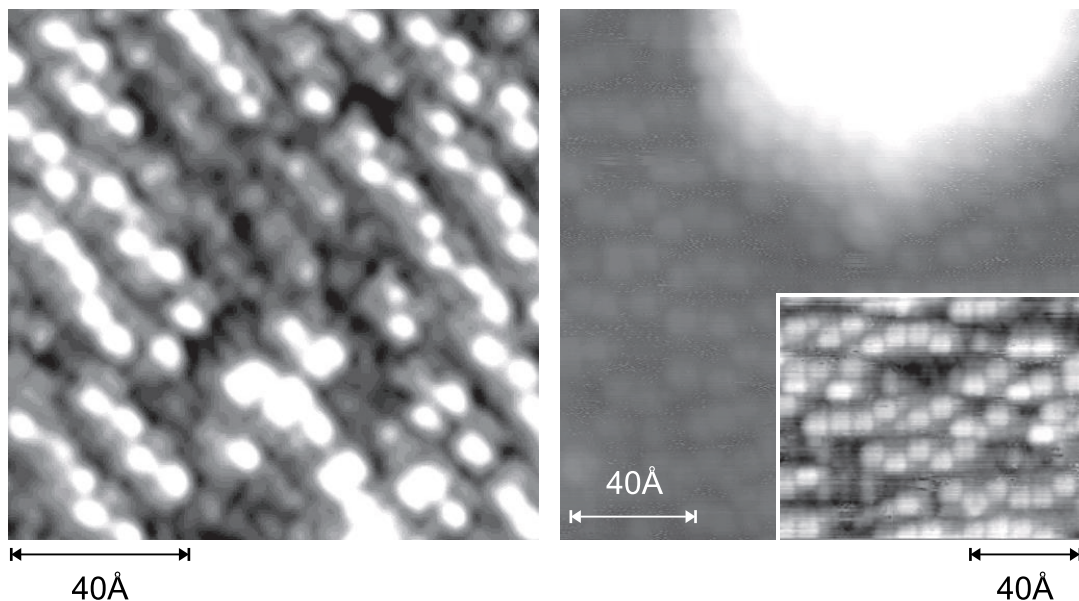


Abb. 7.18: Hochauflösende STM-Bilder der InAs-Schichten. *Links*: Eine 1 ML dicke InAs-Schicht. $120 \times 120 \text{ \AA}^2$, $U = -2,9 \text{ V}$, $I = 0,14 \text{ nA}$. *Rechts*: Die Benetzungsschicht zwischen den dreidimensionalen Inseln. Der weiße Bereich oben rechts im Bild zeigt eine Insel an, die aufgrund der Höhe lediglich weiß erscheint. Die Benetzungsschicht ist mit einer eigenen Graustufung hervorgehoben im Einschub dargestellt. $180 \times 180 \text{ \AA}^2$, $U = -2,5 \text{ V}$, $I = 0,175 \text{ nA}$.

Belk *et al.* [233, 234] sind hingegen der Auffassung, die Benetzungsschicht zwischen den dreidimensionalen Inseln und auch auf einer 1 ML dicken InAs-Schicht sei eine $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Legierung. Die Zusammensetzung dieser Legierung sei zwar von der Wachstumstemperatur abhängig, sie bilde sich jedoch auch bei niedrigen (420°C) aus. Ein atomistisches Modell für die Struktur wurde von den Autoren allerdings nicht angegeben. Gestützt wird eine Legierungsbildung auch von Röntgen-Beugungsexperimenten anderer Gruppen [239].

Für eine Legierungsbildung müßte die As-Doppellage der $c(4 \times 4)$ -Struktur aufgebrochen werden, damit auch die Ga-Atome an die Oberfläche treten könnten. Das bedeutet, daß trotz der relativ niedrigen Wachstumstemperaturen ein erheblicher Anteil an Umstrukturierung der Atome vonstatten gehen müßte. Die Ga-Atome sind in der $c(4 \times 4)$ -Struktur bereits in einer Bindungskonfiguration, wie sie die im Volumen gebundenen Atome besitzen. Daß so etwas passieren könnte, ist zwar schwer vorstellbar, aber die Experimente von Heitz *et al.* [237] und von Ramachandran *et al.* [204]

zeigen eindeutig, daß das Material auf dieser Benetzungsschicht sehr mobil ist. In diesen Experimenten wurde gezeigt, daß ganze Inseln, deren laterale Ausmaße etwa 500 \AA und deren Höhe bis zu 4 ML ($11,2 \text{ \AA}$) betragen, in Abhängigkeit von der nominellen InAs-Bedeckung sich bilden und wieder auflösen können.

Bottomley [240] gab hierzu eine interessante theoretische Erklärung, die allerdings nicht von allen theoretischen Arbeitsgruppen akzeptiert wird [241]. Hiernach schmilzt das InAs bereits bei 770 K aufgrund der Verspannung, wenn es auf GaAs abgeschieden wird. Es entsteht eine flüssige Phase eines $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Gemisches, die hoch mobil ist und daher den Transport von Teilchen erleichtert. Dadurch wird die relativ schnelle Bildung der dreidimensionalen Inseln erklärt.

In einer theoretischen Arbeit von Wang *et al.* [242] wurde jedoch berichtet, daß die Benetzungsschicht niedrigster Energie eine $\beta 2(2 \times 4)$ -Struktur mit abrupter In/Ga-Grenzfläche besitzt. Das heißt, daß es nur zu einer unvollständigen InAs-Schicht kommt, wenn die Inseln mehr Material aufsammeln, als nach der nominellen Bedeckung vorhanden ist. Darüber hinaus zeigten sie, daß die In-Atome in einer Mischstruktur bevorzugt in der obersten Kationen-Lage eingebaut werden.

Vergleicht man nun die STM-Bilder der 1 ML dicken InAs-Schicht mit der InAs-Benetzungsschicht zwischen den Inseln, fällt eine Struktur besonders ins Auge. In Abb. 7.18 sind zwei hochauflösende STM-Bilder gegenübergestellt. Das Bild der InAs-Schicht zeigt teilweise zickzack-angeordnete längliche Strukturen. Diese Strukturen haben die Ausmaße eines Dimers, sind allerdings nur $1,4 \text{ \AA}$ höher als die darunter liegenden Strukturen. Das STM-Bild der Benetzungsschicht zeigt hingegen überwiegend die mehr oder weniger geordnete (2×4) -Struktur, in der jeweils zwei eng benachbarte längliche Strukturen auf gleicher Höhe sitzen.

Diese Bilder geben in Zusammenhang mit den oben erwähnten Arbeiten Anlaß zur folgenden Interpretation: Die hellen Strukturen in der 1 ML dicken InAs-Schicht könnten In-Dimere sein. Dafür spräche einerseits die Höhe von lediglich $1,4 \text{ \AA}$. Dies entspricht dem Höhenunterschied einer atomaren Lage. Andererseits könnte aufgrund des bevorzugten Einbaus von In in die obersten Kationen-Lagen sowie aus der Legierungsbildung geschlossen werden, daß In in den ersten Lagen nicht festeingebaut wird. Statt dessen könnte das In dimerisiert lose an der Oberfläche, ähnlich wie sogenannte *surfactants*, auf einer Schicht ‘schwimmen’. Diese lose gebundene In-Schicht könnte die hohe Mobilität des InAs und dadurch auch die plötzliche Entstehung der dreidimensionalen InAs-Inseln erklären. Sobald die InAs-Inseln gebildet werden, wür-

de das lose gebundene In die Inseln erreichen und epitaktisch als InAs wachsen. Auf ähnliche Ergebnisse schlossen Brandt *et al.* [243] bei Untersuchungen von InAs/GaAs-Heterostrukturen. Diese Interpretation kann allerdings nicht weiter begründet werden, da die entsprechenden theoretischen Arbeiten hierzu nicht vorhanden sind.

7.10 Zusammenfassung und Ausblick

Die Form von selbstorganisiert wachsenden InAs-Inseln auf GaAs(001)-Oberflächen wurde mit Hilfe des UHV-STM untersucht. Es konnte bei dieser Studie gezeigt werden, daß MBE-gewachsene InAs-Inseln Facettenseiten besitzen, deren Orientierungen hohe Millersche Indizes aufweisen. Dabei sind ausgezeichnete Facetten aufgefallen, die {137}- und ähnliche Orientierungen haben. Die genaue Identifizierung der Millerschen Indizes konnte mit Hilfe von Referenzmessungen an GaAs-Substraten durchgeführt werden.

Ferner wurde im Zusammenhang mit den Referenzmessungen an den GaAs-Oberflächen gezeigt, daß die ausgezeichneten Facetten keine stabile Rekonstruktion besitzen, sondern lediglich semistabil sind. Diese Semistabilität wurde als mögliche Ursache angesehen, daß bei der Bildung von dreidimensionalen InAs-Inseln auf GaAs(001) stets eine scharfe Größenverteilung vorliegt. Das Auftreten von semistabilen {137}-Facetten hat darüber hinaus zur Konsequenz, daß die Beschreibung der Inselbildung im Sinne eines kohärenten Stranski-Krastanow-Wachstumsmodells unvollständig ist.

Eine vergleichende Studie zwischen einer 1 ML dicken InAs-Schicht und der InAs-Benetzungsschicht, die zwischen den InAs-Inseln besteht, gab Anlaß zur Annahme, daß InAs auf GaAs nicht vollständig kristallin eingebaut wird. Statt dessen wurde auf eine In-Dimer-Struktur geschlossen, die auf einer lokal (2×4) -geordneten InAs (oder $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) relativ schwach gebunden sein sollte. Diese In-Schicht könnte als Ursache gesehen werden, warum die Inseln spontan gebildet werden und warum der Teilchenaustausch über die Benetzungsschicht so effizient vonstatten geht.

Diese Experimente haben gezeigt, daß kinetische Effekte offenbar eine größere Rolle beim Wachstum der Inseln spielen, als bisher angenommen wurde. Da sie alle bei nur einer Wachstumstemperatur ausgeführt wurden, wäre es wünschenswert, die Experimente mit derselben Präzision bei veränderten Wachstumsbedingungen durchzuführen. Es ist zu vermuten, daß sich die Form der Inseln unter verschiedenen Präparationsbedingungen durchaus ändern könnte. Die interessanteste Frage bleibt in diesem

Zusammenhang, wie stark sich die Form ändert. Die hier gezeigten Experimente ließen den Schluß zu, daß einer der Gründe für das Auftreten von {137}-Facetten die sonderbaren Bindungsanordnungen von As-Dimeren sein sollten. Es könnte demnach sein, daß sich die Form der Inseln zwar ändert, die Facettenorientierungen jedoch immer noch zu der Familie der {137}-Oberflächen gehören.

8 Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit war die Untersuchung der atomaren Struktur von Halbleiteroberflächen. Um die Oberflächen *in situ* studieren zu können, wurde ein Rastertunnelmikroskop (STM) in ein Ultrahochvakuum-System integriert. Die Oberflächen selbst wurden mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie (MBE) präpariert.

Die erfolgreiche Inbetriebnahme des gesamten Systems konnte anhand der GaAs(001)-Oberfläche überprüft werden. Die GaAs(001)-Oberfläche zeigt sowohl sehr As-reiche wie auch Ga-reiche Rekonstruktionen auf, die in der Literatur sehr gut dokumentiert sind. Durch Reproduktion der bekannten Ergebnisse konnten daher die einzelnen Schritte der Experimente, d.h.,

- das epitaktische Wachsen eines Filmes und dadurch die Präparation der Oberfläche,
- der Abkühlungsprozeß einer Oberfläche, ohne die Struktur dabei zu verlieren, und
- das Abbilden der Oberfläche mit dem STM

sehr genau untersucht und überprüft werden.

Hintergrund der vorliegenden Arbeit war die Fragestellung nach der Form von InAs-Inseln, die auf der GaAs(001)-Oberfläche selbst organisiert wachsen. Die Inseln haben laterale Abmessungen von einigen 10 nm und sind etwa 2 – 5 nm hoch. Werden sie in einem GaAs-Kristall eingebettet, d.h. mit GaAs überwachsen, zeigen diese Strukturen quantisierte elektronische Zustände auf und werden daher als *Quantum Dots* bezeichnet. Neben den faszinierenden physikalischen Eigenschaften, die an solchen Strukturen studiert werden können, besteht an den *Quantum Dots* ein großes technologisches Interesse, weil die Inseln einerseits beim Wachstum der Kristalle ohne

fremde Einwirkung erzeugt werden können, d.h., daß sie selbst organisiert wachsen, andererseits werden in einem Wachstumsvorgang Inseldichten von etwa $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ erreicht. Das macht sie besonders interessant für Anwendungen in der Optoelektronik.

Der selbst ablaufende Mechanismus, der zur Bildung der Inseln führt, konnte bislang nicht vollständig nachvollzogen werden. Einer der Gründe dafür ist, daß die Form der Inseln, d.h. die umhüllenden Facetten der Strukturen, noch nicht zweifelsfrei identifiziert werden konnten. Mehrere Arbeiten zu diesem Thema gaben deutliche Hinweise, daß die Orientierungen der Facetten keine niedrigindizierten Oberflächen sind, sondern Orientierungen $\{11n\}$ ($n= 3, 4, 5$), $\{125\}$, $\{10n\}$ ($n= 2, 4$) und $\{136\}$ haben könnten.

Die zugrundeliegende Idee dieser Arbeit war, Oberflächen verschiedener Orientierungen unter diversen Präparationsbedingungen zu untersuchen, um deren Strukturen mit den atomaren Strukturen der Facetten der InAs-Inseln vergleichen zu können. Als Substrate wurden GaAs-Kristalle verwendet, da sie kommerziell mit vertretbaren Kosten zu beziehen sind. Die Oberflächen von GaAs und InAs zeigen große Ähnlichkeiten auf, so daß die an GaAs gewonnen Ergebnisse auf InAs übertragen werden können. Aufgrund der großen Anzahl der bisher vorgeschlagenen Oberflächen als Facetten der Inseln wurde die Arbeit aufgeteilt. Dabei wurden in der vorliegenden Arbeit die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B- und GaAs(114)A-Oberflächen untersucht. Lutz Geelhaar hat im Rahmen seiner Dissertation die GaAs(113)A und Vizinalflächen von GaAs(113)A mit den gleichen Methoden untersucht [35]. Schließlich wurden in der vorliegenden Arbeit auch die Facetten der InAs-Inseln selbst untersucht.

Die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche zeigte zwei stabile Phasen, die durch unterschiedliche Prozeduren nach dem Wachsen erhalten wurden.

Die erste Struktur wurde durch eine Ga-reiche Präparation gefunden. Diese besitzt eine (8×1) -Rekonstruktion und wurde als die zur GaAs(113)A(8×1)-Rekonstruktion analoge Struktur identifiziert. Das heißt, beide Strukturen werden durch die gleichen Komponenten, aber mit jeweils vertauschten Elementen gebildet. Während die charakteristischen Komponenten der GaAs(113)A(8×1) in Zickzackreihen angeordnete As-Dimere sind, dimerisieren auf der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1) Ga-Atome und ordnen sich zu Zickzackreihen an. Die Morphologie der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1)-Oberfläche zeigte ausge dehnte Terrassen, und im Gegensatz zur GaAs(113)A ist keine Welligkeit beobachtet worden. Ferner zeigte die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B(8×1) eine extrem anisotrope Stufenstruktur, die mit Hilfe von azimuthabhängigen RHEED-Intensitätsoszillationen auf 2D-Nukleation und Wachstum entlang $[\bar{3}\bar{3}2]$ zurückgeführt werden konnte.

Eine zweite Struktur der GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche konnte durch As-reiche Präparationen gefunden werden. Diese As-reiche Phase ist auf atomarer Skala im hohem Maße ungeordnet, zeigt allerdings auf einer mesoskopischen Skala ausgedehnte Terrassen und monoatomare Stufen. Die Oberfläche wird hauptsächlich durch zwei Komponenten stabilisiert, die eine Mischstruktur bilden. Einerseits bilden sich Reihen von As-Dimeren, die entlang $[1\bar{1}0]$ angeordnet sind, andererseits wurden Bereiche auf der Oberfläche gefunden, auf denen dreifach koordinierte As-Atome adsorbiert wurden. Basierend auf STM-Beobachtungen wurden Rekonstruktionsmodelle erstellt, von denen allerdings keines die Elektronenzählregel (ECR) erfüllte. Es wurde daraus geschlossen, daß die aus diesem Grunde verletzte Ladungsneutralität durch einen lokalen Einbau von Defekten bzw. durch atomare Unordnung erreicht wird. Ferner wurde die Hypothese aufgestellt, daß eine Oberfläche durch Absättigung der gebrochenen Bindungen eine stabile Phase erreichen kann, ohne daß der halbleitende Zustand eingenommen wird. Die Oberfläche kann offensichtlich die überschüssigen Ladungen durch Defekte kompensieren und wird somit gegenüber einer Facettierung stabilisiert.

Auch die GaAs(114)A-Oberfläche zeigte zwei Rekonstruktionen auf, die sich im As-Gehalt unterscheiden. Dadurch konnte gezeigt werden, daß die GaAs(114)A-Oberfläche nicht als Vizinalfläche von GaAs(001) anzusehen ist, sondern daß sie eigenständige Rekonstruktionen bildet. Ausgehend von (001) ist sie bisher die erste stabile Oberfläche, die zwischen GaAs(001) und GaAs(111)A auftritt.

Unter As-reichen Präparationsbedingungen wurde eine Struktur gefunden, die eine $(2 \times 1)/c(2 \times 2)$ -Periodizität besitzt. Die STM-Daten zeigten eindeutig, daß die Struktur der Oberfläche durch ein Modell beschrieben werden kann, das von Yamaguchi *et al.* [172] vorgeschlagen wurde. Demnach wird die Oberfläche durch GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)/\beta 2c(2 \times 2)$ korrekt beschrieben. Allerdings zeigten die hier durchgeführten Experimente, daß die Oberfläche dazu tendiert, Mikrofacetten der Orientierungen (113) und (115) auszubilden.

Durch Tempern der GaAs(114) $\beta 2(2 \times 1)/\beta 2c(2 \times 2)$ -Oberfläche im UHV (ohne Zugabe von As) wurde eine Ga-reichere Struktur gefunden. Diese Oberfläche zeigte im Gegensatz zu der As-reicheren Struktur sehr flache Terrassen und keine Mikrofacettierung. Das Strukturmodell für diese mit GaAs(114) $\alpha 2(2 \times 1)$ bezeichnete Rekonstruktion wurde durch eine vergleichende Studie der experimentellen Daten mit *ab-initio*-Rechnungen der Gesamtenergie bestimmt. Ihre Oberflächenenergie wurde zu $53 \text{ meV}/\text{Å}^2$ berechnet, was innerhalb der Werte liegt, die für niedrigindizier-

te GaAs-Oberflächen bekannt sind. Eine bemerkenswerte Eigenschaft dieser Struktur ist ihre Einfachheit. Ganz im Gegensatz zu den bislang gefundenen Rekonstruktionen von GaAs-Oberflächen wird sie direkt aus der *'bulk-truncated'* Struktur erhalten, indem lediglich einige Oberflächenatome miteinander eine Bindung eingehen. Das heißt, sie wird ohne zusätzliche Atome oder Gräben (wie z.B. die GaAs(001) β 2(2×4)-Rekonstruktion) gebildet.

Die Form von selbstorganisiert wachsenden InAs-Inseln auf GaAs(001)-Oberflächen wurde ermittelt, indem atomar aufgelöste STM-Bilder der Facettenseiten aufgenommen wurden. Dabei konnten weder $\{113\}$ - noch $\{114\}$ -orientierte Facetten auf den Inseln identifiziert werden. Statt dessen sind auf den Inseln ausgezeichnete Facetten aufgefallen, die $\{137\}$ - und hierzu ähnliche Orientierungen haben. Die genaue Identifizierung der Millerschen Indizes konnte mit Hilfe von Referenzmessungen an GaAs-Substraten durchgeführt werden, die im Rahmen der Dissertation von Lutz Geelhaar untersucht wurden [35]. Die Referenzmessungen an den GaAs-Oberflächen haben gezeigt, daß die $\{137\}$ -Oberflächen keine stabile Rekonstruktion besitzen, sondern lediglich semistabil sind. Die Semistabilität der $\{137\}$ -Oberflächen wurde als mögliche Ursache in Betracht gezogen, daß bei der Bildung von dreidimensionalen InAs-Inseln auf GaAs(001) stets eine scharfe Größenverteilung vorliegt. Das Auftreten von semistabilen $\{137\}$ -Facetten hat darüber hinaus zur Konsequenz, daß die Beschreibung der Inselbildung im Sinne eines kohärenten Stranski-Krastanow-Wachstumsmodells unvollständig ist.

In weiteren Experimenten wurde die atomare Struktur einer 1 ML dicken InAs-Schicht untersucht sowie die der InAs-Benetzungsschicht, die zwischen den InAs-Inseln besteht. Aus dieser Studie wurde gefolgert, daß InAs auf GaAs nicht vollständig kristallin eingebaut wird. Statt dessen wurde auf eine In-Dimer Struktur geschlossen, die auf einer lokal (2×4)-geordneten InAs (oder $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$)-Legierung relativ schwach gebunden sein sollte. Es wurde daher vorgeschlagen, diese In-Schicht als Ursache für die plötzliche Bildung der Inseln anzusehen.

Die Experimente am InAs/GaAs-System haben gezeigt, daß kinetische Effekte offenbar eine größere Rolle beim Wachstum der Inseln spielen, als bisher angenommen wurde. Es ist daher zu vermuten, daß sich die Form der Inseln unter verschiedenen Präparationsbedingungen durchaus ändern könnte. Allerdings ließen die Experimente den Schluß zu, daß einer der Gründe für das Auftreten von $\{137\}$ -Facetten die sonderbaren Bindungsanordnungen von As-Dimeren sein sollte. Es könnte demnach sein,

daß sich die Form der Inseln zwar ändert, die Facettenorientierungen jedoch immer noch zu der Familie der $\{137\}$ -Oberflächen gehören.

Als Fazit der hier untersuchten hochindizierten GaAs-Oberflächen mußte zwar eingeräumt werden, daß diese Oberflächen nicht zur Bildung der InAs-Inseln beitragen, jedoch haben sowohl GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B- als auch GaAs(114)A-Oberflächen Strukturen aufgezeigt, die als Substrat für diverse Halbleiterbauelemente interessant sein sollten. Insbesondere ist die GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-Oberfläche mit ihren zwei sehr unterschiedlichen Strukturen im Hinblick auf selbst ordnende Effekte bei InAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs-Heterostrukturen sicherlich hochinteressant.

Literaturverzeichnis

- [1] Siehe z.B. P. Y. Yu und M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors. Physics and Material Properties*, (Springer, Berlin, 1996) S. 457 ff.
- [2] M. Kastner, *Physics Today*, Januar, 24 (1993).
- [3] M. A. Reed, *Sci. Am.* **268**, 98 (1993).
- [4] E. Corcoran und G. Zorpette, *The Solid State Century Issues*, (Scientific American Special Issues, Oktober 1997) S. 7026.
- [5] K. Eberl, *Physics World* **10**, 47 (1997).
- [6] M. J. Kelly, in: *Low-Dimensional Semiconductors*, Series on Semiconductor Science and Technology Vol. 3, Hrsg. H. Kamimura, R. J. Nicholas, und R. H. Williams, (Oxford University Press, Oxford, 1995) S. 61 ff.
- [7] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, (John Wiley & Sons, New York, 1981) S. 848 ff.
- [8] M. Grundmann und D. Bimberg, *Phys. Bl.* **53**, 517 (1997).
- [9] D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, (Wiley, Chichester, 1999).
- [10] N. Kirstaedter, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, S. S. Ruvimov, M. V. Maximov, P. S. Kop'ev, Zh. I. Alferov, U. Richter, P. Werner, U. Gösele und J. Heydenreich, *Electron. Lett.* **30**, 1416 (1994).
- [11] S. Farfad, K. Hinzer, S. Raymond, M. Dion, J. McCaffrey, Y. Feng und S. Charbonneau, *Science* **274**, 1350 (1996).

- [12] M. Grundmann, *Physica E* **5**, 167 (2000).
- [13] O. Brandt, L. Tapfer, K. Ploog, R. Bierwolf, M. Hohenstein, F. Phillipp, H. Lage und A. Heberle, *Phys. Rev. B* **44**, 8043 (1991).
- [14] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Den Baars und P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3203 (1993).
- [15] J. M. Moison, F. Houzay, F. Barthe, L. Leprince, E. André und O. Vatel, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 196 (1994).
- [16] L. G. Wang, P. Kratzer, N. Moll und M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **62**, 1897 (2000).
- [17] B. A. Joyce, D. D. Vvedensky, G. R. Bell, J. G. Belk, M. Itoh und T. S. Jones, *Mat. Sci. & Eng. B* **67**, 7 (1999).
- [18] N. Moll, M. Scheffler und E. Pehlke, *Phys. Rev. B* **58**, 4566 (1998).
- [19] S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt, U. Gösele, J. Heydenreich, U. Richter, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, A. Yu. Egorov, P. S. Kop'ev und Zh. I. Alferov, *Phys. Rev. B* **51**, 14 766 (1995).
- [20] E. Steinmetz, F. Schienle und W. Richter, *J. Cryst. Growth* **170**, 208 (1997).
- [21] O. Flebbe, H. Eisele, T. Kalka, F. Heinrichsdorff, A. Krost, D. Bimberg und M. Dähne-Prietsch, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17**, 1639 (1999).
- [22] B. A. Joyce, T. S. Jones und J. G. Belk, *J. Vac. Sci. Technol. B.* **16**, 2373 (1998).
- [23] Y. Hasegawa, H. Kiyama, Q. K. Xue und T. Sakurai, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2265 (1998).
- [24] Y. Nabetani, T. Ishikawa, S. Noda und A. Sasaki, *J. Appl. Phys.* **76**, 347 (1994).
- [25] H. Eisele, O. Flebbe, T. Kalka und M. Dähne-Prietsch, *Surf. Interface Anal.* **27**, 537 (1999).
- [26] H. Lee, R. Lowe-Webb, W. Yang und P. C. Sercel, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 812 (1998).

- [27] D. E. Jesson, G. Chen, K. M. Chen und S. J. Pennycook, Phys. Rev. Lett. **80**, 5156 (1998).
- [28] K. Jacobi, J. Platen und C. Setzer, phys. stat. sol. (b) **218**, 329 (2000).
- [29] P. Drathen, W. Ranke und K. Jacobi, Surf. Sci. **77**, L162 (1978).
- [30] M. Wassermeier, J. Sudijono, M. D. Johnson, K. T. Leung, B. G. Orr, L. Däweritz und K. Ploog, Phys. Rev. B **51**, 14721 (1995).
- [31] J. Platen, A. Kley, C. Setzer, K. Jacobi, P. Ruggerone und M. Scheffler, J. Appl. Phys. **85**, 3597 (1999).
- [32] R. Nötzel, J. Temmyo und T. Tamamura, Nature **369**, 131 (1994).
- [33] G. Binnig und H. Rohrer, Phys. Bl. **43**, 282 (1987).
- [34] Siehe z.B.: <http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html>.
- [35] L. Geelhaar, Dissertation (Technische Universität Berlin, 2000).
- [36] H. Yamaguchi und Y. Horikoshi, Phys. Rev. B **51**, 9836 (1995).
- [37] Kubisches Zinksulfid. Siehe auch Ref.[7].
- [38] C. B. Duke, Chem. Rev. **96**, 1237 (1996).
- [39] B. Kübler, W. Ranke und K. Jacobi, Surf. Sci. **92**, 519 (1980).
- [40] R. M. Feenstra, J. A. Stroscio, J. Tersoff und A. P. Fein, Phys. Rev. Lett. **87**, 1192 (1987).
- [41] J. L. A. Alves, J. Hebenstreit und M. Scheffler, Phys. Rev. B **44**, 6188 (1991).
- [42] J. P. Borel, und A. Chatelain, Surf. Sci. **156**, 572 (1985).
- [43] M. A. Van Hove, Prog. Surf. Sci. **64**, 157 (2000).
- [44] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias und J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).
- [45] J. A. Appelbaum, G. A. Baraff und D. R. Hamann, Phys. Rev. B **14**, 1623 (1976).

- [46] W. A. Harrison, J. Vac. Sci. Technol. **16**, 1492 (1979).
- [47] M. D. Pashley, Phys. Rev. B **40**, 10481 (1989).
- [48] D. J. Chadi, in: *The Structure of Surfaces III*, Springer Series in Surface Sciences Vol. 24, Hrsg. S. Y. Tong, M. A. Van Hove, K. Takayanagi und X. D. Xie, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1991) S. 532.
- [49] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, (R. Oldenbourg Verlag, München, 1993) S. 30 ff. und S. 52 ff.
- [50] G. Ertl und J. Küppers, *Low Energy Electrons and Surface Chemistry*, (Verlag-Chemie, Weinheim, 1985) S. 203 ff.
- [51] M. Henzler und W. Göpel, *Oberflächenphysik des Festkörpers*, (Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1994) S. 28.
- [52] H. Lüth, *Surfaces and Interfaces of Solids*, (Springer, Berlin, 1993) S. 30 ff., S. 6 ff.
- [53] A. W. Czanderna in: *Methods of Surface Analysis*, Methods and Phenomena **1**, Hrsg. A. W. Czanderna, (Elsevier Publishing, Amsterdam, 1975) S. 5 ff.
- [54] Y. X. Wang und P. H. Holloway, J. Vac. Sci. B **2**, 613 (1984).
- [55] H. J. Scheel, J. Cryst. Growth **211**, 1 (2000).
- [56] R. L. Moon, J. Cryst. Growth **170**, 1 (1997).
- [57] H. Ando, J. Cryst. Growth **170**, 16 (1997).
- [58] M. A. Herman und H. Sitter, Microelectronics J. **27**, 257 (1996).
- [59] A. Y. Cho, J. Cryst. Growth **201/202**, 1 (1999).
- [60] M. Scheffler, Plenary Talk in ECOSS 19, Madrid 2000.
- [61] J. H. Neave, B. A. Joyce, P. J. Dobson und N. Norton, Appl. Phys. A **47**, 1 (1983).
- [62] Z. Zhang und M. G. Lagally, Science **276**, 377 (1997).
- [63] C. G. Morgan, P. Kratzer und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **82**, 4886 (1999).
- [64] G. LeLay und R. Kern, J. Cryst. Growth **44**, 197 (1978).

- [65] E. Bauer und J. H. Van der Merwe, Phys. Rev. B **33**, 3657 (1986).
- [66] D. Woodruff und T. A. Delchar in: *Modern Techniques of Surface Science*, Cambridge Solid State Sciences Series, Hrsg. E. A. Davis, I. M. Ward und D. R. Clarke, (Cambridge University Press, Cambridge, 1994) S. 36.
- [67] M. P. Seah und W. A. Dench, Surf. Inter. Anal. **1**, 2 (1979).
- [68] W. Braun in: *Applied RHEED* Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 154, Hrsg. G. Höhler, (Springer, Berlin, 1999) S. 13ff.
- [69] M. A. Van Hove, W. H. Weinberg und C.-M. Chan, in: *Low-Energy Electron Diffraction*, Springer Series in Surface Sciences Vol.6, Hrsg. G. Ertl und R. Gomer, (Springer, Berlin, 1986) S. 13 ff.
- [70] M. Henzler, Applications of Surf. Sci. **11/12**, 450 (1982).
- [71] B. A. Joyce, J. H. Neave, P. J. Dobson und P. K. Larsen, Phys. Rev. B **29**, 814 (1984).
- [72] J. J. Harris, B. A. Joyce und P. J. Dobson, Surf. Sci. **103**, L90 (1981).
- [73] J. H. Neave, P. J. Dobson, B. A. Joyce und J. Zhang, Appl. Phys. Lett. **47**, 100 (1985).
- [74] S. Clarke und D. D. Vvedensky, Phys. Rev. Lett. **58**, 2235 (1987).
- [75] G. Briones, L. Gonzales und J. A. Vela, in: *RHEED oscillations control of GaAs and AlAs MBE growth using phase-lock modulated beams*, Reflection High-Energy Electron Diffraction and Reflection Electron Imaging of Surfaces, Hrsg. P. K. Larsen und P. J. Dobson, (Plenum Press, New York, 1988).
- [76] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber und E. Weibel, Phys. Rev. Lett. **49**, 57 (1982).
- [77] H. E. Gaub, A. A. Gewirth, R. Guckenberger, J. Rabe, W. M. Heckl und B. Parkinson, *Procedures in Scanning Probe Microscopies*, (John Wiley & Sons, Chichester, 1997).
- [78] R. H. Fowler und L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **119**, 173 (1928).

- [79] A. R. Lubinsky, C. B. Duke, B. W. Lee und P. Mark, Phys. Rev. Lett. **36**, 1058 (1976).
- [80] J. Tersoff und D. R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).
- [81] C. Setzer, Dissertation (Technische Universität Berlin 1997).
- [82] J. Platen, Dissertation (Technische Universität Berlin 1997).
- [83] J. H. Neave, P. K. Larsen, J. F. Van Der Veen, P. J. Dobson und B. A. Joyce, Surf. Sci. **133**, 267 (1983).
- [84] M. Okano, K. Kajimura, S. Wakiyama, F. Sakai, W. Mizutani und M. Ono, J. Vac. Sci. Technol. A **5**, 3313 (1987).
- [85] P. Geng, W. Ranke und K. Jacobi, J. Phys. E **9**, 924 (1976).
- [86] C. R. Hammond in: *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, Hrsg. R. Weast und M. J. Astle, (Chemical Rubber Press, Boca Raton, 1980) S. B-12.
- [87] L. Däweritz, pers. Mitteilung.
- [88] P. Kratzer, C. G. Morgan und M. Scheffler, Prog. Surf. Sci. **59**, 1 (1998).
- [89] C. T. Foxon und B. A. Joyce, Surf. Sci. **50**, 434 (1975).
- [90] B. Elmann, E. S. Kotetles, P. Melman, C. Jagannath, J. Lee und D. Dugger, Appl. Phys. Lett. **55**, 1659 (1989).
- [91] C. J. Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*, (Oxford University Press, New York, 1993).
- [92] J. Wintterlin, Dissertation (Freie Universität Berlin 1988).
- [93] D. D. Chambliss und R. J. Wilson, J. Vac. Sci. Technol. B **9**, 928 (1991).
- [94] U. Harten, A. M. Lahee, J. P. Toennies und C. Wöll, Phys. Rev. Lett. **54**, 2619 (1985).
- [95] I. Ekvall, E. Wahlstrøm, D. Claesson, H. Olin und E. Olsson, Meas. Sci. Technol. **10**, 11 (1999).

- [96] E. Graugnard und T. Lee, <http://www.physics.purdue.edu>
- [97] T. Ohno, Phys. Rev. Lett. **73**, 631 (1993).
- [98] H. J. Güntherodt und R. Wiesendanger, in: *Scanning Tunneling Microscopy I*, Springer Series in Surface Sciences, Vol. 20, Hrsg. H. J. Güntherodt und R. Wiesendanger, (Springer, Berlin, 1994).
- [99] L. Däweritz und R. Hey, Surf. Sci. **236**, 15 (1990).
- [100] S.-H. Lee, W. Moritz und M. Scheffler, eing. zu Phys. Rev. Lett.
- [101] V. P. La Bella, H. Yang, D. W. Bullock, P.M. Thibado, P. Kratzer und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **83**, 2989 (1999).
- [102] W. Stieler, c't, Magazin für Computer und Technik **20**, 53 (1999); Frankfurter Allgemeine Zeitung (03.11.1999).
- [103] M. D. Pashley, K. W. Haberen, W. Friday, J. M. Woodfall und P. D. Kirchner, Phys. Rev. Lett. **60**, 2176 (1988).
- [104] D. J. Chadi, J. Vac. Sci. Technol. A **5**, 834 (1987).
- [105] G.-X. Qian, R. M. Martin und D. J. Chadi, Phys. Rev. B **38**, 7649 (1988).
- [106] N. Moll, A. Kley, E. Pehlke und M. Scheffler, Phys. Rev. B **54**, 8844 (1996).
- [107] H. H. Farrell und C. J. Palmstrøm, J. Vac. Sci. Technol. B **8**, 903 (1990).
- [108] A. R. Avery, D. M. Holmes, T. S. Jones, B. A. Joyce und G. A. D. Briggs, Phys. Rev. B **50**, 8098 (1994).
- [109] J. Behrend, M. Wassermeier, L. Däweritz und K. Ploog, Surf. Sci. **342**, 63 (1995).
- [110] T. Hashizume, Q. K. Xue, J. Zhou, A. Ichimiya und T. Sakurai, Phys. Rev. Lett. **73**, 2208 (1994).
- [111] Q. K. Xue, T. Hashizume und T. Sakurai, Appl. Surf. Sci. **141**, 244 (1999).
- [112] A. R. Avery, D. M. Holmes, J. L. Sudijono, T. S. Jones und B. A. Joyce, Surf. Sci. **323**, 91 (1995).

- [113] A. R. Avery, C. M. Goringe, D. M. Holmes, J. L. Sudijono und T. S. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3344 (1996).
- [114] D. K. Biegelsen, R. D. Bringham, J. E. Northrup und L.-E. Swartz, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 452 (1990).
- [115] J. E. Northrup und S. Froyen, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2276 (1993).
- [116] I. Kamiya, H. Tanaka, D. E. Aspnes, L. P. Florez, E. Colas, J. P. Harbison und R. Bhat, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 1238 (1992).
- [117] W. Ranke und K. Jacobi, *Prog. Surf. Sci.* **10**, 1 (1981).
- [118] S. M. Newstead, R. A. A. Kubiak und E. H. C. Parker, *J. Cryst. Growth* **81**, 49 (1987).
- [119] D. J. Frankel, C. Yu, J. P. Harbison und H. H. Farrell, *J. Vac. Sci. Technol. B* **5**, 1113 (1987).
- [120] S. L. Skala, J. S. Hubacek, J. R. Tucker, J. W. Lyding, S. T. Chou, und K.-Y. Cheng, *Phys. Rev. B* **48**, 9138 (1993).
- [121] J. E. Northrup und S. Froyen, *Phys. Rev. B* **71**, 2015 (1994).
- [122] M. Küball, D. T. Wang, N. Esser, M. Cardona, J. Zegenhagen und B. O. Fimland, *Phys. Rev. B* **51**, 13 880 (1995).
- [123] Q. Xue, T. Hashizume, J. M. Zhou, T. Sakata, T. Ohno und T. Sakurai, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3177 (1995).
- [124] Q. K. Xue, T. Hashizume, J. Zhou, T. Sakata und T. Sakurai, *Appl. Surf. Sci.* **87/88**, 364 (1995).
- [125] J. G. McLean, P. Kruse und A. C. Kummel, *Surf. Sci.* **424**, 206 (1999).
- [126] W. G. Schmidt, S. Mirbt und F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* **62**, 8087 (2000).
- [127] R. Nötzel, J. Temmyo, T. Tamamura, T. Fukui und H. Hasegawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L872 (1995).

- [128] K. Nishi, R. Mirin, D. Leonard, G. Medeiros-Ribeiro, P. M. Petroff und A. Gosard, *J. Appl. Phys.* **80**, 3466 (1996).
- [129] H. Xu, W. Jiang, B. Xu, W. Zhou und Z. Wang, *J. Cryst. Growth* **205**, 481 (1999).
- [130] Y. J. Chun, S. Nakajima und M. Kawabe, *Jpn. J. Appl. Phys* **35** L1075 (1996).
- [131] K. Nishi, T. Anan, A. Gomyo, S. Kohmoto und S. Sugou, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 3579 (1997).
- [132] H. Xu, W. Zhou, B. Xu, W. Jiang, Q. Gong, D. Ding und Z. Wang, *Appl. Surf. Sci.* **141**, 101 (1999).
- [133] J.-L. Lee, M. Sugisaki, H.-W. Ren, S. Sugou und Y. Masumoto, *J. Cryst. Growth* **200**, 77 (1999).
- [134] A. Pantanè, A. Polimeni, M. Henini, L. Eaves, P. C. Main und G. Hill, *J. Cryst. Growth* **201/202**, 1139 (1999).
- [135] Y. Kaneko, S. Nakagawa, Y. Ichimura, D. E. Mars und T. Takekuchi, *J. Appl. Phys.* **87**, 1597 (2000).
- [136] C. B. Duke, C. Mailhot, A. Paton, A. Kahn und K. Stiles, *J. Vac. Sci. Technol. A* **4**, 947 (1985).
- [137] K. Jacobi, C. v. Muschwitz und W. Ranke, *Surf. Sci.* **82**, 270 (1979).
- [138] S. Y. Tong, G. Xu und W. N. Mei, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1693 (1984).
- [139] D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1911 (1984).
- [140] E. Kaixaras, Y. Bar-Yam, J. D. Joannopoulos und K. C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 106 (1986).
- [141] D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 102 (1986).
- [142] E. Kaixaras, Y. Bam-Yam, J. D. Joannopoulos und K. C. Pandey, *Phys. Rev. B* **35**, 9636 (1987).
- [143] K. W. Haberen und M. D. Pashley, *Phys. Rev. B* **41**, 3226 (1990).

- [144] D.K. Biegelsen, R.D. Bringans, J.E. Northrup und L.-E. Swartz, Phys. Rev. B **41**, 5701 (1990).
- [145] C. Setzer, J. Platen, H. Bludau, M. Gierer, H. Over, und K. Jacobi, Surf. Sci. **402-404**, 782 (1998).
- [146] J.M. C. Thornton, P. Unsworth, M. D. Jackson, P. Weightman, und D. A. Woolf, Surf. Sci. **316**, 231 (1994).
- [147] K. Stiles und A. Kahn, J. Vac. Sci. Technol. B **3**, 1089 (1985).
- [148] D. J. Chadi, J. Vac. Sci. Technol. B **3**, 1167 (1985).
- [149] S.M. Scholz, M. Morgenstern und K. Jacobi, Surf. Sci. **316**, 157 (1994).
- [150] C. Setzer, J. Platen, W. Ranke und K. Jacobi, Surf. Sci. **419**, 291 (1999).
- [151] M. Kawase, Y. Ishikawa und T. Fukui, Appl. Surf. Sci. **130-132**, 457 (1998).
- [152] M. Pristovsek, H. Menhal , T. Schmidtling, N. Esser und W. Richter, Microelectronics J. **30**, 449 (1999).
- [153] D. I. Lubyshev, M. Micovic, D. L. Miller, I. Chizhov und R. F. Willis, J. Vac. Sci. Technol. B **16**, 1339 (1998).
- [154] L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi, Phys. Rev. B **60**, 15 890 (1999).
- [155] M. Morgenstern, Diplomarbeit (Technische Universität Berlin, 1993).
- [156] P. Moriarty, Y.-R. Ma, A.W. Dunn, P.H. Beton, M. Henini, C. McGinley, E. McLoughlin, A. A. Cafolla, G. Hughes, S. Downes, D. Teehan und B. Murphy, Phys. Rev. B **55**, 15 397 (1997).
- [157] U. Resch-Esser, N. Esser, C. Springer, J. Zegenhagen, W. Richter, M. Cardona und B. O. Fimland, J. Vac. Sci. Technol. B **13**, 1672 (1995).
- [158] Q.K. Xue, Y. Hasegawa, T. Ogino. H. Kiyama und T. Sakurai, J. Vac. Sci. Technol. B **15**, 1270 (1997).
- [159] E. J. Roan und K. Y. Chen, Appl. Phys. Lett. **59**, 2688 (1991).

- [160] S. Shimomura, A. Wakejima, A. Adachi, Y. Okamoto, N. Sano, K. Murase und S. Hiyamizu, *Jpn. J. Appl. Phys.* **32**, L1728 (1993).
- [161] S. Hiyamizu, S. Shimomura, A. Wakajima, S. Kaneko, A. Adachi, Y. Okamoto, N. Sano und K. Murase, *J. Vac. Sci. Technol. B* **12**, 1043 (1994).
- [162] S. Shimomura, K. Shinohara, T. Kitada, S. Hiyamizu, Y. Tsuda, N. Sano, A. Adachi und Y. Okamoto, *J. Vac. Sci. Technol. B* **13**, 696 (1995).
- [163] S. Shimomura, S. Kaneko, T. Motokawa, K. Shinohara, A. Adachi, Y. Okamoto, N. Sano, K. Murase und S. Hiyamizu, *J. Cryst. Growth* **150**, 409 (1995).
- [164] Y. Hanamaki, T. Takekeuchi, N. Ogasawara, Y. Shiraki, *J. Cryst. Growth* **175/176**, 359 (1997).
- [165] D. Bimberg, J. Christen, T. Fukunaga, H. Nakashima, D. E. Mars und J. N. Miller, *J. Vac. Sci. Technol. B* **5**, 1191 (1987).
- [166] A. Ponchet, A. Le Corre, A. Godefroy, S. Salaün und A. Poudoulec, *Microelectronics J.* **26**, 783 (1995).
- [167] A. Ponchet, A. Le Corre, H. L'Haridon, B. Lambert und S. Salaün, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1850 (1995).
- [168] S. C. Erwin, A. A. Baski und L. J. Whitman, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 687 (1996).
- [169] Y. Tsuda, S. Shimomura, S. Hiyamizu und N. Sano, *J. Cryst. Growth* **150**, 415 (1995).
- [170] T. Yamada, H. Yamaguchi und Y. Horikoshi, *J. Cryst. Growth* **150**, 421 (1995).
- [171] J. Platen, C. Setzer, W. Ranke und K. Jacobi, *Appl. Surf. Sci.* **123/124**, 43 (1998).
- [172] H. Yamaguchi, T. Yamada und Y. Horikoshi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L1490 (1995).
- [173] <http://www.fhi-berlin.mpg.de/th/th.html>.
- [174] M. Henzler, *Appl. Phys.* **9**, 11 (1976).

- [175] S. Mirbt, N. Moll, A. Kley und J. D. Jannopoulos, *Surf. Sci.* **422**, L177 (1999).
- [176] H. Yamaguchi und Y. Horikoshi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, L1423 (1994).
- [177] J. Márquez, P. Kratzer, L. Geelhaar, K. Jacobi und M. Scheffler, nicht veröffentlicht.
- [178] J. Márquez, P. Kratzer, L. Geelhaar, K. Jacobi und M. Scheffler, eingereicht bei *Phys. Rev. Lett.*
- [179] Y. B. Xu, E. T. M. Kernohan, D. J. Freeland, A. Ercole, M. Tselepi und J. A. C. Bland, *Phys. Rev. B* **58**, 890 (1998).
- [180] E. M. Kneeder, B. T. Jonker, P. M. Thibado, R. J. Wagner, B. V. Shanabrook und L. J. Whitman, *Phys. Rev. B* **56**, 8163 (1997).
- [181] G. A. Prinz, *Science* **282**, 1660 (1998).
- [182] W. J. Schaffer, M. D. Lind, S. P. Kowalczyk und R. W. Grant, *J. Vac. Sci. Technol. B* **1**, 688 (1983).
- [183] L. Goldstein, F. Glas, J.-Y. Marzin, M. N. Charasse und G. Le Roux, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 1099 (1985).
- [184] J.-Y. Marzin, J.-M. Gérard, A. Izraël, D. Barrier und G. Bastard, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 716 (1994).
- [185] M. Grundmann, J. Christen, N. N. Ledentsov, J. Böhrer, D. Bimberg, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, U. Gösele, J. Heydenreich, V. M. Ustinov, A. Yu. Egorov, A. E. Zhukov, P. S. Kop'ev und Zh. I. Alferov, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4043 (1995).
- [186] C. W. Snyder, J. F. Mansfield und B. G. Orr, *Phys. Rev. B* **46**, 9551 (1992).
- [187] A. Madhukar, Q. Xie, P. Chen und A. Konkar, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2727 (1994).
- [188] G. S. Solomon, J. A. Trezza und J. S. Harris, Jr., *Appl. Phys. Lett.* **66**, 991 (1995).
- [189] G. S. Solomon, J. A. Trezza und J. S. Harris, Jr., *Appl. Phys. Lett.* **66**, 3161 (1995).

- [190] N. P. Kobayashi, T. R. Ramachandran, P. Chen und A. Madhukar, Appl. Phys. Lett. **68**, 3299 (1996).
- [191] N. N. Ledentsov, M. Grundmann, N. Kirchstaedter, O. Schmidt, R. Heitz, J. Böhrer, D. Bimberg, V. M. Ustinov, V. A. Shchukin, A. Yu. Egorov, A. E. Zhukov, S. Zaitsev, P. S. Kop'ev, Zh. I. Alferov, S. S. Ruvimov, A. O. Kosogov, P. Werner, U. Gösele und J. Heydenreich, Solid-State Electron. **40**, 785 (1996).
- [192] T. R. Ramachandran, A. Madhukar, I. Mukhametzhanov, R. Heitz, A. Kalburge, Q. Xie und P. Chen, J. Vac. Sci. Technol. B **16**, 1330 (1998).
- [193] H. Lee, R. R. Lowe-Webb, W. Yang und P. C. Sercel, Appl. Phys. Lett. **71**, 2325 (1997).
- [194] H. Zhu, Z. Wang, H. Wang, L. Cui und S. Feng, J. Cryst. Growth **197**, 372 (1999).
- [195] M. Grundmann, O. Stier und D. Bimberg, Phys. Rev. B **52**, 11 969 (1995).
- [196] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Farfad und L. Jacak, Phys. Rev. B **54**, 5604 (1996).
- [197] W. Yang, H. Lee, T. J. Johnson, P. C. Sercel und A. G. Norman, Phys. Rev. B **61**, 2784 (2000).
- [198] D. J. Eaglesham und M. Cerullo, Phys. Rev. Lett. **64**, 1943 (1990).
- [199] I. N. Stranski und L. Krastanow, Sitzungsberichte d. Akad. d. Wiss. Wien, Abt. II b, Bd. **146**, 797 (1937).
- [200] S. Guha, A. Madhukar und K. C. Rajkumar, Appl. Phys. Lett. **57**, 2110 (1990).
- [201] D. Vanderbilt und L. K. Wickham, in *Evolution of Thin-Film and Surface Microstructure*, Hrsg. C. V. Thompson, J. Y. Tsao und D. J. Srolovitz, (Materials Research Society, Pittsburg, 1991) S. 555.
- [202] W. Ostwald, Z. Phys. Chem. **34**, 495 (1900).
- [203] D. Leonard, K. Pond und P. M. Petroff, Phys. Rev. B **50**, 11687 (1994).
- [204] T. R. Ramachandran, R. Heitz, P. Chen und A. Madhukar, Appl. Phys. Lett. **70**, 640 (1997).

- [205] P. B. Joyce, T. J. Krzyzewski, G. R. Bell, B. A. Joyce und T. S. Jones, Phys. Rev. B **58**, R 15 981 (1998).
- [206] J. M. Gérard, J. B. Génin, J. Lefebvre, J. M. Moison, N. Lebouché und F. Barthe, J. Cryst. Growth **150**, 351 (1995).
- [207] C. Ratsch und A. Zangwill, Surf. Sci. **293**, 123 (1993).
- [208] B. G. Orr, D. Kessler, C. W. Snyder und L. Sander, Europhys. Lett. **19**, 33 (1992).
- [209] Y. Chen und J. Washburn, Phys. Rev. Lett. **77**, 4046 (1996).
- [210] C. Priester und M. Lannoo, Phys. Rev. Lett. **75**, 93 (1995).
- [211] V. A. Shchukin, N. N. Ledentsov, P. S. Kop'ev und D. Bimberg, Phys. Rev. Lett. **75**, 2968 (1995).
- [212] E. Pehlke, N. Moll, A. Kley und M. Scheffler, Appl. Phys. A **65**, 525 (1997).
- [213] L. G. Wang, P. Kratzer, M. Scheffler und N. Moll, Phys. Rev. Lett. **82**, 4042 (1999).
- [214] I. M. Watt, *The Principles and Practice of Electron Microscopy*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997) S. 59 ff.
- [215] R. Murray, S. Malik, P. Sievers, D. Childs, C. Roberts, B. Joyce und H. Davock, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 496 (1999).
- [216] M. Grundmann, N. N. Ledentsov, R. Heitz, L. Eckey, J. Böhrer, D. Bimberg, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, J. Heydenreich, V. M. Ustinov, A. Yu. Egorov, A. E. Zhukov, P. S. Kop'ev und Zh. I. Alferov, phys. stat. sol. (b) **188**, 249 (1995)
- [217] S. Farfad, R. Leon, D. Leonard, J. L. Merz und P. M. Petroff, Phys. Rev. B **52**, 5752 (1995).
- [218] H. Drexel, D. Leonard, W. Hansen, J. P. Kotthaus und P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **73**, 2252 (1994).

- [219] X. Z. Liao, J. Zou, X. F. Duan, D. J. H. Cockayne, R. Leon und C. Lobo, *Phys. Rev. B* **58**, R4235 (1998).
- [220] W. Wu, J. R. Tucker, G. S. Solomon und J. S. Harris, Jr., *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1083 (1997).
- [221] B. Legrand, B. Grandidier, J. P. Nys, D. Stiévenard, J. M. Gérard und V. Thierry-Mieg, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 96 (1998).
- [222] B. Lita, R. S. Goldman, J. D. Phillips und P. K. Bhattacharya, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2824 (1999).
- [223] H. Eisele, O. Flebbe, T. Kalka, C. Preinesberger, F. Heinrichsdorff, A. Krost, D. Bimberg und M. Dähne-Prietsch, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 106 (1999).
- [224] D. E. Savage und M. G. Lagally, *J. Vac. Sci. Technol. B* **4**, 943 (1986).
- [225] Q. Gong, J. B. Liang, B. Xu, D. Ding, H. X. Li, C. Jiang, W. Zhou, F. Q. Liu, Z. G. Wang, X. H. Qiu, G. Y. Shang und C. L. Bai, *J. Cryst. Growth* **192**, 376 (1998).
- [226] Q. K. Xue, Y. Hasegawa, H. Kiyama und T. Sakurai, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 500 (1999).
- [227] N. Ikoma und S. Ohkouchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L-724 (1995).
- [228] H. Lee, W. Yang, P. C. Sercel und A. G. Norman, *J. Electr. Mat.* **28**, 481 (1999).
- [229] L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi, *Phys. Rev. B* **62**, 6908 (2000).
- [230] L. Geelhaar, P. Kratzer, J. Márquez und K. Jacobi, eingereicht bei *Phys. Rev. Lett.*
- [231] G. R. Bell, T. J. Krzyzewski, P. B. Joyce und T. S. Jones, *Phys. Rev. B* **61**, R10 551 (2000).
- [232] A. Kley, P. Ruggerone und M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5278 (1997).
- [233] J. G. Belk, J. L. Sudijono, D. M. Holmes, C. F. McConville, T. S. Jones und B. A. Joyce, *Surf. Sci.* **365**, 735 (1996).

- [234] J. G. Belk, C. F. McConville, J. L. Sudijono, T. S. Jones und B. A. Joyce, *Surf. Sci.* **387**, 213 (1997).
- [235] V. Bressler-Hill, A. Lorke, S. Varma, P. M. Petroff, K. Pond und W. H. Weinberg, *Phys. Rev. B* **50**, 8479 (1994).
- [236] V. Bressler-Hill, S. Varma, A. Lorke, B. Z. Nosho, P. M. Petroff und W. H. Weinberg, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3209 (1995).
- [237] R. Heitz, T. R. Ramachandran, A. Kalburge, Q. Xie, I. Mukhametzhanov, P. Chen und A. Madhukar, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4071 (1997).
- [238] N. Grandjean, J. Massies und O. Tottereau, *Phys. Rev. B* **55**, R10 189 (1997).
- [239] M. Sauvage-Simkin, Y. Garreau, R. Pinchaux und M. B. Veron, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3485 (1995).
- [240] D. J. Bottomley, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 783 (1998).
- [241] P. Kratzer, pers. Mitteilung.
- [242] L. G. Wang, P. Kratzer und M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **62**, 1897 (2000).
- [243] O. Brandt, K. Ploog, L. Tapfer, M. Hohenstein, R. Bierwolf und F. Phillipp, *Phys. Rev. B* **45**, 8443 (1992).

Veröffentlichungen

Artikel in Zeitschriften

Erstautor

- J. Márquez, P. Kratzer, L. Geelhaar, K. Jacobi und M. Scheffler: *Atomic structure of the stoichiometric GaAs(114) surface*, eingereicht bei Phys. Rev. Lett. (Juni 2000).
- J. Márquez, L. Geelhaar und K. Jacobi: *Atomic structure of the GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{3}$)B-(8×1) surface reconstruction*, Phys. Rev. B **62**, 9969 (2000).

Koautor

- L. Geelhaar, J. Márquez, P. Kratzer und K. Jacobi: *GaAs(2511) – A new stable surface inside the stereographic triangle*, eingereicht bei Phys. Rev. Lett. (Oktober 2000)).
- L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi: *Experimental evidence for a new stable GaAs surface near (113)*, Phys. Rev. B **62**, 6908 (2000).
- K. Jacobi, L. Geelhaar, J. Márquez, J. Platen und C. Setzer : *The morphology of high index GaAs surfaces*, Appl. Surf. Sci. **166**, 173 (2000).
- P. Geng, J. Márquez, L. Geelhaar, J. Platen, C. Setzer und K. Jacobi: *A compact ultrahigh-vacuum system for the in situ investigation of III/V semiconductor surfaces*, Rev. Sci. Instrum. **71**, 504 (2000).

- L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi: *Step structure on GaAs(113)A studied by scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. B **60**, 15 890 (1999).
- L. Geelhaar, J. Márquez, K. Jacobi, A. Kley, P. Ruggerone und M. Scheffler: *A scanning tunneling microscopy study of the GaAs(112) surfaces*, Microelectronics J. **30**, 393 (1999).
- K. Jacobi, J. Platen, C. Setzer, J. Márquez, L. Geelhaar, C. Meyne, W. Richter, A. Kley, P. Ruggerone und M. Scheffler: *Morphology, surface core-level shifts and surface energy of the faceted GaAs(112)A and $(\bar{1}\bar{1}\bar{2}B)$ surfaces*, Surf. Sci. **439**, 59 (1999).
- J. Márquez, S. N. Orlov, Yu. N. Polivanov, V. V. Smirnov, D. Voelkel, F. Huisken und Yu. L. Chuzavkov,: *Narrow-band spectroscopic source of coherent radiation tunable in the mid-IR range*, Quantum Electronics (Übersetzung von: *Kvantovaya Elektronika*) **25**, 165 (1998).
- D. Voelkel, Yu. L. Chuzavkov, J. Márquez, S. N. Orlov, Yu. N. Polivanov, V. V. Smirnov, und F. Huisken: *Infrared degenerate four-wave mixing and resonance-enhanced stimulated Raman scattering in molecular gases and free jets*, Appl. Phys. B **65**, 93 (1997).
- F. Huisken, M. Kaloudis, J. Márquez, Yu. L. Chuzavkov, S. N. Orlov, Yu. N. Polivanov und V. V. Smirnov, : *Single-mode KTiOPO₄ optical parametric oscillator*, Opt. Lett. **20**, 2306 (1995).

Muchas gracias...

Diese Arbeit entstand in der Abteilung *Physikalische Chemie* am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. G. Ertl, bei dem ich mich für die erwiesene Unterstützung bedanke.

Die wissenschaftliche Betreuung übernahm Herr Prof. Dr. Karl Jacobi, bei dem ich mich für sein Engagement für dieses Projekt und seine stetige Diskussionsbereitschaft ganz besonders bedanken möchte.

Herrn Prof. Dr. D. Bimberg danke ich für die Übernahme der Betreuung seitens der Technischen Universität Berlin.

Für die intensive und sehr fruchtbare Zusammenarbeit bedanke ich mich bei Lutz Geelhaar, der als interessierter Gesprächspartner stets zur Verfügung stand und immer ein offenes Ohr für Probleme hatte.

Mein besonderer Dank gilt auch Herrn Peter Geng, der mir nicht nur bei allen technischen Problemen mit Rat und Tat zur Seite stand, sondern auch mit seiner nicht zu verbergenden 'Berliner Lebensart' immer für gute Laune innerhalb der Arbeitsgruppe gesorgt hat. Darüber hinaus war er stets bemüht für die – für mich sehr wichtige lebenserhaltende – tägliche Kaffeeration zu sorgen.

Allen ehemaligen und derzeitigen Mitgliedern der Arbeitsgruppe (Dr. Kolja Bedürftig, Chaoyang Fan, Dr. Jutta Platen, Maria Richard, Evgeny Temko, Dr. Jinghai Wang und Yuemin Wang) sowie allen Mitarbeitern des Instituts bin ich für das nette Arbeitsklima sehr verbunden.

Für die hilfreichen Diskussionen und die hervorragende Zusammenarbeit bedanke ich mich auch bei Herrn Dr. Peter Kratzer von der theoretischen Abteilung des Fritz-Haber-Instituts.

Herrn Prof. Dr. T. S. Jones vom Imperial College of Science der Universität London, Herrn Dr. J. Wintterlin vom Fritz-Haber-Institut sowie Herrn Dr. M. Wassermeier vom

Danksagung

Paul-Drude Institut in Berlin, danke ich für die wertvollen Ratschläge beim Umgang mit einem STM.

Mein Dank gilt auch Frau Ingeborg Reinhardt für ihre Mühe, die orthographischen Fehler auf ein Minimum zu reduzieren.

Bei Mario Melzer bedanke ich mich für die alltäglichen Ablenkungen sowie die fachmännischen Diskussionen über die Spielzüge von ALBA-Berlin, die wir *in situ* führen konnten.

Ganz herzlichen Dank gebührt Gabi und Dieter Scheer, die mich insbesondere am Anfang des Studiums sehr unterstützt haben und dadurch einen wesentlichen Anteil daran haben, daß ich diese Promotionsarbeit überhaupt durchführen konnte.

Meiner Frau Julia möchte einen großen Dank dafür aussprechen, daß sie mich bei meiner Wahl des Promotionortes Berlin unterstützt hat und dafür etliche Stunden in voll besetzten Waggons der DB auf sich genommen hat. Ich hoffe sehr, daß wir bald diese ‘Wochenendehe’ hinter uns lassen können.