

# Epitaktisch gewachsene GaAs-Oberflächen im Inneren des stereografischen Dreiecks

von

Dipl.-Phys. **Lutz Geelhaar**

aus Düsseldorf

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.-Ing. H. J. Eichler

Berichter: Prof. Dr. K. Jacobi

Prof. Dr. M. Dähne

Tag der mündlichen Prüfung: 25. September 2000

## Abstract

The aim of this thesis was to investigate GaAs surfaces whose orientations are located inside the stereographic triangle, i. e., far from the low-index planes (001), (110) and (111). Various surfaces were prepared by using molecular beam epitaxy (MBE), and characterized *in situ* by scanning tunneling microscopy (STM) and electron diffraction (LEED, RHEED).

**GaAs(112)A** is not stable but decays into facets. Some of these facets are oriented in a direction close to  $\{124\}$ . This plane is located inside the stereographic triangle.

On **GaAs(113)A**– $(8\times 1)$  a highly anisotropic step structure was observed. While steps along  $[33\bar{2}]$  are straight for up to 2000 Å without any kinks, steps along  $[1\bar{1}0]$  are very rough. This phenomenon was explained on the basis of the electron counting rule (ECR). Under certain preparation conditions, mesoscopic valleys appear along  $[33\bar{2}]$ . Parts of their sidewalls are of the orientation  $\{3715\}$ . This plane is also located inside the stereographic triangle.

In order to check the aforementioned indications that there is a stable surface inside the stereographic triangle, spherical depressions were ground into GaAs(113)A samples. A hitherto unknown stable surface was discovered in these depressions.

Further experiments on suitably cut planar samples revealed that the Miller indices of this new surface are **(2511)**. The  $(1\times 1)$  unit mesh of the reconstruction contains an inclined series of three arsenic dimers and fulfills the ECR. The surface consists of large terraces without any islands or holes. Narrow stripes with the orientation **(3715)** form on the surface. The angle between this plane and (2511) is only  $1^\circ$ . GaAs(3715) violates the ECR, but the density of dangling bonds is only 0.1% greater than on GaAs(2511). It was concluded that, in general, on semiconductor surfaces the gain in stability arising from the minimization of the number of dangling bonds is significantly greater than the gain arising from reaching a semiconducting ground state.

On the basis of the results for GaAs(2511), the bounding facets of InAs/GaAs(001) quantum dots were unambiguously identified in STM images as  $\{137\}$ .

The discovery of GaAs(2511), the first stable surface inside the stereographic triangle, raises the question of what other surfaces there may be.



## Kurzzusammenfassung

Das Ziel dieser Dissertation war die Erforschung von GaAs-Oberflächen, deren Orientierungen im Inneren des stereografischen Dreiecks liegen, also weit entfernt von den niederindizierten Ebenen (001), (110) und (111). Verschiedene Oberflächen wurden mit Molekularstrahlepitaxie (MBE) präpariert und in situ mit Rastertunnelmikroskopie (STM) und Elektronenbeugung (LEED, RHEED) untersucht.

**GaAs(112)A** ist instabil und zerfällt in Facetten. Einige dieser Facetten weisen eine Orientierung nahe  $\{124\}$  auf, einer Ebene im Inneren des stereografischen Dreiecks.

Auf **GaAs(113)A**– $(8 \times 1)$  wurde eine stark anisotrope Stufenstruktur beobachtet. Während Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  über bis zu  $2000 \text{ \AA}$  gerade verlaufen, sind Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  sehr rauh. Dieses Phänomen wurde mit Hilfe der Elektronen-Zählregel (ECR) erklärt. Unter gewissen Präparationsbedingungen entstehen in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  mesoskopische Gräben, auf deren Seitenwänden Abschnitte mit der Orientierung  $\{3\bar{7}15\}$  auftreten. Diese Ebene liegt ebenfalls im Inneren des stereografischen Dreiecks.

Um diesen Hinweisen auf eine stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks nachzugehen, wurden sphärische Mulden in GaAs(113)A-Proben geschliffen. In diesen Mulden wurde eine bisher unbekannte stabile Oberfläche entdeckt.

Deren Miller-Indizes wurden in weiteren Versuchen auf entsprechenden planaren Proben zu  $(2\bar{5}11)$  bestimmt. Die  $(1 \times 1)$ -Einheitszelle der Rekonstruktion enthält eine geneigte Folge von drei Arsendimeren und erfüllt die ECR. Die Oberfläche besteht aus großen Terrassen ohne Inseln oder Löcher, auf denen sich schmale Streifen der Orientierung  $(3\bar{7}15)$  bilden. Der Winkel zwischen dieser Ebene und  $(2\bar{5}11)$  beträgt nur  $1^\circ$ . GaAs(3715) verletzt die ECR, aber die Dichte der hängenden Bindungen ist nur um 0,1% höher als auf GaAs(2511). Es wurde gefolgert, daß generell auf Halbleiter-Oberflächen durch die Minimierung der Anzahl der hängenden Bindungen ein deutlich größerer Stabilitätsgewinn erzielt wird als durch das Erreichen eines halbleitenden Grundzustandes.

Mit Hilfe der Resultate zu GaAs(2511) wurden auf STM-Bildern von InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten einhüllende Facetten zweifelsfrei als  $\{137\}$  identifiziert.

Die Entdeckung von GaAs(2511), der ersten stabilen Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks, wirft die Frage auf, was es noch für Oberflächen geben mag.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>15</b>
2.1	GaAs-Oberflächen . . . . .	15
2.1.1	Der GaAs-Kristall . . . . .	15
2.1.2	Prinzipien der Struktur von Halbleiter-Oberflächen . . . . .	21
2.2	Epitaktisches Kristallwachstum . . . . .	26
2.2.1	Wachstumsmoden . . . . .	26
2.2.2	Molekularstrahlepitaxie (MBE) . . . . .	28
2.3	Analysemethoden . . . . .	30
2.3.1	Rastertunnelmikroskopie (STM) . . . . .	30
2.3.2	Elektronenbeugung (LEED und RHEED) . . . . .	32
<b>3</b>	<b>Experimente</b>	<b>35</b>
3.1	Aufbau . . . . .	35
3.2	Durchführung . . . . .	39
3.2.1	Probenpräparation . . . . .	39
3.2.2	Muldenschleifen . . . . .	42
3.2.3	STM-Experimente . . . . .	46
3.3	Auswertung . . . . .	47
<b>4</b>	<b>GaAs(112)A und GaAs(<math>\bar{1}\bar{1}\bar{2}</math>)B</b>	<b>49</b>
4.1	Einführung . . . . .	49
4.2	STM-Ergebnisse . . . . .	52
4.3	Diskussion . . . . .	53

<b>5</b>	<b>GaAs(113)A</b>	<b>55</b>
5.1	Einführung . . . . .	55
5.1.1	Die ideale Oberfläche . . . . .	55
5.1.2	Literaturüberblick . . . . .	57
5.2	Die (8×1)-Rekonstruktion . . . . .	62
5.3	Anisotrope Stufenstruktur . . . . .	66
5.3.1	STM-Ergebnisse . . . . .	66
5.3.2	Modelle eindimensionaler Inseln auf GaAs(113)A-(8×1) . . . . .	69
5.3.3	Diskussion . . . . .	74
5.4	Mesoskopische Rauigkeit . . . . .	76
5.4.1	STM-Ergebnisse . . . . .	76
5.4.2	Diskussion . . . . .	81
5.5	Sphärische Mulde in GaAs(113)A . . . . .	86
5.5.1	Einführung . . . . .	86
5.5.2	Überprüfung der Präparationsmethode . . . . .	89
5.5.3	Die neue stabile Oberfläche . . . . .	91
5.5.4	Diskussion . . . . .	95
5.6	Zusammenfassung . . . . .	97
<b>6</b>	<b>GaAs(2 5 11)</b>	<b>99</b>
6.1	Einführung . . . . .	99
6.2	Atomare Struktur . . . . .	100
6.2.1	Ergebnisse . . . . .	100
6.2.2	Diskussion . . . . .	103
6.3	Weitere Experimente . . . . .	114
6.3.1	RHEED . . . . .	114
6.3.2	Mesoskopische Morphologie . . . . .	116
6.3.3	Tempern im Ultrahochvakuum . . . . .	118
6.4	Zusammenhang mit InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten . . . . .	123
6.4.1	Einführung . . . . .	123
6.4.2	Ergebnisse . . . . .	124
6.4.3	Diskussion . . . . .	128
6.5	Zusammenfassung . . . . .	132

<b>7 Zusammenfassung</b>	<b>134</b>
<b>A Oberflächenenergien von Galliumarsenid</b>	<b>139</b>
<b>B Anwendung der ECR auf eindimensionale Inseln auf GaAs(113)A</b>	<b>140</b>
B.1 Eindimensionale Inseln entlang $[3\bar{3}2]$ . . . . .	140
B.2 Eindimensionale Inseln entlang $[1\bar{1}0]$ . . . . .	144
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>145</b>
<b>Eigene Veröffentlichungen</b>	<b>157</b>
<b>Danksagung</b>	<b>159</b>



## Liste häufig verwendeter Akronyme

AFM	<i>atomic force microscopy</i> , Rasterkraftmikroskopie
BEP	<i>beam equivalent pressure</i> , Druck im Molekularstrahl
DFT	Dichtefunktional-Theorie
ECR	<i>electron counting rule</i> , Elektronen-Zählregel
HREM	<i>high-resolution electron microscopy</i> , hochaufgelöste Elektronenmikroskopie
IBA	<i>ion bombardment and annealing</i> , Ionenbeschuß und Ausheilen
I-V-Messungen	Intensität von LEED-Reflexen in Abhängigkeit von der Energie der Elektronen (Beschleunigungsspannung)
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	Monolagen
PL	Photolumineszenz
PLE	<i>photo luminescence excitation</i> , Photolumineszenzanregung
QD	<i>quantum dot</i> , Quantenpunkt
QW	<i>quantum well</i> , Quantenfilm
QWR	<i>quantum wire</i> , Quantendraht
RHEED	<i>reflection high-energy electron diffraction</i> , Beugung hochenergetischer Elektronen
SPA-LEED	<i>spot profile analysis-LEED</i> , hochaufgelöstes LEED
SEM	<i>scanning electron microscopy</i> , Rasterelektronenmikroskopie
STM	<i>scanning tunneling microscopy</i> , Rastertunnelmikroskopie
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
UHV	Ultrahochvakuum

# 1 Einleitung

Die größten technologischen Umwälzungen der letzten vierzig Jahre sind auf die rasante Entwicklung und zunehmende Verbreitung von Computern und elektronischen Geräten zurückzuführen. Dieser Fortschritt basiert ganz wesentlich auf der exakten Steuerung der Zusammensetzung von Halbleitern und ihrem gezielten Aufbau zu komplexen Strukturen in Mikrometergröße. Obwohl Silizium nach wie vor das bei weitem wichtigste Ausgangsmaterial ist, werden in steigendem Maße III-V-Halbleiter verwendet. Diese besitzen im Gegensatz zu Silizium meist eine direkte Bandlücke und sind daher für optoelektronische Anwendungen geeignet. Der bedeutendste derartige Halbleiter ist Galliumarsenid, auf dem Aluminiumarsenid und jede beliebige ternäre Verbindung aus Aluminium, Gallium und Arsen epitaktisch aufgewachsen werden können. Durch die Wahl der Zusammensetzung läßt sich dabei die Größe der Bandlücke kontrollieren (englisch *band gap engineering*). Ein weiterer Vorteil gegenüber Silizium ist die höhere Beweglichkeit der Ladungsträger, die die Entwicklung von Hochfrequenz-Bauelementen ermöglicht. Galliumarsenid ist daher ein wichtiges Basismaterial für die Telekommunikationsindustrie.

Eine notwendige Voraussetzung für die Produktion hochwertiger Bauelemente ist die genaue Kontrolle der Abmessungen und Zusammensetzungen der einzelnen Schichten. Ausgangspunkt ist dabei stets eine Oberfläche. Während der fortschreitenden Entwicklung sind die Abmessungen immer kleiner geworden. Der Anteil der Ober- und Grenzflächen und damit ihr Einfluß auf die Qualität der Bauelemente ist dadurch zunehmend größer geworden. Grundlegendes Wissen über die Eigenschaften von Oberflächen ist daher wesentlich für Fortschritte auf diesem Gebiet.

Auch in der Oberflächenphysik ist Galliumarsenid nach Silizium der am häufigsten untersuchte Halbleiter. Diese beiden Materialien sind die Standardtypen eines Elementar- und eines Verbindungshalbleiters. Die niederindizierten Oberflächen

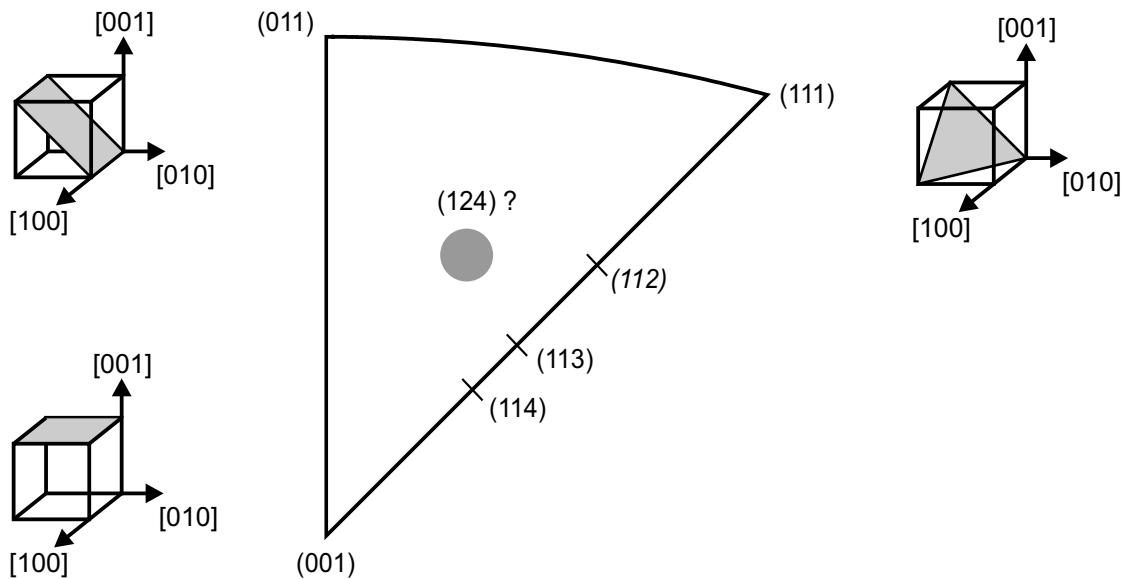


Abbildung 1.1: Stereografisches Dreieck mit den bekannten stabilen GaAs-Oberflächen und der hier ebenfalls betrachteten instabilen GaAs(112)-Fläche. Die Lage der drei niederindizierten Ebenen innerhalb des kubischen Kristalls ist in den kleinen Skizzen durch die grauen Flächen angegeben.

GaAs(001), GaAs(110) und GaAs(111) wurden ausgiebig untersucht, und aus diesen Studien wurden generelle Prinzipien für die Struktur von Halbleiteroberflächen abgeleitet [1]. Von allen anderen, höherindizierten Flächen wird angenommen, daß sie in niederindizierte zerfallen. Lediglich von den GaAs(113)- und GaAs(114)-Oberflächen ist bekannt, daß sie stabil sind [2–5]. Die Lage der verschiedenen Raumrichtungen zueinander ist aus dem stereografischen Dreieck ersichtlich (Abb. 1.1). Oberflächen aus dessen Inneren, die also sehr weit entfernt von den niederindizierten Ebenen liegen, wurden noch gar nicht untersucht. Durch das Studium neuer, komplizierterer Oberflächen kann die Allgemeingültigkeit der erwähnten Prinzipien überprüft und somit das Verständnis von Halbleiteroberflächen im allgemeinen verbessert werden.

Neben dem Streben nach grundlegenden Erkenntnissen gibt es für die Untersuchung von höherindizierten Oberflächen eine weitere, anwendungsnähere Motivation. Eines der Gebiete, auf denen die Forschungstätigkeit in den letzten Jahren enorm zugenommen hat, ist die Untersuchung und Nutzung von elektronisch niederdimensionalen Halbleiterstrukturen (Übersichten in Ref. [6–18]). Durch Einbetten einer Halbleiterstruktur in ein anderes Halbleitermaterial mit einer größeren Bandlücke wird die Bewegungsfreiheit der Ladungsträger eingeschränkt. Wird die eingebettete Halbleiter-

struktur so weit verkleinert, daß ihre Abmessungen in den Bereich der de Broglie-Wellenlänge der Festkörperelektronen gelangen, kommen Quanteneigenschaften zum Tragen, und die Dimensionalität der Struktur wird reduziert. Systeme, in denen sich die Ladungsträger noch in zwei Richtungen (Dimensionen) bewegen können, werden als Quantenfilm bezeichnet (englisch *quantum well*, QW), eindimensionale als Quantendrähte (*quantum wire*, QWR) und nulldimensionale als Quantenpunkte (*quantum dot*, QD). Durch diese Verringerung der Dimensionalität wird die elektronische Zustandsdichte drastisch verändert. In Quantenpunkten können die Elektronen nur noch diskrete Zustände einnehmen, und die Zustandsdichte ähnelt der Summe mehrerer Deltafunktionen. Die Quantenpunkte können also als große künstliche Atome aufgefaßt werden. Abgesehen von der faszinierenden Physik, die an solchen Strukturen studiert werden kann, besitzen sie auch ein enormes Potential für technologische Anwendungen. So weisen Quantenpunkt-Laser besonders niedrige Schwellströme und eine hohe Temperaturstabilität auf.

Sowohl für die Grundlagenwissenschaft als auch für die möglichen Anwendungen ist von besonderer Bedeutung, daß aufgrund ihrer Quantennatur die Eigenschaften dieser niederdimensionalen Strukturen entscheidend durch ihre Form und Größe beeinflusst werden. Dies eröffnet z. B. die prinzipielle Möglichkeit, die Wellenlänge von Lasern einzustellen. Experimentelle Untersuchungen ergaben, daß höherindizierte Flächen an der Form von InAs/GaAs-Quantenpunkten beteiligt sind, und zwar insbesondere solche aus dem Inneren des stereografischen Dreiecks [19, 20]. Um die Eigenschaften der Quantenpunkte modellieren zu können, sind also genaue Informationen über diese Oberflächen erforderlich.

Die Quantenpunkte müssen einen Durchmesser von etwa 10 nm besitzen, damit es in ihnen gebundene diskrete Zustände gibt, deren Abstand größer als die thermische Energie der Elektronen ist. Diese winzigen Abmessungen lassen sich mit konventionellen, lithografischen Techniken nicht verwirklichen. Zum einen ist deren Auflösung begrenzt, zum anderen sind die so erzeugten Grenzflächen nicht glatt genug. Ein vielversprechenderer Weg zur Herstellung von niederdimensionalen Strukturen ist daher deren selbstorganisiertes Wachstum. Dabei werden thermodynamische und/oder kinetische Effekte genutzt, damit sich die gewünschten Strukturen sozusagen von selbst bilden. Um diese Vorgänge besser zu verstehen und somit die Bildung der Quantenpunkte erfolgreicher beeinflussen zu können, ist es ebenfalls notwendig, die dabei beteiligten Oberflächen zu untersuchen.

Eine direkte Anwendungsmöglichkeit von höherindizierten Oberflächen ist ihre Verwendung als Substrat von Halbleiter-Bauelementen. Die Eigenschaften von Bauelementen hängen von der Orientierung des Substrates ab. Neue stabile Oberflächen bieten also stets das Potential für neuartige Bauelemente. So wurden auf GaAs(113)A z. B. Quantenpunkte [21] und Quantendrähte [22] von ausgezeichneter Qualität erzeugt, und auf GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B richteten sich Quantenpunkte selbstorganisiert zu regelmäßigen Anordnungen aus [23–25].

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Untersuchung von GaAs-Oberflächen im Inneren des stereografischen Dreiecks. Vor der Charakterisierung von Oberflächen müssen diese zunächst in hoher Qualität präpariert werden. Dazu wurden für diese Arbeit mit Molekularstrahlepitaxie (englisch *molecular beam epitaxy*, MBE) dünne Schichten homoepitaktisch auf GaAs-Substraten unterschiedlicher Orientierungen abgeschieden. Die so erzeugten Oberflächen wurden in situ mit einem Rastertunnelmikroskop (*scanning tunneling microscope*, STM) analysiert, das im Rahmen der vorliegenden Arbeit in Zusammenarbeit mit J. Márquez [26] in Betrieb genommen wurde. Zusätzlich wurde für die Oberflächenuntersuchungen die Beugung hoch- (*reflection high-energy electron diffraction*, RHEED) und niederenergetischer Elektronen (*low-energy electron diffraction*, LEED) eingesetzt.

Der Ausgangspunkt dieser Arbeit waren mit GaAs(112)A und GaAs(113)A zwei bereits vorher studierte höherindizierte Oberflächen, die auf einer der Seiten des stereografischen Dreiecks liegen (vgl. Abb. 1.1). GaAs(112)A zerfällt in Flächen niedrigerer Energie [27]. Aufgrund dieser Ergebnisse wurde vermutet, daß GaAs(124) oder eine nahe gelegene Oberfläche stabil sein könnte. In Ergänzung der vorherigen Studien wurden die GaAs(112)-Flächen für die vorliegende Arbeit erstmals in situ mit einer Realraummethode untersucht (Kapitel 4). GaAs(113)A war dagegen die erste bekannte stabile höherindizierte Oberfläche. Da sie bereits mit STM untersucht [2] und ihre atomare Struktur berechnet [3] wurde, war das Ziel der hier vorgestellten Experimente zunächst, diese Resultate zu reproduzieren (Abschnitt 5.2). Danach wurden auf dieser Oberfläche anisotrope Strukturen auf der Größenskala 100–1000 nm analysiert (Abschnitte 5.3 und 5.4). Die Ergebnisse motivierten die Untersuchung von Oberflächen, die nahe (113) im Inneren des stereografischen Dreiecks liegen. Um viele verschiedene Flächen in diesem Bereich einschließlich derjenigen um (124) zugänglich zu machen, wurde eine Methode entwickelt, in GaAs(113)A-Substrate sphärische Mulden zu schleifen (Abschnitt 5.5). Diese Studie führte zu der Entdeckung einer neuen

stabilen Oberfläche. Aufbauend auf den Ergebnissen aus der Mulde wurden planare Proben entsprechender Orientierung untersucht. Daraus ergab sich die zentrale Erkenntnis der vorliegenden Arbeit, daß mit GaAs(2 5 11) eine bisher unbekannte stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks existiert (Kapitel 6). Mit Hilfe dieser Resultate konnten die Form und Bildung von InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten besser verstanden werden (Abschnitt 6.4).

Die Darstellung wurde gegliedert nach den Orientierungen der jeweiligen Substrate. Einerseits bauen die Experimente in der gewählten Reihenfolge aufeinander auf, andererseits wurden Ergebnisse oft erst unter der Berücksichtigung von späteren Versuchen vollständig verstanden. Daher ließ es sich in den Diskussionsabschnitten manchmal nicht vermeiden, auf einzelne Resultate aus nachfolgenden Kapiteln zu verweisen.

# 2 Grundlagen

## 2.1 GaAs-Oberflächen

### 2.1.1 Der GaAs-Kristall

Galliumarsenid ist ein Verbindungshalbleiter, dessen Atome im kubischen Zinkblendegitter angeordnet sind (Abb. 2.1). Die Gitterkonstante  $a$  beträgt  $5,65 \text{ \AA}$ . Jedes Atom ist tetraedrisch von vier Atomen des jeweils anderen Elements umgeben. Gallium besitzt drei Valenzelektronen, Arsen fünf, so daß jede Bindung im Volumen mit zwei Elektronen gefüllt wird. Da die Elektronegativität von Arsen 20% höher ist, besitzen die Bindungen einen teilweise ionischen Charakter.

Ganz allgemein wird eine Oberfläche durch Aufschneiden des Volumenkristalls erzeugt. Streicht man analog hierzu aus einem Volumenkristallmodell die entsprechenden Atome, erhält man die sogenannte ideale Oberflächenstruktur (englisch *bulk-truncated*). Diese tritt jedoch real nicht auf, wie weiter unten ausführlich erläutert wird. Je nachdem in welcher Richtung der Volumenkristall zerschnitten wird, werden Oberflächen unterschiedlicher Orientierung freigelegt. Dabei wird zwischen nieder- und höherindizierten Oberflächen unterschieden. Erstere werden freigelegt, wenn der Kristall entlang von Ebenen mit hoher Symmetrie aufgeschnitten wird. Für GaAs sind dies die Flächen (100), (110) und (111). Die Bezeichnung ergibt sich aus den niedrigen Werten der Miller-Indizes dieser Orientierungen. Alle anderen Flächen werden als höherindiziert bezeichnet.

Neben dieser eher formalen Klassifizierung von Oberflächen anhand ihrer Orientierung gibt es eine weitere, die sich nach der Stabilität der Oberfläche richtet. Beim Aufschneiden des Volumenkristalls werden Bindungen aufgebrochen. Die dadurch entstehenden nicht abgesättigten Bindungen der Oberflächenatome werden hängende Bin-

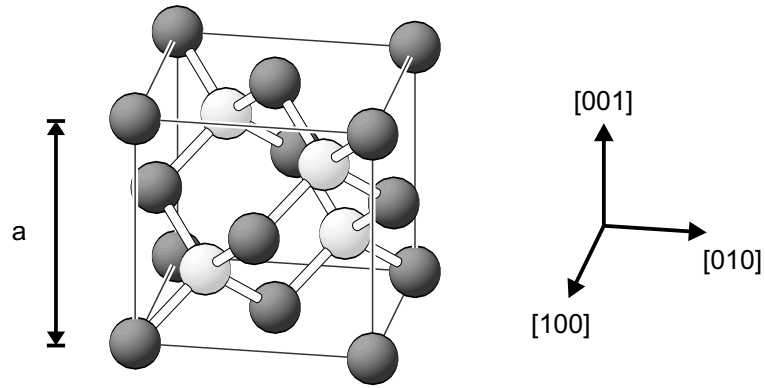


Abbildung 2.1: Volumenkristallstruktur von GaAs.

dungen genannt (englisch *dangling bond*). Da die Elektronen der weggeschnittenen Bindungspartner fehlen, sind die hängenden Bindungen nur teilweise gefüllt. Dies ist eine energetisch sehr ungünstige Situation. Aus diesem Grund besitzt eine Oberfläche willkürlicher Orientierung in der Regel eine hohe Energie. Daher sind viele Oberflächen instabil und zerfallen in benachbarte Flächen mit niedrigerer Energie [28] (Abb. 2.2(a)). Obwohl sich dabei die Gesamtoberfläche zwangsläufig vergrößert, wird die Gesamtenergie abgesenkt. Dieser Vorgang wird als Facettierung bezeichnet. Wenn die Energien von benachbarten Oberflächen bekannt sind, kann mit Hilfe der Herring-Konstruktion [29] bestimmt werden, ob durch eine Facettierung die Energie abgesenkt werden kann. Da die dafür notwendige Berechnung von Oberflächenenergien sehr aufwendig ist, wurde dieses Verfahren für Galliumarsenid nur für die (112)- und (113)-Flächen tatsächlich angewandt [3]. Stabile Oberflächen werden auch singulär genannt. Die niederindizierten Oberflächen sind singulär und wurden ausführlich untersucht (Übersicht z. B. in Ref. [1, 30]). Ihre Oberflächenenergien wurden mit Hilfe der Dichtefunktional-Theorie (DFT) berechnet [31] (Tabelle in Anhang A). Lange Zeit wurde angenommen, daß nur die niederindizierten Oberflächen stabil sind. Erst in letzter Zeit wurden mit GaAs(113) und GaAs(114) zwei höherindizierte Oberflächen gefunden, die nicht facettieren [2–5].

Einen Sonderfall stellen die Vizinalflächen dar. Diese Oberflächen liegen in unmittelbarer Nähe (etwa  $\leq 5^\circ$ , eine genaue Definition gibt es nicht) einer stabilen Oberfläche. Daher bildet sich auf ihnen eine Stufenfolge aus (Abb. 2.2(b)), wobei die Richtung der Stufen durch die Richtung der Verkippung und die mittlere Breite der Terrassen durch die Größe der Verkippung beeinflusst wird.



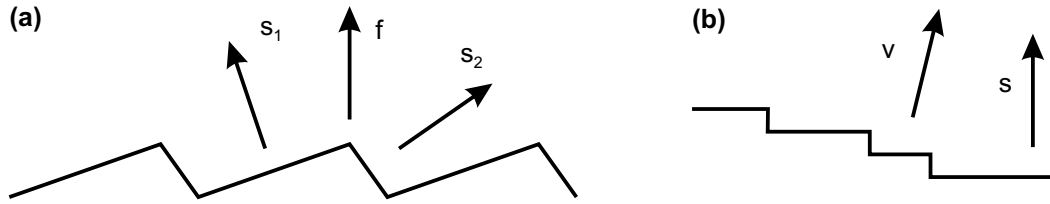


Abbildung 2.2: (a) Facettierte Oberfläche. Die ideale Oberfläche  $f$  zerfällt in die benachbarten Flächen  $s_1$  und  $s_2$ . (b) Vizinalfläche. Die Orientierung der idealen Oberfläche  $v$  weicht um einen kleinen Winkel von der Orientierung der stabilen Oberfläche  $s$  ab.

Eine übersichtliche Darstellung der verschiedenen Orientierungen läßt sich durch eine stereografische Projektion in die Ebene erreichen (ausführlich z. B. in Ref. [32]). Die stereografische Projektion ist winkeltreu, so daß sich Winkel zwischen verschiedenen Flächen direkt bestimmen lassen. Aufgrund der Kristallsymmetrie sind viele Ebenen äquivalent, insbesondere solche, deren Indizes durch zyklisches Vertauschen auseinander hervorgehen [(11n) entspricht (n11)]. Daher genügt es für viele Zwecke, die Projektion auf das stereografische Dreieck zwischen (001), (011) und (111) zu beschränken (Abb. 1.1 auf S. 11).

Die drei niederindizierten Flächen an den Ecken des Dreiecks bilden eine Basis der Kristallstruktur. Alle höherindizierten Oberflächen lassen sich aus diesen drei Flächen aufbauen. Orientierungen, die auf den Seiten des Dreiecks liegen, sind Kombinationen der Flächen an den jeweiligen Ecken. So sind z. B. die Flächen mit den Miller-Indizes (11n) aus (111) und (001) zusammengesetzt (vgl. Abb. 5.1(b) auf S. 56). Aufgrund dieser Überlegungen sieht man auch leicht, daß  $(1\ 1\ 25) = 1 \cdot (111) + 24 \cdot (001)$  vizinal zu (001) liegt. Allgemeingültig ist das in diesem Absatz Dargestellte jedoch nur für die idealen Oberflächen. Auf GaAs(113) etwa bildet sich eine stabile Struktur, die unabhängig von niederindizierten Oberflächen ist [2, 3].

Als Zone bezeichnet man die Menge aller Flächen, die durch Drehung um eine bestimmte Achse ineinander übergehen. Die Richtung dieser Achse gibt der Zone ihren Namen. Untersuchungen auf Oberflächen der  $[\bar{1}10]$ -Zone waren der Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit. In Abb. 2.3 ist diese Zone dargestellt. In ihr liegen die Ebenen mit den Indizes (11n). Die Winkel zwischen diesen Flächen sind in Tab. 2.1 zusammengefaßt.

Bei Galliumarsenid sind die beiden durch Aufschneiden eines Kristalls erzeugten Oberflächen, also Vorder- und Rückseite, in der Regel nicht äquivalent, da der Stoff aus

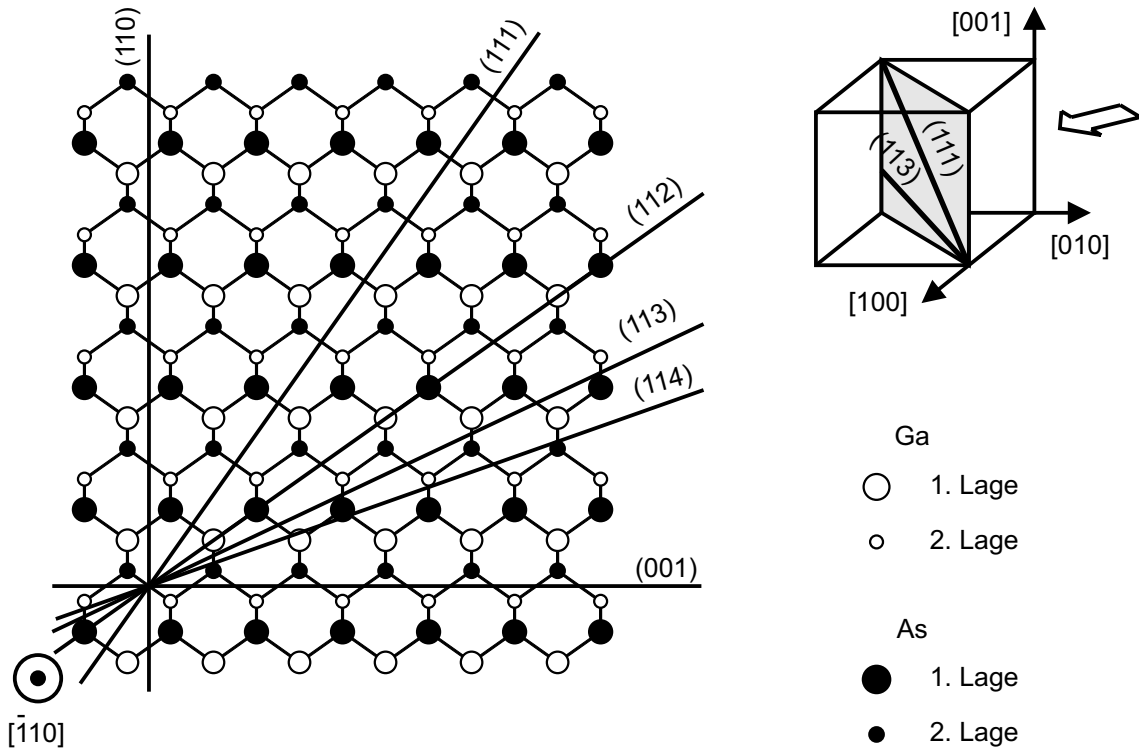


Abbildung 2.3: Die  $[\bar{1}10]$ -Zone. Der Blick ist auf die  $(\bar{1}10)$ -Oberfläche gerichtet (graue Fläche in der kleinen Skizze). Die  $(11n)$ -Ebenen werden dadurch in Seitenansicht dargestellt.

Tabelle 2.1: Winkel zwischen den Ebenen in der  $[\bar{1}10]$ -Zone (in Grad)

	(110)	(111)	(112)	(113)	(114)	(001)
(110)	0,0	35,3	54,7	64,8	70,5	90,0
(111)	35,3	0,0	19,5	29,5	35,3	54,7
(112)	54,7	19,5	0,0	10,0	15,8	35,3
(113)	64,8	29,5	10,0	0,0	5,8	25,2
(114)	70,5	35,3	15,8	5,8	0,0	19,5
(001)	90,0	54,7	35,3	25,2	19,5	0,0

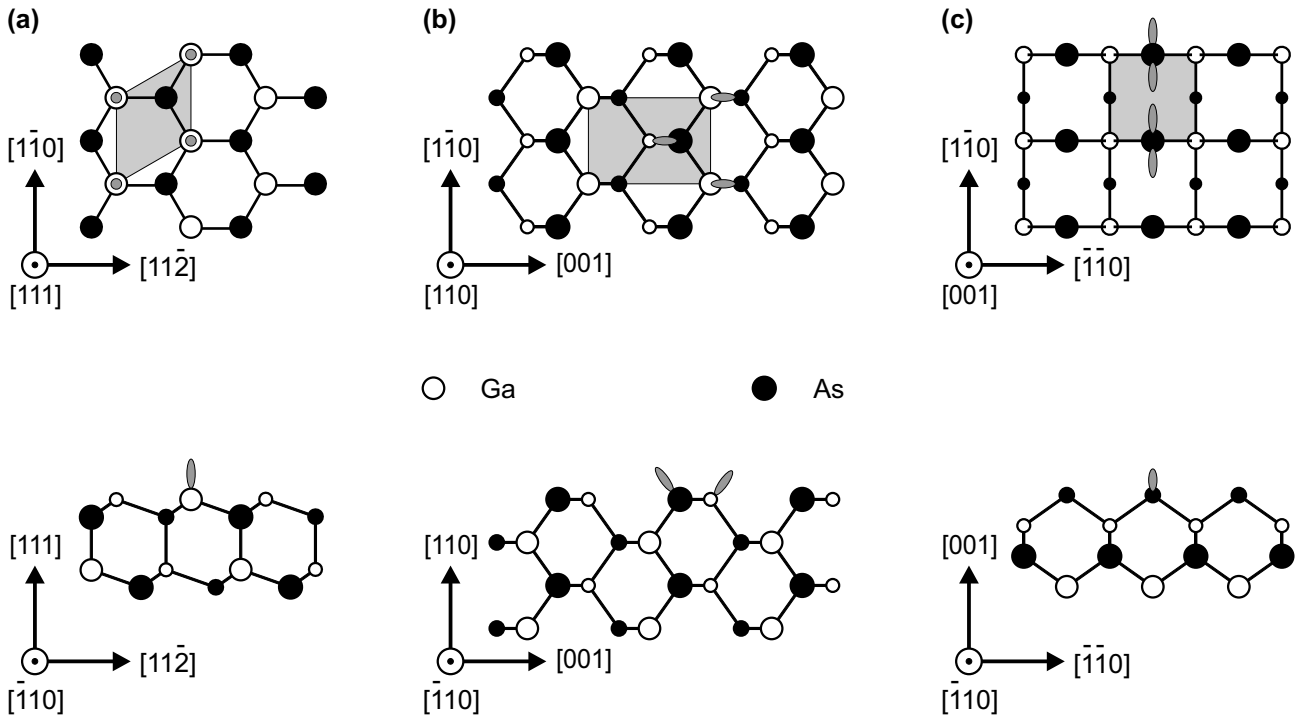


Abbildung 2.4: Die idealen niederindizierten GaAs-Oberflächen in Aufsicht (oben) und Seitenansicht (unten). Die grauen Flächen sind die Einheitszellen, hängende Bindungen sind als Ellipsen dargestellt, und kleinere Kugeln entsprechen Atomen in tieferliegenden Lagen. (a) (111). Die Oberflächenatome sind hexagonal angeordnet. Jedes von ihnen besitzt eine hängende Bindung, die senkrecht aus dem Kristall herausragt. (b) (110). Die Oberflächenatome bilden Zickzackketten entlang  $[1\bar{1}0]$ , in denen sich Gallium und Arsen abwechseln. An jedem dieser Atome gibt es eine hängende Bindung. Diese sind gegen  $[110]$  alle um denselben Winkel geneigt. (c) (001), As-terminiert. Die Oberflächenatome besitzen jeweils zwei hängende Bindungen und sind quadratisch angeordnet.

zwei verschiedenen Elementen besteht. Die verschiedenen möglichen Konfigurationen werden anhand von Abb. 2.4 diskutiert, in der die Strukturen der idealen niederindizierten Oberflächen dargestellt sind.

- In  $[111]$ -Richtung (Unterabb. (a)) wechseln sich Lagen ab, die vollständig entweder aus Gallium oder aus Arsen bestehen. Da eine der vier tetraedrisch angeordneten Bindungen jedes Atoms parallel zu  $[111]$  liegt, sind Vorder- und Rückseite nicht äquivalent. Aufgrund der unterschiedlichen Elektronegativitäten von Gallium und Arsen bildet sich in dieser Richtung ein Dipolmoment aus. Daher ist die ideale Oberfläche polar. Die (111)-Oberfläche ist Ga-terminiert und wird auch A-Seite genannt. Die entgegengesetzte  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ -Oberfläche ist dagegen As-terminiert

und wird als B-Seite bezeichnet. Durch diese Konvention wird das Vorzeichen der [111]-Richtung und damit des gesamten Koordinatensystems im Zinkblendekristall festgelegt. Ausgehend von der (111)-Fläche gibt es zwei Methoden, anderen Ebenen A- und B-Seiten zuzuordnen:

- Diejenige Seite, die in der obersten Lage Gallium enthält, wird mit A bezeichnet.
- Diejenige Seite, die in der Nähe von (111)A liegt, wird mit A bezeichnet.

Die beiden Möglichkeiten können zu unterschiedlichen Ergebnissen führen; eindeutig ist nur die genaue Richtungsangabe mit Hilfe der Vorzeichen der Miller-Indizes. Die vorliegende Arbeit folgt der zweiten Konvention.

- Die (110)-Oberfläche (Unterabb. (b)) enthält in jeder Lage gleich viele Ga- und As-Atome. Diese Fläche ist daher stöchiometrisch. Zwei der Bindungen jedes Atoms liegen in der (110)-Ebene, die anderen beiden ragen unter demselben Winkel zu [110] aus der Lage nach unten und nach oben heraus. Somit heben sich die Dipolmomente auf, und diese Fläche ist unpolar. Vorder- und Rückseite sind äquivalent, und eine Unterscheidung in A- und B-Seite ist überflüssig.
- In [001]-Richtung (Unterabb. (c)) wechseln sich wie in [111]-Richtung vollständige Ga- und As-Lagen ab. Wegen der Symmetrie der Bindungen bildet sich im Volumenkristall jedoch kein Dipolmoment aus. Durch das Aufschneiden des Kristalls wird diese Symmetrie aber verletzt, so daß die (001)-Oberfläche dennoch polar ist. Trotzdem ist aufgrund der Bindungssymmetrie eine Unterscheidung in A- und B-Seite sinnlos. Statt dessen spricht man von einer Ga- oder As-terminierten (001)-Oberfläche. Da im Experiment üblicherweise unter As-reichen Bedingungen gearbeitet wird, wird in der Regel die As-terminierte Oberfläche dargestellt.
- Da alle anderen Flächen sich aus den drei niederindizierten aufbauen lassen, sind sie polar. Darunter gibt es Flächen wie z. B. (112), die zwar stöchiometrisch sind, deren Vorder- und Rückseite sich aber trotzdem unterscheiden (vgl. Abb. 4.1 auf S. 50).

### 2.1.2 Prinzipien der Struktur von Halbleiter-Oberflächen

Weiter oben wurde bereits erwähnt, daß die ideale Oberflächenstruktur nicht auftritt, da sie wegen der gebrochenen Bindungen eine hohe Energie besitzt. Abgesehen von einer Facettierung gibt es zwei Umordnungsprozesse, durch die die Energie der Oberfläche abgesenkt werden kann:

- Bei einer *Relaxation* ändern sich die Positionen der Oberflächenatome, wodurch andere Bindungslängen und -winkel entstehen. Dies passiert auf GaAs(110) [1] (Abb. 2.5): Gallium rückt etwas in die Oberfläche hinein, Arsen etwas heraus.
- Bei einer *Rekonstruktion* werden Bindungen gebrochen und/oder zusätzlich gebildet. Dabei können auch Atome entfernt (Fehlstellen) oder hinzugefügt (Adatome) werden, wodurch sich oft die chemische Zusammensetzung der Oberfläche ändert. Meistens wird durch diesen Prozeß die Symmetrie der Oberfläche erniedrigt. Kann man die Basisvektoren der rekonstruierten Oberfläche als Vielfache  $m$  und  $n$  der Basisvektoren der idealen Oberfläche wählen, so spricht man von einer  $(m \times n)$ -Rekonstruktion. Alle stabilen GaAs-Oberflächen außer (110) rekonstruieren. Als Beispiel ist die GaAs(001)- $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion [1, 33] in Abb. 2.6 gezeigt.

Aus den vielen Studien zu verschiedenen Halbleiteroberflächen wurden grundlegende Prinzipien extrahiert, die die Oberflächenstrukturen beschreiben [1]. Für Verbindungshalbleiter sind dies:

1. Es bildet sich diejenige Oberflächenstruktur aus, die in einem Minimum der freien Energie liegt und kinetisch während der Präparation zugänglich ist.
2. Die Anzahl der hängenden Bindungen wird minimiert.
3. Hängende Bindungen werden abgesättigt.

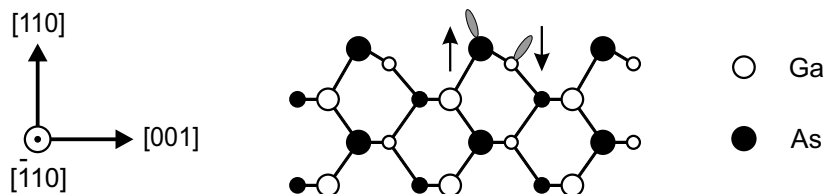


Abbildung 2.5: Die relaxierte GaAs(110)-Oberfläche in der Seitenansicht.

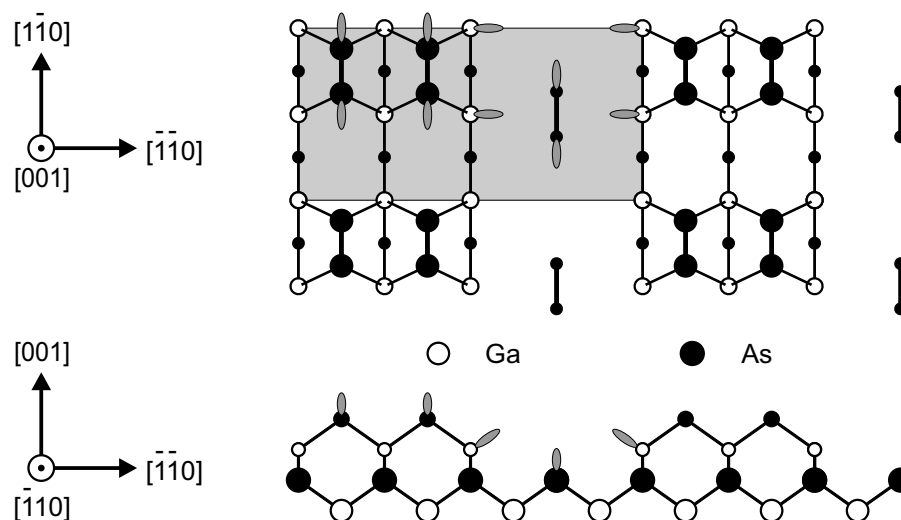


Abbildung 2.6: Die  $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion der GaAs(001)-Oberfläche. Oben: Aufsicht, unten: Seitenansicht.

4. Es dürfen auf der Oberfläche keine überschüssigen Ladungen vorliegen.
5. Es bildet sich eine halbleitende Oberflächen-Bandstruktur aus, d. h., es gibt keine nur teilweise gefüllten Bänder. Dies gilt streng für alle eindimensionalen Systeme (Peierls-Instabilität [34]), aber auch für sehr viele zweidimensionale Systeme (also Oberflächen).

Die Punkte 3–5 werden automatisch erfüllt, wenn die Oberflächenstruktur der Elektronen-Zählregel (englisch *electron counting rule*, ECR) [35–40] genügt.<sup>1</sup> Diese einfache Regel besagt, daß alle hängenden Bindungen des elektropositiven Elements (Ga) leer und alle hängenden Bindungen des elektronegativen Elements (As) gefüllt sein sollen. Wenn sich die zur Verfügung stehenden Elektronen so verteilen lassen, erfüllt eine Struktur die ECR. Gezählt wird auf folgende Weise: Es werden alle Bindungen berücksichtigt, die nicht volumenartig (Ga–As) sind, also alle hängenden Bindungen und alle Bindungen zwischen Atomen desselben Elements (Ga–Ga, As–As). Im Volumen hat jedes Atom vier Bindungen. Die drei Elektronen des Gallium bzw. fünf des Arsen werden also so verteilt, daß für jede Bindung dieser Atome *im Mittel*  $3/4$  (Ga) bzw.  $5/4$  (As) zur Verfügung stehen [35]. Hängende Bindungen des Gallium sollen leer bleiben; die des Arsen benötigen dagegen zwei Elektronen, um gefüllt zu werden. Für

<sup>1</sup>Mehrere Autoren wandten die Prinzipien der ECR an, bevor sie klar als Regel formuliert wurden. Die Verallgemeinerung geht auf Harrison [36] und Pashley [39] zurück.

Tabelle 2.2: Mittlere Anzahl an Elektronen in den verschiedenen Bindungstypen gemäß der Elektronen-Zählregel

	Bindungstyp	Ga	As
liefert	jeder	3/4	5/4
benötigt	Bindung an Ga	1	5/4
	Bindung an As	3/4	1
	hängende Bindung	0	2

jede Bindung zwischen gleichartigen Atomen müssen ebenfalls zwei Elektronen aufgebracht werden. Dieses Verfahren ist in Tab. 2.2 zusammengefaßt und wird nun auf zwei Beispiele angewandt.

Die Einheitszelle von GaAs(110) enthält jeweils eine hängende Bindung des Gallium und des Arsen (Abb. 2.4(b)). Die 3/4 Elektronen des Gallium ergeben zusammen mit den 5/4 Elektronen des Arsen gerade zwei Elektronen, mit denen die As-Bindung gefüllt werden kann. Als Folge dieses Ladungstransfers rehybridisiert das Gallium zu einer  $sp^2$ -Konfiguration und nimmt eine beinahe planare Position ein (Abb. 2.5). Das Arsen rehybridisiert zu  $s^2p^3$  und rückt etwas aus der Oberfläche heraus in eine pyramidale Konfiguration. Da sich ein energetisch günstiger Zustand so einfach erreichen läßt, ist (110) die natürliche Spaltfläche des GaAs-Kristalls.

Auf der As-terminierten idealen GaAs(001)-Oberfläche gibt es in der Einheitszelle zwei hängende Bindungen des Arsen (Abb. 2.4(c)). Die zusammen 10/4 Elektronen reichen nicht aus, um beide Bindungen zu füllen. Diese Struktur verletzt also die ECR und tritt in der Realität auch nicht auf. Statt dessen rekonstruiert die Oberfläche in Konfigurationen, die die ECR erfüllen. Auf GaAs(001) wurden mehr als zehn unterschiedliche Rekonstruktionen beobachtet, die sich je nach Präparationsbedingungen bilden [41, 42]. Diejenige mit dem größten Stabilitätsbereich ist die  $\beta 2(2 \times 4)$ -Rekonstruktion (Abb. 2.6). Auf ihr wird auch typischerweise mit Molekularstrahlepitaxie gewachsen. Das charakteristische Strukturelement sind Dimere, die sich aus benachbarten As-Atomen bilden. Dimerisierung ist allgemein eine wichtige Möglichkeit für Oberflächen, die Anzahl der hängenden Bindungen zu reduzieren. Jedes vierte Dimer fehlt, und mit den Elektronen der so erzeugten hängenden Ga-Bindungen können alle As-Bindungen aufgefüllt werden. Die genaue Aufschlüsselung der Elektronenbeiträge ist in Tab. 2.3 gegeben.

## 2 Grundlagen

Tabelle 2.3: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf GaAs(001)- $\beta 2(2 \times 4)$

Bindungstyp	liefert	benötigt
4 Ga häng. Bind.	$4 \cdot \frac{3}{4} = 3$	$4 \cdot 0 = 0$
6 As häng. Bind.	$6 \cdot \frac{5}{4} = 7\frac{1}{2}$	$6 \cdot 2 = 12$
3 As-As	$3 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 7\frac{1}{2}$	$3 \cdot 2 = 6$
Summe	18	18

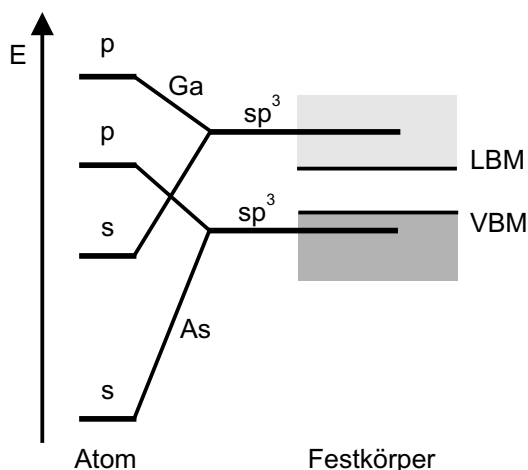


Abbildung 2.7: Energieschema für Ga, As und GaAs (nach Ref. [36]).  $p$ ,  $s$  und  $sp^3$  sind Atomorbitale.  $LBM$  ist das Leitungsband-Minimum und  $VBM$  das Valenzband-Maximum.

Die Begründung für die Elektronen-Zählregel basiert auf einer Arbeit von Harrison [36]. Er berechnete die Energien der Orbitale des Ga- und des As-Atoms und durch Linearkombination daraus die Energien der  $sp^3$ -Hybridorbitale (Abb. 2.7). Im GaAs-Kristall rehybridisieren beide Elemente in diese Konfiguration. Die Energie des Ga- $sp^3$ -Orbitals liegt im Leitungsband von GaAs, diejenige des As- $sp^3$ -Orbitals im Valenzband. Unter der Voraussetzung, daß die hängenden Bindungen an der Oberfläche die  $sp^3$ -Hybridisierung beibehalten, ist also zu verstehen, daß die hängenden Bindungen des Gallium leer und die des Arsen gefüllt sind.

Eine so simple Regel hat natürlich ihre Grenzen. Wie an dem Beispiel der Relaxation von GaAs(110) deutlich wird, stellt die Annahme, daß hängende Bindungen  $sp^3$ -Orbitalen entsprechen, eine starke Vereinfachung dar. Andere Beiträge zur Gesamtenergie, wie z. B. aus Verspannungen, werden gar nicht berücksichtigt. Dennoch erwies sich die ECR für GaAs als äußerst erfolgreich. Sie wird von allen Oberflächen, deren Struktur bestimmt wurde, erfüllt. Die wichtigste Ausnahme bildet die



GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )-( $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ )-Rekonstruktion. Da sie eine sehr große Einheitszelle besitzt, sind ab initio-Rechnungen auf ihr nach wie vor nicht durchgeführt worden.<sup>2</sup> Aufgrund ihrer Symmetrie kann sie die ECR nicht erfüllen [43]. Eine Erklärung für die Stabilität dieser Rekonstruktion wurde mit Hilfe von Rechnungen in der tight-binding-Näherung gegeben [44]. In dem Strukturmodell mit der niedrigsten Energie sind drei vierfach koordinierte Ga-Atome aneinander gebunden. Die überschüssige Ladung steckt in diesen Ga-Ga-Bindungen, die einen metallischen Charakter ähnlich wie in einem reinen Ga-Kristall besitzen. Daher können die hängenden Bindungen von Gallium und Arsen leer bzw. gefüllt sein, wie es von der ECR verlangt wird. Des Weiteren wurde auf der GaAs(113)-Oberfläche eine Struktur vorgeschlagen, die die ECR verletzt [45] (s. Abschnitt 5.1.2, S. 59). Hierzu liegen bisher jedoch nur wenige experimentelle Daten vor. Eindeutig belegte Verletzungen der ECR wurden auf GaSb(001) [46] und auf GaN [47] beobachtet. Bei den bekannten Ausnahmen von der ECR treten an der Oberfläche die Atome einer Sorte stark gehäuft aneinander gebunden auf. Unter diesen Bedingungen ähnelt die Oberflächenstruktur eher derjenigen des Volumenkristalls des entsprechenden, meist metallischen Elements.

Trotz ihrer Grenzen ist die ECR eine sehr wichtige Hilfe bei der Bestimmung neuer GaAs-Oberflächenstrukturen. Dabei wird wie folgt vorgegangen: Ausgehend von der idealen Oberfläche werden Modelle aufgestellt, die in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten sind. Modelle, die die ECR verletzen, werden nicht weiter berücksichtigt. Nimmt man Prinzip 2 (Minimierung der hängenden Bindungen) sowie die bekannten Strukturelemente wie Dimerisierung hinzu, bleibt oft nur ein Modell übrig. Stehen immer noch mehrere Modelle zur Diskussion, wird eine weitere Schwäche der ECR deutlich: Eine Entscheidung zwischen diesen Modellen ist auf ihrer Basis nicht möglich. Daher wurden zwei Ergänzungen zur ECR vorgeschlagen. Northrup und Froyen berücksichtigten als zusätzliches Kriterium die elektrostatische Energie, die sich aus dem von der ECR geforderten Ladungstransfer ergibt [48]. Damit erhielten sie für GaAs(001)-( $2 \times 4$ ) das richtige Ergebnis, daß das  $\beta 2$ -günstiger als das  $\beta$ -Modell ist. Eine weitergehende Regel wurde von Mirbt et al. vorgeschlagen [49]. In ihrem Modell werden verschiedene *Bindungen* (hängende Bindungen, Ga-Ga und As-As) gezählt, je nach Präparationsbedingungen (Ga-reich/As-reich) unterschiedlich

---

<sup>2</sup>Die Komplexität der Rechnungen steigt mit der Anzahl der Atome, die berücksichtigt werden müssen.

gewichtet und daraus die relative Oberflächenenergie abgeschätzt. Damit ließen sich die unterschiedlichen (bereits bekannten) Rekonstruktionen auf den niederindizierten GaAs-Oberflächen gut erklären. Für neue Strukturen wurde jedoch noch keine der beiden Ergänzungen verwendet.

Die beste Methode zur Bestimmung der Oberflächenenergie eines Strukturmodells sind ab initio-Rechnungen mit Hilfe der Dichtefunktional-Theorie in der Lokale-Dichte-Näherung (Übersicht in Ref. [50]). Anhand der Energiewerte kann aus konkurrierenden Modellen das günstigste ausgewählt werden. Dabei kann natürlich nicht ausgeschlossen werden, daß es noch ein weiteres, nicht betrachtetes Modell gibt, das eine noch niedrigere Energie besitzt. Dies gilt insbesondere dann, wenn keine experimentellen Daten vorliegen und daher keine Vorauswahl unter den Modellen getroffen werden kann.

## 2.2 Epitaktisches Kristallwachstum

### 2.2.1 Wachstumsmoden

Eine notwendige Voraussetzung für das Studium von Oberflächen ist die Präparation derselben in hoher Qualität. Eine der besten Methoden dafür ist das Abscheiden von dünnen Filmen des gewünschten Materials auf einem Substrat. Wenn bei diesem Vorgang eine kristallografische Beziehung zwischen der Kristallstruktur des Films und der des Substrats besteht, spricht man von epitaktischem Wachstum. Bestehen Substrat und Film aus dem gleichen Material, wird das Aufwachsen Homoepitaxie genannt, ansonsten Heteroepitaxie.

Je nach der Morphologie des wachsenden Films unterscheidet man phänomenologisch zwischen drei verschiedenen Wachstumsmodi, die in Abb. 2.8(a)–(c) schematisch dargestellt sind:

*Frank-van der Merwe:* Der Film wächst zweidimensional in vollständigen Lagen; bevor sich eine neue Lage bildet, wird die darunterliegende geschlossen (Lagenmodus, Unterabb. (a)).

*Vollmer-Weber:* Der Film benetzt das Substrat nicht; das aufgewachsene Material läuft zu dreidimensionalen Inseln zusammen (Inselmodus, Unterabb. (b)).

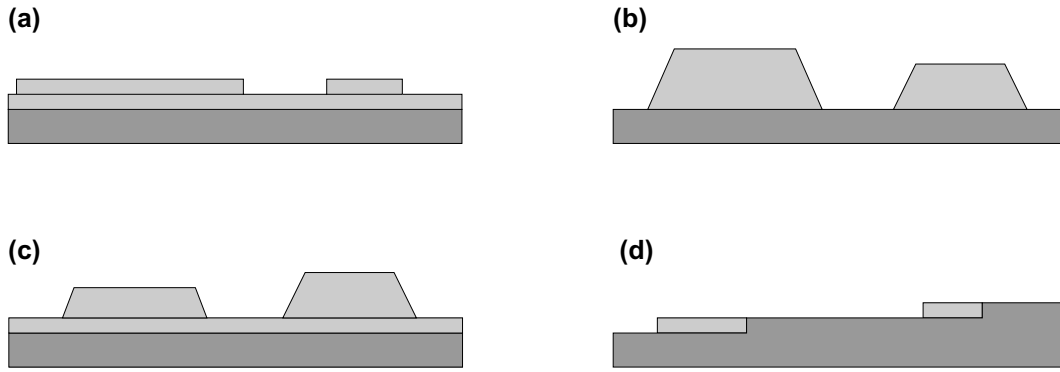


Abbildung 2.8: Die verschiedenen Wachstumsmodi. (a) Frank-van der Merwe. (b) Vollmer-Weber. (c) Stranski-Krastanow. (d) Stufenflußwachstum.

*Stranski-Krastanow*: Dies ist eine Mischform der beiden anderen Modi. Zunächst entstehen eine oder wenige komplette Lagen, danach dreidimensionale Inseln (Unterabb. (c)).

In erster Näherung können diese Modi durch eine Betrachtung der freien Energie der Grenzfläche  $\gamma_g$  und der freien Oberflächenenergien des Substrates  $\gamma_s$  und des Films  $\gamma_f$  verstanden werden. Wenn

$$\gamma_s \geq \gamma_f + \gamma_g$$

gilt, wächst der Film im Lagenmodus, sonst im Inselmodus. Der Stranski-Krastanow-Modus kann durch eine Gitterfehlpassung zwischen Substrat und Film verursacht werden. Dann nimmt mit steigender Filmdicke die Verspannungsenergie innerhalb des Films zu, und durch die Bildung von dreidimensionalen Inseln wird die Verspannung abgebaut. Dies geschieht z. B. im System InAs/GaAs, in dem eine Fehlanpassung von 7% besteht. Eine andere Beschreibung der Ausbildung der verschiedenen Modi basiert auf den Bindungsstärken zwischen den Atomen des Films und des Substrats. Das Wachstum erfolgt im Lagenmodus, wenn die Wechselwirkung zwischen Substrat und Film stärker ist als die der Atome innerhalb des Films, und im Inselmodus im umgekehrten Fall.

Für die Herstellung von hochwertigen Halbleiter-Bauelementen sind glatte Grenzflächen und damit glatte Wachstumsoberflächen notwendig. An rauen Grenzflächen existieren ungewollte Rekombinations- und Streuzentren, und die Dicke von Quantenfilmen wird durch raue Grenzflächen moduliert. Daher wird normalerweise für Anwendungen das Wachstum im Lagenmodus angestrebt. In letzter Zeit wurde jedoch

zunehmende Aufmerksamkeit dem Stranski-Krastanow-Prozeß entgegengebracht, da er für die selbstorganisierte Bildung von Quantenpunkten genutzt werden kann. Dazu wird das heteroepitaktische Wachstum nach wenigen Lagen abgebrochen, und die dreidimensionalen Inseln werden mit dem Material des Substrates überwachsen.

Eine Variante des Lagenwachstums ist das Stufenflußwachstum, das unter geeigneten Wachstumsbedingungen auf Vizinalflächen beobachtet wird (Abb 2.8(d)). Dabei wachsen neue Lagen nicht aus zweidimensionalen Inseln, die auf den Terrassen nukleieren. Statt dessen erfolgt der Einbau von Atomen nur an den Stufenkanten, so daß die Stufen über die darunterliegenden Terrassen „fließen“. Auf diese Weise können besonders glatte Oberflächen erzeugt werden, da zu keinem Zeitpunkt auf den Terrassen Inseln vorliegen.

Da während des Wachsens Atome oder Moleküle aus der Gasphase irreversibel in den festen Zustand übergehen, ist Epitaxie notwendigerweise ein Nicht-Gleichgewichtsprozeß. Daher kann die Art des Wachstums auch durch kinetische Effekte wie etwa Diffusion stark beeinflußt werden.

Detaillierte Ausführungen zu Wachstumsvorgängen sind in Ref. [51–55] dargestellt.

### 2.2.2 Molekularstrahlepitaxie (MBE)

Eines der wichtigsten Verfahren für das Abscheiden von dünnen Filmen ist die Molekularstrahlepitaxie (englisch *molecular beam epitaxy*, MBE). Der grundlegende experimentelle Aufbau ist in Abb. 2.9 gezeigt. Molekularstrahlen der aufzuwachsenden Elemente werden in einer Ultrahochvakuum-Umgebung auf die Probe gerichtet, die auf die Wachstumstemperatur geheizt wird. Zur Erzeugung der Molekularstrahlen werden die jeweiligen Elemente, aus denen der Film bestehen soll, in Knudsen-Zellen erhitzt. Dabei handelt es sich um Öfen, die mit einer Blende versehen sind. In den Öfen gehen Atome oder Moleküle des Füllmaterials in die Gasphase über, und durch die Blende wird die Richtung der entweichenden Teilchen auf einen Strahl beschränkt. Um schnelle Wachstumsunterbrechungen zu ermöglichen, sind die Öfen mit einer Klappe (englisch *shutter*) versehen. Die Flußverhältnisse der aufzudampfenden Materialien können durch Einstellen der Ofentemperaturen und damit der Dampfdrücke der jeweiligen Materialien variiert werden.

Mit MBE läßt sich die Schichtdicke der aufgewachsenen Filme bis hinunter zu atomaren Abständen kontrollieren. Auch die Zusammensetzung von Verbindungshalblei-

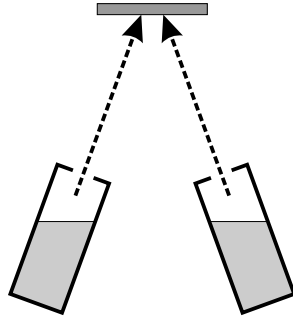


Abbildung 2.9: Experimenteller Aufbau für die Molekularstrahlepitaxie.

tern sowie die Dotierung lassen sich sehr genau einstellen. Ein großer Vorteil dieser Technik ist, daß im UHV der Einsatz von Elektronenbeugung (RHEED) zur Überprüfung der Oberflächenqualität und der Wachstumsrate möglich ist. Des weiteren können in entsprechenden Apparaturen mit MBE präparierte Oberflächen mit verschiedenen Analysemethoden charakterisiert werden, ohne daß die Proben aus dem UHV entfernt werden. Für die Grundlagenforschung ist von besonderem Vorteil, daß aufgrund der geringen Anzahl von beteiligten Elementen nur relativ einfache Reaktionen ablaufen.

Eine alternative Wachstumsmethode ist die metallorganische Gasphasenepitaxie (englisch *metal organic vapor phase epitaxy*, MOVPE). Bei diesem Verfahren werden die aufzuwachsenden Elemente als gasförmige, meist organische Verbindungen bei Drücken im mbar-Bereich über die Probe geleitet. Dieses Verfahren erlaubt einen höheren Waferdurchsatz und wird daher in der Industrie angewandt; wegen der vielfältigen chemischen Reaktionen ist der Wachstumsprozeß jedoch weniger gut verstanden.

Bei der Molekularstrahlepitaxie von Galliumarsenid wird das Substrat auf etwa 500–600 °C aufgeheizt, damit die für das Wachstum notwendigen Prozesse kinetisch möglich sind. Beim Aufheizen desorbiert bevorzugt Arsen. Oberhalb von etwa 500 °C tritt so viel Arsen aus der Probe aus, daß sich auf der verbleibenden galliumreichen Oberfläche Tröpfchen aus diesem Element bilden. Um dies zu verhindern, wird ständig unter Arsenüberschuß gearbeitet. Das Wachstum findet dennoch stöchiometrisch statt, da bei den typischen Wachstumstemperaturen der Haftkoeffizient von Arsen ohne die Anwesenheit von Gallium verschwindend gering ist. Der Haftkoeffizient von Gallium wird als Eins angenommen. Die Wachstumsgeschwindigkeit wird daher durch den Galliumfluß auf die Oberfläche bestimmt.

Arsen sublimiert aus der festen Phase nicht atomar, sondern als  $\text{As}_4$ . Durch eine zusätzliche Glühvorrichtung (englisch *cracker*) vor dem As-Ofen können diese Mole-

küle zu  $\text{As}_2$  aufgebrochen werden. Dadurch wird der Einbau von Arsen in die Probe vereinfacht, da der Dissoziationsschritt von  $\text{As}_4$  auf der Oberfläche eingespart wird.

Ausführliche Darstellungen zu MBE sind in Ref. [51–54, 56] zu finden.

## 2.3 Analysemethoden

Alle in der vorliegenden Arbeit zur Charakterisierung der Oberflächen eingesetzten Verfahren sind Standardmethoden der Oberflächenphysik. Ausführliche Darstellungen ihrer Funktionsprinzipien, ihrer Anwendungsmöglichkeiten und der experimentellen Aufbauten sind in Lehrbüchern zu finden [51, 57, 58].

### 2.3.1 Rastertunnelmikroskopie (STM)

Seit seiner Entwicklung Anfang der achtziger Jahre durch Binnig und Rohrer [59] hat das Rastertunnelmikroskop (englisch *scanning tunneling microscope*, STM) erheblich zum Fortschritt in der Oberflächenphysik beigetragen. Der große Vorteil dieser Methode ist die Abbildung von planaren Oberflächen mit atomarer Auflösung. Somit wurden lokale nicht-periodische Strukturen zugänglich und das Studium nicht-idealer Oberflächen möglich.

Das Funktionsprinzip ist schematisch in Abb. 2.10 dargestellt. Eine atomar scharfe Spitze wird bis auf etwa  $10 \text{ \AA}$  an die Probe angenähert und mit Hilfe von piezoelektrischen Kristallen über typischerweise  $(100 \text{ \AA})^2 - (1 \mu\text{m})^2$  große Bereiche der Oberfläche gerastert. Zwischen Spitze und Probe wird eine Spannung der Größenordnung  $1 \text{ V}$  angelegt. Dadurch können Elektronen die aus den Austrittsarbeiten von Spitze und Probe gebildete Barriere durchtunneln. Bei Anlegen einer negativen Spannung an die Probe fließen Elektronen aus den gefüllten Zuständen der Probe in die leeren Zustände der Spitze, bei umgekehrter Polarität tunneln Elektronen aus den gefüllten Zuständen der Spitze in die leeren Zustände der Probe.

Die hohe Auflösung basiert auf der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstromes von dem Abstand zwischen Spitze und Probe. Bei einer Änderung dieses Abstandes um  $1 \text{ \AA}$  ändert sich der Tunnelstrom um etwa eine Größenordnung. Der Tunnelprozeß wird ermöglicht durch den Überlapp von Wellenfunktionen der Spitze und der Probe. Daher ist der Tunnelstrom des weiteren von der lokalen Zustandsdichte sowohl der Spitze als auch der Probe abhängig. Für die metallische Spitze ist die relevante Zu-

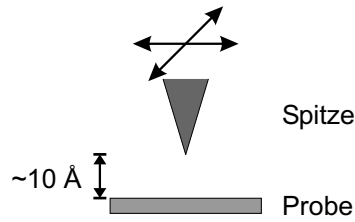


Abbildung 2.10: Funktionsprinzip des Rastertunnelmikroskops.

standsdichte in der Nähe des Fermi-Niveaus näherungsweise konstant. Bei Halbleitern kann die lokale Zustandsdichte stark von der Energie abhängig sein. In das aufgenommene Bild fließt also sowohl die geometrische als auch die elektronische Struktur ein. Auf GaAs-Oberflächen sind die hängenden Bindungen des Gallium leer und die des Arsen gefüllt (Abschnitt 2.1.2). Aus diesem Grund wird bei der Charakterisierung mit dem STM gemeinhin angenommen, daß bei der Abbildung leerer Zustände hauptsächlich die hängenden Bindungen des Gallium und bei der Abbildung gefüllter Zustände im wesentlichen die des Arsen detektiert werden.

Das STM läßt sich in unterschiedlichen Betriebsarten benutzen. Im Konstanter-Strom-Modus wird der vertikale Abstand zwischen Spitze und Probe durch eine Rückkopplungsschleife so geregelt, daß der Tunnelstrom während des Rasterns konstant bleibt (typischer Wert 1 nA). Das Meßsignal ist die an den z-Piezo angelegte Spannung. Auf diese Weise wird eine Fläche konstanter Zustandsdichte abgebildet. Im Konstante-Höhe-Modus wird die Spitze ohne Nachregelung des z-Piezos über die Oberfläche gerastert und dabei der Tunnelstrom gemessen. Mit dieser Methode lassen sich Bilder schneller aufnehmen, sie kann aber nur bei sehr ebenen Proben angewandt werden. Des weiteren lassen sich durch Messen der Abhängigkeit zwischen Strom und Spannung spektroskopische Informationen gewinnen. Für die vorliegende Arbeit wurde nur der Konstante-Strom-Modus verwendet.

Der Erfolg des STM stimulierte die Entwicklung einer Reihe weiterer Methoden, bei denen ebenfalls eine Sonde in geringem Abstand über die Oberfläche gerastert wird. Erwähnt sei hier nur die Rasterkraftmikroskopie (englisch *atomic force microscopy*, AFM), bei der die Kraft zwischen Probe und Spitze gemessen wird. Der Vorteil dieser Methode gegenüber STM ist, daß auch nicht-leitende Proben untersucht werden können.

Weitergehende Informationen zu STM und verwandten Methoden werden in Ref. [60–62] gegeben.

### 2.3.2 Elektronenbeugung (LEED und RHEED)

Eine Oberfläche wird mathematisch beschrieben als ein zweidimensionales Gitter mit einer Basis, in der die Anordnung der Atome innerhalb der Einheitszelle angegeben ist. Für die Beschreibung von Beugungsexperimenten ist es sinnvoll, den reziproken Raum einzuführen, der aus dem Realraum durch eine Fourier-Transformation hervorgeht. Seien  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  die Basisvektoren des Realraumgitters. Dann wird das Gitter des reziproken Raumes durch die Vektoren  $\vec{a}_1^*$  und  $\vec{a}_2^*$  aufgespannt, für die gilt:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = 2\pi\delta_{ij}, \quad |\vec{a}_i^*| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i| \sin \angle(\vec{a}_i, \vec{a}_j)} \quad (i, j \in \{1, 2\}).$$

Eine hohe Intensität der gebeugten Wellen wird in den Richtungen beobachtet, in die die Wellen nach einem elastischen Streuprozeß konstruktiv interferieren. Dies wird durch die Laue-Gleichungen und den Energieerhaltungssatz ausgedrückt:

$$(\vec{k}_{aus} - \vec{k}_{ein})_{\parallel} = \vec{g}_{hk} \quad \text{und} \quad |\vec{k}_{aus}| = |\vec{k}_{ein}|.$$

Dabei sind  $\vec{k}_{ein}$  und  $\vec{k}_{aus}$  die Wellenvektoren der einfallenden bzw. ausfallenden Wellen und  $\vec{g}_{hk}$  ein Gittervektor des zweidimensionalen reziproken Oberflächengitters.

Aus der Anordnung der Beugungsreflexe können die Gitterabstände sowie die Periodizität der Oberflächenstruktur ermittelt werden. Um Informationen über die Anordnung der Atome in der Basis zu erhalten, muß die Intensität der Reflexe berücksichtigt werden. Wenn auf der Oberfläche weitere periodische Anordnungen existieren wie z. B. Facettenflächen oder regelmäßige Folgen von Stufen, tragen diese ebenfalls zum Beugungsbild bei. Dies wirkt sich in einer Aufspaltung von Reflexen bei gewissen Energien aus.

#### LEED

Der bei der Beugung von niederenergetischen Elektronen (englisch *low-energy electron diffraction*) verwendete Aufbau ist schematisch in Abb. 2.11(a) dargestellt. Elektronen mit einer Energie von 30–500 eV werden senkrecht auf die Oberfläche der Probe geschossen, und die gebeugten Elektronen werden in Reflexion auf einem kugelförmigen Fluoreszenzschirm detektiert. Das Intensitätsmuster auf dem Schirm stellt ein Abbild des zweidimensionalen reziproken Gitters der Oberfläche dar. Die Oberflächen sensitivität dieser Methode basiert auf der geringen Eindringtiefe der Elektronen. Die mittlere freie Weglänge von Elektronen wird näherungsweise für alle Materialien durch



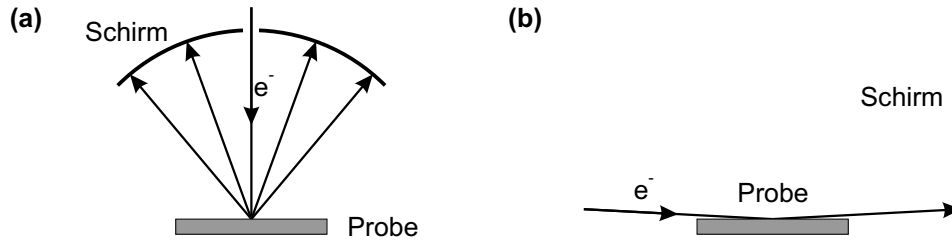


Abbildung 2.11: Schematische Darstellung der experimentellen Aufbauten bei der Beugung von Elektronen, Querschnitt. (a) LEED. (b) RHEED.

eine universelle Kurve beschrieben [63]. Deren Minimum liegt bei ungefähr 50 eV, bei dieser Energie beträgt die mittlere freie Weglänge etwa  $5 \text{ \AA}$ .

Der Vorteil aller Beugungsmethoden gegenüber Realraummethoden ist, daß automatisch über den gesamten Bereich gemittelt wird, aus dem die Streuung kohärent ist. Die Größe dieses Bereiches ist vor allem durch die unvermeidbaren instrumentellen Unzulänglichkeiten wie z. B. die Ausdehnung der Elektronenquelle limitiert. Typischerweise beträgt der Durchmesser dieses Bereiches, die Transferweite, etwa  $100 \text{ \AA}$ . Bei hochauflösenden Geräten (englisch *spot profile analysis-LEED*, SPA-LEED) werden mehr als zehnmals so große Werte erzielt. Zusätzlich zu dieser kohärenten Mittelung wird die auf dem Schirm beobachtete Intensität additiv über die Region der Oberfläche gemittelt, aus der Elektronen überhaupt detektiert werden. Die Größe dieser Region ist durch den Durchmesser des Elektronenstrahls bestimmt, der typischerweise von der Größenordnung 1 mm ist.

Eine Stärke von LEED ist die Strukturbestimmung von Oberflächen. Dazu werden I-V-Messungen durchgeführt, d. h., die Intensität der Reflexe wird in Abhängigkeit von der Elektronenenergie (Beschleunigungsspannung) aufgenommen. Aus einem Strukturmodell wird diese Kurve mit Hilfe dynamischer Streutheorie simuliert und mit der experimentellen verglichen. Der Grad der Übereinstimmung wird mit Hilfe des sogenannten R-Faktors angegeben und durch Variation des zugrundegelegten Modells maximiert. Die Atompositionen lassen sich so auf besser als  $0,1 \text{ \AA}$  ermitteln. Ein Nachteil dieses Verfahrens ist der geringe Konvergenzradius; das Ausgangsmodell muß bereits relativ gut mit der tatsächlichen Struktur übereinstimmen, damit ein guter R-Faktor erzielt werden kann.

Detailliert ist LEED in Ref. [64] dargestellt.

### RHEED

Bei der Beugung von hochenergetischen Elektronen (englisch *reflection high-energy electron diffraction*, RHEED) werden die Elektronen unter streifendem Einfall auf die Probenoberfläche geschossen, um trotz der größeren mittleren freien Weglänge ebenfalls eine hohe Oberflächensensitivität zu erreichen (Abb. 2.11(b)). Die Energie der Elektronen beträgt 5–50 keV. Daher sind die Beträge der Wellenvektoren sehr viel größer als die Längen der Basisvektoren des reziproken Oberflächengitters, und es werden für die Detektion planare Fluoreszenzschirme verwendet. Aufgrund der Geometrie des Aufbaus wird die Oberflächenperiodizität nur in einer Richtung ermittelt. Aus diesem Grund muß die Probe um die Oberflächennormale gedreht werden, um ein Abbild des gesamten reziproken Raumes zu erhalten.

Der Vorteil von RHEED gegenüber LEED ist, daß der Platz vor der Probe frei bleibt. RHEED kann daher *während* der Oberflächenpräparation mit MBE eingesetzt werden. Wenn das Wachstum im Lagen-Modus abläuft, oszilliert die Intensität der RHEED-Reflexe. Aus der Periode kann die Wachstumsrate bestimmt werden.

Die Streutheorie ist für RHEED weniger weit entwickelt als für LEED, und zur Bestimmung der Positionen von Atomen in der Basis wird erstere Methode selten eingesetzt.

Eine ausführliche Beschreibung von RHEED ist in Ref. [65] gegeben.

# 3 Experimente

## 3.1 Aufbau

Oberflächen von Festkörpern werden am besten im Ultrahochvakuum (UHV) bei Drücken  $< 10^{-9}$  mbar untersucht. Bei höheren Drücken werden Oberflächen innerhalb weniger Minuten vollständig durch adsorbierende Atome aus der Gasphase bedeckt, also schneller, als Experimente durchgeführt werden können. Dies kann die Ergebnisse natürlich massiv beeinflussen. Analysemethoden, die auf freien Elektronen basieren, können überhaupt nur eingesetzt werden, wenn deren mittlere freie Weglänge größer als die Abmessungen des experimentellen Aufbaus ist. Aus diesen Gründen finden die Versuche in Edelstahlkammern statt, die kontinuierlich gepumpt werden. Die zur Erzeugung des extrem niedrigen Druckes notwendigen Techniken werden ausführlich z. B. in Ref. [66] beschrieben.

Für die Experimente dieser Arbeit wurde der in Abb. 3.1 gezeigte kompakte Aufbau verwendet, der aus vier miteinander verbundenen UHV-Kammern besteht. Proben werden über die Schleusenkammer (Mitte links) ins UHV eingeführt, in der MBE-Kammer (links) präpariert und in der Analyse- (rechts) und STM-Kammer (unten) untersucht. Die Kammern sind durch ein Transfersystem miteinander verbunden, so daß alle Untersuchungen *in situ* durchgeführt werden, d. h., ohne die Proben aus der Vakuumumgebung zu entnehmen. Wie anfangs erläutert wurde, ist dies von entscheidender Wichtigkeit, um aussagekräftige Ergebnisse zu erzielen. Damit die Kammern einzeln geöffnet und ausgeheizt werden können, befinden sich zwischen ihnen Ventile. Mit den zur Verfügung stehenden Methoden kann die geometrische Struktur der Proben sowohl im Realraum (STM) als auch im reziproken Raum (LEED, RHEED) analysiert werden. Die elektronische Struktur ist mittels Photoemission ebenfalls zugänglich. Somit ist eine umfangreiche Charakterisierung von hochqualitativen Pro-

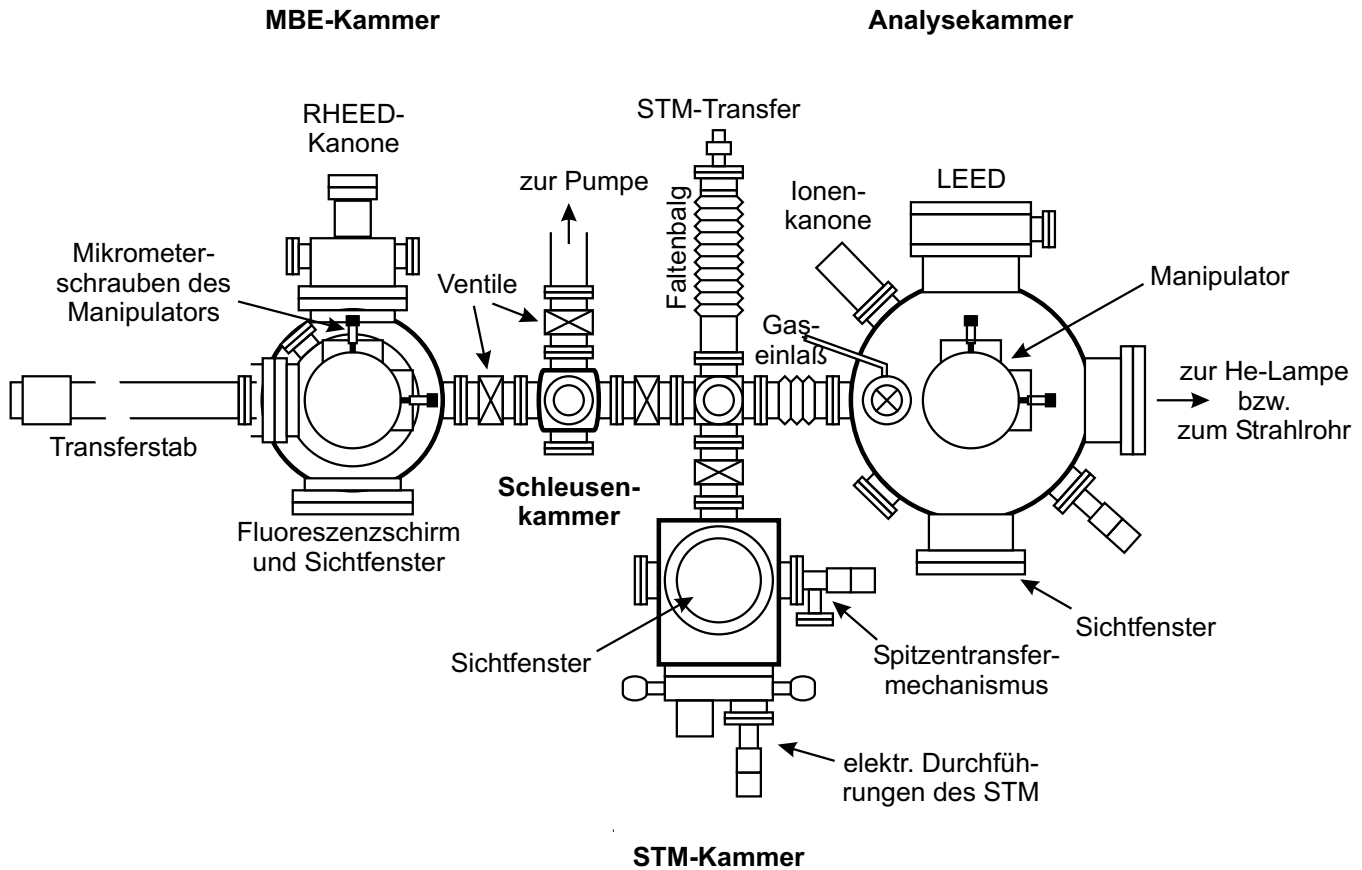


Abbildung 3.1: Experimenteller Aufbau in Aufsicht.

benoberflächen möglich.

Die MBE-, Schleusen- und Analyse-kammer existierten bereits vor Beginn dieser Arbeit [67, 68]. Beim Design war besonders darauf geachtet worden, die Abmessungen klein zu halten, da dieses System auch am Synchrotron der Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung (BESSY) eingesetzt wurde. Das STM wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit in Zusammenarbeit mit J. Márquez [26] in Betrieb genommen, und die entsprechende Kammer wurde von P. Geng entworfen.

In der MBE-Kammer werden Oberflächen höchster Qualität präpariert, indem mittels Molekularstrahlepitaxie auf den Einkristallproben dünne Schichten abgeschieden werden. Dafür stehen drei mit Gallium, Indium und Arsen bestückte Knudsen-Zellen zur Verfügung. Die beiden Zellen für Gallium und Indium sind baugleich (Oxford Instruments, Miniature K-Cell) und fassen jeweils  $0,5\text{ cm}^3$ . Sie können mit Hilfe einer Klappe geschlossen werden, um den Molekularstrahl zu unterbrechen. Die Arsenzelle (DCA, Valved Cracker MBS-250-35-11 As) ist größer ( $250\text{ cm}^3$ ), da außer für sehr

galliumreiche Präparationen ständig unter Arsendruck gearbeitet werden muß (vgl. Abschnitt 2.2.2). Sie ist mit einer zusätzlichen Glühvorrichtung (englisch *Cracker*) ausgerüstet, um die  $\text{As}_4$ -Moleküle, die während des Sublimierens entstehen, in  $\text{As}_2$  aufzubrechen. Der Molekularfluß kann mit einem Nadelventil eingestellt werden. Die Temperaturen der Zellen werden elektronisch geregelt und betragen während der Präparation typischerweise  $1070^\circ\text{C}$  (Ga),  $980^\circ\text{C}$  (In) und  $440^\circ\text{C}$  (As).

Die Probe hängt im Manipulator mit der Oberfläche nach unten. Sie kann in alle drei Raumrichtungen bewegt und um die Oberflächennormale um  $270^\circ$  gedreht werden. Von der Rückseite wird die Probe mit einer Glühwendel geheizt. Auf diese Weise können Temperaturen bis zu  $620^\circ\text{C}$  erreicht werden. Die Probertemperatur wird mit Hilfe eines Pyrometers (Kleiber, Pyroskop 202) gemessen, das sich außerhalb der UHV-Kammer befindet.

Die Oberflächenqualität und die Wachstumsrate werden während der Präparation mit RHEED bestimmt. Dafür wurden zwei verschiedene Elektronenkanonen verwendet. Mit der zu Beginn zur Verfügung stehenden (Varian, 981-2454 Auger Gun) konnten die Elektronen bis auf 3 keV beschleunigt werden. Später wurde eine bessere Kanone eingebaut (Staub Instrumente, RHEED 15), mit der Elektronenenergien bis 15 keV erreicht werden können. Der zunächst verwendete, selbst fabrizierte Fluoreszenzschirm [68] wurde ebenfalls durch einen besseren ersetzt (Staub Instrumente, Sonderanfertigung).

Der Strahlendruck (englisch *beam equivalent pressure*, BEP) kann mit einer beweglichen Ionenmeßröhre ermittelt werden. Diese befindet sich normalerweise oberhalb der RHEED-Kanone und wird für Messungen in die Position gefahren, an der sich sonst die Probe befindet. Die dafür notwendige Schwenkvorrichtung wurde von P. Geng entwickelt [69].

Die MBE-Kammer wird mit einer Ionengetterpumpe (VTS, MECA 2000, PID 200, Pumpgeschwindigkeit 200 l/s) und einer Titansublimationspumpe (Balzers, USP 034) gepumpt. Um den Hintergrunddruck auch während des Betriebs der Knudsen-Zellen niedrig zu halten, wird eine Kühlfalle eingesetzt, die mit flüssigem Stickstoff gefüllt wird. Der Basisdruck beträgt  $1 \times 10^{-10}$  mbar und wird mit einer zweiten, fest installierten Ionenmeßröhre gemessen.

In der kleinen Schleusenkammer befindet sich eine Lagervorrichtung, in der bis zu vier Proben aufbewahrt werden können. Auch an dieser Kammer steht eine Ionengetterpumpe (Varian, Star Cell, 221/s) zur Verfügung. Nach dem Einschleusen von Proben

### 3 Experimente

wird die Kammer zunächst mit einer Turbomolekularpumpe (Pfeiffer, TPD 050, 501/s) evakuiert, die mit einer Drehschieberpumpe (Balzers, Duo 008, 2,51/s) verbunden ist.

In der Analysekammer können die Proben mit LEED (VSI, ErLEED 1000-A) und winkelaufgelöster Photoemissionsspektroskopie charakterisiert werden. Das Elektronenspektrometer (VG, ADES 400) kann entweder im Labor zusammen mit einer He-Lampe oder bei BESSY zusammen mit Synchrotronstrahlung eingesetzt werden. Photoemissionsexperimente wurden für die vorliegende Arbeit nicht durchgeführt. Außerdem befinden sich an dieser Kammer eine Ionenkanone (PHI, Model 04-161) und ein Gaseinlaß für Argon, wodurch die Probenreinigung durch Ionenbeschuß (englisch *sputtering*) ermöglicht wird. Für die Lecksuche steht ein Massenspektrometer zur Verfügung. Der Basisdruck beträgt  $5 \times 10^{-11}$  mbar und wird wiederum mit einer Ionenmeßröhre ermittelt. Gepumpt wird die Kammer mit einer magnetgelagerten Turbomolekular-Drage-Pumpe (Balzers, TPH 180, 1701/s), die mit einer Membran-Vorpumpe (Vacuubrand, MD 4, 11/s) verbunden ist, und einer Titansublimationspumpe (VG, ST 22).

Das wichtigste Untersuchungsinstrument dieser Arbeit war das STM (Park Scientific Instruments (jetzt ThermoMicroscopes), Autoprobe VP2). Der Vorteil der Geräte dieses Herstellers ist, daß der Probenraum frei zugänglich ist und daher leicht an den bereits existierenden Transfermechanismus des Kammersystems angepaßt werden konnte. Dazu wurde ein neuer STM-Probenhalter gebaut, auf den die schon vorher für den Transfermechanismus entwickelten Probenträger einfach aufgelegt werden. Da die Probenträger relativ schwer sind (55 g), mußten die Federn der Schwingungsdämpfungsvorrichtung durch stärkere ersetzt werden.

Zusätzlich befindet sich in der STM-Kammer ein Mechanismus, mit dem STM-Spitzen entweder zur Präparation vor eine Glühwendel oder zum Auswechseln auf einen speziellen Probenträger befördert werden können. Dieser Mechanismus wurde ebenfalls unter der Federführung von P. Geng gebaut [69]. Der Basisdruck beträgt in der STM-Kammer  $1 \times 10^{-10}$  mbar und wird mit einer Ionengetterpumpe (Varian, Vacion plus 150, 1401/s) erreicht. Zum Evakuieren nach dem Öffnen der Kammer wird eine Turbomolekular-Drage-Pumpe (Pfeiffer, TMH 064, 421/s) zusammen mit einer Membranpumpe (Vacuubrand, MD 4, 11/s) verwendet.

Das in situ-Transfersystem basiert auf zylinderförmigen Probenträgern aus Tantal. Die Übergabe zwischen den verschiedenen Manipulatoren und Transfermechanismen geschieht mit Hilfe von Zangen und Arretiermechanismen, die entweder in

ein Loch in der Rückseite der Probenträger oder in eine der beiden seitlichen Rillen greifen. Zwischen der MBE- und der Analysechamber werden die Probenträger mit einem magnetisch gekoppelten Linear-Rotations-Transferstab (Huntington, VFC-169-36) transportiert. Senkrecht dazu werden die Probenträger mit einem *Wobblestick* in die STM-Kammer befördert. Beide Transfermechanismen werden von Elektromotoren angetrieben, so daß die Anlage von einer Person bedient werden kann.

RHEED- und LEED-Bilder werden mit einer CCD-Kamera (EHD, kamPro02) aufgenommen und über eine Framegrabber-Karte in einen Personal Computer (PC) eingeladen. Zur Messung von RHEED-Oszillationen und zur weiteren Datenanalyse steht ein Auswerteprogramm zur Verfügung (Dr. M. F. Opheys, EE 2000).

## 3.2 Durchführung

### 3.2.1 Probenpräparation

Als Substrate für das MBE-Wachstum wurden etwa  $10 \times 10 \text{ mm}^2$  große GaAs-Einkristallproben verwendet, die aus ca. 0,5 mm dicken 2-Zoll-Wafern gebrochen wurden. Die Wafer wurden von verschiedenen Herstellern gekauft (s. Tab. 3.1). Da für die STM-Experimente ein Strom durch die Proben fließen muß, ist es wichtig, daß ihre Ladungsträgerdichte durch eine entsprechende Dotierung mindestens  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  beträgt. Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten höherindizierten Proben sind kein Standardprodukt der Halbleiterindustrie und werden nur von wenigen Firmen hergestellt. Da alle Produktionsprozesse auf (001)-Wafer optimiert sind, bereiten andere Orientierungen Schwierigkeiten. Besonders hervorzuheben ist Wafer Technology; diese Firma lieferte nach unseren Spezifikationen GaAs(2511)-Proben von sehr guter Qualität.

Die Proben wurden mit flüssigem Indium auf die Probenträger geklebt und dann zusammen mit diesen in kochendes Propanol p. A. getaucht. Für alle folgenden Schritte sind Probe und Probenträger als eine Einheit zu betrachten und werden nur noch mit „Probe“ bezeichnet. Unmittelbar vor dem Einführen in die Schleusenkammer wurden die Proben aus dem Propanol genommen und mit Helium abgeblasen. Nach dem Ausheizen der Schleusenkammer über Nacht wurden sie in der MBE-Kammer für 1–2 Stunden bei etwa  $400^\circ\text{C}$  ausgegast. Danach wurde durch Aufheizen unter As-Gegendruck auf mehr als  $580^\circ\text{C}$  das Oxid von den Proben entfernt. Die meisten Wafer sind *epi-ready*, d. h., sie wurden vom Hersteller mit einer wohldefinierten dünnen Oxidschicht

### 3 Experimente

Tabelle 3.1: Eigenschaften der verwendeten GaAs-Wafer. Alle Wafer sind mit Silizium dotiert (n-Typ).

Orientierung	Ladungsträgerdichte in $10^{17} \text{ cm}^{-3}$	Hersteller
(112)A	unbekannt	American Xtal Technology
( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B	6–34	Wafer Technology
(113)A	25	Laser Diode
(113)A	11–48	Wafer Technology
(25 11)A <sup>1</sup>	11–48	Wafer Technology

versehen. Nach Abdampfen dieser Schicht soll eine saubere Oberfläche vorliegen. Es stellte sich jedoch heraus, daß dies nicht immer zutrifft [68]. Daher wurden die Proben durch Beschuß mit  $\text{Ar}^+$ -Ionen und anschließendes Ausheilen unter As-Gegendruck gereinigt (englisch *ion bombardment and annealing*, IBA). Für den Ionenbeschuß wurde die Analysekommer bis auf  $1 \times 10^{-4}$  mbar mit Argon gefüllt. Die Ionen wurden mit 1 kV beschleunigt, der Ionenstrom betrug etwa  $10 \mu\text{A}$ , und der Beschuß wurde typischerweise 20–30 min lang durchgeführt. Für das Ausheilen wurden die Proben mindestens so lange, wie der vorherige Ionenbeschuß dauerte, auf üblicherweise  $600^\circ\text{C}$  aufgeheizt. Vor dem ersten Wachstum wurden drei solcher IBA-Zyklen durchgeführt.

Es sei darauf hingewiesen, daß bei der Bezeichnung IBA in der Literatur das Ausheilen in der Regel ohne As-Gegendruck stattfindet. IBA ist eine Standardreinigungsmethode in der Oberflächenphysik, die nicht nur für GaAs eingesetzt wird. In einfacheren Aufbauten steht keine As-Zelle zur Verfügung, mit der ein As-Gegendruck erzeugt werden kann. Ohne diesen können GaAs-Proben beim Tempern jedoch leicht beschädigt werden (vgl. Abschnitt 2.2.2). Daher wurde in den Experimenten der vorliegenden Arbeit stets unter As-Gegendruck gearbeitet, es sei denn, es wurde eine galliumreiche Präparation beabsichtigt.

Nach dieser Vorbehandlung mit IBA wurden auf den Proben homoepitaktisch 20–200 nm dicke GaAs-Schichten abgeschieden. Die resultierende Oberflächenqualität läßt sich durch die Parameter Probentemperatur, Flußverhältnis von Arsen zu Gallium und Wachstumsgeschwindigkeit beeinflussen. Die günstigsten Präparationsbedingungen für die hier untersuchten Oberflächen sind in Tab. 3.2 zusammengefaßt. Die Proben wurden bei Wachstumsraten von  $0,3\text{--}0,5 \text{ \AA/s}$  präpariert. Der Einfluß der Wachs-

<sup>1</sup>Spezifikation des Herstellers: von (113)A um  $9,7^\circ$  in Richtung  $[\bar{1}10]$  fehlorientiert.



Tabelle 3.2: Optimale Wachstumsparameter. Die Angaben für GaAs(112)A und  $(\bar{1}\bar{1}\bar{2})$ B stammen aus Ref. [67], die entsprechenden BEP-Verhältnisse gelten für As<sub>4</sub>. Für GaAs(113)A wurde auf Erfahrungen aus Ref. [68] zurückgegriffen. Bei dieser Oberfläche erwiesen sich Wachstumsunterbrechungen als vorteilhaft. Die GaAs(2 5 11)-Oberfläche wurde nach dem Wachstum zusätzlich 15 min lang bei 450 °C im As<sub>2</sub>-Strahl gehalten.

Orientierung	Wachstumstemperatur in °C	BEP <sub>As<sub>2</sub></sub> /BEP <sub>Ga</sub>
(112)A	560	10
$(\bar{1}\bar{1}\bar{2})$ B	540	10
(113)A	600	16
(2 5 11)A	580	16

tumsparameter ist bei den in der vorliegenden Arbeit betrachteten höherindizierten Orientierungen jedoch nicht sehr groß. Entscheidend ist vielmehr der Abkühlvorgang nach dem Wachstum. Das Ziel ist dabei, die Probe auf Raumtemperatur zu bringen, ohne daß sich die Oberfläche verändert (englisch *quenching*). Das Problem hierbei liegt im Gleichgewicht mit der Gasphase, aus der bei niedrigen Temperaturen überschüssiges Arsen auf die Oberfläche adsorbieren kann. Wird der Arsenofen dagegen zu früh geschlossen, kann Arsen aus der Oberfläche desorbieren. Dann bilden sich auf der Oberfläche Galliumtröpfchen in der Größe der Wellenlänge sichtbaren Lichtes, und die Proben bekommen einen matten Grauschleier. Damit ist die Probe zerstört und kann nicht mehr verwendet werden. Es gibt zwei Möglichkeiten, um dies zu verhindern: Zum einen kann die Probe solange bei 480 °C gehalten werden, bis der Druck auf weniger als  $3 \times 10^{-9}$  mbar gefallen ist. Zum anderen kann die Probe bei gut 500 °C möglichst schnell, d. h. innerhalb von etwa 30 s, in die Schleusenkammer transferiert werden. Für die vorliegende Arbeit wurde bevorzugt die erste Methode angewandt.

Um besonders arsenreiche Oberflächen zu präparieren, werden die Proben nach dem Wachstum bei Temperaturen zwischen 400 °C und 500 °C für einige Minuten dem As<sub>2</sub>-Strahl ausgesetzt. Auf GaAs(001) wird so der Phasenübergang von der  $(2 \times 4)$ - zur  $c(4 \times 4)$ -Rekonstruktion induziert [70]. Auf der hier erstmals untersuchten GaAs(2 5 11)-Oberfläche wurde auf diese Weise die beste Oberflächenqualität erzielt.

Werden die Proben dagegen ohne As-Gegendruck auf über 500 °C getempert, werden besonders galliumreiche Oberflächen erzeugt. Während der Erprobung der Präparationsparameter wurden die GaAs(2 5 11)-Proben 5–15 min bei bis zu 590 °C geheizt.

Nach der Präparation wurden die Proben in die Analysekommer transferiert und dort mit LEED analysiert. Vor der Untersuchung mit dem STM wurde etwa 1 h gewartet, bis die Proben auf Raumtemperatur abgekühlt waren. Nach Abschluß der Oberflächencharakterisierung können die Proben durch Durchlaufen eines IBA-Zyklus und erneutes Aufwachsen mit MBE mehrere Male unter verschiedenen Bedingungen präpariert werden.

#### 3.2.2 Muldenschleifen

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Methode entwickelt, um auf einer Probe gegebener Orientierung eine kontinuierliche Schar von Vizinalflächen in allen azimuthalen Richtungen zu erzeugen. Dies ist von großem Vorteil insbesondere für die Erforschung von Oberflächen, die vizinal zu höherindizierten Ebenen liegen. Wafer solcher Ausrichtung sind kommerziell nur unter Schwierigkeiten erhältlich und dann sehr teuer. Da es in der Literatur auch keine vorherigen Untersuchungen auf entsprechenden Oberflächen gibt, ist zudem nicht bekannt, welche Verkippungswinkel besonders interessante Ergebnisse liefern. Um beide Probleme zu umgehen, wurden sphärische Mulden in die standardmäßig eingesetzten GaAs-Proben geschliffen. Für die vorliegende Arbeit wurde dies für Proben mit der Orientierung (113)A durchgeführt; die Methode läßt sich aber natürlich auf beliebige andere Orientierungen übertragen.

Die Proben wurden wie üblich aus Wafern gebrochen. Für die weitere Präparation wurde ein Muldenschleifer (Gatan, Precision Dimple Grinder 656/3) verwendet. Dieses Gerät ist ein kommerzielles Produkt, das normalerweise dafür verwendet wird, Proben für die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) zu dünnen. Das Funktionsprinzip ist schematisch in Abb. 3.2 dargestellt. Die Probe wird mit Wachs auf einen zylindrischen Halter geklebt, der sich um die vertikale Achse dreht. Auf die Probe wird dann ein Arm mit einem sich um die horizontale Achse drehenden Schleifrad gesetzt. Durch die beiden zueinander senkrechten Drehbewegungen wird die sphärische Mulde erzeugt. Ihr Krümmungsradius ist durch den Radius von 7,5 mm des Schleifrades bestimmt. Nach Erreichen der eingestellten Tiefe (hier meist 150  $\mu\text{m}$ ) wird der Schleifvorgang automatisch abgebrochen.

Für das Schleifen lassen sich je nach Material einige Parameter variieren. Die Drehgeschwindigkeit des Schleifrades und sein Auflagegewicht sind einstellbar. Neben den aus Bronze bestehenden Schleifrädern wurden Polierräder benutzt, die mit Filz überzo-

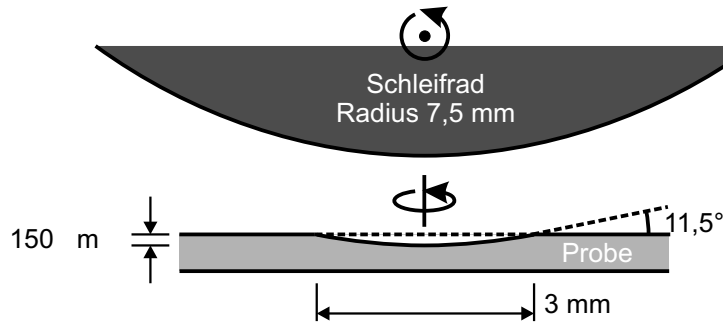


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Muldenschleifens in Seitenansicht.

Tabelle 3.3: Präparationsparameter für das Muldenschleifen in GaAs

Präparationsschritt	Rad	Körnung der Diamantpaste	Auflagegewicht	Drehstufe
1. Schleifen	Bronze	$1\ \mu\text{m}$	15 g, ab $10\ \mu\text{m}$ Restschleiftiefe 8 g	5
2. Läppen	Filz	$1\ \mu\text{m}$	je 15 min 10 g und 5 g	7
3. Polieren	Filz	$0,25\ \mu\text{m}$	je 15 min 10 g und 5 g	7

gen sind. Als Schleifmittel wurde Diamantpaste unterschiedlicher Körnung eingesetzt, die mit bidestilliertem Wasser verdünnt wurde. Als am günstigsten hat sich die in Tab. 3.3 zusammengefaßte Abfolge herausgestellt. Nach dem ersten Schritt bleiben Splitter in der Mulde zurück, die in die Oberfläche hineingepreßt wurden und nur durch Polieren nicht mehr entfernt werden können. Daher ist der zweite Schritt wichtig. Durch das Läppen (Feinschleifen) und Polieren wird die Tiefe der Mulde nur noch unwesentlich vergrößert.

Während des Schleifens wird etwa einmal pro Minute mit bidestilliertem Wasser aus einer Spritzflasche gespült und abgeschliffenes Material mit einem weichen, fusselfreien Tuch abgetupft. Wenn sich sehr viel Material auf der Probe angesammelt hat, wird das Schleifen unterbrochen und die Probe vorsichtig mit bidestilliertem Wasser und Propanol p. A. abgewischt. Zwischen den einzelnen Schritten wird die Probe ebenfalls auf diese Weise gereinigt. Insbesondere bei Wechsel der Körnung ist es wichtig, daß keine Reste des vorherigen Schleifmittels auf der Probe verbleiben. Dabei muß auch das Rad gewechselt werden. Nach dem letzten Polieren und Reinigen wird das Wachs geschmolzen und die Probe vom Halter gelöst. Überschüssiges Wachs wird durch 2 min langes Eintauchen in kochendes Aceton p. A. gelöst. Danach wird die

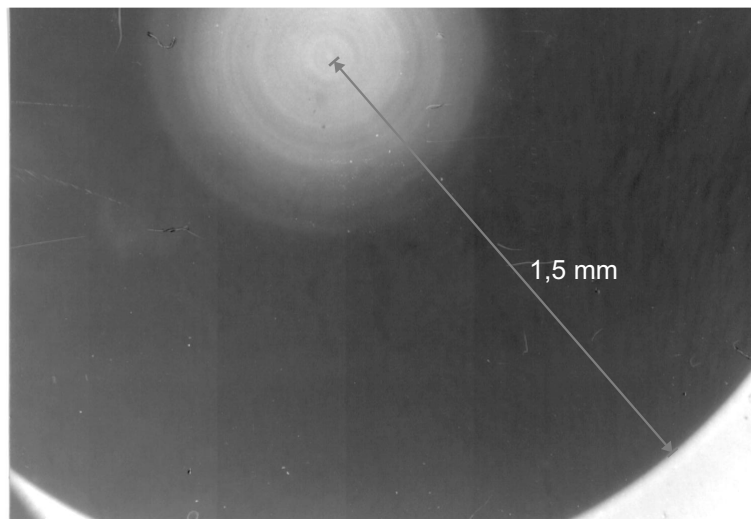


Abbildung 3.3: Durch ein optisches Mikroskop aufgenommenes Foto einer Mulde.

Probe für jeweils 30 s in bidestilliertem Wasser und Propanol p. A. mit Ultraschall gereinigt. Bei längerer Anwendung des Ultraschallbades besteht die Gefahr, daß die Proben zerbrechen.

Zur Begutachtung der Oberflächenqualität läßt sich auf den Muldenschleifer ein kleines Mikroskop aufsetzen. Als die optimalen Präparationsparameter noch nicht herausgefunden worden waren, wurde die Probe nach jedem Schritt zusätzlich unter einem separaten optischen Mikroskop betrachtet, mit dem eine 50- bis 630-fache Vergrößerung erzielt werden konnte. Später wurde dies nur noch am Ende des gesamten Schleifprozesses getan. Ein entsprechendes Foto, das bei 50facher Vergrößerung aufgenommen wurde, ist in Abb. 3.3 gezeigt. Die helle Fläche am unteren Rand des Bildes ist die unbehandelte Probenoberfläche. Etwa die Hälfte der Mulde, die größtenteils dunkel erscheint, ist abgebildet. Um die Muldenmitte sind konzentrische Ringe zu erkennen. Bei anderer Beleuchtung und Schärfeneinstellung sind sie auch weiter außen in der Mulde zu sehen. Dies sind durch das Schleifen erzeugte Unregelmäßigkeiten. Die Mulde besitzt also nicht die Form eines perfekten Kugelabschnittes, sondern es treten in ihr wellenförmige Unebenheiten auf. Der Abstand zwischen den Ringen beträgt etwa  $20\ \mu\text{m}$ . Dies ist mindestens zwei Größenordnungen mehr als der typische Bereich, der mit dem STM untersucht wird bzw. in dem eine Periodizität mit LEED detektiert wird. Daher kann vermutet werden, daß durch die wellenförmigen Unebenheiten nur die lokale Orientierung der Oberfläche beeinflusst wird.

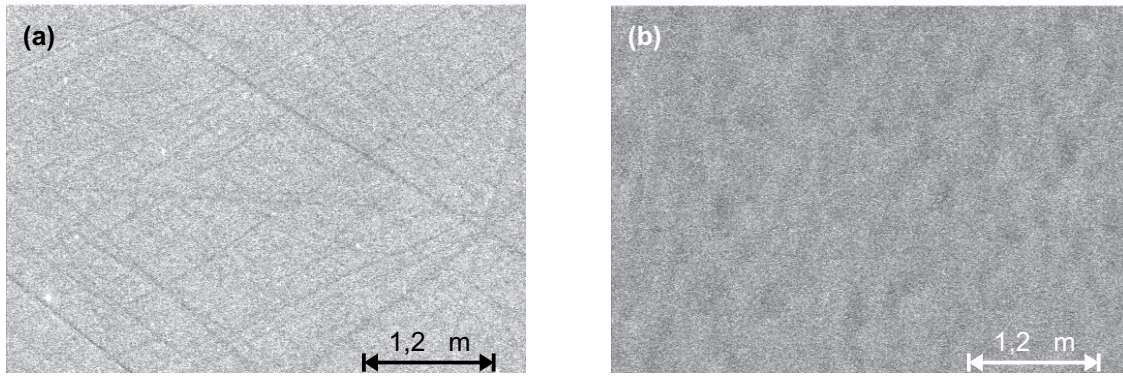


Abbildung 3.4: SEM-Aufnahmen der Muldenoberfläche. Die Primärenergie der Elektronen war 10 keV. (a) Nach der Schleifprozedur. (b) Nach einem IBA-Zyklus.

Um die Morphologie der Muldenoberfläche auf einer kleineren Längenskala einschätzen zu können, wurden einige der Proben mit einem Rasterelektronenmikroskop (englisch *scanning electron microscope*, SEM) charakterisiert. Diese Untersuchungsmethode verfügt nicht über die hohe Auflösung eines STM, bietet aber dafür den Vorteil, erheblich einfacher in der Anwendung zu sein. Zudem ist die Vergrößerung sehr variabel (Es kann auch die gesamte Mulde abgebildet werden.) und schnell zu verändern. In Abb. 3.4(a) ist ein SEM-Bild präsentiert, das nach der kompletten Schleifprozedur in dem Bereich zwischen Mitte und Rand der Mulde aufgenommen wurde. Bilder aus anderen Regionen der Mulde zeigen die gleiche Oberflächenmorphologie. Durch das gesamte Bild verlaufen kreuz und quer Riefen, die 20 nm bis 50 nm breit sind. Dies sind offensichtlich Spuren des letzten Polierschrittes (Körnung 250 nm).

Nach der Erzeugung der Mulde wurden die Proben wie üblich in das UHV-System eingeschleust, mit IBA behandelt und als Substrat für das MBE-Wachstum verwendet. Vor dem Einschleusen wiesen die Muldenproben noch starke Schleifspuren auf, waren also von schlechterer Qualität als die normalerweise benutzten planaren Proben. Daher wurde eine Muldenprobe nach dem ersten IBA-Zyklus wieder ausgeschleust und erneut mit dem SEM untersucht. Die in Abb. 3.4(b) gezeigte Aufnahme stammt aus der Muldenmitte. Zwischen den verschiedenen Bereichen der Mulde gab es wiederum keine qualitativen Unterschiede. Auf das Schleifen zurückzuführende Riefen sind nicht mehr zu erkennen. Die Oberfläche ist jedoch sehr rauh und mit etwa 150 nm großen flachen Gruben durchsetzt. Da die Probenoberfläche neben der Mulde ebenso beschaffen war, ist die Rauhmigkeit ausschließlich auf die IBA-Prozedur zurückzuführen. Die Spuren

der Schleifprozedur wurden offensichtlich beseitigt. Die Oberflächenqualität der MBE-präparierten Mulde wird in Abschnitt 5.5 behandelt.

Hervorzuheben ist an der hier beschriebenen Methode, daß das Schleifen mit einem kommerziellen Gerät durchgeführt wurde, das für einen anderen Zweck hergestellt wird. Somit wurde eine kostengünstige Möglichkeit gefunden, einen weiten Bereich von Vizinalflächen zugänglich zu machen. Dieses Verfahren könnte wahrscheinlich ohne Neuanschaffungen von vielen Forschungsgruppen übernommen werden. Tong und Bennet [71] und Hanbücken et al. [72] wandten sehr ähnliche Methoden an, um Vizinalflächen auf Silizium zu untersuchen. In beiden Fällen bestand die Präparation nach dem Schleifen aus naßchemischem Ätzen und kurzem Heizen im UHV auf Temperaturen nahe dem Schmelzpunkt. Diese Prozedur läßt sich auf den Verbindungshalbleiter Galliumarsenid wegen des unterschiedlichen Verhaltens seiner Bestandteile nicht übertragen. Für andere Arbeiten auf sphärischen Substraten scheinen aufwendigere Schleifverfahren entwickelt worden zu sein, allerdings wurden die Probenpräparationen nicht so detailliert beschrieben [73–75].

#### 3.2.3 STM-Experimente

Durch seine hervorragende Auflösung ist das STM für die Oberflächenphysik ein sehr fruchtbares Werkzeug. Das experimentelle Erreichen von stabilen Aufnahmebedingungen bei hoher Auflösung ist jedoch ein schwieriges Unterfangen. Wenn alle Bestandteile ordnungsgemäß arbeiten, steht im Zentrum der Bemühungen die Präparation geeigneter Spitzen, da diese den Abbildungsvorgang massiv beeinflussen. Das Ziel ist es, die Spitzen so zu formen, daß der Tunnelprozeß nur durch ein einzelnes hervorstehendes Atom stattfindet. Diese Konfiguration soll dann so lange wie möglich stabil bleiben. Wegen der hohen Empfindlichkeit des STM spielen aber auch Faktoren eine Rolle, die nicht von außen kontrolliert werden können. Wenn z. B. aus dem Restgas oder von der Oberfläche ein Atom oder Molekül auf der Spitze adsorbiert, kann dies das aufgenommene Bild deutlich verändern, obwohl die einstellbaren Tunnelparameter nicht variiert wurden. Bei jedem einzelnen Experiment müssen diese daher von neuem optimiert werden.

In den Forschungsgruppen, die mit STM arbeiten, wurden unterschiedliche Herstellungsverfahren für Spitzen entwickelt [76, 77]. Für die Experimente der vorliegenden Arbeit wurden die besten Erfahrungen mit der folgenden Methode gemacht: Aus-

gangsmaterial ist polykristalliner Wolframdraht mit einem Durchmesser von 0,5 mm. Die Spitze wird durch Abreißen mit einer schräg angesetzten Kneifzange erzeugt. Um stabile Tunnelbedingungen erzielen zu können, müssen die Spitzen im UHV nachpräpariert werden. Dazu werden sie mit dem in Abschnitt 3.1 erwähnten Transfermechanismus bis auf etwa 2 mm an eine Glühwendel gebracht. Dann wird an die Spitze eine positive Spannung von 300–500 V angelegt, und der Strom durch die geerdete Glühwendel wird so geregelt, daß für 20–200 s ein Emissionsstrom von 1–3 mA fließt. Die Spitze wird dabei durch Elektronenstoßheizung weißglühend. Durch dieses Verfahren wird nichtleitendes Wolframoxid verdampft. Es wird ebenfalls eingesetzt, wenn die Spitze während der Messungen kontaminiert wurde. Die Gefahr bei dieser Methode ist, daß durch zu langes Heizen die Spitze komplett schmilzt.

### 3.3 Auswertung

STM-Rohdaten werden üblicherweise bearbeitet, um interessante Aspekte deutlicher hervorzuheben. Dabei muß natürlich vorsichtig vorgegangen werden, da sonst leicht scheinbare Oberflächeneigenschaften künstlich in die Bilder eingefügt werden. Oft ist es dennoch nicht möglich, alle in den STM-Daten enthaltenen Informationen in einer einzigen Darstellung zu vermitteln. Viele Details werden erst durch das Ausprobieren mehrerer Bearbeitungsverfahren am Computer deutlich. Erfahrung in der Interpretation von STM-Bildern ist ebenfalls unerlässlich. Auf Papier läßt sich eine optimale Bildqualität nur mit hochwertigen Fotodruckern erreichen.

Die beiden folgenden Verfahren wurden bei fast allen Bildern der vorliegenden Arbeit angewandt: Da die Probe in der Regel nicht völlig parallel zum Rasterkopf ausgerichtet ist, wird zunächst ein linearer Untergrund abgezogen. Dadurch werden die relativen Höhenunterschiede zwischen den verschiedenen Bereichen des Bildes minimiert. Bei gestuften Flächen kann es auch sinnvoll sein, die Steigung so zu wählen, daß die einzelnen Terrassen in einer Graustufe erscheinen. Danach werden Kontrast und Helligkeit so geregelt, daß die gewünschten Merkmale gut zu erkennen sind.

In einigen Fällen war eine weitergehende Bearbeitung notwendig. So kann es vorkommen, daß auf Bildern einzelne helle Streifen zu sehen sind, die eine Rasterlinie breit sind (englisch *glitches*). Diese werden dadurch verursacht, daß die Spitze adsorbierte Atome oder Moleküle über die Oberfläche schleift. Solche Störungen, die nichts mit der Oberflächenstruktur zu tun haben, können durch Mittelung über benachbarte

Rasterlinien entfernt werden. Die Qualität von sehr verrauschten Bildern kann durch Filtern im Fourier-Raum verbessert werden. Da hierbei das Abbild der Oberflächenstruktur erheblich verändert werden kann, ist jedoch äußerste Vorsicht angebracht. Darüber hinaus gibt es noch weitere Bildverarbeitungsmethoden wie das Bilden von Ableitungen, die für die STM-Bilder dieser Arbeit jedoch nicht angewandt wurden. Eine detaillierte Übersicht über die verschiedenen Bearbeitungsmöglichkeiten wird in Ref. [78] gegeben.

Ein anderer Teil der Datenauswertung bestand in der Ermittlung der Gitterabstände von neuen Oberflächenstrukturen aus LEED- und STM-Daten. Dabei wurden jeweils mehrere Bilder berücksichtigt. Die in den Kapiteln 5 und 6 angegebenen Werte sind jeweils das arithmetische Mittel und die Standardabweichung der Einzelmessung. Die Anzahl der in die Auswertung eingegangenen Meßpunkte wird ebenfalls an den entsprechenden Stellen genannt. Die Angabe der Standardabweichung soll lediglich ein Gefühl für die Streuung der Meßwerte geben. Die Gesamtunsicherheit war bei beiden Methoden durch die experimentelle Meßunsicherheit bestimmt.

Bei LEED war die experimentelle Meßgenauigkeit durch die Ausrichtungsmöglichkeiten der Probe eingeschränkt. Aufgrund des geringen zur Verfügung stehenden Platzes konnte die Probe nicht genau ins Zentrum des LEED-Schirms gebracht werden. Zudem ist die Probe mit dem Manipulator nur um eine Raumachse drehbar. Deswegen konnte sie nicht exakt senkrecht zum Elektronenstrahl ausgerichtet werden, sondern war um wenige Grad aus dieser Lage verkippt. Bei einer Testmessung auf der bekannten GaAs(110)-Oberfläche wichen die Ergebnisse für die Abmessungen der Einheitszelle von den Literaturwerten um 2% ab. Diese tatsächliche Abweichung vom realen Wert war größer als die statistisch ermittelte Standardabweichung. Die Auswertung der LEED-Bilder war für GaAs(110) einfacher als für die höherindizierten Oberflächen, da die Reflexe sehr scharf und fast alle zu sehen waren. Die experimentelle Meßunsicherheit wird daher für die neue Oberfläche auf  $\leq 5\%$  geschätzt.

Die Bestimmung von absoluten Abständen mit dem STM ist ein prinzipielles Problem. Durch Nichtlinearitäten der Piezos, thermische Drift und andere Störungen können leicht Verzerrungen entstehen [79]. Eine Kalibriermessung des hier verwendeten STM auf GaAs(110) ergab, daß innerhalb einer Versuchsreihe die scheinbaren Gitterabstände um 20% voneinander abweichen können [26]. Dieses Problem kann nur umgangen werden, indem sehr viele Messungen durchgeführt werden, oder wenn es auf demselben Bild einen bekannten Abstand gibt, an dem dieses skaliert werden kann.



# 4 GaAs(112)A und GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B

## 4.1 Einführung

Die Ergebnisse einer früheren Studie zu GaAs(112)A wiesen darauf hin, daß GaAs(124) oder eine nahe gelegene Fläche stabil sein könnte [27]. Hierbei handelt es sich um eine Ebene im *Inneren* des stereografischen Dreiecks (s. Abb. 1.1 auf S. 11). Daher standen Versuche auf den GaAs(112)-Flächen am Anfang der vorliegenden Arbeit. In fast allen bisherigen Experimenten waren die Oberflächen mit Elektronenbeugung analysiert worden. Die einzige Realraumuntersuchung wurde unter Atmosphärenbedingungen durchgeführt [67, 80]. Eine Veränderung der Oberfläche nach dem Ausschleusen aus der UHV-Kammer ist jedoch nicht auszuschließen. Für die vorliegende Arbeit wurden MBE-präparierte GaAs(112)A- und ( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B-Proben erstmals *in situ* mit STM charakterisiert.

Ein Modell der idealen GaAs(112)A-Oberfläche ist in Abb. 4.1 gezeigt. Die Einheitszelle enthält zwei dreifach koordinierte Ga-Atome mit jeweils einer hängenden Bindung und ein zweifach koordiniertes As-Atom mit zwei hängenden Bindungen. Die Verhältnisse auf der B-Seite ergeben sich durch Vertauschen von Gallium und Arsen. Analog zur GaAs(110)-Oberfläche lassen sich mit den Elektronen aus den hängenden Bindungen des Gallium die des Arsen vollständig besetzen. Diese Struktur erfüllt also die Elektronen-Zählregel. Eine weitere Übereinstimmung mit der (110)-Ebene ist in der Seitenansicht zu erkennen: In jeder atomaren Lage sind gleich viele Ga- und As-Atome enthalten; die Oberfläche ist stöchiometrisch. Im Gegensatz zur (110)-Oberfläche gibt es jedoch unterschiedliche A- und B-Seiten, da die Atome der beiden Elemente an der Oberfläche verschieden koordiniert sind. Eine Besonderheit der (112)-Flächen ist, daß jeweils eine der vier Ga-As-Bindungen genau in dieser Ebene liegt. Aufgrund dieser einfachen Geometrie und der Erfüllung der ECR liegt es nahe zu vermuten, daß die

#### 4 GaAs(112)A und GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B

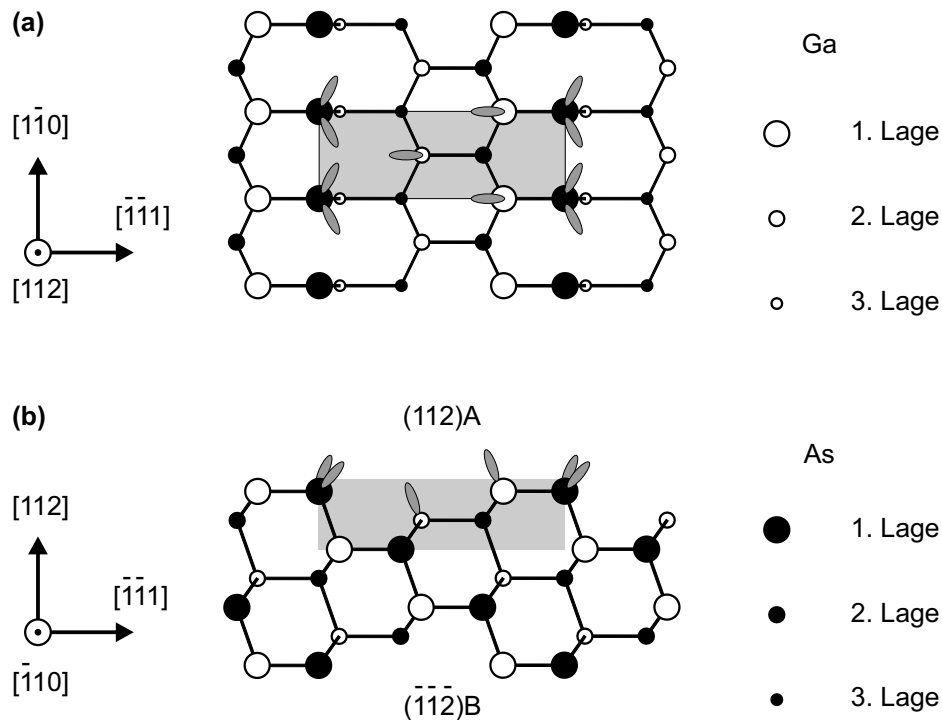


Abbildung 4.1: Ideale GaAs(112)A-Oberfläche. (a) Aufsicht. Das graue Rechteck ist die Einheitszelle. Ihre Seiten sind  $4,0 \text{ \AA}$  und  $9,8 \text{ \AA}$  lang. (b) Seitenansicht von der unteren Seite der Aufsicht.

(112)-Flächen stabil sind. Dabei ist jedoch zu bedenken, daß Oberflächenatome mit zwei hängenden Bindungen energetisch sehr ungünstig sind. Nach einer Absättigung dieser Bindungen durch Dimerisierung benachbarter As-Atome wäre die ECR ohne weitere Modifikationen nicht mehr erfüllt.

Es gibt in der Literatur nur wenige Artikel zu Untersuchungen der GaAs(112)-Oberflächen. Auf einem zylindrischen IBA-präparierten GaAs-Kristall beobachteten Ranke et al. in Richtung  $(11\bar{2})$  (äquivalent zu  $(\bar{1}\bar{1}\bar{2})B$ ) mit LEED einen Zerfall in zwei  $\{110\}$ -artige Facetten [81]. Die elektronische Struktur der idealen (112)-Flächen wurde von Mazur et al. berechnet [82]. Hren et al. untersuchten, wiederum mit LEED, erstmals planare Proben der beiden inäquivalenten GaAs(112)-Oberflächen, die mit IBA präpariert wurden [83, 84]. Die A-Seite zerfiel in zwei  $\{110\}$ -Facetten und die B-Seite in drei  $\{110\}$ -Facetten. Chadi führte Gesamtenergierechnungen zur geometrischen und elektronischen Struktur der (112)-Flächen durch [85]. Ausgangspunkt waren die idealen Oberflächen, denen erlaubt wurde zu relaxieren. Demnach sind beide Flächen nicht-metallisch, die A-Seite weist jedoch hochenergetische besetzte Zustände auf.

Eine Dimerisierung der As-Atome erniedrigt auf dieser Seite die Oberflächenenergie. Der Mittelwert der Energien beider Seiten ist dreimal so groß wie die Energie der relaxierten (110)-Fläche. In einer frühen MBE-Studie wurde mit RHEED beobachtet, daß die GaAs( $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$ )B-Oberfläche facettiert, die A-Seite jedoch nicht [86]. Nähere Angaben zur Struktur wurden nicht gemacht. Eine detailliertere RHEED-Untersuchung der MBE-präparierten ( $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$ )B-Oberfläche wurde von Nötzel et al. durchgeführt [87, 88]. Diese Gruppe fand einen reversiblen Übergang zwischen einer flachen Oberfläche mit einem hohen Grad von Unordnung unterhalb von 550 °C und einer regelmäßig facettierten Oberfläche oberhalb von 590 °C. Die facettierte Oberfläche bestand aus asymmetrischen Pyramiden mit zwei {110}-Facetten, (111)-Terrassen und (001)-Stufen. Ein Übergang von der facettierten zu einer flachen Oberfläche konnte auch durch Aufwachsen von 0,5 ML Indiumarsenid oder 0,06 ML Silizium induziert werden [89]. Eine SPA-LEED-Studie ergab dagegen, daß sich auf der MBE-präparierten GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B-Oberfläche vier Facetten mit den Orientierungen ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )B, ( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B und  $\{\bar{1}\bar{1}0\}$  ausbilden [27]. Auf der A-Seite entstanden fünf Facetten mit den Orientierungen {110}, {124} und (111). SEM- und AFM-Messungen an Luft bestätigten dies und zeigten, daß die Facetten sich zu Vertiefungen in der Oberfläche anordnen [67, 80]. Ab initio-Berechnungen ergaben, daß GaAs(112)A instabil ist gegenüber einer Facettierung in {111} und {113}-Flächen unter Ga-reichen Bedingungen und in zwei {110}-Flächen unter As-reichen Bedingungen [3]. Das Gleiche gilt für GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B, wobei sich die Facetten aus den entsprechenden B-Seiten bilden.

Obwohl GaAs(112)A und GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B auch nur selten als Substrate für Heterostrukturen erforscht wurden, gibt es einige vielversprechende Ansätze. Durch das Nutzen von zweiten Harmonischen konnten auf GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B grüne [90] und blaue [91, 92] Laser auf der Basis herkömmlicher III-V-Technologie hergestellt werden. Aufgrund der Kristallsymmetrie ist die Anregung von zweiten Harmonischen in Heterostrukturen auf (001)-Substraten komplizierter, und unter den (11n)-Flächen weist (112) die höchste Effizienz dafür auf [92]. Eine weitere interessante Eigenschaft von GaAs(112) ist das amphotere Dotierverhalten von Silizium. Durch Ändern des As-Drucks können nur mit Si sowohl p- als auch n-leitende Schichten gewachsen werden [86, 93]. Damit wurden auf GaAs(112)A Leuchtdioden (LED) hergestellt, in denen nur Si als Dotierelement verwendet wurde [94]. Die Bildung von InAs-Quantenpunkten wurde sowohl auf GaAs(112)A [95, 96] als auch auf GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B [97–99] beobachtet, wobei auf der B-Seite die QD bei höheren Wachstumstemperaturen eine längliche Form annehmen.

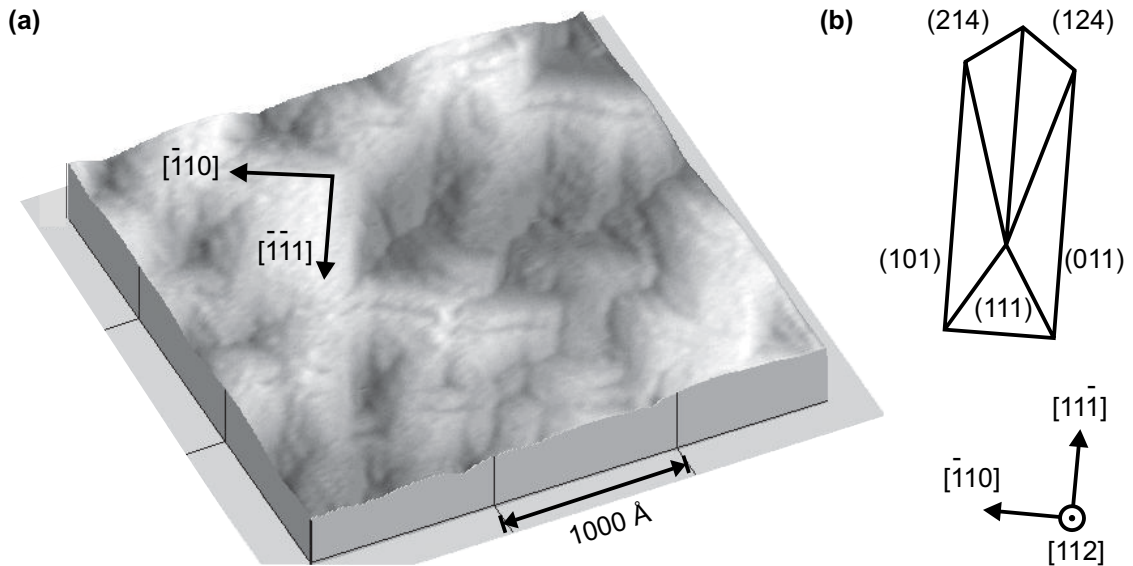


Abbildung 4.2: (a) STM-Bild der GaAs(112)A-Oberfläche.  $U_{Probe} = -2,0\text{ V}$ ,  $I = 0,2\text{ nA}$ .  
 (b) Modell der Vertiefungen auf dieser Oberfläche.

## 4.2 STM-Ergebnisse

Ein STM-Bild eines größeren Ausschnitts der GaAs(112)A-Oberfläche ist in Abb. 4.2(a) gezeigt. Die gesamte Oberfläche ist facettiert, und es gibt keine ebenen Bereiche mit (112)-Orientierung. Fünf verschiedene Orientierungen können bei den Facetten unterschieden werden. Die Facetten sind zu Vertiefungen in der Oberfläche angeordnet, deren horizontaler Querschnitt ein unregelmäßiges Pentagon entlang  $[\bar{1}\bar{1}1]$  und  $[\bar{1}10]$  ist. Teilweise gehen benachbarte Vertiefungen ineinander über, so daß der fünfeckige Grundriß nicht voll ausgebildet ist. Die Vertiefungen sind unregelmäßig verteilt, und ihre Abmessungen variieren zwischen  $300\text{ \AA}$  und  $900\text{ \AA}$  in Richtung  $[\bar{1}10]$  und zwischen  $500\text{ \AA}$  und  $2000\text{ \AA}$  in Richtung  $[\bar{1}\bar{1}1]$ .

Neben dem STM-Bild ist in Unterabb. (b) ein Modell einer einzelnen Vertiefung dargestellt, das auf den aus LEED bestimmten Facettenorientierungen basiert [27]. Das experimentelle Bild ist in guter Übereinstimmung mit diesem Modell. Rechts neben dem Pfeil in Richtung  $[\bar{1}\bar{1}1]$  ist z. B. die „L“-förmige linke untere Ecke eines solchen Pentagons zu erkennen. An die  $[\bar{1}10]$ -Kante dieses Pentagons stößt von unten die Spitze einer anderen Vertiefung.

In Abb. 4.3(a) ist ein STM-Bild der B-Seite zu sehen. Es gelten die gleichen Beobachtungen wie für die A-Seite mit dem Unterschied, daß nur vier verschiedene Facetten

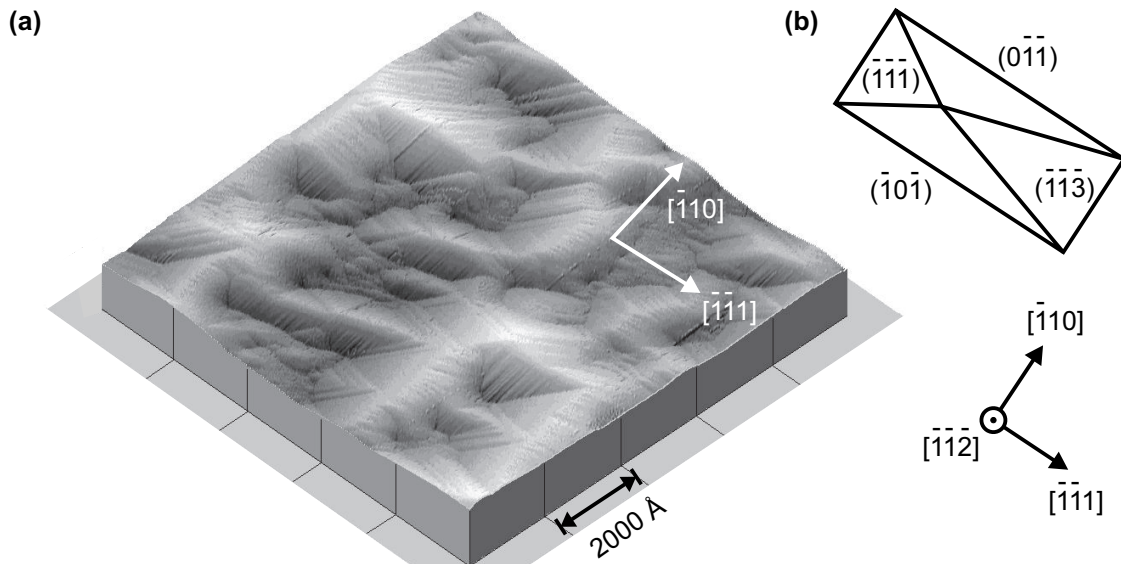


Abbildung 4.3: (a) STM-Bild der GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B-Oberfläche.  $U_{Probe} = -2,0\text{ V}$ ,  $I = 0,3\text{ nA}$ .  
 (b) Modell der Vertiefungen auf dieser Oberfläche.

auftreten. Diese bilden invertierte Pyramiden in der Oberfläche. Zwei solcher Pyramiden sind deutlich in der unteren Ecke des Bildes zu erkennen. An anderen Stellen überlagern sich benachbarte Vertiefungen, so daß nicht alle vier Seiten des rechteckigen Grundrisses klar auszumachen sind. Entlang  $[\bar{1}\bar{1}1]$  beträgt die Länge der Vertiefungen zwischen  $1000\text{ \AA}$  und  $4500\text{ \AA}$  und in Richtung  $[\bar{1}10]$  zwischen  $1000\text{ \AA}$  und  $3000\text{ \AA}$ . Das STM-Bild ist in guter Übereinstimmung mit dem in Unterabb. (b) gezeigten Modell, das wiederum auf LEED-Messungen [27] basiert.

### 4.3 Diskussion

Die in situ-STM-Untersuchung bestätigt, daß GaAs(112)A in fünf Facetten mit den Orientierungen (111),  $\{110\}$  und  $\{124\}$  zerfällt, während sich auf GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B invertierte Pyramiden mit den Seitenflächen  $\{\bar{1}\bar{1}0\}$ , ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )B und ( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B formen. Größere ebene Bereiche mit der nominellen (112)-Orientierung treten auf keiner der beiden Seiten auf. Die von Nötzel et al. [87, 88] beobachteten (001)-Stufen wurden nicht gefunden. Zudem sind die mit dem STM gemessenen Facetten deutlich größer, als Nötzel et al. aus ihren RHEED-Daten folgerten.

Eine Oberfläche zerfällt in Facetten, wenn dadurch trotz der Vergrößerung der Oberfläche die Gesamtenergie abgesenkt wird (s. Abschnitt 2.1.1). Bemerkenswert ist

an der hier beobachteten Facettierung das Auftreten von Ebenen mit hohen Miller-Indizes. Dies bedeutet, daß die entsprechenden planaren Oberflächen eine niedrige Energie haben. Überraschend ist vor allem das unterschiedliche Verhalten der beiden (112)-Seiten. Da  $\text{GaAs}(113)A$  bekanntermaßen eine stabile Oberfläche mit niedriger Energie ist [2, 3], wäre eigentlich zu erwarten, daß sich auf  $\text{GaAs}(112)A$  wie auf der B-Seite invertierte Pyramiden mit einer vierten Facette der Orientierung (113)A bilden. Statt dessen ist es anscheinend energetisch noch günstiger, daß die hypothetische (113)A-Facette weiter in zwei  $\{124\}$ -Facetten aufspaltet. Dies weist darauf hin, daß  $\text{GaAs}(124)$  eine stabile Oberfläche ist. Dabei ist zu berücksichtigen, daß die Facettenorientierung mit LEED nur auf etwa  $5^\circ$  genau bestimmt werden konnte [67]. Die Bestimmung von Facettenwinkeln aus STM-Bildern ist auch nicht exakter. Die postulierte stabile Oberfläche kann also auch eine von (124) etwas abweichende Orientierung haben. Auf jeden Fall liegt diese Ebene aber bemerkenswerterweise im *Inneren* des stereografischen Dreiecks.

In der Tat wurde in weiteren Experimenten der vorliegenden Arbeit entdeckt, daß  $\text{GaAs}(2\ 5\ 11)$  eine stabile Oberfläche ist (Abschnitt 6.2). Dabei ergab sich jedoch auch, daß  $\text{GaAs}(3\ 7\ 15)$  als semistabil anzusehen ist. Außerdem wurden auf  $\text{InAs}/\text{GaAs}(001)$ -Quantenpunkten (137)-Facetten identifiziert (Abschnitt 6.4). Alle diese Orientierungen liegen in einem Winkelbereich von  $\leq 4^\circ$  und sind in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten der Facetten auf  $\text{GaAs}(112)A$ . Eine endgültige Klärung deren Orientierung steht also noch aus.

Die unterschiedliche mesoskopische Struktur der  $\text{GaAs}(113)A$ - und B-Oberflächen ermöglicht eine zumindest ansatzweise Erklärung der verschiedenen Facettierungen auf  $\text{GaAs}(112)A$  und B. Während die  $(\bar{1}\bar{1}\bar{3})B$ -Oberfläche relativ glatt ist [100], treten auf der A-Seite mesoskopische Gräben auf [101] (s. auch Abschnitt 5.4). Diese Gräben wurden auch auf (113)-Facetten beobachtet, die sich auf durch Ätzen strukturierten  $\text{GaAs}(001)$ -Oberflächen während des Wachstums ausbilden [102, 103]. Auf einer hypothetischen (113)A-Facette auf  $\text{GaAs}(112)A$  könnte ein solcher Graben also die Aufspaltung in zwei spiegelsymmetrische Facetten induzieren. Dafür spricht auch, daß bei manchen Versuchen auf  $\text{GaAs}(112)A$  die beiden  $\{124\}$ -Facetten weniger deutlich ausgeprägt waren. Die auf den Seitenwänden der Gräben beobachteten Bereiche mit der Orientierung  $\{3\ 7\ 15\}$  (Abschnitt 5.4) sind, wie schon erwähnt, in Übereinstimmung mit den  $\text{GaAs}(112)A$ -Daten.

# 5 GaAs(113)A

## 5.1 Einführung

Unter den höherindizierten GaAs-Oberflächen ist (113) diejenige, die am häufigsten untersucht wurde. Sie war die erste bekannte stabile höherindizierte Fläche, und ihre Struktur wurde ebenfalls als erste bereits vor Beginn der vorliegenden Arbeit bestimmt [2, 3]. Das Ziel der hier präsentierten Experimente war daher zunächst, die bekannten Ergebnisse zur atomaren Struktur zu reproduzieren. Dabei wurde eine auffallende Stufenstruktur beobachtet, die eingehend untersucht wurde. Des Weiteren ergab die Analyse der GaAs(113)-Oberfläche auf einer mesoskopischen Skala Hinweise auf eine stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks. Die Resultate dieser beiden neuen Studien motivierten die Untersuchung von Flächen, die vizinal zu (113) im Inneren des stereografischen Dreiecks liegen. Um möglichst viele solcher Flächen charakterisieren zu können, wurden Versuche auf eigens präparierten sphärischen Mulden in GaAs(113)A durchgeführt. Dabei wurde eine neue stabile Oberfläche entdeckt.

### 5.1.1 Die ideale Oberfläche

Ein Modell der idealen GaAs(113)A-Oberfläche ist in Abb. 5.1 dargestellt. Die primitive Einheitszelle ist rhomboedrisch und enthält ein dreifach koordiniertes Ga- und ein zweifach koordiniertes As-Atom. Meist wird jedoch eine rechteckige Einheitszelle verwendet, die doppelt so groß ist (Begründung in Abschnitt 5.2). In der Seitenansicht ist zu erkennen, daß die ideale Oberfläche zusammengesetzt ist aus abwechselnden (001)- und (111)-Nanofacetten, die anderthalb Einheitszellenlängen der jeweiligen Orientierung breit sind. Die Grenzen zwischen diesen Nanofacetten kann man als Stufen auf

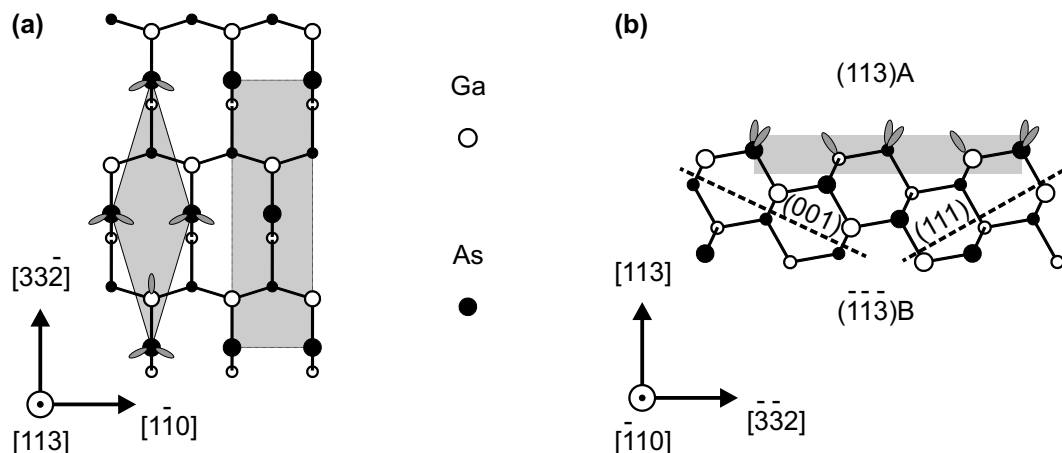


Abbildung 5.1: Ideale GaAs(113)A-Oberfläche. (a) Aufsicht. Der graue Rhombus ist die primitive Einheitszelle und das graue Rechteck die häufiger verwendete, doppelt so große Einheitszelle. Deren Seiten sind  $4,0 \text{ \AA}$  und  $13,3 \text{ \AA}$  lang. (b) Seitenansicht von der linken Seite der Aufsicht.

Tabelle 5.1: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf die ideale GaAs(113)A-Oberfläche

Bindungstyp	liefert	benötigt
1 Ga häng. Bind.	$1 \cdot \frac{3}{4} = \frac{3}{4}$	$1 \cdot 0 = 0$
2 As häng. Bind.	$2 \cdot \frac{5}{4} = 2\frac{1}{2}$	$2 \cdot 2 = 4$
Summe	$3\frac{1}{4}$	4

einer stark verkippten niederindizierten (001)- oder (111)-Oberfläche auffassen. In diesem Sinne ist (113) unter den (11n)-artigen Orientierungen diejenige mit der höchsten Stufendichte, da sie von (001) und (111) etwa gleich weit entfernt liegt ( $25,2^\circ$  bzw.  $29,5^\circ$ ). Aus diesem Grund nimmt (113) in der  $[\bar{1}10]$ -Zone eine gewisse Sonderstellung ein. In der Seitenansicht wird ebenfalls deutlich, daß Vorder- und Rückseite nicht äquivalent sind, die Oberfläche also polar ist. Für die vorliegende Arbeit wurde nur die A-Seite untersucht.

Die ideale GaAs(113)A-Oberfläche verletzt die Elektronen-Zählregel (Tab. 5.1). Es ist also zu erwarten, daß die ideale Oberfläche metallisch und instabil ist. Auf der Basis dieser Elektronenzählung wurde vermutet, daß eine Rekonstruktion mit einer  $8n$ -fach großen Einheitszelle zu vollständig gefüllten Zuständen führen könnte [104]: Mit den  $3\frac{1}{4}$  Elektronen wird die eine hängende As-Bindung gefüllt (zwei Elektronen), die andere bekommt die verbleibenden  $5/4$  Elektronen. Letztere ist nun zu  $5/8$  gefüllt



(zwei Elektronen wären notwendig,  $5/4 : 2 = 5/8$ ), was zu einem metallischen Oberflächenzustand führt. Bei einer  $8n$ -fach großen Einheitszelle könnten  $5n$  der teilweise gefüllten hängenden Bindungen vollständig gefüllt werden und  $3n$  blieben leer; es würde also ein halbleitender Zustand erreicht. In diesem einfachen Bild wird jedoch nicht berücksichtigt, daß nach der konventionellen Elektronen-Zählregel *alle* hängenden As-Bindungen komplett gefüllt sein sollten. Außerdem könnte sich durch Fehlstellen oder Adatome die Anzahl der zur Verfügung stehenden und benötigten Elektronen auch anderweitig ändern.

### 5.1.2 Literaturüberblick

Die atomare Oberflächenstruktur von GaAs(113) wurde erstmals Mitte der achtziger Jahre untersucht. Chadi berechnete in der tight-binding-Näherung die Gesamtenergien der idealen Oberflächen [85]. Sowohl die A- als auch die B-Seite sind metallisch, und der Mittelwert ihrer Energien ist doppelt so hoch wie der Wert für GaAs(110). Für die A-Seite wurde erwartet, daß eine Dimerisierung der As-Atome die Stabilität deutlich erhöhen sollte. Für die erste experimentelle Studie auf GaAs(113) wurde die Oberfläche mit IBA präpariert [84]. Mit LEED wurde eine  $(1 \times 1)$ -Periodizität beobachtet. Es wurden auch I-V-Messungen durchgeführt, jedoch wurde für die A-Seite<sup>1</sup> kein Strukturmodell gefunden, das zu den Daten paßte. Oberhalb von  $600^\circ\text{C}$  zerfiel die Oberfläche in drei  $\{110\}$ -Facetten. Aufbauend auf diesen Ergebnissen führten Duke et al. weitere Gesamtenergierechnungen in der tight-binding-Näherung durch [104]. Danach zeigt die relaxierte ideale Oberfläche metallisches Verhalten. Eine Struktur mit einem Ga-Adatom auf dem Dreifach-Lochplatz, das die hängenden Bindungen der idealen Oberfläche absättigt, hat dagegen einen halbleitenden Grundzustand.<sup>2</sup> Dieses Modell führte auch zu einer besseren Übereinstimmung mit den I-V-Messungen aus Ref. [84]. Allerdings war der R-Faktor trotzdem nicht sehr gut und zudem nicht besser als für ein Strukturmodell mit metallischen Eigenschaften, in dem das Ga-Adatom nur die hängenden Bindungen des As absättigt (Brückenplatz). Eine weitergehende Analyse derselben LEED-Daten favorisierte dagegen wieder eine relaxierte ideale Oberflä-

---

<sup>1</sup>Diese Autoren untersuchten sowohl die A- als auch die B-Seite. Die Nomenklatur war allerdings genau umgekehrt wie in der vorliegenden Arbeit und wurde daher angepaßt.

<sup>2</sup>Dieses Strukturmodell verletzt ebenfalls die Elektronen-Zählregel. Auf die Diskrepanz, warum sich aus ihren Berechnungen dennoch halbleitendes Verhalten ergab, gingen die Autoren nicht ein.

chenstruktur [105]. Olsson et al. untersuchten die mit IBA präparierte GaAs(113)A-Oberfläche mit winkelaufgelöster Photoemission [106]. Dabei wurde kein metallisches Oberflächenband gefunden, was das Strukturmodell mit dem Ga-Adatom im Dreifach-Lochplatz unterstützt. Die Rumpfniveauspektren passen ebenfalls zu diesem Modell.

Auf der MBE-präparierten GaAs(311)A-Oberfläche beobachteten Nötzel et al. mit RHEED die vorher vermutete achtfache Periodizität in Richtung  $[01\bar{1}]$  [87, 107]. Im  $[\bar{2}33]$ -Azimuth trat eine Aufspaltung der RHEED-Streifen in Längsrichtung auf. Daher wurde gefolgert, daß die Oberfläche ein regelmäßiges Zwei-Lagen-System bildet mit einer Stufenhöhe von  $10,2 \text{ \AA}$ . Die Autoren schlugen vor, daß sich zwischen kleinen (311)-Terrassen auf- und abwärtsgerichtete  $(33\bar{1})$  und  $(\bar{3}1\bar{3})$ -Facetten ausbilden. Dieses Modell verletzt allerdings die Elektronen-Zählregel. Die regelmäßige Korrugation dieser Struktur wurde als ein vielversprechendes Substrat für das Wachstum von Quantendrähten gehandelt. Anisotrope optische und elektrische Eigenschaften sowie Transmissionselektronenmikroskop-Aufnahmen (TEM) eines auf dieser Oberfläche gewachsenen GaAs/AlAs-Schichtsystems schienen dies zu bestätigen [107].

Das von Nötzel et al. postulierte Strukturmodell wurde jedoch von anderen Gruppen nicht bestätigt. Brandt et al. beobachteten weder eine vertikale Aufspaltung der RHEED-Reflexe noch eine Anisotropie der Photolumineszenz- (PL) und Photolumineszenzanregungs-Spektren (englisch *photo luminescence excitation*, PLE), und HREM-Messungen (hochaufgelöste Elektronenmikroskopie, englisch *high-resolution electron microscopy*) zeigten keine Korrugation [108]. Hsu et al. kamen aufgrund von RHEED und TEM-Daten zu dem gleichen Ergebnis und vermuteten, daß die von Nötzel et al. beobachtete Korrugation durch unzureichende As-Zufuhr verursacht worden sein könnte [109]. Auf der Basis von in situ-STM-Untersuchungen der MBE-präparierten GaAs(113)A-Oberfläche schlugen Wassermeier et al. ein neues Strukturmodell vor [2]. Danach bildet die Oberfläche eine  $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion mit einer Korrugation von lediglich  $3,4 \text{ \AA}$ . Dieses Modell basiert auf As-Dimeren, erfüllt die Elektronen-Zählregel und wird in Abschnitt 5.2 ausführlicher erläutert. Kinematische RHEED-Simulationen bestärkten das Wassermeier-Modell gegenüber dem Nötzel-Modell [110]. In dieser Studie wurde zudem gezeigt, daß die von Nötzel et al. beobachtete vertikale Aufspaltung der RHEED-Reflexe auf eine Fehlorientierung der Probe um  $0,9^\circ$  zurückzuführen war. Setzer et al. bestätigten mit LEED die  $(8 \times 1)$ -Periodizität der MBE-präparierten GaAs(113)A-Oberfläche [111]. Die von dieser Gruppe gemessenen Rumpfniveauspektren sind in Übereinstimmung mit dem Wassermeier-Modell

und im Widerspruch zum Nötzel-Modell. Ab initio-Gesamtenergieberechnungen ergaben für das Wassermeier-Modell den günstigen niedrigen Wert von  $47 \text{ meV}/\text{\AA}^2$  [3], der mit denen der niederindizierten GaAs-Oberflächen vergleichbar ist ( $45 \text{ meV}/\text{\AA}^2$  für GaAs(001)-c( $4 \times 4$ ) und  $55 \text{ meV}/\text{\AA}^2$  für GaAs(001)- $\beta 2(2 \times 4)$  [31], alle Angaben gelten für arsenreiche Bedingungen;<sup>3</sup> s. auch Tabelle in Anhang A). Die von Wassermeier für MBE-präparierte Proben vorgeschlagene ( $8 \times 1$ )-Rekonstruktion wird also von experimentellen Daten einer Vielzahl von Methoden und von theoretischen Rechnungen gestützt.

Nach einer arsenreichen MBE-Präparation beobachteten Moriarty et al. mit STM dagegen eine von der ( $8 \times 1$ )-Rekonstruktion abweichende Struktur [112]. Es lagen auf der Oberfläche zwar auch As-Dimere vor, jedoch ohne Fernordnung. Lokal wurden die Periodizitäten  $\times 2$ ,  $\times 3$  und  $\times 5$  gesehen. Rumpfniveauspektren deuteten darauf hin, daß viele Ga-Atome in Konfigurationen gebunden waren, die nicht der Elektronen-Zählregel genügen.

Auf Proben, die mit metallorganischer Gasphasenepitaxie (MOVPE) präpariert wurden, wurde mit LEED ebenfalls eine ( $8 \times 1$ )-Periodizität beobachtet [45]. Reflexions-Anisotropie-Spektren (RAS) dieser Proben waren qualitativ gleich solchen von MBE-präparierten Proben, so daß gefolgert wurde, daß sich auch bei MOVPE-Wachstum die Wassermeier-Struktur ausbildet. In derselben Studie wurde für das MOVPE-System unter besonders arsenreichen Bedingungen ein Übergang zu einer p( $1 \times 1$ )-Struktur berichtet. Die Autoren schlugen ein Strukturmodell mit einer Doppellage Arsen vor, das allerdings die Elektronen-Zählregel nicht erfüllt. Bei einer arsenreichen MBE-Präparation wurde mit RAS eine Veränderung der Spektren beobachtet, die ähnlich dem Wechsel von ( $8 \times 1$ ) zu p( $1 \times 1$ ) in MOVPE war. Im LEED-Bild waren jedoch weiterhin schwache  $\times 8$ -Reflexe zu erkennen.

Auf einer mesoskopischen Skala weist die GaAs(113)A-Oberfläche eine anisotrope Rauigkeit auf. Mit SEM wurde auf MOVPE-präparierten Proben eine wellige Morphologie mit Tälern entlang  $[\bar{3}32]$  beobachtet [101]. Mit zunehmender Dicke der auf-

---

<sup>3</sup>Auf Verbindungshalbleitern können sich Rekonstruktionen in ihrer Stöchiometrie unterscheiden. Daher sind ihre Oberflächenenergien und damit ihre relativen Stabilitäten abhängig von der chemischen Umgebung. Experimentell entspricht dies in MBE dem Flußverhältnis des As- und des Ga-Strahls. In die Rechnungen geht das chemische Potential als Parameter ein [31]. Da die hier betrachteten Oberflächen alle arsenreich präpariert werden, müssen die Energiewerte für das entsprechende chemische Potential verglichen werden.

gewachsenen Schicht erhöhte sich die Periode dieser Welligkeit, bis bei Schichtdicken größer als 50 nm bis 100 nm ein Sättigungswert erreicht wurde. Dieser Sättigungswert wiederum stieg mit zunehmender Wachstumstemperatur von  $(25 \pm 1)$  nm bei  $650^\circ\text{C}$  auf  $(80 \pm 3)$  nm bei  $800^\circ\text{C}$ . Aufgrund dieses Verhaltens folgerten die Autoren, daß die Morphologie durch Stufenbündelung verursacht wird und die Sättigung dadurch entsteht, daß die Periode die Diffusionslänge erreicht. In AFM-Untersuchungen auf MOVPE-präparierten Proben wurde die wellige Morphologie bestätigt, wobei allerdings die Periode um etwa 40 nm größer angegeben wurde [45, 113, 114]. Die Täler waren ca.  $20 \text{ \AA}$  tief [45], und der Steigungswinkel der Wälle betrug zwischen  $1^\circ$  und  $10^\circ$  [113]. Aus der Änderung der Periode mit steigender Wachstumstemperatur wurde die Energiebarriere für Diffusion zu  $(0,38 \pm 0,06)$  eV bestimmt [114]. Bemerkenswerterweise wurde die periodische Welligkeit auch auf  $\{113\}$ -Facetten beobachtet, die sich während des Wachstums mit MOVPE auf strukturierten GaAs(001)-Substraten ausbildeten [102, 103]. Die Perioden bei verschiedenen Wachstumstemperaturen entsprachen den in Ref. [101] angegebenen Werten.

Auf MBE-präparierten Proben wurde mit STM ebenfalls eine mesoskopische anisotrope Rauigkeit gefunden, deren Größe etwa  $10 \text{ \AA}$  betrug [2]. Der Bildausschnitt war jedoch zu klein, um eine etwaige Periodizität beurteilen zu können. Diese Autoren äußerten zudem die Vermutung, daß die in Ref. [107] berichteten anisotropen optischen und elektrischen Eigenschaften auf diese anisotrope Rauigkeit zurückzuführen sein könnten. Hsu et al. beobachteten dagegen flache Grenzflächen in einem AlAs/GaAs-Multilagenschichtsystem [109]. Die Dicke der einzelnen Schichten betrug aber lediglich  $25 \text{ \AA}$ , also viel weniger als bei den aufgewachsenen Schichten in den Oberflächenstudien. Zudem ist auf dem TEM-Bild dieser Veröffentlichung in Richtung  $[\bar{2}33]$  durchaus eine Schichtdickenmodulation zu erkennen. Nach der arsenreichen MBE-Präparation in Ref. [112] war die mit STM gemessene Oberflächenrauigkeit deutlich weniger anisotrop als in der Studie von Wassermeier et al. [2].

Nötzel et al. zeigten, daß sich durch die Hinzugabe von atomarem Wasserstoff während der Molekularstrahlepitaxie die Oberflächenmorphologie radikal ändern läßt [21, 115]. Nach einer Standard-MBE-Präparation war auf Übersichts-AFM-Bildern im Vergleich zu den von MOVPE-Proben bekannten Bildern eine relativ glatte Oberfläche zu erkennen. Die Rauigkeit wies aber trotzdem  $[\bar{2}33]$  als Vorzugsrichtung auf. Dieses Ergebnis ist also nicht im Widerspruch zu den STM-Bildern von Wassermeier et al. [2], die einen viel kleineren Bereich der Oberfläche zeigen. Nach Hinzugabe von atomarem

Wasserstoff bildeten sich mehrere  $\mu\text{m}$  lange Gräben entlang  $[\bar{2}33]$  aus. Diese Gräben waren periodisch angeordnet mit einem Abstand von etwa 40 nm, und ihre Tiefe betrug 20–30 Å. Der auch während des MOVPE-Wachstums vorhandene Wasserstoff scheint also Stufenbündelung zu fördern und die intrinsische anisotrope Rauigkeit zu verstärken. Als Ursache wurde vermutet, daß der Wasserstoff die Energiebarriere an Stufenkanten reduziert und die Inkorporationswahrscheinlichkeit an Abwärtsstufen-Plätzen erhöht [21, 115].

Die Bedeutung von GaAs(113) als Fläche niedriger Energie zeigt sich auch darin, daß sich Facetten dieser Orientierung während des Wachstums von Quantendrähten [102, 103, 116] und Quantenpunkten [20, 117–120] ausbilden. Des weiteren sei kurz erwähnt, daß die GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B-Oberfläche ebenfalls stabil ist. Neben (1×1)- [84, 113, 121] und (2×1)-Strukturen [122] wurde eine zur A-Seite analoge (8×1)-Rekonstruktion gefunden, die sich durch gegenseitigen Austausch von As und Ga ergibt [100]. Eine ausführliche Darstellung der Arbeiten zu GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B ist in Ref. [26] zu finden.

Unter den höherindizierten Flächen ist GaAs(113)A ebenfalls diejenige, die bei weitem am häufigsten auf ihre Verwendbarkeit als Substrat für Heterostrukturen und Halbleiter-Bauelemente untersucht wurde. Im folgenden wird nur eine Auswahl dieser Arbeiten vorgestellt. Bereits früh wurde entdeckt, daß Silizium auf GaAs(113)A-Substraten amphotere Dotiereigenschaften besitzt. Durch Kontrolle der Wachstumstemperatur und des V/III-Flußverhältnisses können sowohl n- als auch p-leitende Schichten erzeugt werden [93, 123–126]. Dies wurde dazu genutzt, Transistoren [127] und Laser [128] nur mit Si als Dotierelement herzustellen.

Beim Wachstum von 4–6 ML  $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$  auf GaAs(113)A bilden sich Strukturen aus, die Quantendrähten ähneln [95, 129, 130]. Deren optische Eigenschaften wiesen jedoch auf nulldimensionalen elektronischen Einschluß hin und waren besser als die von gleichzeitig gewachsenen Quantenpunkten auf GaAs(001). Beim Aufbringen von weiterem  $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$  entstehen dreidimensionale Inseln. Heteroepitaktisches Wachstum von InAs auf GaAs(113)A führt dagegen wie auf (001) bei 1.8 ML direkt zur Bildung von Quantenpunkten [131–133]. Diese waren ähnlich einer Pfeilspitze geformt und wiesen anisotrope optische Eigenschaften auf. Ihre Photolumineszenz-Linienbreite war deutlich geringer als die von gleichzeitig gewachsenen QD auf GaAs(001).

Auf GaAs(311)A-Substraten, die durch Lithografie strukturiert wurden, bildet sich auf der einen Seite von flachen Streifen entlang  $[01\bar{1}]$  eine schnell wachsende Seitenwand aus [134]. Dies ermöglicht die Herstellung von GaAs-Quantendrähten, die in AlGaAs

eingebettet sind, von höchster Qualität [22, 135, 136]. Durch eine Kombination dieser Streifen-Strukturierung mit der selbstorganisierten Ausbildung von senkrecht dazu ausgerichteten Gräben bei der Hinzugabe von atomarem Wasserstoff konnten GaAs-Quantenpunkte von ebenfalls ausgezeichneter Qualität erzeugt werden [21, 137].

## 5.2 Die $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion

Ein LEED-Bild der GaAs(113)A-Oberfläche ist in Abb. 5.2 gezeigt. Die einzelnen Reflexe sind scharf, und die Intensität des Untergrunds ist niedrig. Dies zeigt eine gute Oberflächenqualität an. Die primitive rhomboedrische Einheitszelle der idealen und die rechteckige Einheitszelle der rekonstruierten Oberfläche sind eingezeichnet. Da nicht alle Reflexe des Grundgitters deutlich heller sind als die der Rekonstruktion, basiert die Zuordnung der Einheitszelle der idealen Oberfläche auf deren bekannten Abmessungen. Die  $(8 \times 1)$ -Periodizität der Rekonstruktion ist deutlich zu erkennen. Die Bezeichnung  $(8 \times 1)$  basiert auf der rechteckigen, nicht-primitiven Einheitszelle der idealen Oberfläche (s. Abb. 5.1 auf S. 56) und wurde daher in dem LEED-Bild in Anführungszeichen gesetzt. Wird von der primitiven rhomboedrischen Einheitszelle ausgegangen, so muß die Rekonstruktion mit einer Matrix beschrieben werden [111]. Der Einfachheit halber wird jedoch im folgenden die kürzere Notation verwendet.

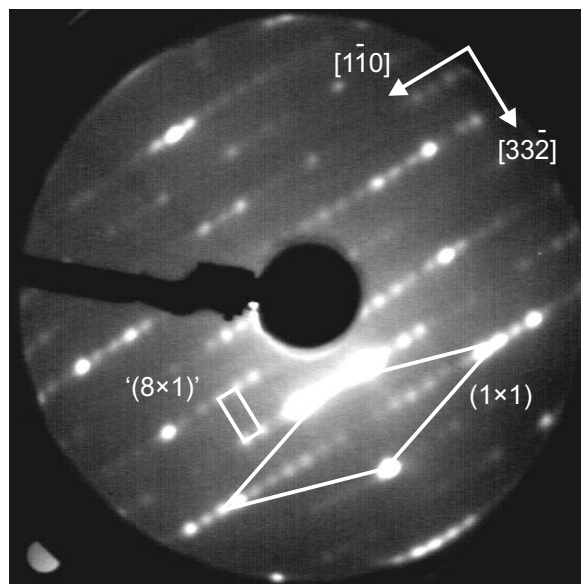


Abbildung 5.2: LEED-Bild der GaAs(113)A- $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion.  $E = 55$  eV.

Ein hochaufgelöstes STM-Bild dieser Oberfläche ist in Abb. 5.3(a) präsentiert. Ganz rechts und in der Mitte links verlaufen von oben nach unten zwei Zickzack-Ketten von hellen Punkten. Jeweils rechts und links von diesen beiden Ketten sind sehr ähnliche Ketten von etwas dunkleren Punkten zu sehen, die etwas nach oben verschoben sind. Die beiden derartigen Ketten in der Mitte rechts werden durch eine dunkle Schlangenlinie getrennt. Die Einheitszelle der Rekonstruktion ist durch das Rechteck markiert. Dieses STM-Bild zeigt die gleiche Struktur wie die STM-Bilder in Ref. [2].

Die hier vorgestellten Ergebnisse sind also in Übereinstimmung mit denen von Wassermeier et al. [2]. Die von diesen Autoren vorgeschlagene atomare Struktur dieser Oberfläche ist schematisch in Abb. 5.3(b) und (c) dargestellt. Wie in der Seitenansicht in Unterabb. (c) zu erkennen ist, erstreckt sich die Rekonstruktion über drei Lagen in die Tiefe. In der Aufsicht in Unterabb. (b) wird dies durch unterschiedlich große Kugeln angezeigt. Dabei werden die fast auf gleicher Höhe liegenden Ga- und As-Atome als eine Lage gezählt (vgl. Seitenansicht in Abb. 5.1(b) auf S. 56). Strenggenommen müßte jede Ebene senkrecht zu  $[11\bar{3}]$ , die durch Zentren von Atomen verläuft, als eine atomare Lage gezählt werden. In dem STM-Bild in Unterabb. (a) werden die drei Lagen durch unterschiedliche Graustufen angezeigt: zwei Sorten von unterschiedlich hellen Punkten und die dunkle Schlangenlinie. Das charakteristische Strukturelement der Rekonstruktion ist eine Zickzack-Kette von As-Dimeren entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$ . In dem STM-Bild, in dem gefüllte Zustände detektiert wurden, sind die As-Dimere als helle Punkte abgebildet. Dies ist rechts oben durch ein überlagertes Modell schematisch angedeutet. Die Zickzack-Kette tritt in der obersten Lage an den Seiten der Einheitszelle und direkt daneben auch in der mittleren Lage, jedoch phasenverschoben um etwa ein Viertel der Länge der Einheitszelle in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  auf. Zwischen den beiden Zickzack-Ketten der mittleren Lage befindet sich ein Graben hinunter in die dritte Lage. In der Seitenansicht ist gut zu sehen, daß die Einheitszelle zwei Stufen zwischen verschiedenen Lagen nach unten und zwei nach oben enthält. Man beachte jedoch, daß die Rekonstruktion nicht spiegelsymmetrisch ist. Die Struktur erfüllt die Elektronen-Zählregel (Tab. 5.2).

Da an der Rekonstruktion mehrere Lagen beteiligt sind, muß der Begriff „Stufe“ näher erklärt werden. Man betrachte dazu das hochaufgelöste STM-Bild eines etwas größeren Ausschnitts der Oberfläche in Abb. 5.4(a) und das dazugehörige Höhenprofil in Unterabb. (b). Die rechte Hälfte des Bildes wird von einer Terrasse eingenommen, also einem Bereich konstanter mittlerer Höhe. Aufgrund der Geometrie der Rekon-

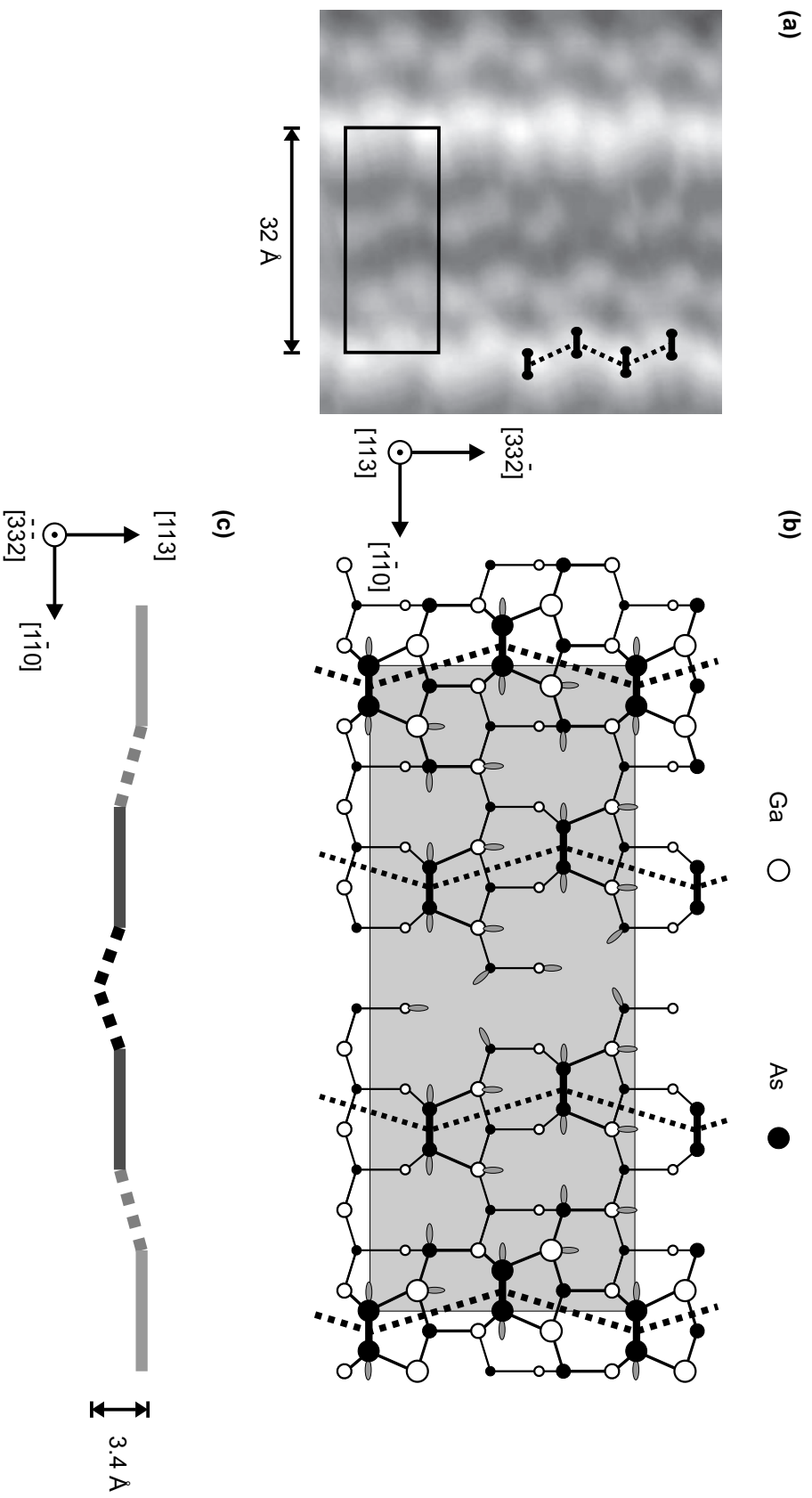


Abbildung 5.3: Die GaAs(113)A-(8×1)-Rekonstruktion. (a) Hochaufgelöstes STM-Bild der rekonstruierten Oberfläche.  $U_{Probe} = -2.8\text{ V}$ ,  $I = 0,2\text{ nA}$ . Das Bild ist leicht verzerrt aufgrund etwas unterschiedlicher Kalibrierungen der x- und y-Piezos. (b) Strukturmodell nach Wassermeier et al. [2], Aufsicht. Das graue Rechteck ist die Einheitszelle, und die gestrichelten Linien deuten die Zickzack-Ketten von As-Dimeren an. (c) Strukturmodell, schematische Seitenansicht von der unteren Seite der Aufsicht. Die horizontalen Striche stellen die Dimerketten dar. Man beachte, daß die Seitenansicht in einer anderen Richtung gezeigt ist als bei der idealen Oberfläche in Abb. 5.1.



Tabelle 5.2: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf GaAs(113)A- $(8 \times 1)$ 

Bindungstyp	liefert	benötigt
16 Ga häng. Bind.	$16 \cdot \frac{3}{4} = 12$	$16 \cdot 0 = 0$
20 As häng. Bind.	$20 \cdot \frac{5}{4} = 25$	$20 \cdot 2 = 40$
6 As-As	$6 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 15$	$6 \cdot 2 = 12$
Summe	52	52

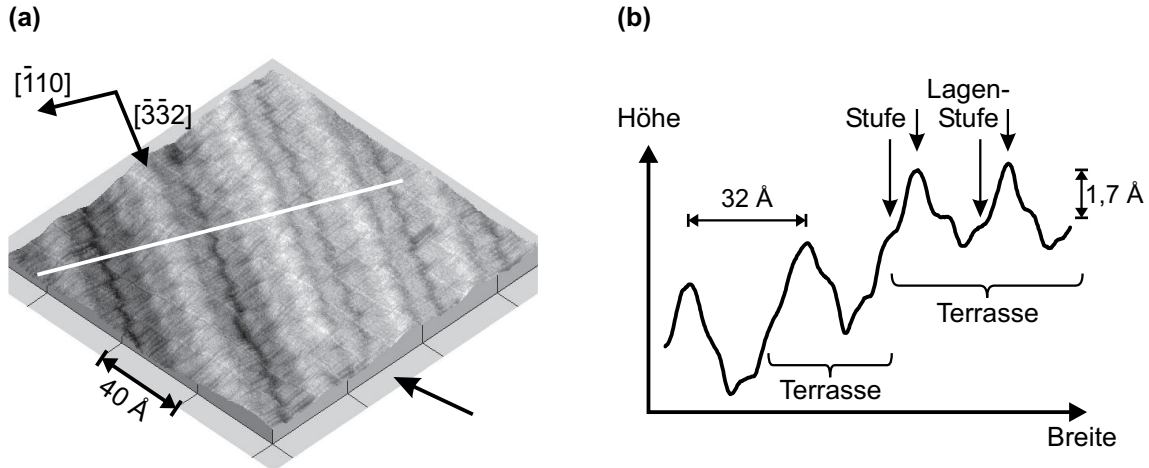


Abbildung 5.4: (a) Hochauflöstes STM-Bild der GaAs(113)A- $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion in 3D-Darstellung.  $U_{Probe} = -2.5 \text{ V}$ ,  $I = 0,3 \text{ nA}$ . (b) Höhenprofil entlang der weißen Linie in (a).

struktion treten innerhalb dieser Terrasse ständig Stufen zwischen verschiedenen Lagen auf. Diese Art von Stufen wird im folgenden „Lagen-Stufen“ genannt. Die Grenze zwischen zwei Terrassen, also zwei Bereichen unterschiedlicher konstanter mittlerer Höhe wird dagegen einfach nur mit „Stufe“ bezeichnet, da dies der normalen Verwendung des Begriffs entspricht. Auf der linken Seite von Abb. 5.4(a) und (b) sind zwei Stufen dieser Sorte zu tieferen Terrassen zu erkennen. Diese Terrassen sind nur eine Einheitszellen-Länge breit. Die Höhe einer solchen Stufe beträgt  $1,7 \text{ \AA}$ , also ebenfalls einen Lagenabstand. Die atomare Struktur der beiden Stufenarten ist gleich; zu ihrer Unterscheidung müssen die Bereiche links und rechts der Stufe herangezogen werden. An der Grenze zwischen Terrassen folgen drei gleichgerichtete Lagen-Stufen aufeinander statt zwei wie innerhalb der Einheitszelle der Rekonstruktion.

## 5.3 Anisotrope Stufenstruktur

Nach der Untersuchung der atomaren Struktur der GaAs(113)A-(8×1)-Rekonstruktion wird nun die Morphologie der Oberfläche auf der nächstgrößeren Skala betrachtet. In den STM-Bildern fiel eine anisotrope Stufenstruktur auf, die in diesem Abschnitt analysiert wird. Mehrere Autoren berichteten anisotrope Eigenschaften für diese Oberfläche, ohne daß deren atomare Ursachen geklärt worden wären [2, 21, 45, 87, 101, 107, 113–115]. Stufen sind auf jeder Oberfläche neben der eventuellen Umordnung von Atomen durch Relaxation oder Rekonstruktion von besonderer Bedeutung. Stufen wirken oft als Diffusionsbarrieren und/oder als Inkorporationszentren während des Wachstums. Die mikroskopische Stufenstruktur beeinflußt also die Oberflächenmorphologie und ist daher für die Oberflächenphysik interessant. Für die Herstellung von hochwertigen Halbleiter-Bauelementen ist die Kontrolle der Stufenmorphologie essentiell. Zum einen sind glatte Oberflächen mit breiten Terrassen, wenigen Stufen und ohne Inseln als Grenzflächen für das Wachstum von Heterostrukturen erstrebenswert. Zum anderen kann eine regelmäßige Anordnung von Stufen als Substrat für das selbstorganisierte Wachstum von Quantendrähten verwendet werden (Übersicht in Ref. [10, 18]).

### 5.3.1 STM-Ergebnisse

In Abb. 5.5 ist ein STM-Bild eines größeren Bereiches der (113)-Oberfläche dargestellt. Auch auf dieser Skala sind die Ketten von As-Dimeren zu erkennen (Linien von links oben nach rechts unten). Etwa zehn verschiedene Höhenebenen tragen zur Oberfläche bei. Terrassen sind in Richtung  $[1\bar{1}0]$  sehr schmal, und es treten Stufen sowohl nach oben als auch nach unten auf. Verglichen mit gut präparierten niederindizierten GaAs-Oberflächen ist die Oberflächenrauhigkeit also relativ groß und zudem anisotrop. Diese Rauigkeit wurde auch von anderen Gruppen beobachtet und ist typisch für diese Oberfläche [2, 45, 101, 113] (s. Literaturüberblick auf S. 59). Es gibt aber auch vergleichsweise große glatte Bereiche, wie z. B. im oberen mittleren Bereich von Abb. 5.5. Auf höheraufgelösten Bildern ist zudem ersichtlich, daß der lokale Ordnungsgrad sehr hoch ist, es treten kaum Fehlstellen auf.

Am auffälligsten in dem Bild ist die Anisotropie der Stufenstruktur. Zur Verdeutlichung wurde der Rand einer Terrasse in Abb. 5.5 markiert. Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  erstrecken sich extrem gerade ohne jegliche Kinks über bis zu  $2000 \text{ \AA}$ . Stufen entlang

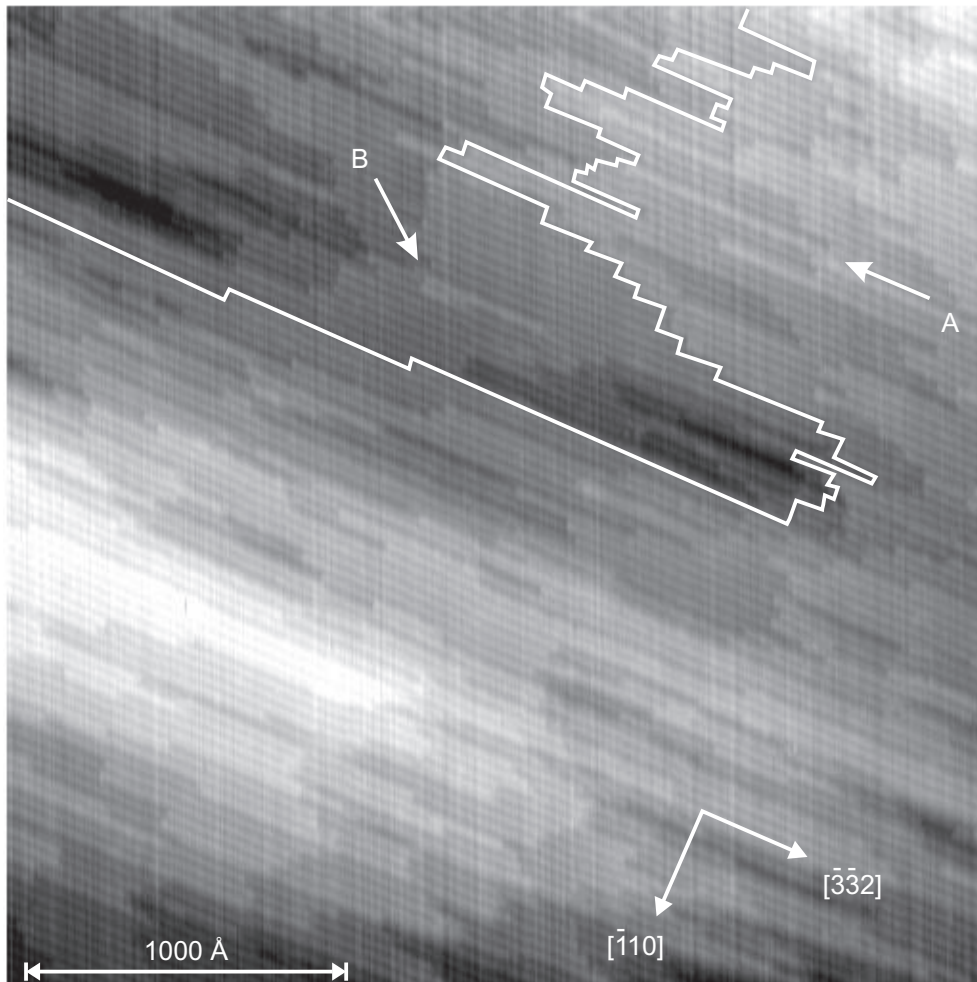


Abbildung 5.5: Übersichts-STM-Bild der GaAs(113)A-(8×1)-Oberfläche.  $U_{Probe} = -2.5$  V,  $I = 0,2$  nA.

$[1\bar{1}0]$  sind dagegen sehr rauh. Nur selten enden mehr als zwei benachbarte Dimerketten an der gleichen Stelle. Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  sind also nur für typischerweise weniger als  $100 \text{ \AA}$  gerade. Manchmal ragen einzelne Dimerketten mehr als  $500 \text{ \AA}$  aus einer solchen Stufe heraus (Fortsetzung des Pfeils *A* in Abb. 5.5). In dem hochaufgelösten STM-Bild in Abb. 5.4 sieht man, daß Stufenkanten entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  aus vollständigen Dimerketten bestehen, wie sie auch in der  $(8 \times 1)$ -Einheitszelle auftreten. Vorne rechts auf dieser Abbildung endet eine Dimerkette und bildet damit eine Stufe parallel zu  $[1\bar{1}0]$  (Pfeil in Abb. 5.4). Diese ist jedoch nicht klar aufgelöst. Daher ist nicht zu erkennen, ob die Stufenkanten in dieser Richtung auch konsistent mit der Rekonstruktion sind. Offensichtlich wird die Stufenstruktur bestimmt durch die Dimerketten, die charakteristisch sind für diese Rekonstruktion.

Eine ähnliche Anisotropie ist bekannt von der viel untersuchten  $\text{GaAs}(001)-(2 \times 4)$ -Oberfläche. Dort unterscheidet man zwischen Stufen vom Typ *A*, die parallel zu den As-Dimeren entlang  $[1\bar{1}0]$  (der  $\times 2$ -Richtung dieser Rekonstruktion) verlaufen, und Stufen vom Typ *B* entlang  $[110]$ . *A*-Stufen sind gerader als *B*-Stufen [138, 139], und die Stufenkanten werden immer aus vollständigen  $(2 \times 4)$ -Einheitszellen gebildet. Für einen Vergleich zwischen verschiedenen Oberflächen oder zwischen Experiment und Theorie muß der Stufenanisotropie ein Zahlenwert zugewiesen werden. Hierfür gibt es zwei Methoden. Zum einen können aus STM-Bildern Höhenprofile entlang den beiden kristallografisch ausgezeichneten Richtungen extrahiert werden. In diesen Höhenprofilen werden die Stufen gezählt, und daraus wird die laterale Stufendichte bestimmt. Das Verhältnis der beiden lateralen Stufendichten quantifiziert die Stufenanisotropie. Zum anderen können die Längen von Inseln in den kristallografischen Richtungen gemessen und wiederum das Verhältnis gebildet werden. Auf  $\text{GaAs}(001)-(2 \times 4)$  ergaben sich Werte  $A/B$  zwischen 2 und 10 [140–145].

Für diese Studie auf  $\text{GaAs}(113)$  wurde die Anisotropie aus den lateralen Stufendichten bestimmt, da auf dieser Oberfläche viel mehr Stufen als Ränder von Terrassen als von Inseln auftreten. Sechs Übersichtsbilder von drei Präparationen wurden ausgewertet, wobei pro Bild jeweils vier Höhenprofile in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  und vier in Richtung  $[1\bar{1}0]$  extrahiert wurden. Aus den Höhenprofilen in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  erhält man die laterale Dichte von Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  und umgekehrt. Die Stufendichte beträgt  $(10 \pm 2) \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  für Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  und  $(1,3 \pm 0,5) \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  für Stufen parallel zu  $[1\bar{1}0]$ , und das Verhältnis ist  $8 \pm 4$ . Die höchsten Verhältnisse auf  $\text{GaAs}(001)$  wurden aus anisotropen Insellängen bestimmt. Die Länge, über die Stufen gerade ohne

*jegliche* Kinks sind, wurde also nicht berücksichtigt. In einer detaillierteren Analyse auf GaAs(001) wurden Kinklängen und -abstände gemessen und gezählt [146]. Die Kinklänge ist dabei die Strecke, die der Kink senkrecht in die Stufenkante einschneidet bzw. aus ihr herausragt, und der Kinkabstand ist die Entfernung zwischen benachbarten Kinks parallel zur Stufenkante. Die größte in den rauheren *B*-Stufen gefundene Kinklänge beträgt vier Einheitszellenlängen bzw. 32 Å. Auf GaAs(113) dagegen sind in den Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  Kinklängen von 25 und mehr Einheitszellen bzw. 330 Å nicht ungewöhnlich. Die Anisotropie der Stufenstruktur ist also auf GaAs(113) höher als auf GaAs(001).

### 5.3.2 Modelle eindimensionaler Inseln auf GaAs(113)A–(8×1)

Um den Ursprung dieser Anisotropie zu verstehen, werden im folgenden Modelle eindimensionaler Inseln auf der GaAs(113)A–(8×1)-Oberfläche betrachtet. Auf die kombinierte Struktur von Oberfläche mit eindimensionaler Insel darauf wird dann die Elektronen-Zählregel angewandt. Auf ähnliche Weise konnte Pashley die anisotrope Stufenstruktur auf GaAs(001)–(2×4) erklären [39]. Eindimensional bedeutet in diesem Zusammenhang, daß die Insel sich in der einen kristallografisch ausgezeichneten Richtung unter den Beschränkungen der Rekonstruktion so kurz wie möglich erstreckt und unendlich weit in der dazu senkrechten Richtung. Dies ist nicht zu verwechseln mit dem eindimensionalen Einschluß von Elektronen in Quantendrähten. Die Strukturmodelle wurden so konstruiert, daß alle Atome nach Möglichkeit in der gleichen Bindungskonfiguration sind, wie sie es als Teil der rekonstruierten Oberfläche wären. Nach unten gerichtete offene Bindungen wurden ausgeschlossen.

Zunächst werden Inseln entlang  $[33\bar{2}]$  betrachtet. In der Seitenansicht der Rekonstruktion in Abb. 5.3(b) ist zu erkennen, daß diese, ausgehend vom Graben, aus einer Folge von zwei Lagen-Stufen nach oben und zwei Lagen-Stufen nach unten besteht. Statt nach der zweiten Stufe nach oben wieder herunterzugehen, kann man durch eine zusätzliche Dimerkette eine dritte Stufe nach oben bilden, wie dies in Abb. 5.6(a) durch die gestrichelte Linie dargestellt ist. Auf diese Weise wurde eine eindimensionale Insel entlang  $[33\bar{2}]$  konstruiert. Eine solche dreifache Lagen-Stufe tritt in Abb. 5.4 auf der linken Seite zweimal auf. Dort führt die Stufe auf eine höhere Terrasse und nicht auf eine Insel, aber die Folge von drei Dimerketten ist die gleiche. Eine Aufsicht der oben beschriebenen Inselstruktur ist in Abb. 5.6(b) gezeigt, wobei die Insel

durch zwei vertikale gestrichelte Linien markiert ist. Obwohl sich diese Insel in Richtung  $[1\bar{1}0]$  weniger als eine Einheitszellenlänge weit erstreckt, ist sie konsistent mit der  $(8\times 1)$ -Rekonstruktion, da keine Atome in neuen Bindungskonfigurationen auftreten. Die Anknüpfung an die mittlere Lage des Substrates wird auf der rechten Seite durch  $(110)$ -artige Nanofacetten mit dreifach koordinierten Ga- und As-Atomen erreicht. Um die Elektronen-Zählregel auf diese Struktur von Oberfläche mit Insel darauf anwenden zu können, muß ihre Einheitszelle bestimmt werden. Diese ist in Abb. 5.6(b) als graues Rechteck eingezeichnet. In Richtung  $[1\bar{1}0]$  ergibt sich die Periodizität aus unendlich vielen nebeneinander liegenden Inseln. Diese Struktur erfüllt die Elektronen-Zählregel (Die Anwendung der ECR auf die in diesem Abschnitt diskutierten Inselmodelle wird in Anhang B ausführlich dargestellt.).

Außer der einzelnen zusätzlichen Dimerkette, die im vorherigen Absatz beschrieben wurde, gibt es weitere mögliche eindimensionale Inseln entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$ . Ausgangspunkt ist die bereits diskutierte Struktur in Abb. 5.6(a). Wenn die zusätzliche, gestrichelte Dimerkette Teil der  $(8\times 1)$ -Rekonstruktion wäre, wäre die normale Fortsetzung nach rechts statt der  $(110)$ -Nanofacette eine Stufe nach unten zu einer Dimerkette *in* der obersten Lage des Substrates. Dies ist in Abb. 5.6(c) dargestellt. Die Anbindung an das Substrat wird durch das normale Grabenelement der Rekonstruktion erreicht. In Abb. 5.6(d) ist eine weitere mögliche Konfiguration dargestellt: Die Insel besteht nur aus der Dimerkette, die in Abb. 5.6(c) hinzugefügt wurde. Die Kombination der Inseln in Abb. 5.6(a) and (c) ergibt schließlich eine Insel, die eine vollständige Einheitszelle der  $(8\times 1)$ -Rekonstruktion enthält (Abb. 5.6(e)). Neben den in Abb. 5.6 dargestellten eindimensionalen Inseln entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  gibt es dazu äquivalente, die man erhält, wenn man bei der Konstruktion mit drei aufwärts gerichteten Stufen von rechts nach links beginnt. Alle diese Strukturen erfüllen die ECR und sind daher wahrscheinlich stabil. In Abb. 5.5 ist tatsächlich eine solche eindimensionale Insel zu sehen (Pfeil *B*). Ein entsprechender Bildausschnitt ist in Abb. 5.7 vergrößert dargestellt. Die Breite der Insel ist zwar nicht konstant wie in den Modellen, aber auch an keiner Stelle größer als die der Insel in Abb. 5.6(e).

Nun wenden wir uns eindimensionalen Inseln entlang  $[1\bar{1}0]$  zu. Ein Modell einer solchen Insel ist in Abb. 5.8 dargestellt. Die Insel ist wiederum durch zwei gestrichelte Linien angedeutet und die Einheitszelle durch ein graues Rechteck. Im Gegensatz zu der Situation bei Inseln entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  ist es in Richtung  $[1\bar{1}0]$  nicht möglich, die  $(8\times 1)$ -Einheitszelle in kleinere Elemente wie z. B. Dimerketten aufzuspalten, ohne Bindun-

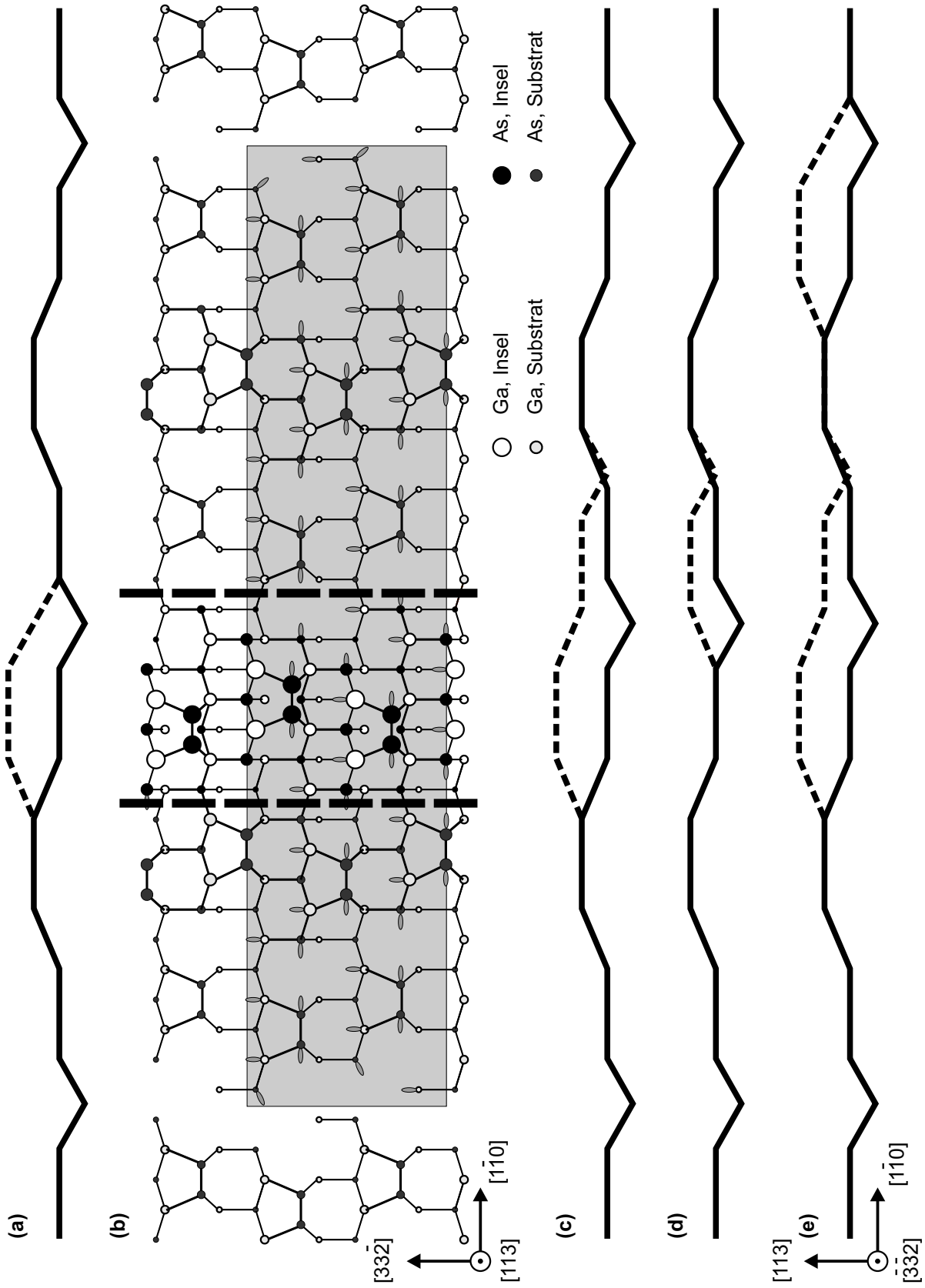


Abbildung 5.6: Modelle eindimensionaler Inseln entlang  $[33\bar{2}]$ . (a) Eine Dimerkette auf der obersten Substratlage, Seitenansicht. (b) Zwei Dimerketten, Aufsicht. (c) Zwei Dimerketten, Seitenansicht. (d) Eine Dimerkette in der obersten Substratlage, Seitenansicht. (e) Die Insel enthält eine vollständige Einheitszelle der Rekonstruktion, Seitenansicht (anderer Maßstab als (a)–(d)).

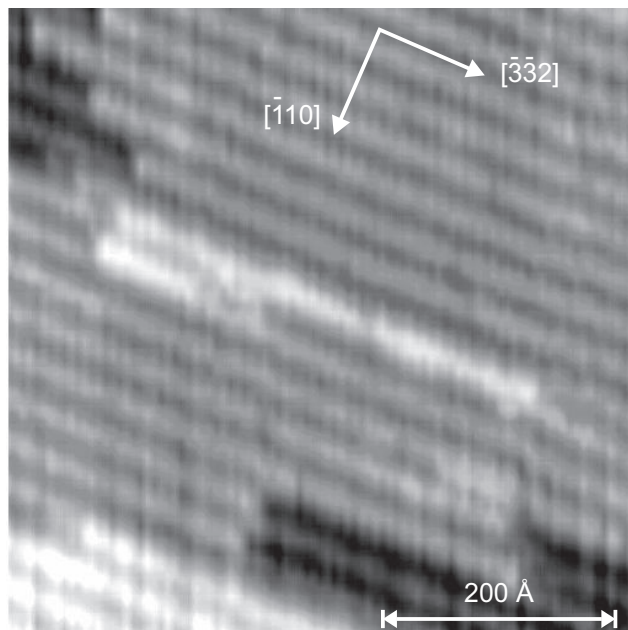


Abbildung 5.7: Vergrößerter Ausschnitt aus Abb. 5.5, der eine eindimensionale Insel entlang  $[3\bar{3}2]$  zeigt.  $U_{Probe} = -2.5 \text{ V}$ ,  $I = 0,2 \text{ nA}$ .

gen zu brechen. Die in Abb. 5.8 gezeigte Struktur ist die kleinstmögliche Insel mit einer  $(8 \times 1)$ -Periodizität. Allerdings müssen sogar für die Konstruktion dieser Insel Bindungen der  $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion gebrochen werden. Die so gebildeten hängenden Bindungen sind durch eine dunklere Schattierung hervorgehoben. Dies ist auf dem vergrößerten Detailbild deutlicher zu erkennen. Daher ist es nicht überraschend, daß diese Struktur die Elektronen-Zählregel verletzt. Es treten sogar Ga-Atome mit zwei hängenden Bindungen auf, was energetisch sehr ungünstig ist. Durch Hinzufügen einzelner Atome oder Dimere gelang es ebensowenig, eine Insel zu finden, die die ECR erfüllt.

Zusätzlich zu der in Abb. 5.8 gezeigten gibt es eine weitere mögliche Inselstruktur entlang  $[1\bar{1}0]$ . Die As-Dimere einer Insel in dieser Richtung bilden unendlich viele einzelne Segmente der normalen Zickzack-Kette (dicke durchgezogene Linien in Abb. 5.8(a)). Die durchgehenden Zickzack-Ketten der obersten Substratlage sind zum Vergleich gestrichelt eingezeichnet. In der abgebildeten Insel sind die Dimerketten-Segmente von rechts unten nach links oben orientiert („Zick“). Wenn die Insel um eine halbe Einheitszellenlänge in Richtung  $[3\bar{3}2]$  verschoben auf das Substrat gesetzt wird, sind die Segmente der hinzugefügten Dimerkette von links unten nach rechts



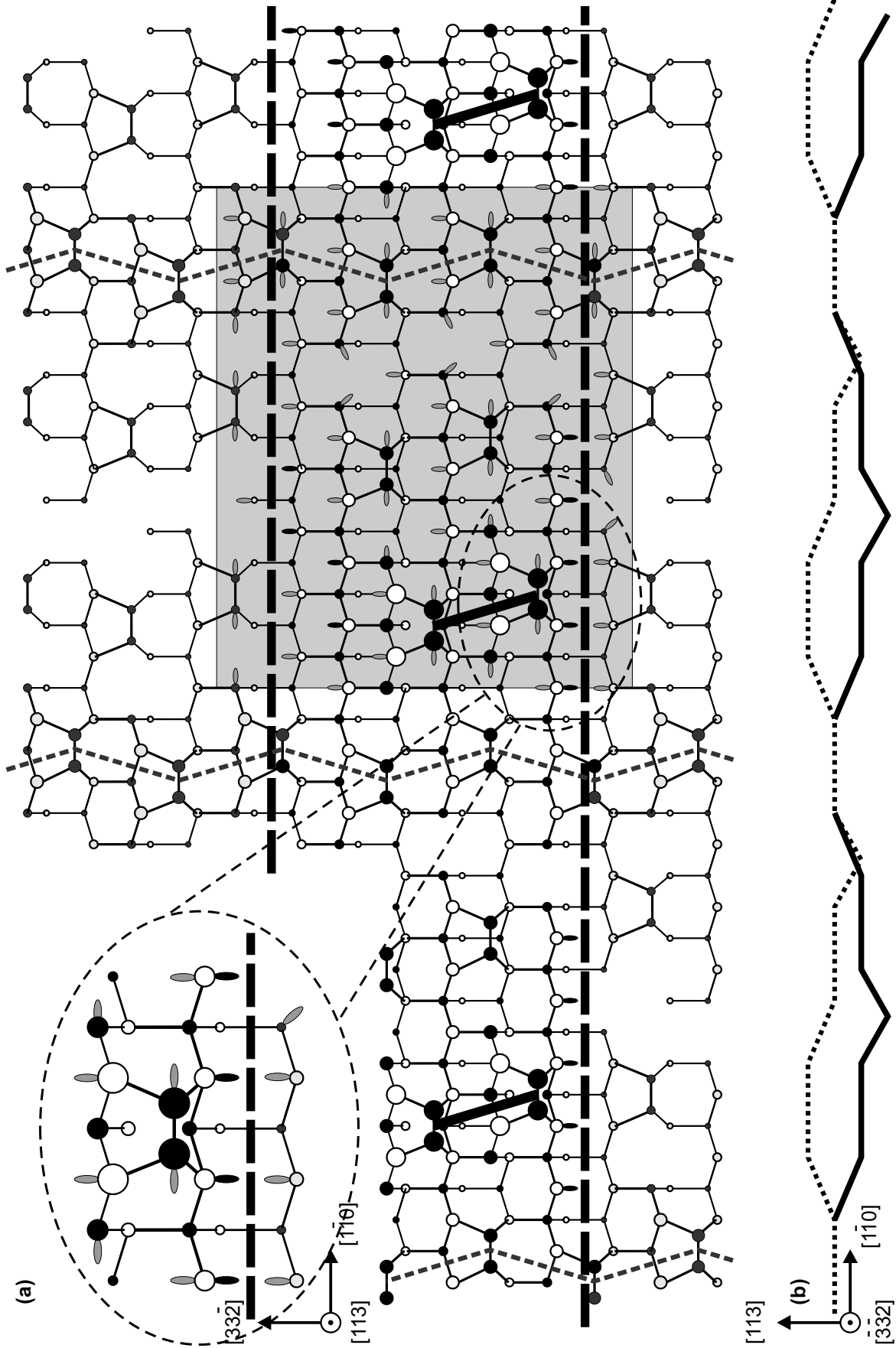


Abbildung 5.8: Modell einer eindimensionalen Insel entlang  $[1\bar{1}0]$ . (a) Aufsicht. Die Zickzack-Linien markieren die Dimerketten (gestrichelt; Substrat; durchgezogen: Insel). Die Insel-Dimerketten bestehen nur aus jeweils einem Segment („Zick“). Detailbild: vergrößerter Ausschnitt. (b) Seitenansicht. Man beachte, daß sich hier im Gegensatz zu Abb. 5.6 die mit einer gestrichelten Linie gezeichnete Insel nicht unendlich in die Zeichenebene hinein erstreckt.

oben gerichtet („Zack“). Die Seitenansicht der so erzeugten Insel sieht genauso aus wie Abb. 5.8(b). Diese Insel enthält von jeder Art Strukturelement die gleiche Anzahl wie die abgebildete und ist daher zu dieser äquivalent. Wie schon bei den Inseln entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  beschrieben wurde, kann man ebenfalls äquivalente Inseln konstruieren, indem man die zusätzlichen Dimere auf der linken Seite der obersten Dimerkette des Substrats plaziert. Inseln entlang  $[\bar{1}\bar{1}0]$  verletzen also die Elektronen-Zählregel und sind daher mit großer Wahrscheinlichkeit instabil. Sie wurden mit dem STM auch nicht beobachtet.

### 5.3.3 Diskussion

Die vorangegangenen Überlegungen ermöglichen es nun, die hochgradig anisotrope Stufenstruktur auf GaAs(113)A- $(8\times 1)$  zu erklären. Aus Stufen entlang  $[\bar{1}\bar{1}0]$  können fingerähnliche Strukturen senkrecht herausragen, ohne daß die Elektronen-Zählregel verletzt wird. Dies ist auf STM-Bildern in der Tat zu sehen (siehe Pfeil A in Abb. 5.5). Stufen entlang  $[\bar{1}\bar{1}0]$  sind daher sehr rauh. Dagegen würden Strukturen, die aus einer Stufe entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  herauswachsen, die Elektronen-Zählregel verletzen und wären daher energetisch ungünstig. Aus diesem Grund sind Stufenkanten entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  extrem gerade.

Die Stufenstruktur dieser Oberfläche ist offensichtlich bereits in der Einheitszelle der Rekonstruktion angelegt, die drei atomare Lagen enthält und eine ausgezeichnete Richtung für Stufen aufweist. Die verschiedenen möglichen eindimensionalen Inselmodelle in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  zeigen zusammen mit den STM-Bildern, daß das bestimmende Strukturelement auf GaAs(113)A die Zickzackkette von As-Dimeren ist. Diese Schlußfolgerung wird von einer Studie auf InAs(311)A unterstützt [147]: In STM-Bildern wurden helle Reihen entlang  $[\bar{2}3\bar{3}]$  wie auf GaAs(113)A- $(8\times 1)$  beobachtet und als As-Dimerketten interpretiert. Mit RHEED war jedoch, je nach Präparationsbedingungen, eine  $(5\times 1)$ - und eine  $(15\times 2)$ -Periodizität zu erkennen. Die Autoren folgerten, daß auf dieser Oberfläche die gleichen As-Dimerketten auftreten wie auf GaAs(113)A- $(8\times 1)$ , jedoch in einer anderen Anordnung, wodurch sich eine andere Einheitszelle ergibt. Die Zickzack-Dimerkette ist also ein Strukturelement, das eine niedrige Energie haben muß. Auf niederindizierten GaAs-Oberflächen tritt diese Zickzackkette nicht auf. Erst die Untersuchung der höherindizierten GaAs(113)A-Oberfläche ermöglichte die Entdeckung dieses neuen energetisch günstigen Strukturelements. Vor der hier vorge-

stellten Studie ist die Bedeutung der Zickzackkette von As-Dimeren als neues Strukturelement einer Oberflächenrekonstruktion nicht so klar hervorgehoben worden. Auf eine mögliche weitere Stapelung dieser Zickzackketten wird noch näher in Abschnitt 5.4 eingegangen.

Die hier vorgestellten Ergebnisse lassen außerdem vermuten, daß Wachstum auf GaAs(113)A-(8×1) hauptsächlich durch Anlagerung in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  stattfindet. Dies wurde auch für InAs(113)A berichtet, basierend auf einer starken azimuthalen Abhängigkeit von RHEED-Oszillationen [147]. Die Plausibilität von Wachstum durch Anlagerung an Stufen parallel zu  $[1\bar{1}0]$  kann man sich anhand von Abb. 5.8 klar machen. Der Rand der dort gezeigten Insel bildet eine solche Stufe parallel zu  $[1\bar{1}0]$ . Insbesondere in dem vergrößerten Detailbild ist zu erkennen, daß an einer solchen Stufe stets mehr hängende Bindungen zur Verfügung stehen als auf Terrassen. Daher können auf der Oberfläche diffundierende Spezies dort leicht Inkorporationsplätze finden. Im Gegensatz dazu tritt an Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  die gleiche Anzahl von hängenden Bindungen auf wie auf Terrassen (vgl. Abb. 5.6), es werden also keine zusätzlichen Inkorporationsmöglichkeiten angeboten.

Es gibt drei mögliche Ursachen für eine anisotrope Stufenstruktur: unterschiedliche Stufenenergien, unterschiedliche Stufenreaktivitäten und anisotrope Diffusion auf der Oberfläche. In dieser Studie wurden die ersten beiden Punkte behandelt. Die Anwendung der Elektronen-Zählregel legt nahe, daß die Energie von Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  niedriger ist als die von Stufen senkrecht dazu. Das Auftreten von zusätzlichen hängenden Bindungen in dem in Abb. 5.8 vorgestellten Strukturmodell macht es plausibel, daß die Inkorporationswahrscheinlichkeit an Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  höher ist. Diese beiden Faktoren beeinflussen also die Stufenmorphologie in dieselbe Richtung. Eine Abschätzung des Einflusses der Diffusion ist auf der Basis der hier vorgestellten Ergebnisse nicht möglich. Pristovsek et al. untersuchten die Diffusion auf GaAs(113)A, aber eine mögliche Anisotropie wurde nicht berücksichtigt [114].

Zum Abschluß sei noch erwähnt, daß interessanterweise sehr ähnliche STM-Bilder in einem gänzlich anderen System aufgenommen wurden, nämlich der Pt(110)-(1×2)-Oberfläche [148, 149]. Diese Rekonstruktion besteht aus Atomreihen entlang  $[1\bar{1}0]$ , von denen im Vergleich zur idealen Oberfläche jede zweite fehlt. Stufen parallel zu diesen Atomreihen sind sehr gerade, in der dazu senkrechten Richtung dagegen sehr gezackt. Dies wurde durch unterschiedliche Stufenenergien erklärt.

## 5.4 Mesoskopische Rauigkeit

Für die Analyse der anisotropen Stufenstruktur wurden Bereiche der Oberfläche betrachtet, die etwa  $(3000 \text{ \AA})^2$  groß waren. In diesem Abschnitt geht es nun um die Morphologie der Oberfläche auf einer Skala der Größenordnung  $1 \mu\text{m}^2$ . Es wurde eine relativ große und stark anisotrope Rauigkeit berichtet, die sich in langen Gräben entlang  $[33\bar{2}]$  manifestiert [21, 45, 101, 113–115] (s. Literaturüberblick auf S. 59). Rauhe Oberflächen sind für die Herstellung von Halbleiter-Bauelementen ungünstig, da es nach dem Überwachsen an den Grenzflächen ungewollte Rekombinationszentren gibt. Die Anisotropie auf GaAs(113)A konnte aber für die Erzeugung von Quantenpunkten sehr guter Qualität genutzt werden [21]. Für MBE-präparierte Proben gibt es in der Literatur nur sehr wenige Studien zur Oberflächenmorphologie auf dieser Größenskala [21, 115]. In der vorliegenden Arbeit wurde die Struktur der Gräben erstmals atomar aufgelöst. Daraus ergaben sich Hinweise auf eine stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks.

### 5.4.1 STM-Ergebnisse

In Abb. 5.9 sind zwei  $1 \mu\text{m}^2$  große STM-Bilder von zwei verschiedenen Proben gezeigt. In beiden Fällen ist die Oberfläche im Vergleich zu niederindizierten Proben relativ rau. Dies ist in Übereinstimmung mit den eigenen Untersuchungen kleinerer Bereiche (Abschnitt 5.3, Abb. 5.5) und Studien anderer Autoren [2, 21, 45, 101, 113–115]. Etwa 20 Lagen tragen zur Oberfläche bei. Der maximale Höhenunterschied und die RMS-Rauigkeit<sup>4</sup> sind für beide Proben von der gleichen Größenordnung (s. Bildunterschrift). Zwischen den beiden Bildern gibt es jedoch signifikante Unterschiede. In Unterabb. (a) sind lange, flache „Täler“ entlang  $[33\bar{2}]$  zu erkennen, die sich praktisch über die gesamte Breite des Bildes erstrecken (s. Pfeile am Bildrand). An einigen Stellen haben sich  $\sim 20 \text{ \AA}$  tiefe Gräben ausgebildet, die  $\sim 3000 \text{ \AA}$  lang sind. Diese Gräben haben die Form von langgestreckten Dreiecken, deren Spitzen in Richtung  $[33\bar{2}]$  zeigen. In Unterabb. (b) besitzen dagegen nur sehr kleine Strukturen die Vorzugsrichtung  $[33\bar{2}]$ . Auf einer größeren Skala liegt höchstens eine schwache Anisotropie vor.

---

<sup>4</sup>Dies ist die Standardabweichung der über das gesamte Bild gemittelten Höhe. RMS steht für *root mean square*.

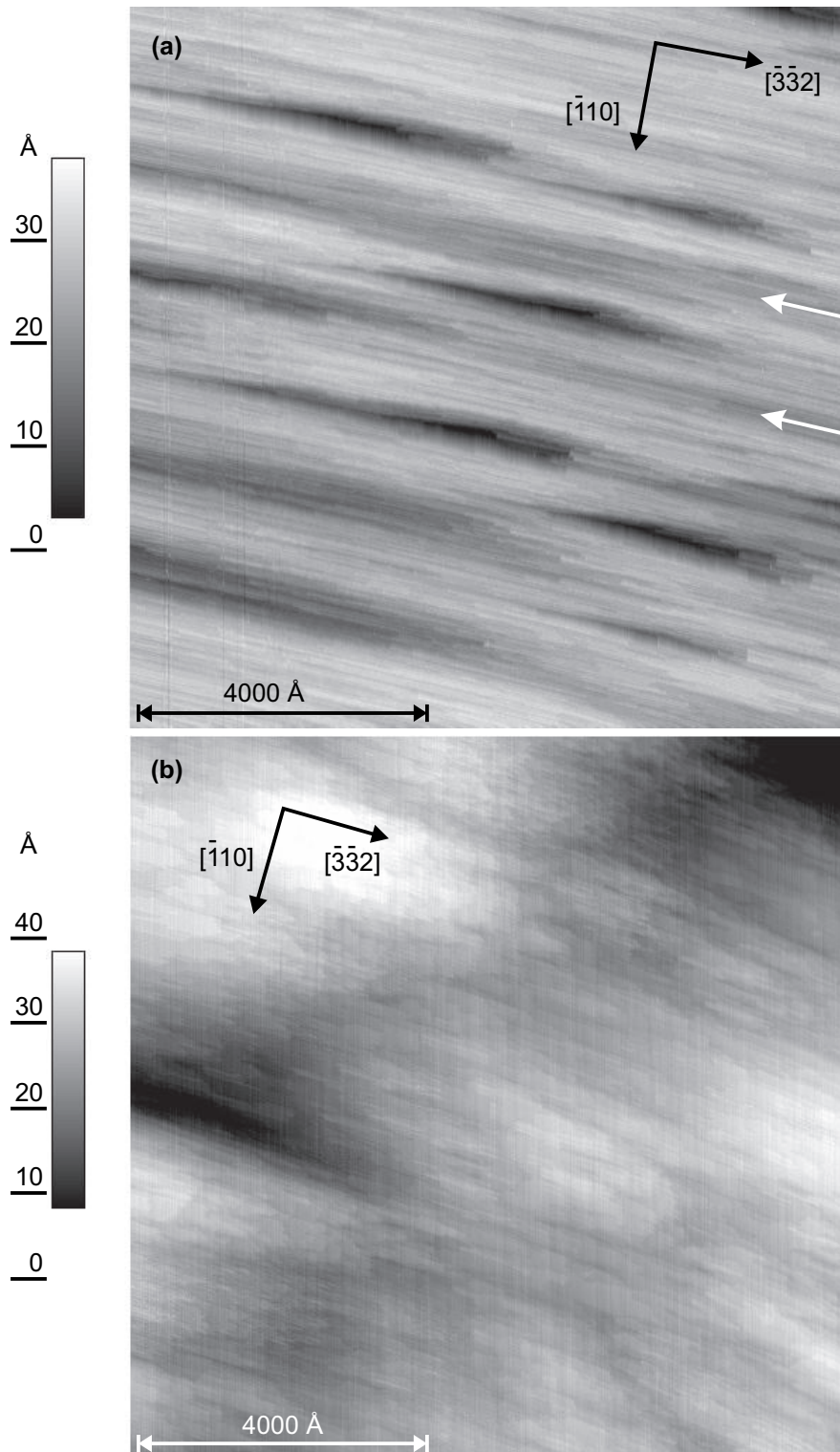


Abbildung 5.9: STM-Bilder größerer Bereiche der GaAs(113)A-(8×1)-Oberfläche. (a) Proben­temperatur  $\vartheta_{Probe} = 580^\circ\text{C}$ , Schichtdicke  $d \approx 180$  nm, max. Höhenunterschied  $\Delta h = 35$  Å, RMS-Rauigkeit  $R_{RMS} = 5,1$  Å,  $U_{Probe} = -2,5$  V,  $I = 0,1$  nA. (b)  $\vartheta_{Probe} = 600^\circ\text{C}$ ,  $d \approx 30$  nm (Wachstumsunterbrechungen),  $\Delta h = 42$  Å,  $R_{RMS} = 6,4$  Å,  $U_{Probe} = -2,5$  V,  $I = 0,2$  nA.

Die Präparationsbedingungen für die beiden Proben waren unterschiedlich (s. Bildunterschrift). Für die in Unterabb. (a) gezeigte Oberfläche wurde eine deutlich dickere Schicht bei einer niedrigeren Temperatur auf das Substrat gewachsen. Für die Präparation in Unterabb. (b) wurde das Wachstum mehrmals unterbrochen. Die quantitative Auswertung der Stufenanisotropie (Abschnitt 5.3) wurde an Proben ähnlich der in Abb. 5.9(b) gezeigten durchgeführt, da diese Präparationsbedingungen eher zur Ausbildung des thermodynamischen Gleichgewichtszustandes führen. Die Berücksichtigung von Proben wie in Unterabb. (b) würde an den qualitativen Ergebnissen nichts ändern. Das Verhältnis der lateralen Stufendichten wäre lediglich noch größer.

Die Anisotropie in Unterabb. (a) ähnelt dem, was für MOVPE-präparierte Proben [45, 101, 113, 114] und für MBE-Wachstum unter Hinzugabe von atomarem Wasserstoff [21, 115] berichtet wurde. In diesen Studien waren die „Täler“ jedoch stärker ausgeprägt, erstreckten sich über mehrere Mikrometer und waren zudem in Richtung  $\bar{1}10$  periodisch angeordnet. Dreieckige Gräben wurden in Ref. [21, 45, 101, 113–115] nicht beobachtet, was aber auch auf die geringere Auflösung der dort verwendeten Analysemethoden zurückzuführen sein könnte. Es sei darauf hingewiesen, daß InAs/GaAs(113)A-Quantenpunkte pfeilförmig sind und deren Spitzen in die gleiche Richtung zeigen wie die der dreieckigen Gräben in Abb. 5.9(a) [131, 133]. Bei der Homoepitaxie auf GaAs(113)A-Substraten, in die regelmäßige Felder quadratischer Löcher und Mesen geätzt wurden, bilden sich ebenfalls dreieckige Strukturen [150, 151]. Diese Strukturen sind sehr viel größer als Quantenpunkte, und ihre Spitzen zeigen in die entgegengesetzte Richtung wie die der dreieckigen Gräben in Abb. 5.9(a).

Die Morphologie in Unterabb. (b) entspricht dagegen dem, was für konventionelle MBE-Präparation beobachtet wurde [21, 115]. Im Vergleich zu den H-modifizierten Proben wurden diese Oberflächen als relativ glatt angesehen. Die AFM-Bilder in Ref. [21, 115] zeigen jedoch Höhenunterschiede vergleichbar mit denen in Abb. 5.9(b) und ebenfalls feine anisotrope Strukturen.

Die bisherigen Studien zur mesoskopischen Morphologie wurden mit SEM [101] und AFM [21, 45, 113–115] durchgeführt. Die mikroskopische Struktur der „Täler“ war aufgrund der zu geringen Auflösung dieser Methoden nicht zugänglich. Mit Hilfe des STM konnte diese Struktur in den dieser Arbeit zugrundeliegenden Experimenten aufgeklärt werden. In Abb. 5.10 ist ein hochaufgelöstes STM-Bild gezeigt, das in dem Bereich der Spitze eines dreieckigen Grabens aufgenommen wurde. Die charakteristischen Dimer-Zickzackketten der  $(8\times 1)$ -Rekonstruktion sind deutlich in acht verschie-

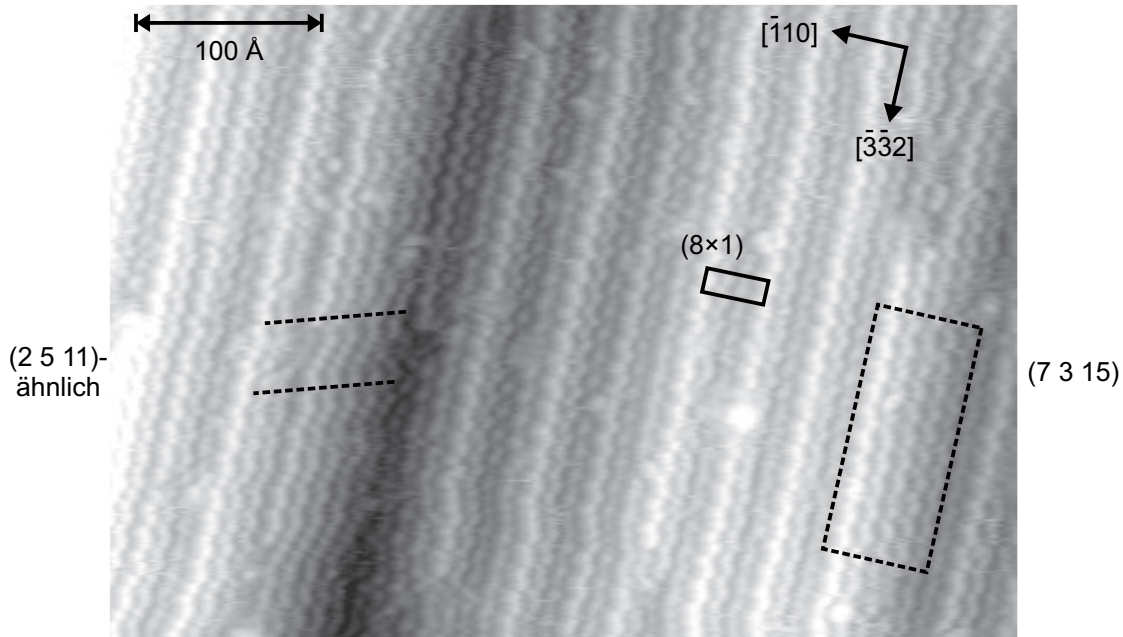


Abbildung 5.10: Hochaufgelöstes STM-Bild aus dem Bereich der Spitze eines dreieckigen Grabens auf GaAs(113)A-(8×1).  $U_{Probe} = -2,8\text{ V}$ ,  $I = 0,2\text{ nA}$ . Man beachte, daß das Bild gegenüber Abb. 5.9(a) gedreht ist.

denen Lagen zu erkennen. Die Terrassen sind jedoch in Richtung  $[\bar{1}10]$  so schmal, daß nicht in allen Lagen vollständige (8×1)-Einheitszellen ausgebildet sind. Statt dessen treten Stufenbündel auf.

Ein besonders dichtes Stufenbündel ist auf der rechten Seite von Abb. 5.10 in dem gestrichelten Rechteck zu sehen. Dieses Stufenbündel kann auch als Mikrofacette aufgefaßt werden. Deren Struktur wird im folgenden erklärt, da die entsprechende Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks liegt und für die weitere Diskussion wichtig ist. In Abschnitt 5.3.2 wurde gezeigt, daß eine Struktur bestehend aus einem GaAs(113)A-(8×1)-Substrat mit einer zusätzlichen Dimerkette als eindimensionale Insel darauf die Elektronen-Zählregel erfüllt. Daraus folgt, daß diese Konfiguration wahrscheinlich stabil ist, und eine ähnliche Insel wurde mit dem STM tatsächlich beobachtet (Abb. 5.7 auf S. 72). Diese Struktur enthält eine schräg ansteigende Folge von drei Dimerketten (Abb. 5.6(a)). Anhand von Abb. 5.4 wurde bereits diskutiert, daß Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  von dieser Form und damit konsistent mit der (8×1)-Rekonstruktion sind (s.S. 68). Dies wird auch in Abb. 5.10 deutlich. Durch Stapeln weiterer Dimerketten kann diese ansteigende Folge fortgesetzt wer-

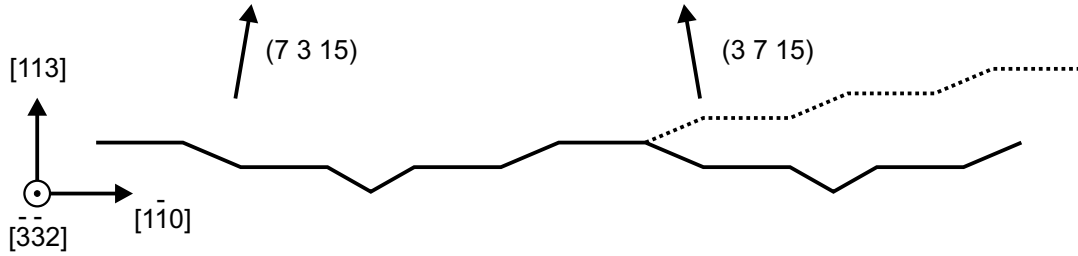


Abbildung 5.11: Kontinuierliches Stapeln der Dimerketten auf GaAs(113)A-(8×1) ergibt die Oberfläche mit der Orientierung (3 7 15). Spiegelsymmetrisch dazu liegt (7 3 15). Durchgezogene Linie: GaAs(113)A-(8×1). Gestrichelte Linie: GaAs(3 7 15). Die horizontalen Liniensegmente stellen Dimerketten dar (vgl. Abb. 5.3 und 5.6 auf S. 64 bzw. 71).

den, und man erhält eine neue Oberfläche (Abb. 5.11). Diese besitzt die Orientierung (3 7 15). Durch Stapeln in die entgegengesetzte Richtung wird die Ebene (7 3 15) gebildet. Das Stufenbündel in dem gestrichelten Rechteck in Abb. 5.10 ist ein solcher Stapel von fünf Dimerketten. Diese Dimerketten bilden also eine Mikrofacette der Orientierung (7 3 15). In der entgegengesetzten Richtung treten in diesem Ausschnitt der Oberfläche nur Stapel von höchstens drei Dimerketten auf. Auf anderen, hier nicht abgebildeten STM-Bildern sind aber auch in dieser Richtung größere Stapel zu sehen. Aufgrund der Kristallsymmetrie sind die beiden Ebenen äquivalent.

In Abb. 5.12(a) ist die (7 3 15)-Mikrofacette aus Abb. 5.10 vergrößert dargestellt. Da für die weitere Diskussion der Bezug auf (3 7 15) günstiger ist, wurde das Bild gespiegelt, so daß nun diese Oberfläche gezeigt wird. Zusätzlich wurde ein linearer Untergrund abgezogen, so daß (3 7 15) in der Zeichenebene liegt. Rechts daneben ist in Unterabb. (b) ein Strukturmodell der (3 7 15)-Oberfläche zu sehen, das auf den von GaAs(113)A-(8×1) bekannten Arsen-Dimerketten basiert. Um zu der abgebildeten (1×1)-Rekonstruktion zu gelangen, wurde zu der idealen (3 7 15)-Oberfläche pro Einheitszelle ein Arsenatom hinzugefügt und die Anzahl hängender Bindungen durch Dimerisierung reduziert.

In Abb. 5.10 ist auch zu erkennen, wie sich die „Spitze“ des dreieckförmigen Grabens ausbildet. An einigen Stellen sind die normalen Zickzack-Ketten gestört, und es treten hintereinander mehrere „Zicks“ auf (z. B. zwischen den gestrichelten Linien auf der linken Seite). Diese Unregelmäßigkeiten erstrecken sich über mehrere Lagen, wodurch sich die Breite des Grabens vergrößert. Übereinanderliegende „Zickzick“-Dimerfolgen



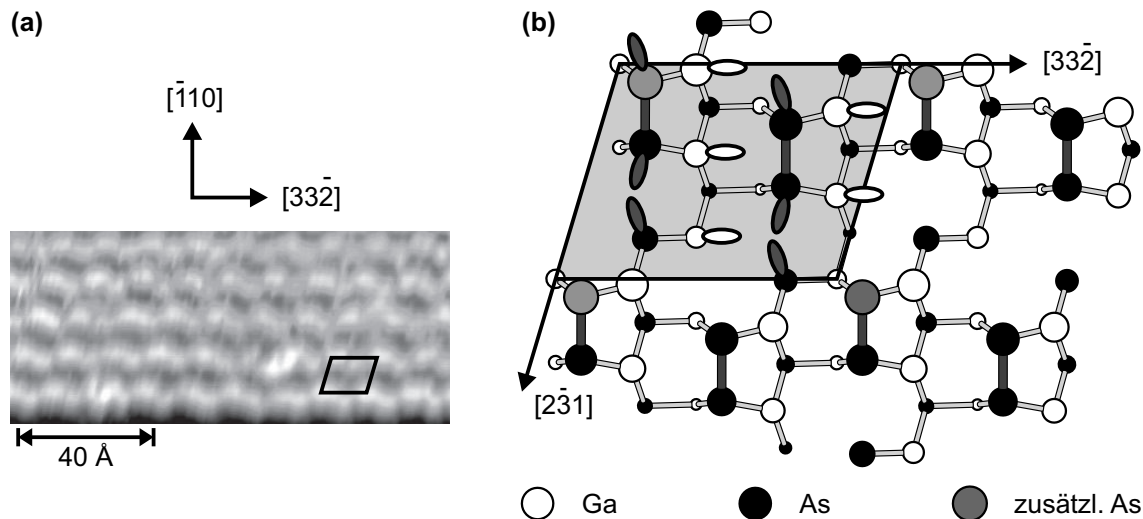


Abbildung 5.12: Die rekonstruierte GaAs(3715)-Oberfläche. (a) Vergrößerter Ausschnitt aus Abb. 5.10, der die (7315)-Facette enthält. Um zu (3715) zu gelangen, wurde eine Spiegelung durchgeführt. (b) Strukturmodell. Tieferliegende Atome sind durch kleinere Kugeln dargestellt. Das graue Parallelogramm ist die Einheitszelle. Deren Seiten sind 10,6 Å und 13,3 Å lang, und der eingeschlossene Winkel beträgt 73,4°. Gefüllte bzw. leere hängende Bindungen sind als dunkelgraue bzw. weiße Ellipsen eingezeichnet.

(durch gestrichelte Linien markierter Bereich) entsprechen den für GaAs(2511) charakteristischen Streifen (s. Kapitel 6).

Die „Zickzick“-Dimerfolgen scheint es auf den beiden gegenüberliegenden langen Seiten des Grabens jeweils nur in einer Richtung zu geben. Daher schließt sich der Graben in Richtung  $[\bar{3}\bar{3}2]$  nicht auf die gleiche Weise, wie er sich weitet. Statt dessen wird die der Dreieckspitze gegenüberliegende Seite, die parallel zu  $[\bar{1}10]$  orientiert ist, durch benachbarte Dimerketten gebildet, die in Richtung  $[33\bar{2}]$  ungefähr an der gleichen Stelle enden. Dies ist in Abb. 5.9(a) zu erahnen und in Abb. 5.13 rechts unten deutlicher zu sehen.

## 5.4.2 Diskussion

Übereinstimmend gilt für alle hier und in anderen Studien [2, 21, 45, 101, 113–115] untersuchten GaAs(113)A-Proben, daß Terrassen nur eine geringe Flächenausdehnung besitzen und die Oberfläche aus mehreren Lagen gebildet wird. Bei der Anwesenheit von atomarem Wasserstoff während des Wachstumsprozesses – sei es intrinsisch (MOV-

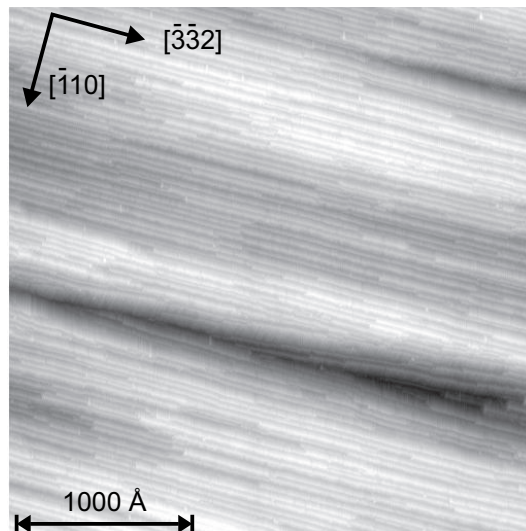


Abbildung 5.13: Dreieckiger Graben in GaAs(113)A-(8×1). Präparationsbedingungen wie in Abb. 5.9(a).  $U_{Probe} = -2,5 \text{ V}$ ,  $I = 0,1 \text{ nA}$ .

PE) oder durch bewußte Hinzugabe (MBE) – bilden sich lange Täler entlang  $[3\bar{3}2]$  aus, die periodisch angeordnet sind [21, 45, 101, 113–115]. Diese Anisotropie ist auf mit normaler MBE präparierten Proben deutlich weniger stark ausgeprägt bzw. nur auf kleineren Längenskalen vorhanden. Der genaue Einfluß der MBE-Wachstumsbedingungen auf die mesoskopische Anisotropie wurde noch nicht systematisch untersucht.

Das Auftreten der (3 7 15)-Abschnitte auf den Seitenwänden der Gräben deutete darauf hin, daß die entsprechende Oberfläche stabil ist. Dies war ein weiterer Hinweis auf eine singuläre Fläche im Inneren des stereografischen Dreiecks und motivierte die Untersuchung von Vizinalflächen zu GaAs(113)A. Für die weitere Diskussion der Grabenstruktur muß teilweise auf die Ergebnisse dieser Studie zurückgegriffen werden, die erst in Kapitel 6 beschrieben werden.

Der Ursprung der mesoskopischen Anisotropie ist noch nicht genau verstanden. Da auf MOVPE-präparierten Proben der Abstand der Täler mit steigender Schichtdicke und Temperatur größer wird, schlossen Nötzel et al. auf einen kinetischen Effekt [101]. Sie schlugen vor, daß die anisotrope Rauigkeit durch Stufenbündelung verursacht wird und die Periode der Diffusionslänge entspricht. Die Änderung der Morphologie durch die Hinzugabe von Wasserstoff während des MBE-Wachstums zeigt deutlich, daß dieser entscheidenden Anteil an der Ausbildung der mesoskopischen Täler hat [21, 115]. Als Erklärung gaben die Autoren dieser Studien an, daß der Wasserstoff die Energiebarriere

Tabelle 5.3: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf die rekonstruierte GaAs(3715)-Oberfläche

Bindungstyp	liefert	benötigt
5 Ga häng. Bind.	$5 \cdot \frac{3}{4} = 3\frac{3}{4}$	$5 \cdot 0 = 0$
6 As häng. Bind.	$6 \cdot \frac{5}{4} = 7\frac{1}{2}$	$6 \cdot 2 = 12$
2 As-As	$2 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 5$	$2 \cdot 2 = 4$
Summe	$16\frac{1}{4}$	16

für die Bewegung von Adatomen über Stufenkanten im Vergleich zu der auf Terrassen erniedrige. Dies führe zu einer erhöhten Inkorporationsrate an Abwärtsstufen-Plätzen und damit zu Stufenbündelung (Modell für die Entwicklung von Terrassenlängen in Ref. [152]).

Die sich aus Abb. 5.10 ergebende Struktur des Grabens läßt sich in der Tat im thermodynamischen Gleichgewicht nicht erklären. Das Auftreten von Facetten auf einer Oberfläche deutet darauf hin, daß die der Facettenorientierung entsprechende Oberfläche eine niedrigere Energie besitzt als die nominelle Oberfläche (s. Abschnitt 2.1.1). Die rekonstruierte GaAs(3715)-Oberfläche verletzt jedoch die Elektronen-Zählregel (Tab. 5.3). Daher ist es unwahrscheinlich, daß sie stabil ist. Im Zuge der Untersuchung der neuen stabilen GaAs-Oberfläche (2511) wurde die Oberflächenenergie der in Abb. 5.12(b) gezeigten Rekonstruktion auf der Basis der Dichtefunktional-Theorie zu  $55 \text{ meV}/\text{Å}^2$  berechnet [153] (s. Kapitel 6). Die Energie der GaAs(113)A-(8×1)-Oberfläche beträgt dagegen nur  $47 \text{ meV}/\text{Å}^2$  [3] (Beide Werte gelten für arsenreiche Bedingungen.). Nur aufgrund der Energien der beiden Oberflächen läßt sich also das Auftreten der (3715)-Facetten auf GaAs(113)A-(8×1) nicht verstehen. Bei dieser Betrachtung ist zwar zu berücksichtigen, daß die Größe der (3715)-Facetten recht gering ist. Wie Tab. 5.3 zu entnehmen ist, beträgt der Ladungsüberschuß auf GaAs(3715) nur ein viertel Elektron; und an den Rändern einer Facette bestehen zusätzliche Möglichkeiten, diesen zu kompensieren. Jedoch ist nicht anzunehmen, daß dadurch die Energie dieser Facetten so weit abgesenkt wird, daß sie eine günstigere Konfiguration darstellen als die rekonstruierte (113)-Oberfläche.

Auch die Ausbildung der (2511)-ähnlichen Streifen kann im Gleichgewicht nicht erklärt werden. Diese Oberfläche ist zwar stabil, ihre Oberflächenenergie liegt mit  $53 \text{ meV}/\text{Å}^2$  [153] (s. Kapitel 6) aber auch über der von GaAs(113)A. Überraschend

ist auch, daß der Graben sich nicht über äquivalente, aber entgegengesetzt gerichtete Streifen schließt. Die Fläche, die sich aus solchen hypothetischen „Zackzack“-Störungen ergäbe, ist  $(5\ 11\ 23)$ . Zu ihrer Stabilität ist nichts bekannt, aber da sie in der Einheitszelle die gleichen Strukturelemente wie  $(2\ 5\ 11)$  in einer ähnlichen Anordnung besitzt, ist eine vergleichbare Oberflächenenergie zu erwarten.<sup>5</sup>

Wie von Nötzel et al. vermutet wurde [101], werden die mesoskopischen Täler tatsächlich durch Stufenbündelung gebildet (s. Abb. 5.10). Die in Ref. [21, 115] angegebene Erklärung ist jedoch nicht vereinbar mit den in der vorliegenden Arbeit gewonnenen Erkenntnissen zur Struktur der GaAs(113)A- $(8\times 1)$ -Oberfläche:

1. Die Stufenbündel bilden sich parallel zu  $[33\bar{2}]$  aus, und im Mittel treten gleich viele Aufwärts- und Abwärtsstufen auf. Bei einer Erhöhung der Inkorporationsrate an Abwärtsstufen-Plätzen durch die Anwesenheit von Wasserstoff würden Gräben wie der in Abb. 5.10 also vielmehr aufgefüllt werden. Die meisten Atome, die auf der obersten,  $(8\times 1)$ -rekonstruierten Terrasse ankommen, würden in diesem Szenario in den Graben diffundieren und dort eingebaut werden. Ein solcher glättender Einfluß von atomarem Wasserstoff wurde auf nominell orientierten GaAs(001)-Proben beobachtet [154]. Das Auftreten von Stufenbündeln ist dagegen nur zu erwarten, wenn alle Stufen in die gleiche Richtung laufen. Dies wurde für vizinale GaAs(001)-Proben nach MOVPE-Präparation berichtet [155–157].
2. Stufen zwischen verschiedenen Terrassen sind entlang  $[33\bar{2}]$  von der gleichen Form wie die Lagen-Stufen innerhalb der  $(8\times 1)$ -Einheitszelle, d. h., an den Stufenkanten treten keine Atome in anderen Bindungskonfigurationen auf. Daher ist nicht zu erwarten, daß Wasserstoff die Diffusionsbarriere in Richtung  $[1\bar{1}0]$  an Terrassen-Stufen anders beeinflußt als auf der Terrasse selbst.
3. Wie in Abschnitt 5.3.3 erläutert wurde, findet Wachstum wahrscheinlich hauptsächlich durch Anlagerung in Richtung  $[33\bar{2}]$  und nicht in Richtung  $[1\bar{1}0]$  statt.

Pristovsek et al. wiesen darauf hin [114], daß eine ähnliche mesoskopische Anisotropie auf Pt(110) beobachtet und dort auf eine intrinsische Verspannung der Oberfläche zurückgeführt wurde [158]. Die quantitative Beschreibung in Ref. [158] erwies sich

---

<sup>5</sup>Die  $(5\ 11\ 23)$ -Fläche ist nicht identisch mit der  $(5\ 2\ 11)$ -Fläche. Letztere ist spiegelsymmetrisch zu  $(2\ 5\ 11)$  und wurde in der sphärischen Mulde auf GaAs(113)A ebenfalls beobachtet (s. Abschnitt 5.5 und Kapitel 6).

jedoch als falsch [159], so daß Verspannung nur noch als eine plausible Erklärungsmöglichkeit angesehen wurde [160]. Eine detailliertere Untersuchung der Stufenverteilung auf Pt(110) ergab, daß die beobachtete Struktur mit einem einfachen Modell einer verspannten Oberfläche mit lediglich dipolaren Kräften nicht kompatibel ist [161]. Daher wurde vermutet, daß multipolare Kräfte einbezogen werden müssen, die sich aus einer dreidimensionalen Verspannungsverteilung ergeben. Die genaue Ursache der mesoskopischen anisotropen Korrugation ist also auch auf dieser Oberfläche noch unverstanden. Darüber hinaus ist es zweifelhaft, ob eventuelle Ergebnisse auf GaAs(113)A übertragen werden könnten. Die Experimente in Ref. [158] zeigten nämlich, daß die mesoskopische Anisotropie auf Pt(110) die Gleichgewichtsstruktur darstellt und gerade nicht auf kinetische Effekte zurückzuführen ist.

Zu den mikroskopischen Wachstumsvorgängen gibt es auf GaAs(113)A keine detaillierten Untersuchungen. Der Einfluß von atomarem Wasserstoff auf GaAs-Oberflächen ist generell noch nicht geklärt. Zu diesem Zeitpunkt ist es daher nicht möglich, ein wohlfundiertes Modell für die Ausbildung der mesoskopischen anisotropen Rauigkeit auf GaAs(113)A-(8×1) zu entwickeln. Dieses Phänomen wäre aber in folgendem Szenario zu verstehen:

In Abschnitt 5.3.2 wurde auf S. 70 bereits diskutiert, daß sich die Dimerkette der nächsten Lage an zwei verschiedenen aber äquivalenten Plätzen formen kann. Dies wird noch einmal in Abb. 5.14 verdeutlicht. Die Dimerkette der zusätzlichen Lage kann sich entweder als Fortsetzung der von links nach rechts oder von rechts nach links ansteigenden Lagen-Stufen in der (8×1)-Einheitszelle des Substrats bilden. Wenn zwei solche entgegengesetzt gerichteten Fortsetzungen aufeinanderstoßen, entsteht lokal eine Konfiguration, die die (8×1)-Periodizität verletzt. Daher bildet sich eine Domänengrenze aus. Es ist gut vorstellbar, daß eine solche Domänengrenze den Keim für einen Graben darstellt. Domänengrenzen müssen nicht unbedingt genau von der in Abb. 5.14 gezeigten Form sein, hier soll lediglich die Idee vermittelt werden. In Abb. 5.10 lassen sich Abstände nicht exakt genug messen, um die genaue Konfiguration in der Grabensohle zu bestimmen und auf das Vorliegen einer Domänengrenze zu prüfen. Wahrscheinlich haben sich dort zwei der Grabenelemente der (8×1)-Einheitszelle direkt nebeneinander ausgebildet.

Die Verstärkung der Gräben durch die Anwesenheit von Wasserstoff könnte erklärt werden, wenn dieser die Barriere für Diffusion in Richtung  $[1\bar{1}0]$  *erhöhen* würde. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Graben „von der Seite“ aufgefüllt wird, würde dadurch er-

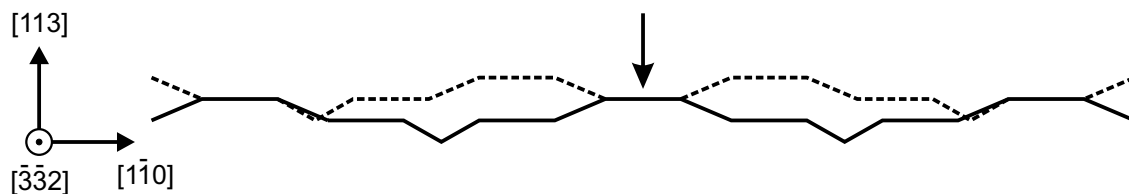


Abbildung 5.14: Ausbildung einer Domänengrenze (Pfeil) auf GaAs(113)A-(8×1). Durchgezogene Linie: Substrat; gestrichelte Linie: neu gewachsene Dimerketten.

niedrigt. In Längsrichtung wäre das Wachstum von Dimerketten in den Gräben hinein wegen der Domänengrenze gehemmt. Bei höheren Wachstumstemperaturen wäre die Anzahl von diffundierenden Atomen, die die Barriere überwinden können, größer, und der mittlere Abstand zwischen den Gräben würde zunehmen.

Dieses Modell ist nicht als vollständige Erklärung aufzufassen. Es wird z. B. angenommen, daß der Wasserstoff die Diffusionsbarriere erhöht, dafür aber keine Begründung gegeben. Darüber hinaus müßte für eine bessere Absicherung die Entwicklung von Terrassen in einem zweidimensionalen Modell mit anisotropen Anlagerungsraten simuliert werden. Das obige Szenario stellt jedoch einen interessanten Ansatz dar, der vielversprechender ist als die bisherigen Erklärungsversuche für die anisotrope mesoskopische Korrugation auf GaAs(113)A.

## 5.5 Sphärische Mulde in GaAs(113)A

### 5.5.1 Einführung

Sowohl die Ergebnisse der Studie auf GaAs(112)A (Kapitel 4) als auch die Analyse der mesoskopischen Gräben auf GaAs(113)A (Abschnitt 5.4) deuteten auf eine neue stabile GaAs-Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks hin. Die entsprechenden Orientierungen sind (124) und (3715), wovon erstere mit einer experimentellen Unsicherheit behaftet ist. Eine Literaturrecherche lieferte weitere ähnliche Hinweise aus jüngster Zeit: Lee et al. untersuchten die Form von dreidimensionalen InAs-Inseln auf GaAs(001) (Quantenpunkte) mit RHEED und fanden einhüllende Facetten, die {136}-Ebenen entsprechen [19]. Hasegawa et al. analysierten das gleiche Materialsystem mit STM und folgerten aus ihren Ergebnissen, daß einige der Seitenwände der Inseln die Orientierung {125} haben [20]. Die relative Lage all dieser Ebenen ist dem stereografischen Dreieck in Abb. 5.15 zu entnehmen.

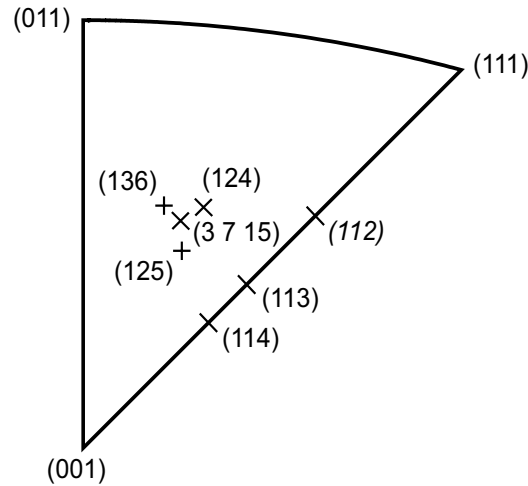


Abbildung 5.15: Stereografisches Dreieck mit den Orientierungen im Inneren, die als Facetten beobachtet wurden. Die mit einem  $\times$  markierten Ebenen wurden auf anderen GaAs-Oberflächen beobachtet, die mit einem  $+$  gekennzeichneten dagegen auf InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten. Die auf einer der Seiten des Dreiecks gelegenen Flächen aus der  $[\bar{1}10]$ -Zone sind ebenfalls eingezeichnet.

Die Beobachtung einer Ebene als Facette ist noch kein eindeutiger Beweis dafür, daß die entsprechende Oberfläche tatsächlich stabil ist. Eine Wechselwirkung mit benachbarten Facetten, ein Einfluß der Kanten zwischen den Facetten und kinetische Effekte können eine Rolle spielen. Es ist ebenfalls vorstellbar, daß sich auf Facetten, die nur einige Einheitszellen groß sind, eine andere Struktur ausbildet als auf einer planaren Probe. Bei den der Literatur entnommenen Berichten [19, 20] ist auch zu berücksichtigen, daß die dort untersuchten Quantenpunkte aus InAs bestehen und verspannt sind. Um die Existenz einer stabilen Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks zu belegen und deren Struktur zu bestimmen, ist es also wünschenswert, GaAs-Oberflächen mit Orientierungen entsprechend den erwähnten Hinweisen zu untersuchen. Einkristallproben mit solchen Orientierungen sind jedoch kein Standardprodukt der Halbleiterbranche und daher sehr teuer.

Bei der Betrachtung des stereografischen Dreiecks in Abb. 5.15 fällt auf, daß die sich aus den Hinweisen ergebenden Ebenen alle in der Nähe von (113) liegen. Die jeweiligen Winkel zwischen diesen Orientierungen und (113) sind in Tab. 5.4 zusammengefaßt. Die den in diesem Abschnitt beschriebenen Experimenten zugrundeliegende Idee war daher, die vorhandenen GaAs(113)A-Proben so zu modifizieren, daß auf ihnen die erstrebten Oberflächen untersucht werden können.

Tabelle 5.4: Winkel zwischen den angegebenen Ebenen und (113)

Ebene	(124)	(3715)	(125)	(136)
Winkel / °	9,3	9,7	7,7	12,0

Die Studie von GaAs-Oberflächen, die näher bei (113) liegen, ist aus einem anderen Grund ebenfalls vielversprechend. Generell weist die Verwendung von geringfügig fehlorientierten Einkristallproben oft Vorteile auf gegenüber der von nominell orientierten. Dies gilt sowohl für grundlegende Studien in der Oberflächenphysik als auch für die Herstellung von Halbleiter-Bauelementen. Auf solchen Vizinalflächen ist eine hohe Dichte von Stufen zu erwarten, deren Richtung durch die azimuthale Richtung des Fehlschnitts beeinflusst wird. Die tatsächliche Stufenform weicht oft von der ab, die nur aufgrund der Fehlorientierung zu erwarten wäre. Die Stufenkanten können z. B. glatt oder rauh sein oder sich an einer Vorzugsrichtung des Kristalls ausrichten. Statt vieler Stufen mit der Höhe eines einzelnen Lagenabstandes können Stufen zu Bündeln größerer Höhe zusammenlaufen, wodurch sich die mittlere Terrassenbreite erhöht. Die Untersuchung dieser Phänomene ermöglicht einen Einblick in die atomare Struktur der Stufen und in die Wechselwirkungen zwischen ihnen. Außerdem kann der Einfluß von Stufen auf Wachstumsvorgänge studiert werden. Zum Beispiel kann auf Vizinalflächen Epitaxie so kontrolliert werden, daß Wachstum im Stufenfluß- statt im Lagenmodus stattfindet (s. Abschnitt 2.2.1). Die sich ergebenden Oberflächen weisen dadurch praktisch keine Inseln auf und sind daher sehr glatt. Dies kann dazu genutzt werden, um hochwertige Grenzflächen in Heterostrukturen wie z. B. Quantenfilm-Lasern zu erreichen. Eine andere Anwendungsmöglichkeit von Vizinalflächen ist es, auf regelmäßigen Anordnungen von Stufen durch selbstorganisiertes Wachstum niederdimensionale Strukturen wie etwa Quantendrähte zu erzeugen [10, 18].

In Abschnitt 5.3 wurde beschrieben, daß die Stufenstruktur der GaAs(113)A-(8×1)-Oberfläche stark anisotrop ist. Stufen entlang  $[33\bar{2}]$  sind über bis zu 2000 Å extrem gerade, und Stufen parallel zu  $[\bar{1}10]$  weisen sehr viele Kinks auf. Die sehr geraden Stufen könnten möglicherweise als Substrat für die Präparation von Quantendrähten eingesetzt werden. Dazu muß untersucht werden, inwieweit eine regelmäßige Stufenfolge und eventuell Stufenbündelung induziert werden kann. A priori ist jedoch unklar, wie groß die Fehlorientierung sein muß und welche azimuthale Richtung gewählt werden muß, um die besten Ergebnisse zu erzielen.



Sowohl für die Suche nach einer möglichen stabilen Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks als auch für die weitere Studie der sehr geraden Stufen auf GaAs(113)A-(8×1) war also die Präparation vieler verschiedener Vizinalflächen von GaAs(113) notwendig. Daher wurde eine Methode entwickelt, eine sphärische Mulde in eine planare Probe zu schleifen. Die Präparation der Mulde wurde bereits in Abschnitt 3.2.2 beschrieben. Eine schematische Zeichnung, aus der die Lage der verschiedenen Orientierungen in der Mulde hervorgeht, ist in Abb. 5.16(a) dargestellt. In der Mulde liegt eine kontinuierliche Schar von Vizinalflächen zu (113) mit Fehlorientierungen bis zu 11,5° in allen azimuthalen Richtungen vor. Eine Fehlorientierung in Richtung  $[3\bar{3}2]$  und dazu entgegengesetzt ergibt Oberflächen mit den Orientierungen (11n). Im stereografischen Dreieck (vgl. Abb. 5.15) entspricht dies der Seitenlinie zwischen den Ecken (001) und (111). In der Mulde sollten sowohl Bereiche mit der Orientierung (112) als auch (114) existieren, da die Winkel dieser Flächen zu (113) 10,0° bzw. 5,8° sind. Die Orientierungen aller anderen Regionen in der Mulde liegen im Inneren des stereografischen Dreiecks. Aufgrund der Kristallsymmetrie des Zinkblendegitters gehen die in der Mulde rechts und links von der Geraden, die durch den Mittelpunkt in Richtung  $[1\bar{1}0]$  geht, gelegenen Flächen durch Spiegeln ineinander über.

### 5.5.2 Überprüfung der Präparationsmethode

Durch den Schleifvorgang werden die Einkristallproben naturgemäß stark beansprucht. Das erste Ziel der Experimente war daher sicherzustellen, daß die Oberflächenqualität in der Mulde hinreichend gut ist. Zu diesem Zweck wurden LEED-Bilder aufgenommen, bei denen der Elektronenstrahl auf Bereiche der Mulde gerichtet war, in denen eine bekannte Oberfläche zu erwarten war. Dazu wurde die Probe senkrecht zur Strahlrichtung bewegt. Die durch die Krümmung der Mulde hervorgerufene Kippung mancher Bereiche gegenüber der Strahlrichtung wurde nicht mit dem Manipulator korrigiert. In Abb. 5.16(b) ist ein solches Bild gezeigt, das im Zentrum der Mulde aufgenommen wurde. In diesem Bereich hat die Oberfläche die nominelle Orientierung (113). In der Tat ist das von GaAs(113)A bekannte (8×1)-Muster zu erkennen (vgl. Abb. 5.2 auf S. 62). Dieses Bild ist im wesentlichen identisch mit solchen, die auf der Probenoberfläche neben der Mulde aufgenommen wurden (nicht abgebildet). Für das Bild (c) wurde die Probe in Richtung  $[\bar{3}\bar{3}2]$  verschoben. Wie erwartet wurde das Muster der GaAs(114)A-c(2×2)-Rekonstruktion [5, 67] gefunden. Das Auftreten von doppel-

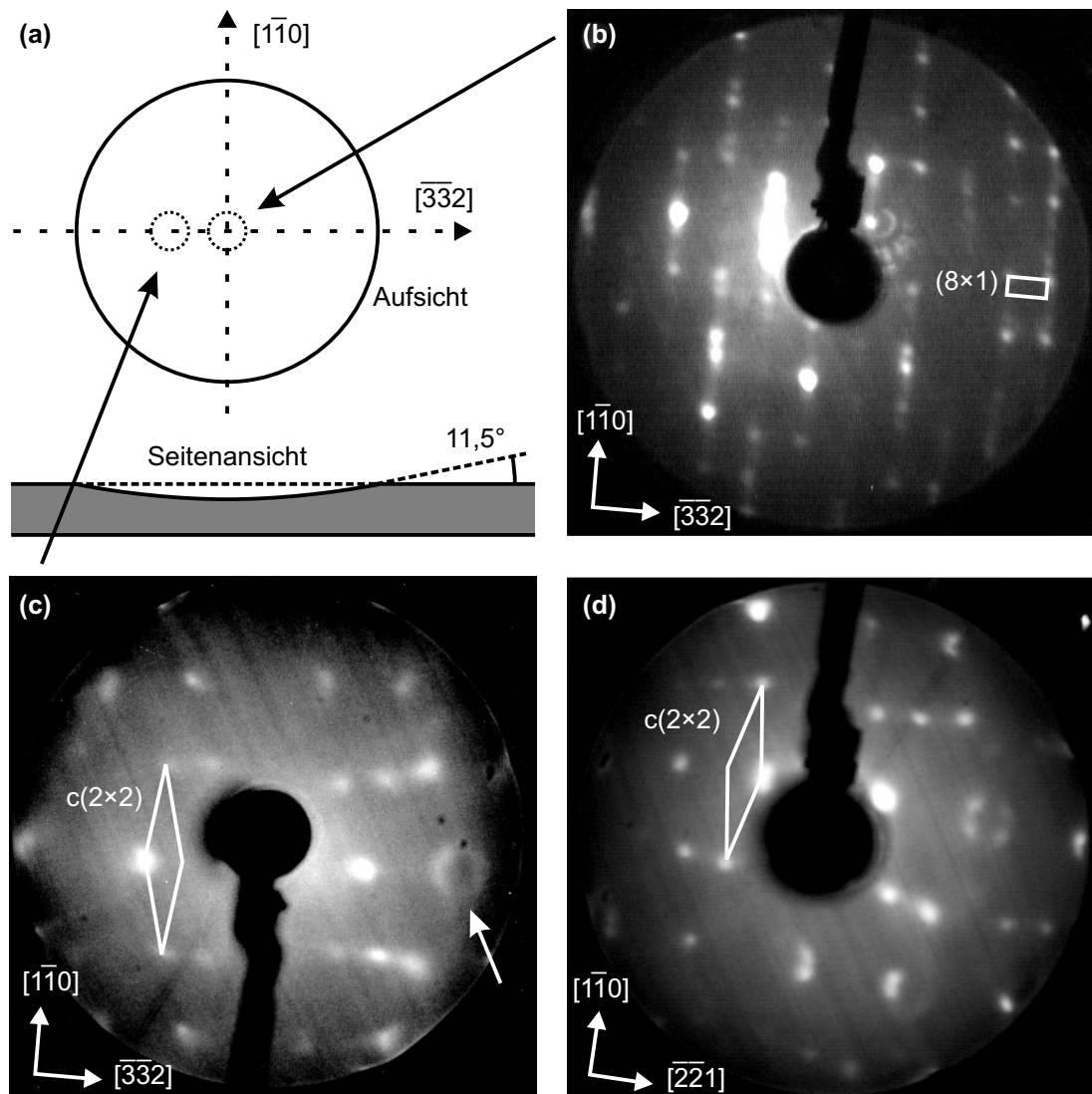


Abbildung 5.16: (a) Schematische Darstellung der Mulde in Aufsicht und Seitenansicht. (b) LEED-Bild von der Mitte der Mulde.  $E = 50$  eV. (c) LEED-Bild von der linken Seitenfläche der Mulde.  $E = 43$  eV. Die eingezeichneten Orientierungen liegen in der (113)-Ebene. (d) LEED-Bild der GaAs(114)A- $c(2 \times 2)$ -Oberfläche (aufgenommen von J. Márquez [26]).  $E = 39$  eV.

ten sichelförmigen Reflexen (s. Pfeil) ist typisch für diese Oberfläche [26, 67]. Zum Vergleich ist in Unterabb. (d) ein LEED-Bild von einer planaren GaAs(114)-Probe gezeigt. Auf der gegenüberliegenden Seite der Mulde wurde ein LEED-Muster beobachtet, das dem von GaAs(112) ähnelt. Da diese Oberfläche instabil ist und facettiert (Kapitel 4), ist dieses Muster jedoch nicht so charakteristisch. Außerdem ist eine Facettierung nicht unbedingt ein Hinweis auf eine gute Oberflächenqualität. Insgesamt beweist die Beobachtung von LEED-Mustern bekannter stabiler Oberflächen in der Mulde, daß die in Abschnitt 3.2.2 beschriebene Abfolge von Schleifen, IBA und anschließendem Wachsen mit MBE eine geeignete Methode ist, um Vizinalflächen guter Qualität zu erzeugen.

### 5.5.3 Die neue stabile Oberfläche

Nachdem sichergestellt war, daß in der Mulde Oberflächen guter Qualität vorliegen, wurde mit den eigentlichen Untersuchungen begonnen. Es wurde nach einer stabilen Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks gesucht, indem der Elektronenstrahl auf Bereiche der Mulde gerichtet wurde, die sich in Abb. 5.16(a) entlang der Geraden durch den Mittelpunkt in Richtung  $[1\bar{1}0]$  befinden. In der stereografischen Projektion gelangt man zu ihnen, wenn man sich von (113) aus senkrecht zur Seitenlinie des Dreiecks ins Innere desselben bewegt (vgl. Abb. 5.15). Dabei tauchte in der Tat ein bisher unbekanntes LEED-Muster auf. Es ist in Abb. 5.17(a) dargestellt. Auf der gegenüberliegenden Seite der Mulde wurde ein dazu spiegelverkehrtes Muster gefunden (Abb. 5.17(b)). Dies liegt an den erwähnten Symmetrieeigenschaften des Zinkblendegitters. Die Bereiche der Mulde, in denen diese LEED-Bilder aufgenommen wurden, sind in Abb. 5.17(c) markiert. Diese LEED-Bilder sind der erste Beweis dafür, daß es eine stabile GaAs-Oberfläche gibt, die bisher nicht bekannt war. Verglichen mit den Bildern in Richtung  $[113]$  und  $[114]$  sind die Reflexe schärfer, und weniger von ihnen sind vom Untergrund überdeckt. Die Oberflächenqualität ist also besser. Diese Beobachtung gilt für alle verwendeten Präparationsbedingungen und weist darauf hin, daß die neue Oberfläche in einem großen Bereich von Präparationsbedingungen stabil ist. LEED-Bilder von mehreren Proben wurden ausgewertet, um die Abmessungen der Einheitszelle zu bestimmen. Im Realraum sind die Längen der Einheitsvektoren  $(10,4 \pm 0,4) \text{ \AA}$  und  $(18,4 \pm 0,6) \text{ \AA}$ , und der Winkel zwischen ihnen beträgt  $(82 \pm 2)^\circ$  (Datensatz: neun Bilder aus acht Präparationen).

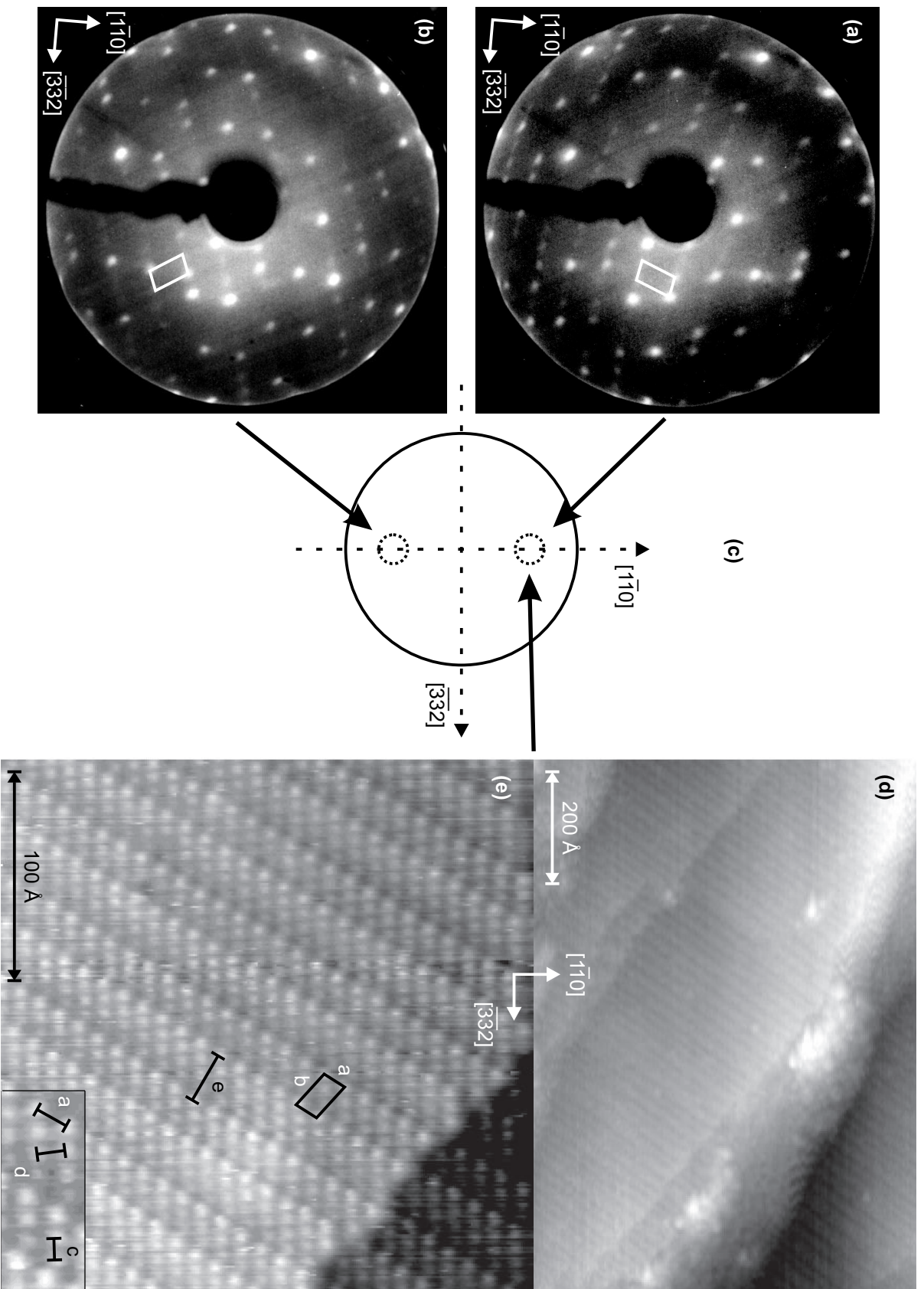


Abbildung 5.17: Die neue Oberfläche in der Mulde. (a) LEED-Bild von der oberen Seitenfläche der Mulde, 93 eV. (b) LEED-Bild von der unteren Seitenfläche der Mulde, 93 eV. (c) Schematische Darstellung der Mulde, Aufsicht. Die Bereiche, in denen die LEED- und STM-Bilder aufgenommen wurden, sind markiert. (d) Übersichts-STM-Bild von der oberen Seitenfläche der Mulde.  $U_{Probe} = -2,5$  V,  $I = 0,1$  nA. (e) Hochaufgelöstes STM-Bild von der oberen Seitenfläche der Mulde. Detailbild: vergrößerter Ausschnitt. Die Längen der eingezeichneten Strecken sind in Tab. 5.5 angegeben.  $U_{Probe} = -3,0$  V,  $I = 0,2$  nA.

Um die Orientierung der neuen Oberfläche zu bestimmen, wurde eine dichte Folge von LEED-Bildern entlang der Linie in Richtung  $[1\bar{1}0]$  in Abb. 5.17(c) aufgenommen. Zwischen zwei aufeinanderfolgenden Messungen wurde die Probe um 0,2 mm verschoben. Aus dieser Serie von LEED-Bildern wurden die projizierten Positionen der neuen Oberfläche (auf beiden Seiten) und der Muldenmitte bestimmt. Die Genauigkeit der Messung war durch den Durchmesser des Elektronenstrahls (etwa 1 mm)<sup>6</sup> begrenzt. Der Winkel in Richtung  $[1\bar{1}0]$  zwischen der neuen Oberfläche und (113) wurde zu  $(9 \pm 2)^\circ$  berechnet. Der relativ große Meßfehler wurde aus der Beobachtung abgeschätzt, daß benachbarte Bilder beinahe identisch sind. Neben dieser Ungenauigkeit in Richtung  $[1\bar{1}0]$  gibt es eine weitere in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$ . Der Bereich der neuen Oberfläche könnte auch nicht genau auf, sondern neben der Linie durch die Muldenmitte liegen, die in Abb. 5.17(c) eingezeichnet ist.

Ein Übersichts-STM-Bild, das im Bereich der neuen Oberfläche aufgenommen wurde, ist in Abb. 5.17(d) dargestellt. Mehrere breite glatte Terrassen sind zu erkennen. Dies ist der zweite Beweis dafür, daß es eine neue stabile Oberfläche gibt. Im unteren Bereich des Bildes sind die Terrassen durch Einzelstufen getrennt, im oberen Bereich ist ein Stufenbündel zu sehen. Auf den Terrassen sind dunkle Linien zu erkennen, die von links unten nach rechts oben verlaufen. Das Auftreten von Stufenbündelung deutet darauf hin, daß das Bild nicht im Zentrum des Bereichs der neuen Oberfläche aufgenommen wurde. Es zeigt jedoch auch, daß sich diese Oberfläche nicht nur in einem kleinen Winkelbereich um ihre nominelle Orientierung ausbildet. Der Abfall der Terrassen in dem Bild von unten nach oben deutet darauf hin, daß sich der eigentliche Bereich der stabilen Oberfläche in der Mulde weiter in Richtung  $[1\bar{1}0]$  befindet. Die STM-Bilder aus der Mulde belegen zusätzlich zu den LEED-Experimenten, daß die Oberfläche in der Mulde auf atomarer Skala eine gute Qualität aufweist.

In Abb. 5.17(e) ist ein kleinerer Bereich mit höherer Auflösung gezeigt. In der oberen rechten Ecke sieht man eine Einzelstufe hinunter zu einer tieferen Terrasse. Beide Terrassen bestehen aus Streifen, deren Kanten von links unten nach rechts oben verlaufen. Diese Kanten sind in dem Übersichtsbild als dunkle Linien zu erkennen. Die Streifen bestehen aus Folgen von entweder drei oder vier Buckeln, die ungefähr in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  angeordnet sind. Jeder Streifen enthält nur eine Art von Folge. Die linke

---

<sup>6</sup>Dieser Wert wurde abgeschätzt, indem das Verschwinden des LEED-Musters beobachtet wurde, wenn der Elektronenstrahl über die Probenkante bewegt wurde.

Tabelle 5.5: Werte der in Abb. 5.17(e) markierten Abstände. Vier STM-Bilder wurden ausgewertet, und für jeden Abstand wurden typischerweise zwanzig Meßwerte ermittelt. Zum Vergleich sind die entsprechenden theoretischen Werte für GaAs(25 11) ebenfalls angegeben, obwohl diese Orientierung erst aus späteren Experimenten ermittelt wurde (Kapitel 6).

Bezeichnung in Abb. 5.17(e)	a	b	c	d	e
Exp. Abstand in Å	10,5±0,1	19,4±1,0	7,0±0,5	9,1±1,2	24,6±0,9
Theor. Abstand in Å	10,6	18,8	6,9	8,9	26,2 <sup>7</sup>

Seite der Streifen liegt höher als die rechte Seite, und die Buckelfolgen auf benachbarten Streifen sind gegeneinander in Richtung  $[\bar{1}10]$  verschoben. Da gefüllte Zustände abgebildet wurden, ist es naheliegend, die Buckel Arsen-Orbitalen zuzuordnen. Ohne die Kenntnis der idealen Oberfläche ist jedoch selbst eine Spekulation über die genaue Art der abgebildeten As-Formation (Einzelatome, Dimere oder sogar Trimere) nicht sinnvoll. Charakteristische Abstände sind in Abb. 5.17(e) markiert, und die entsprechenden Werte sind in Tab. 5.5 zusammengefaßt. Die Einheitszelle  $a \times b$ , die am besten zu den aus den LEED-Daten bestimmten Einheitsvektoren paßt, ist ebenfalls eingezeichnet. Anscheinend ist die Folge von vier Buckeln nicht typisch für diese Oberfläche, sondern eher eine Art Unordnung.

Zur Bestimmung der Orientierung der neuen Oberfläche ist es notwendig, die genaue Lage des mit dem STM untersuchten Bereichs in Bezug auf die Muldenmitte zu bestimmen. Der Blick auf die Mulde durch das Fenster in der STM-Kammer ist jedoch nur unter einem ungünstigen Winkel möglich und wird teilweise durch den Scanner eingeschränkt. Außerdem ist im Vergleich zum Muldendurchmesser (3 mm) der Durchmesser des Drahtes, aus dem die Spitze präpariert wurde, relativ groß (0,5 mm). Aufgrund der Bauart des STM kann die Spitze in der Ebene der Oberfläche zudem nur in einer Richtung ( $x$ ) über  $\mu\text{m}$ -Entfernungen bewegt werden. Ob die Spitze dabei durch die Muldenmitte gefahren werden kann, hängt von der genauen Position der Probe auf dem Probenträger ab. Diese läßt sich beim Aufkleben der Probe jedoch nicht ausreichend exakt kontrollieren. Daher ist es unmöglich, interessante Bereiche der Mulde genau anzusteuern. Aus diesen Gründen konnten die Miller-Indizes der neuen Oberfläche auch aus den STM-Daten nicht extrahiert werden.

<sup>7</sup>Dieser Abstand tritt auf GaAs(25 11) nur als Störung der regelmäßigen Struktur auf.

### 5.5.4 Diskussion

Die LEED- und STM-Daten aus der sphärischen Mulde in GaAs(113) belegen die Existenz einer bisher unbekannt stabilen Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks. Es soll nun versucht werden zu ermitteln, inwieweit diese Oberfläche mit einer der Ebenen übereinstimmt, auf die aus den in Abschnitt 5.5.1 beschriebenen Facettenbeobachtungen geschlossen wurde.

Zunächst werden die Winkel zu (113) verglichen. Dabei ist zu berücksichtigen, daß aus der Folge von LEED-Bildern nur solche Winkel bestimmt werden können, die in der durch  $[1\bar{1}0]$  und  $[113]$  aufgespannten Ebene liegen. Daher wurden die Orientierungen  $[124]$ ,  $[3\bar{7}15]$ ,  $[124]$  und  $[136]$  in diese Ebene projiziert. Die Winkel zwischen diesen projizierten Richtungen und  $[113]$  sind in Tab. 5.6 angegeben. Mit der Ausnahme von  $[136]$  sind die Werte alle in Übereinstimmung mit dem experimentell bestimmten Winkel von  $(9 \pm 2)^\circ$ . Anhand dieser Daten kann also zwischen den verschiedenen Orientierungen nicht entschieden werden.

Sowohl von den  $(3\bar{7}15)$ - als auch von den  $(125)$ -Facetten gibt es hochaufgelöste STM-Bilder (Abb. 5.12(a) auf S. 81 bzw. Ref. [20]). Auf keinem dieser Bilder sind die Streifen zu erkennen, die für die STM-Bilder der stabilen Oberfläche in der Mulde charakteristisch sind (vgl. Abb. 5.17(e) auf S. 92). Deswegen erscheint es unwahrscheinlich, daß die neue Oberfläche diesen Facettenorientierungen entspricht.

Aus den LEED-Daten der neuen stabilen Fläche wurden die Abmessungen ihrer Einheitszelle bestimmt. Diese werden in Tab. 5.7 mit denen derjenigen Ebenen verglichen, die als Facetten beobachtet wurden. Die experimentelle Einheitszelle ist offensichtlich zu den idealen Einheitszellen aller Flächen nicht kommensurabel, auf die es Hinweise aus Facettenbeobachtungen gab. Daher kann gefolgert werden, daß keine dieser Orientierungen die genauen Miller-Indizes der stabilen Oberfläche angibt. Prinzipiell könnten die Miller-Indizes so lange variiert werden, bis eine ideale Einheitszelle gefunden wird, die mit der experimentellen übereinstimmt. Da der Zusammenhang

*Tabelle 5.6:* Winkel zwischen den angegebenen Richtungen, projiziert in die durch  $[1\bar{1}0]$  und  $[113]$  aufgespannte Ebene (s. Text), und  $[113]$ . Im Vorgriff auf Kapitel 6 ist  $[2\bar{5}11]$  ebenfalls aufgeführt.

Richtung	$[124]$	$[3\bar{7}15]$	$[125]$	$[136]$	$[2\bar{5}11]$
Winkel / °	8,9	9,7	7,4	12,0	10,0

Tabelle 5.7: Maße der Einheitszellen der idealen Oberflächen, die als Facetten beobachtet wurden, und der aus den LEED-Daten in der Mulde ermittelten Einheitszelle (vgl. Abb. 5.17(a)). Im Vorgriff auf Kapitel 6 ist auch (2 5 11) aufgeführt. Schematische Darstellungen der idealen Einheitszellen mit Ausnahme von (124) sind in Abb. 5.12(b) auf S. 81, Abb. 6.17 auf S. 128 und Abb. 6.4(c) auf S. 106 zu finden (Reihenfolge wie in der Tabelle).

Fläche	exp.	(124)	(3 7 15)	(125)	(136)	(2 5 11)
$a / \text{Å}$	$10,4 \pm 0,4$	6,9	10,6	6,9	12,6	10,6
$b / \text{Å}$	$18,4 \pm 0,6$	10,6	13,3	12,6	8,9	18,9
Winkel $(a,b) / ^\circ$	$82 \pm 2$	90,0	73,4	90,0	73,6	80,7

zwischen den Maßen der Einheitszelle und der Orientierung der Oberfläche hochgradig nichtlinear ist, ist dieses Verfahren praktisch jedoch nicht durchführbar.

Ohne Kenntnis der Orientierung der neuen Fläche ist eine tiefere Analyse der Oberflächenstruktur nicht sinnvoll. Deswegen wurden auf der Mulde keine weiteren Experimente durchgeführt. Die Entdeckung einer neuen stabilen Oberfläche ist jedoch von so hoher Bedeutung, daß Einkristallproben mit der ungefähr ermittelten Orientierung gekauft wurden. Die darauf durchgeführten Experimente werden in Kapitel 6 beschrieben.

Da die genaue Lage des untersuchten Bereichs der Mulde weder bei den LEED- noch bei den STM-Messungen bestimmt werden konnte, mag der generelle Nutzen von solchen Studien unterschätzt werden. Auf diese Weise wurde aber mit relativ geringem Aufwand bewiesen, daß es tatsächlich eine stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks gibt, und die mögliche Orientierung dieser Fläche wurde eingegrenzt. Erst auf dieser Basis wurde die Anschaffung von planaren Proben aus diesem Bereich sinnvoll. Bei der Untersuchung von Vizinalflächen kann die lokale Fehlorientierung darüber hinaus direkt aus STM-Bildern bestimmt werden. Wenn Terrassen einer bekannten stabilen Oberfläche beobachtet werden, ergibt sich nämlich aus der mittleren Terrassenbreite und der Höhe der Stufen die lokale Abweichung von der nominellen Orientierung. Für die Erschließung von Oberflächen, die nur unter Schwierigkeiten als Wafer zu bekommen sind, ist die in Abschnitt 3.2.2 beschriebene Methode des Muldenschleifens also eine gute Möglichkeit.



## 5.6 Zusammenfassung

Die hier vorgestellten Experimente zu GaAs(113)A sind in Übereinstimmung mit dem von Wassermeier vorgeschlagenen Strukturmodell [2] für die  $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion. Das strukturbestimmende Element dieser Oberfläche ist eine Zickzackkette von As-Dimeren entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$ . Die Einheitszelle der Rekonstruktion erstreckt sich über drei atomare Lagen. Die Ergebnisse dieser Arbeit legen nahe, daß die Zickzackkette für sich allein eine energetisch günstige Formation ist. Sie ist zudem ein Strukturelement, das auf niederindizierten GaAs-Oberflächen nicht auftritt. GaAs(113) kann also nicht als Vizinale von niederindizierten Flächen aufgefaßt werden, sondern ist eine eigenständige Oberfläche.

Die Stufenstruktur auf GaAs(113)A- $(8 \times 1)$  ist auffallend anisotrop. Während Stufen entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  extrem gerade sind, enthalten Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  sehr viele und große Kinks. Diese Beobachtung wurde erklärt, indem die Elektronen-Zählregel auf eindimensionale Inseln auf dieser Oberfläche angewandt wurde. Inseln entlang  $[1\bar{1}0]$  verletzen die ECR. Daher wären Strukturen, die aus einer Stufe entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  herauswachsen, energetisch ungünstig. Im Gegensatz dazu erfüllen Inseln parallel zu  $[3\bar{3}\bar{2}]$  die ECR, und fingerähnliche Strukturen, die aus Stufen entlang  $[1\bar{1}0]$  herausragen, sind auf STM-Bildern zu sehen.

Die Analyse der Strukturmodelle der Inseln lassen zusammen mit den STM-Bildern den Schluß zu, daß Wachstum auf dieser Oberfläche hauptsächlich durch Anlagerung in Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  stattfindet.

Auf einer mesoskopischen Skala ist die GaAs(113)A-Oberfläche rauher als niederindizierte Oberflächen. Im Gegensatz zu MOVPE-präparierten Proben hängt es bei MBE von den Präparationsbedingungen ab, wie stark sich in dieser Rauigkeit eine Anisotropie ausbildet. Es können mehrere  $1000 \text{ \AA}$  lange Gräben entlang  $[3\bar{3}\bar{2}]$  auftreten, die wie langgestreckte Dreiecke geformt sind. Die Struktur der Gräben wurde erstmals atomar aufgelöst. Auf den Seitenwänden gibt es Abschnitte mit der Orientierung  $(3\ 7\ 15)$ . Daher wurde vermutet, daß diese im Inneren des stereografischen Dreiecks gelegene Oberfläche möglicherweise stabil ist. Sie ergibt sich aus GaAs(113)A- $(8 \times 1)$  durch eine kontinuierliche Stapelung der Dimerketten. Mit Hilfe von Ergebnissen aus Kapitel 6 wurde dargelegt, daß die Ausbildung der Gräben keine thermodynamischen Ursachen haben kann. Die von Nötzel et al. [21, 115] gegebene Erklärung für den Ursprung der Gräben ist nicht konsistent mit den in der vorliegenden Arbeit gewonnenen Ergebnis-

sen und wurde daher verworfen. Statt dessen wurde ein Szenario für die Ausbildung der Gräben vorgeschlagen, das auf einer hohen Diffusionsbarriere in Richtung  $[\bar{1}\bar{1}0]$  basiert.

Mehrere Hinweise auf eine stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks motivierten die Untersuchung von GaAs-Oberflächen nahe (113)A. Vizinalflächen zu GaAs(113)A könnten möglicherweise auch als Substrat für das Wachstum von Quantendrähten eingesetzt werden. Um möglichst viele verschiedene solcher Flächen untersuchen zu können, wurde ein Verfahren entwickelt, sphärische Mulden in die normalen GaAs(113)A-Proben zu schleifen. Die Beobachtung von LEED-Bildern bekannter Oberflächen in der Mulde zeigt, daß die hier beschriebene Methode der Muldenpräparation dazu geeignet ist, Oberflächen guter Qualität zu erzeugen.

In der Mulde wurde eine bislang unbekannte stabile Oberfläche entdeckt. Diese Oberfläche ist von (113) um  $(9 \pm 2)^\circ$  in Richtung  $[\bar{1}\bar{1}0]$  verkippt. Auf der gegenüberliegenden Seite der Mulde wurde eine Oberfläche mit gespiegelter Struktur gefunden, wie es aufgrund der kristallografischen Symmetrie zu erwarten ist. Das LEED-Muster weist eine schiefwinklige Einheitszelle auf, und auf STM-Bildern sind Streifen mit Folgen von entweder drei oder vier Buckeln zu sehen. Die Miller-Indizes der neuen Oberfläche konnten auf der Basis der in diesem Kapitel vorgestellten Experimente nicht bestimmt werden. Diese Versuche beweisen jedoch erstmals, daß es im Inneren des stereografischen Dreiecks eine stabile Oberfläche gibt, und deren mögliche Orientierung wurde eingegrenzt.

# 6 GaAs(2 5 11)

## 6.1 Einführung

In diesem Kapitel werden die wichtigsten Erkenntnisse der vorliegenden Arbeit vorgestellt, in deren Zentrum die Entdeckung und Strukturbestimmung einer neuen stabilen GaAs-Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks steht. Vielfach wird angenommen, daß nur niederindizierte Oberflächen stabil sind und alle anderen in Facetten dieser Orientierungen zerfallen. Die Entdeckung einer neuen stabilen Oberfläche ist daher von hoher Bedeutung, und um so mehr im noch völlig unerforschten Inneren des stereografischen Dreiecks.

Erste Hinweise auf eine neue stabile Oberfläche, die auf der Beobachtung von Facetten beruhten, gab es bereits vor Beginn dieser Arbeit [19, 20, 27] (s. Abschnitt 5.5.1). Dabei wurden jedoch weder die Struktur noch die genaue Orientierung ermittelt. Darüber hinaus ist nicht auszuschließen, daß sich auf Facetten, die nicht wesentlich größer als die Einheitszelle der entsprechenden Oberfläche sind, eine andere Struktur ausbildet als auf makroskopisch planaren Proben. Auch eine Beeinflussung durch kinetische Effekte ist möglich. Eindeutige Beweise für die Existenz dieser Oberfläche lieferten erst die in Abschnitt 5.5 diskutierten Experimente auf in GaAs(113)A-Proben geschliffenen sphärischen Mulden. Dort wurden mehr als 1000 Å große Terrassen der neuen Oberfläche beobachtet. Aus diesen Versuchen konnten jedoch deren Orientierung und Struktur ebensowenig bestimmt werden.

Wegen der hohen Bedeutung einer neuen stabilen Oberfläche war nun, da ihre Existenz gesichert war, die Anschaffung von entsprechend geschnittenen Wafern sinnvoll. Zur genauen Aufklärung der Orientierung und Struktur dieser Oberfläche wurde ein Satz von Einkristallproben gekauft, die von (113) um 8,7°; 9,2°; 9,7° und 10,2° in Richtung  $[\bar{1}10]$  fehlorientiert sind (Aus den Experimenten auf der Mulde wurde

eine Verkipfung von  $(9 \pm 2)^\circ$  ermittelt.). Aufgrund der Analyse der Struktur von GaAs(113)A–(8×1) war bekannt, daß die As-Dimerkette ein stabiles Strukturelement ist (Abschnitt 5.3.3). Daher wurde die neue Oberfläche nahe bei (3715) vermutet, obwohl die Versuche auf der Mulde zeigten, daß die neue Oberfläche nicht genau diese Orientierung haben kann (GaAs(3715) ergibt sich aus einer Stapelung der Dimerketten, vgl. Abb. 5.11 auf S. 80.). Aus diesem Grund wurden die Versuche mit Proben aus dem um  $9,7^\circ$  fehlorientierten Wafer begonnen. Auf diesen Proben wurde in der Tat die neue stabile Oberfläche beobachtet, und es stellte sich heraus, daß ihre Orientierung (2511) ist. Im folgenden werden diese Proben daher mit (2511) bezeichnet.

Die ideale GaAs(2511)-Oberfläche wird weiter unten zusammen mit der rekonstruierten beschrieben, da die Struktur dann leichter verständlich ist. GaAs-Oberflächen im Inneren des stereografischen Dreiecks wurden bisher noch gar nicht untersucht. Auf Silizium und Germanium gibt es einige Studien zu stabilen Oberflächen in diesem Winkelbereich [162–166]. Diese wurden aber in den meisten Fällen nicht auf planaren Proben durchgeführt, sondern basieren auf der Analyse von Facetten. Wie von den niederindizierten Orientierungen sowie von (113) und (114) bekannt ist, lassen sich Erkenntnisse zur Oberflächenstruktur von den elementaren Halbleitern Silizium und Germanium auf den Verbindungshalbleiter Galliumarsenid zudem so gut wie gar nicht übertragen [1]. Daher sind die Ergebnisse der erwähnten Studien für die vorliegende Arbeit nicht von Bedeutung.

## 6.2 Atomare Struktur

### 6.2.1 Ergebnisse

Ein LEED-Bild der GaAs(2511)-Oberfläche ist in Abb. 6.1 gezeigt. Es sind relativ viele und scharfe Reflexe vor dem Untergrund zu erkennen, was eine gute Oberflächenqualität anzeigt. Die Reflexe sind in einem schiefwinkligen Gitter angeordnet. Zwei verschiedene Einheitszellen sind in dem Bild eingezeichnet. Zelle *A* ergibt sich intuitiv aus den Reihen von besonders hellen Reflexen entlang  $[19\ 10\ \bar{8}]$  und  $[7\bar{5}1]$ , in Zelle *B* liegt der eingeschlossene Winkel näher an  $90^\circ$ . Da die beiden Einheitszellen im Realraum gleich groß sind, stellen sie zwei äquivalente Beschreibungen der Periodizität dar (Die beiden auf GaAs(113)A verwendeten Einheitszellen haben dagegen einen unterschiedlichen Flächeninhalt, vgl. Abb. 5.1.). Für die Auswertung der experimen-

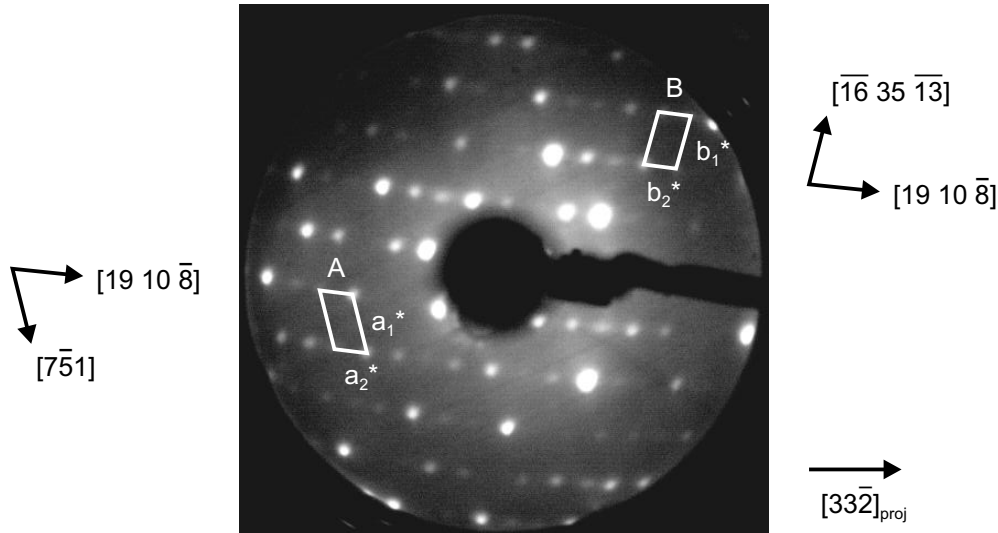


Abbildung 6.1: LEED-Bild der GaAs(2 5 11)-Oberfläche.  $E = 56$  eV.

tellen Daten aus der sphärischen Mulde wurde Zelle  $B$  verwendet (Abschnitt 5.5.3). Zelle  $A$  spiegelt die Oberflächenstruktur jedoch anschaulicher wider und wird daher im folgenden benutzt. Die sich aus den LEED-Daten ergebenden Abmessungen der entsprechenden Einheitszellen im Realraum sind in Tab. 6.1 angegeben.

Die kristallografische Richtung  $[33\bar{2}]$  liegt in den Ebenen (113) und (3 7 15), der nominellen Orientierung der Proben. Die Lage dieser Richtung auf den Proben war aufgrund der Angaben des Waferherstellers bekannt. Die anderen in Abb. 6.1 angegebenen Richtungen wurden erst nach Bestimmung der genauen Orientierung und Struktur der Oberfläche ermittelt. Die Projektion von  $[33\bar{2}]$  in die (2 5 11)-Ebene ist  $[452\ 455\ \bar{2}89]$ , und der Winkel zwischen diesen beiden Richtungen beträgt  $1,0^\circ$ .

Ein STM-Bild eines größeren Bereichs der GaAs(2 5 11)-Oberfläche ist in Abb. 6.2(a) dargestellt. Die Oberfläche besteht aus Terrassen, die sich über mehrere hundert Ångström erstrecken. Auf den Terrassen sind dunkle Linien zu sehen, die von links unten nach rechts oben verlaufen. Bei einer höheren Auflösung (Unterabb. (b)) sind auf den Streifen zwischen diesen entlang  $[2\bar{3}1]$  gerichteten dunklen Linien (s. Markierungen am oberen Bildrand) kleine Buckel (helle Punkte) zu erkennen. Die Streifen bestehen aus ungefähr entlang  $[45\bar{3}]$  verlaufenden Folgen von entweder drei oder zwei solcher Buckel. Die rechte Seite der Buckelfolgen liegt höher als die linke (Dort sind die Punkte heller bzw. größer.). Die Buckelfolgen auf benachbarten Streifen sind gegeneinander in Richtung  $[2\bar{3}1]$  verschoben. Es gibt mehr Streifen mit drei Buckeln als mit zwei.

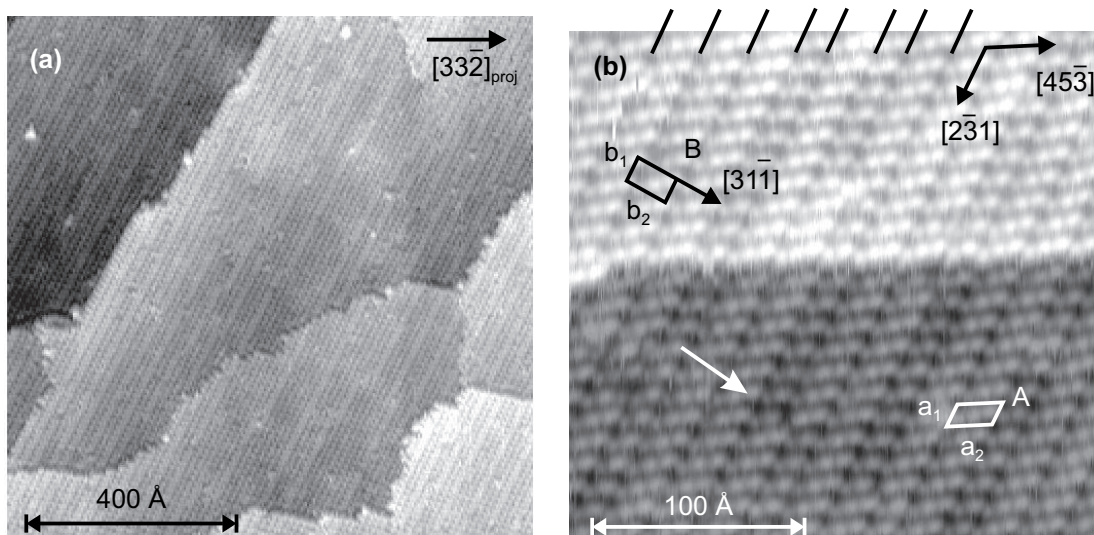


Abbildung 6.2: STM-Bilder der GaAs(2511)-Oberfläche. (a) Größerer Ausschnitt.  $U_{Probe} = -2,5 \text{ V}$ ,  $I = 0,1 \text{ nA}$ . (b) Kleinerer Ausschnitt.  $U_{Probe} = -2,5 \text{ V}$ ,  $I = 0,3 \text{ nA}$ . Die beiden Parallelogramme zeigen die in Abb. 6.1 eingeführten Einheitszellen im Realraum an.

Tabelle 6.1: Experimentell ermittelte Abmessungen der beiden äquivalenten Einheitszellen, die auf den GaAs(2511)-Proben beobachtet wurden. Die Werte der idealen GaAs(2511)-Oberfläche sind zum Vergleich ebenfalls angegeben. Der eingeschlossene Winkel wurde aus den STM-Bildern nur für Zelle A quantitativ ausgewertet. Datensatz LEED: 15 Bilder aus 11 Präparationen; Datensatz STM: typischerweise 20 Meßwerte aus drei bis sechs Bildern.

	Zelle A			Zelle B		
	$a_1/\text{Å}$	$a_2/\text{Å}$	Winkel / °	$b_1/\text{Å}$	$b_2/\text{Å}$	Winkel / °
LEED	$11,1 \pm 0,3$	$20,8 \pm 0,6$	$68,4 \pm 0,9$	$10,9 \pm 0,3$	$19,5 \pm 0,5$	$80,6 \pm 0,9$
STM	$11,0 \pm 0,9$	$20,0 \pm 1,1$	$70 \pm 5$	$11,0 \pm 0,9$	$20,8 \pm 1,1$	–
ideal	10,6	20,0	67,8	10,6	18,9	80,7

Aus den STM-Bildern wurden die Abmessungen der beiden äquivalenten Einheitszellen bestimmt, die die Periodizität der Drei-Buckel-Streifen widerspiegeln. Diese Werte sind ebenfalls in Tab. 6.1 angegeben. Die aus den LEED- und STM-Daten ermittelten Abmessungen stimmen gut überein. Während STM nur einen kleinen Ausschnitt der Oberfläche zeigt, ist LEED eine automatisch über die Oberfläche mittelnde Methode (vgl. Abschnitt 2.3.2). Die mit STM beobachteten Streifen mit zwei Buckeln sind daher als Störung der Periodizität aufzufassen, die nicht zum LEED-Muster beiträgt.

## 6.2.2 Diskussion

### Bestimmung der Orientierung

Das Ermitteln der genauen Miller-Indizes der stabilen Oberfläche stellt in diesem Winkelbereich ein komplexes Problem dar. Im Gegensatz zu der Region um die hochsymmetrischen niederindizierten Oberflächen gibt es im Inneren des stereographischen Dreiecks keine Ebenen, die a priori ausgezeichnet sind. Wird von einem Strukturmodell ausgegangen, führt das Hinzufügen und Entfernen von nur wenigen Atomen sofort zu anderen Miller-Indizes. Umgekehrt ändern sich die Längen und Richtungen der Basisvektoren zwar bereits stark, wenn die Orientierung nur um weniger als  $1^\circ$  variiert wird. Diese Änderung ist jedoch von der Variation der Orientierung nicht monoton abhängig, d. h., bei kontinuierlicher allmählicher Verkippung in eine Richtung können die Basisvektoren sowohl länger als auch kürzer werden.

Sowohl die LEED- als auch die STM-Daten, die im vorigen Abschnitt präsentiert wurden, sind in Übereinstimmung mit den Ergebnissen, die auf der sphärischen Mulde erzielt wurden (Abschnitt 5.5.3). Dieselbe stabile Oberfläche wurde jetzt also erstmals auf planaren Proben beobachtet. Da die Ausrichtung des Substrates nun um einen Faktor Zehn genauer bekannt war ( $\pm 0,2^\circ$  nach Angaben des Waferherstellers), waren die Voraussetzungen zur Bestimmung der Miller-Indizes der stabilen Oberfläche entsprechend besser.

Als Ausgangspunkt zur Ermittlung der genauen Orientierung dieser neuen Oberfläche und zur Entwicklung eines Strukturmodells wurde die ideale GaAs(3715)-Oberfläche gewählt, da die Proben nominell diese Orientierung haben. Deren Einheitszelle (s. Abb. 5.12 auf S. 81) ist jedoch nicht kommensurabel zu den Basisvektoren, die aus den hier vorgestellten LEED-Daten bestimmt wurden (Tab. 6.1). Dies bedeutet, daß die stabile Oberfläche eine etwas andere Orientierung besitzen muß. Wegen der anfangs beschriebenen nicht-monotonen Beziehung zwischen der Orientierung und den Maßen der Einheitszelle wäre die direkte Bestimmung der Miller-Indizes aus diesen Daten sehr aufwendig.

LEED ist wegen der intrinsischen Mittelung gut dafür geeignet, die Größe der Einheitszelle zu messen. Vorstellungen über die Anordnung der Atome in der Basis des Oberflächengitters lassen sich jedoch besser anhand der den Realraum zeigenden STM-Daten gewinnen. Für die STM-Bilder in Abb. 6.2 wurden gefüllte Zustände detektiert. Daher sind die Buckel höchstwahrscheinlich auf Arsen zurückzuführen. In der Tat ent-

spricht die Länge  $a_1 \approx 11 \text{ \AA}$  dem Abstand  $10,6 \text{ \AA}$  der Arsendimere auf der rekonstruierten  $\text{GaAs}(3715)$ -Oberfläche (vgl. Abb. 5.12). Der Winkel zwischen der projizierten  $[3\bar{3}2]$ -Richtung, deren Lage bekannt ist, und der Strecke  $a_1$  stimmt ebenfalls mit dem Winkel zu  $[2\bar{3}1]$  überein, dem entsprechenden Basisvektor auf  $\text{GaAs}(3715)$ . Die Buckel wurden also Arsendimeren zugeordnet, und in einem  $(3715)$ -Modell wurden so lange Atome hinzugefügt und entfernt, bis die Struktur in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten war. Dabei kam zu Hilfe, daß sich die Längen der Basisvektoren bei Variation der Orientierung nicht kontinuierlich ändern, sondern nur diskrete Werte annehmen können.

Die Orientierung der neuen stabilen Oberfläche wurde auf diese Art und Weise zu  $(2511)$  bestimmt. Tab. 6.1 zeigt, daß die experimentellen Maße der Einheitszelle mit denen der idealen  $(2511)$ -Oberfläche übereinstimmen. Der in die durch  $[1\bar{1}0]$  und  $[113]$  aufgespannte Ebene projizierte Winkel zwischen  $[2511]$  und  $[113]$  beträgt  $10,0^\circ$  und ist damit ebenfalls in Übereinstimmung mit dem aus den LEED-Experimenten auf der Mulde bestimmten Wert von  $(9 \pm 2)^\circ$ . Der Winkel zwischen  $(2511)$  und  $(3715)$  beträgt  $1,0^\circ$ . Die untersuchte Probe ist daher als Vizinalfläche zu  $(2511)$  aufzufassen. Die Lage von  $(2511)$  relativ zu den verschiedenen Orientierungen, die im Rahmen der Entdeckung dieser Oberfläche diskutiert wurden, ist dem stereografischen Dreieck in Abb. 6.3 zu entnehmen.

### **Die $\text{GaAs}(2511)$ – $(1 \times 1)$ -Rekonstruktion**

Entgegen der sonst üblichen Vorgehensweise soll bei der Beschreibung der  $\text{GaAs}(2511)$ -Oberfläche mit der Rekonstruktion begonnen und die ideale Oberfläche erst danach eingeführt werden. Beide Strukturen sind sehr komplex, und durch Vergleichen mit den STM-Bildern ist der Zugang zu der rekonstruierten Oberfläche einfacher.

Das auf die im vorherigen Abschnitt beschriebene Art und Weise erstellte Strukturmodell ist in Abb. 6.4(a) und (b) gezeigt. In Unterabb. (a) sind die beiden in Abschnitt 6.2.1 eingeführten äquivalenten Einheitszellen sowie weitere Richtungen und Ebenen eingezeichnet, auf die noch im weiteren Verlauf eingegangen wird. In Unterabb. (b) ist nur die Zelle *A* angedeutet, anhand derer man sich die Oberflächenstruktur besser verdeutlichen kann. Die Einheitszelle enthält eine Folge von drei Arsendimeren entlang  $[12\bar{1}]$ , drei Arsenatome mit jeweils einer hängenden Bindung und sieben Galliumatome mit jeweils einer hängenden Bindung. Wie in Tab. 6.2 detailliert gezeigt



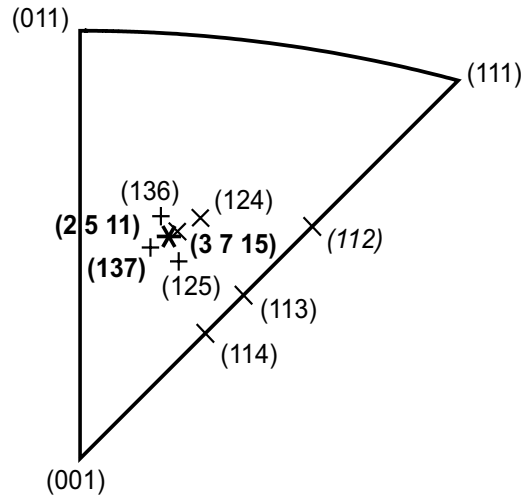


Abbildung 6.3: Stereografisches Dreieck mit allen Orientierungen, die in einem Zusammenhang mit der Entdeckung von  $(2\ 5\ 11)$  stehen. Die mit einem  $\times$  markierten Ebenen wurden als Facetten auf anderen GaAs-Oberflächen beobachtet, die mit einem  $+$  gekennzeichneten dagegen auf InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten. Fett geschriebene Miller-Indizes wurden in der vorliegenden Arbeit zum ersten Mal identifiziert.

Tabelle 6.2: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf die rekonstruierte GaAs(2511)-Oberfläche

Bindungstyp	liefert	benötigt
7 Ga häng. Bind.	$7 \cdot \frac{3}{4} = 5\frac{1}{4}$	$7 \cdot 0 = 0$
9 As häng. Bind.	$9 \cdot \frac{5}{4} = 11\frac{1}{4}$	$9 \cdot 2 = 18$
3 As-As	$3 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 7\frac{1}{2}$	$3 \cdot 2 = 6$
Summe	24	24

wird, erfüllt diese Struktur die Elektronen-Zählregel. Dies ist in Übereinstimmung mit der beobachteten Stabilität der GaAs(2511)-Oberfläche. Die Arsendimere werden in den STM-Bildern bei der Abbildung gefüllter Zustände als Buckel gesehen, während die leeren hängenden Bindungen der Galliumatome unsichtbar sind.

Die komplizierte Struktur der Rekonstruktion soll noch näher erläutert werden. Die Folge von drei Arsendimeren ist gegenüber der  $(2\ 5\ 11)$ -Ebene geneigt und bildet eine (113)-Schuppe (gestricheltes Parallelogramm links unten in Abb. 6.4(a)). Die rechte Seite der Schuppe liegt höher als die linke, und die sich in Abb. 6.4(b) weiter hinten befindende höher als die vordere. Dies wird durch die unterschiedlich groß dargestellten Atome verdeutlicht. Eine solche Folge von drei Arsendimeren existiert

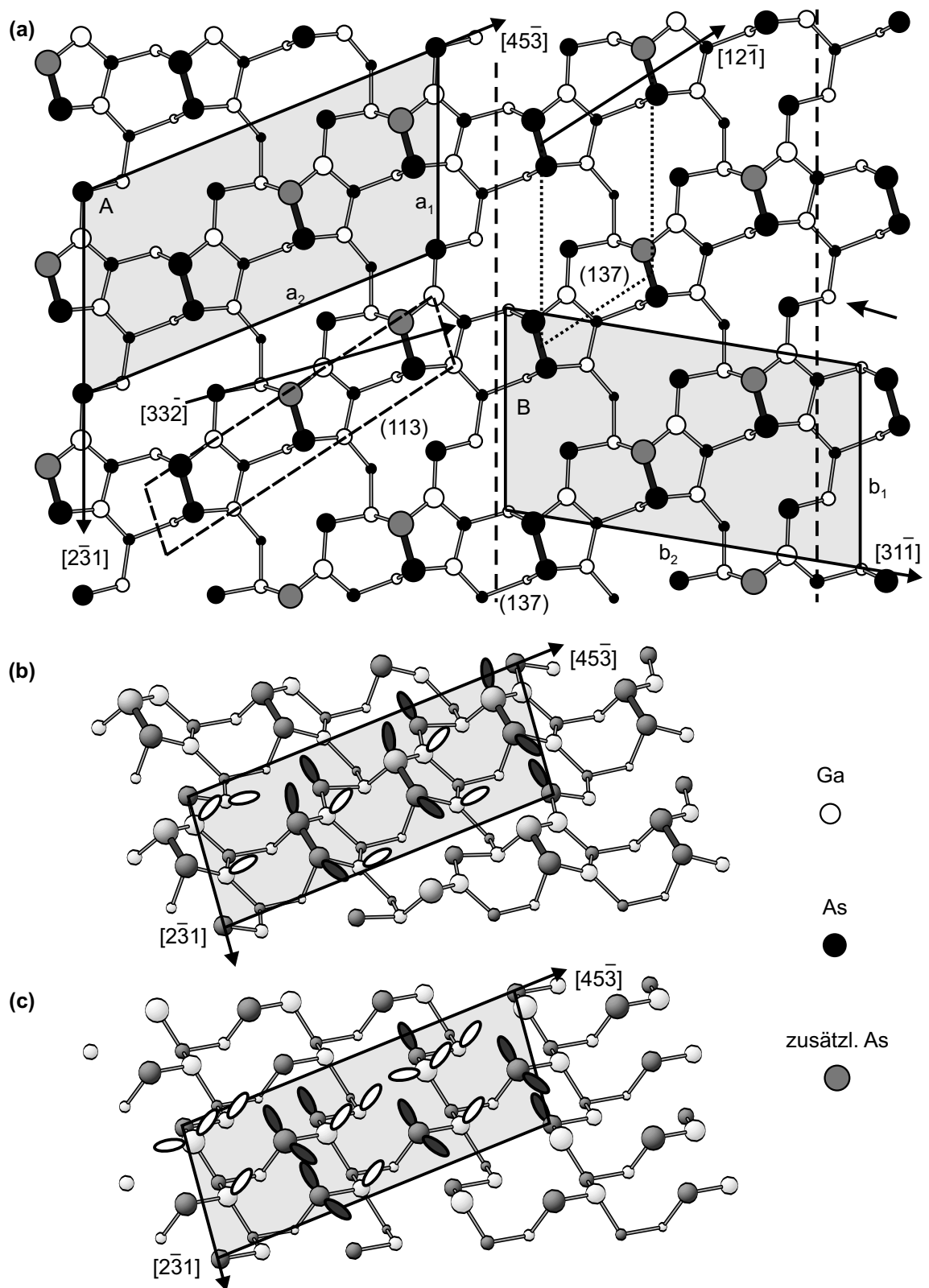


Abbildung 6.4: Strukturmodelle der GaAs(2511)-Oberfläche. (a)  $(1 \times 1)$ -Rekonstruktion, Aufsicht. Die Atompositionen sind das Ergebnis der im Text beschriebenen Berechnungen [153]. (b)  $(1 \times 1)$ -Rekonstruktion, Ansicht schräg von oben. (c) Ideale Oberfläche, Ansicht schräg von oben.

Tabelle 6.3: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf die rekonstruierte GaAs(137)-Oberfläche (s. gepunktete Einheitszelle rechts oben in Abb. 6.4)

Bindungstyp	liefert	benötigt
2 Ga häng. Bind.	$2 \cdot \frac{3}{4} = 1\frac{1}{2}$	$2 \cdot 0 = 0$
3 As häng. Bind.	$3 \cdot \frac{5}{4} = 3\frac{3}{4}$	$3 \cdot 2 = 6$
1 As-As	$1 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 2\frac{1}{2}$	$1 \cdot 2 = 2$
Summe	$7\frac{3}{4}$	8

jedoch nicht auf der rekonstruierten GaAs(113)A Oberfläche [2, 3] (s. Abschnitt 5.2). Das Auftreten dieser (113)-Schuppe ist also keine Facettierung in Ebenen niedrigerer Oberflächenenergie.

Aufgrund der Kristallgeometrie sind die Dimerbindungen ebenfalls geneigt gegenüber der (2511)-Ebene. Geneigte Arsendimere wurden noch auf keiner anderen GaAs-Oberfläche beobachtet.

Dimerfolgen, die in Richtung  $[\bar{2}31]$  benachbart sind, bilden Streifen der Orientierung (137) (Bereich zwischen den senkrechten gestrichelten Linien rechts in Abb. 6.4(a)). Die dunklen Linien von links unten nach rechts oben auf den STM-Bildern (Abb. 6.2) sind die Rinnen zwischen diesen Streifen. Auch dies ist keine Form von Nanofacettierung, wie im folgenden erklärt wird: An jedem Arsendimer befinden sich rechts zwei Galliumatome mit jeweils einer hängenden Bindung. Die siebte hängende Ga-Bindung befindet sich in der schmalen Rinne *zwischen* benachbarten (137)-Streifen (Pfeil auf der rechten Seite von Abb. 6.4(a)). Ohne diese hängende Ga-Bindung würde die ECR verletzt. Eine analog rekonstruierte (137)-Oberfläche (s. gepunktete Einheitszelle rechts oben in Abb. 6.4(a)) erfüllt die ECR daher ebensowenig (Tab. 6.3). Die Stabilität der (2511)-Rekonstruktion ist also auf die Balance zwischen (137)-Streifen einer bestimmten Breite und einer zusätzlichen hängenden Ga-Bindung in der dazwischenliegenden Rinne zurückzuführen.

Die ideale GaAs(2511)-Oberfläche ist in Abb. 6.4(c) dargestellt. In jeder atomaren Lage sind gleich viele Gallium- und Arsenatome enthalten, also ist diese Oberfläche stöchiometrisch. In Anbetracht der hohen Miller-Indizes ist dies recht überraschend, zeigt aber andererseits, daß (2511) eine ausgezeichnete Orientierung ist. Da die ideale Oberfläche stöchiometrisch ist, erfüllt sie ebenfalls die Elektronen-Zählregel.<sup>1</sup> Es gibt

<sup>1</sup>Eine stöchiometrische Oberfläche ist wie der Volumenkristall aus Ga-As-Paaren aufgebaut. Un-

jedoch mehrere Atome mit zwei hängenden Bindungen, was energetisch sehr ungünstig ist. Daher ist nicht zu erwarten, daß diese Struktur stabil ist.

Um die in Abb. 6.4(a) und (b) gezeigte Rekonstruktion zu bilden, wurden zwei Arsenatome zur idealen Oberfläche hinzugefügt, und die Anzahl der hängenden Bindungen wurde durch Dimerisierung benachbarter Arsenatome reduziert. Diese Arsen-Anreicherung ist in Übereinstimmung mit der experimentellen Beobachtung, daß die Oberflächenqualität am besten war für Proben, die nach dem Wachsen im  $\text{As}_2$ -Strahl bei Temperaturen unterhalb von  $500^\circ\text{C}$  ausgeheilt wurden (vgl. Abschnitt 3.2.1). Die Periodizität der Rekonstruktion bleibt  $(1\times 1)$ , was in Übereinstimmung mit den LEED-Daten ist (Tab. 6.1). Allgemein können auf höherindizierten Oberflächen aufgrund der großen idealen Einheitszellen Bindungen gebildet und gebrochen werden, ohne daß die Periodizität sich ändert.

Die Analyse der experimentellen Daten wurde unterstützt durch Gesamtenergie-Berechnungen auf der Basis der Dichtefunktional-Theorie, die von P. Kratzer in der Abteilung Theorie des Fritz-Haber-Instituts durchgeführt wurden [153]. Im Rahmen dieser Rechnungen wurde den Atomen erlaubt zu relaxieren und somit die Struktur der rekonstruierten  $\text{GaAs}(2511)$ -Oberfläche bestimmt. Als weiteres Ergebnis wurde die freie Oberflächenenergie bei  $T = 0\text{ K}$  für arsenreiche Bedingungen zu  $53\text{ meV}/\text{\AA}^2$  ermittelt. Dieser Wert liegt zwischen denen der bekannten  $c(4\times 4)$ - ( $45\text{ meV}/\text{\AA}^2$ ) und  $\beta 2(2\times 4)$ -Rekonstruktionen ( $55\text{ meV}/\text{\AA}^2$ ) auf  $\text{GaAs}(001)$  [31] (Übersicht in Anhang A). Die niedrige Oberflächenenergie bestärkt das Strukturmodell, das auf der Basis der experimentellen Ergebnisse entwickelt wurde.

Die Auswertung von STM-Daten ist nicht unproblematisch, da nicht direkt die Topographie, sondern vielmehr die elektronische Zustandsdichte abgebildet wird. Um die Interpretation der experimentellen STM-Bilder zu bekräftigen, wurden von P. Kratzer aus der berechneten elektronischen Struktur der Rekonstruktion STM-Bilder simuliert [153]. In diesen Simulationen entsprechen die Graustufen Isoflächen einer geeignet gewählten lokalen Zustandsdichte. Diese wurde über ein Energieintervall integriert, das sich für gefüllte Zustände von der Oberkante des Valenzbandes  $1\text{ eV}$  nach unten und für leere Zustände von der Unterkante des Leitungsbandes  $1\text{ eV}$  nach oben erstreckt. Die Simulationen entsprechen experimentellen STM-Bildern, die im Konstanten-Strom-

---

abhängig von deren Anordnung besitzt jedes Ga-As-Paar zusammen acht Elektronen. Diese acht Elektronen können stets so verteilt werden, daß keine teilweise gefüllten Bindungen entstehen.

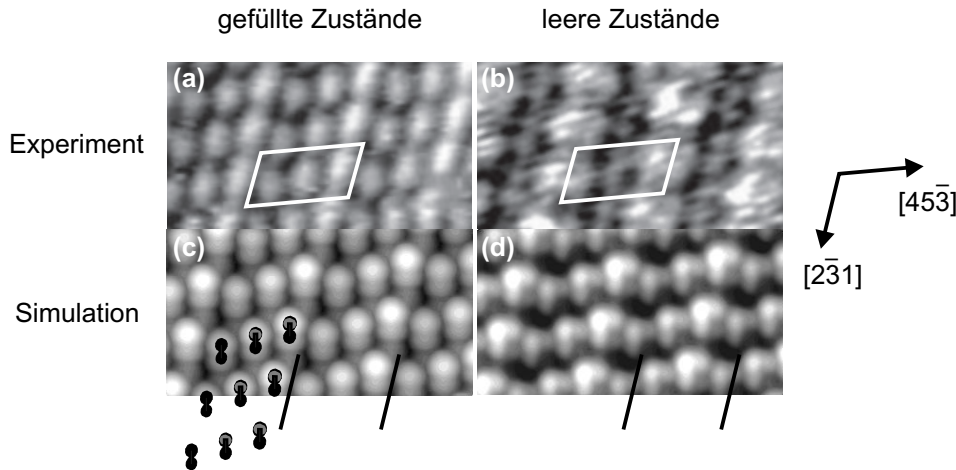


Abbildung 6.5: Experimentelle und simulierte hochaufgelöste STM-Bilder der GaAs(2 5 11)-Oberfläche. Die weißen Parallelogramme zeigen die Einheitszelle  $A$  an. Auf die schwarzen Striche am unteren Bildrand wird im Text eingegangen. (a) Experimentell, gefüllte Zustände.  $U_{Probe} = -3,0\text{ V}$ ,  $I = 0,1\text{ nA}$ . (b) Experimentell, leere Zustände.  $U_{Probe} = +2,5\text{ V}$ ,  $I = 0,3\text{ nA}$ . (c) Simuliert, gefüllte Zustände. Über einen Teil des Bildes wurden die Arsenidimere des Strukturmodells gelegt. (d) Simuliert, leere Zustände.

Modus aufgenommen wurden. Der Unterschied zwischen den absoluten Werten der Energieintervalle und den experimentell an die Probe angelegten Spannungen ist nicht relevant, da der komplexe experimentelle Abbildungsprozeß durch Faktoren beeinflusst wird, die nicht von außen kontrolliert werden können, wie z. B. adsorbierte Atome aus dem Restgas auf der Spitze. Die günstigsten Tunnelparameter müssen daher bei jeder Messung neu ermittelt werden. Wesentlich ist aber die Unterscheidung zwischen leeren und gefüllten Zuständen.

In Abb. 6.5 werden die simulierten mit hochaufgelösten experimentellen STM-Bildern verglichen. Für gefüllte Zustände sind Simulation und Experiment in exzellenter Übereinstimmung. Bei den leeren Zuständen muß berücksichtigt werden, daß solche Bilder experimentell erfahrungsgemäß schwieriger aufzunehmen sind. Die Unterschiede zwischen leeren und gefüllten Zuständen sollen daher zunächst anhand der Simulation herausgearbeitet werden. In beiden Bildern sind längliche Buckel von drei unterschiedlichen Helligkeiten zu sehen. Gleichartige Buckel sind zu Reihen angeordnet, die entlang  $[2\bar{3}1]$  verlaufen. Bei den leeren Zuständen befindet sich der unterste (dunkelste) Buckel jeweils näher an dem links davon gelegenen Buckel, als dies bei den gefüllten Zuständen der Fall ist. Aus diesem Grund gruppiert das Auge die Buckel bei

den gefüllten Zuständen zu von links nach rechts ansteigenden Dreierfolgen. Dies wird durch die Markierungen am unteren Bildrand angedeutet. Bei den leeren Zuständen dagegen scheinen eher Dreierfolgen vorzuliegen, in denen der jeweils höchste Buckel rechts und links von zwei tieferen Buckeln umgeben ist. Dieser Unterschied zwischen gefüllten und leeren Zuständen ist auch in den experimentellen Bildern deutlich zu erkennen. Bei den leeren Zuständen ist der jeweils höchste Buckel nur schwach von dem rechts benachbarten Buckel zu unterscheiden. Die Übereinstimmung der simulierten und experimentellen STM-Bilder ist eine weitere Bestätigung des in Abb. 6.4(a) und (b) gezeigten Strukturmodells für die rekonstruierte GaAs(25 11)-Oberfläche.

### Zusammenhang zwischen GaAs(37 15) und GaAs(25 11)

In den experimentellen STM-Bildern fällt auf, daß neben den Drei-Dimer-Streifen der GaAs(25 11)-Rekonstruktion auch solche zu sehen sind, die aus Folgen von zwei oder selten auch vier Dimeren bestehen. Wenn ein solcher Streifen aus nicht-drei Dimeren auftritt, ist er relativ stabil, d. h., er erstreckt sich in Richtung  $[2\bar{3}1]$  über bis zu mehrere hundert Ångström (Pfeile in Abb. 6.6) und sogar über Stufenkanten hinweg (Abb. 6.2(b) auf S. 102). Diese langreichweitige, *geordnete* Verletzung der Periodizität ist eine von anderen Oberflächen nicht bekannte, neue Eigenschaft einer Oberflächenstruktur im allgemeinen. Der Ursprung dieser Besonderheit wird im folgenden erklärt.

Eine Oberfläche, die ausschließlich entweder aus Zwei- oder aus Vier-Dimer-Streifen bestünde, hätte eine Orientierung, die nur geringfügig von (25 11) abweiche ( $\leq 1^\circ$ ). Die Nicht-Drei-Dimer-Streifen auf GaAs(25 11) können daher entweder als Linienfekt der Rekonstruktion oder als minimal fehlorientierte Nanofacetten aufgefaßt werden. Da die Zwei-Dimer-Streifen die bei weitem häufigere Störung sind, sollen diese näher betrachtet werden. Eine Aneinanderreihung von solchen Streifen ergibt die rekonstruierte (37 15)-Oberfläche, wie sie in Abb. 5.12 auf S. 81 dargestellt ist. Tatsächlich ist die makroskopische Orientierung der Proben (37 15) und nicht (25 11). Es könnte also zunächst vermutet werden, daß das Auftreten der Zwei-Dimer-Streifen auf diese Fehlorientierung zurückzuführen ist. Wie in Abschnitt 6.3.2 gezeigt wird, kompensiert die Oberfläche die Verkippung jedoch hauptsächlich über Stufen, die in eine Richtung verlaufen. Dies geschieht ähnlich auf Vizinalflächen von niederindizierten Oberflächen.

Die Ursache für das Auftreten der Streifen mit nicht-drei Dimeren liegt vielmehr in der Energetik und Kinetik des Systems. Zunächst einmal ist die Entstehung einzel-

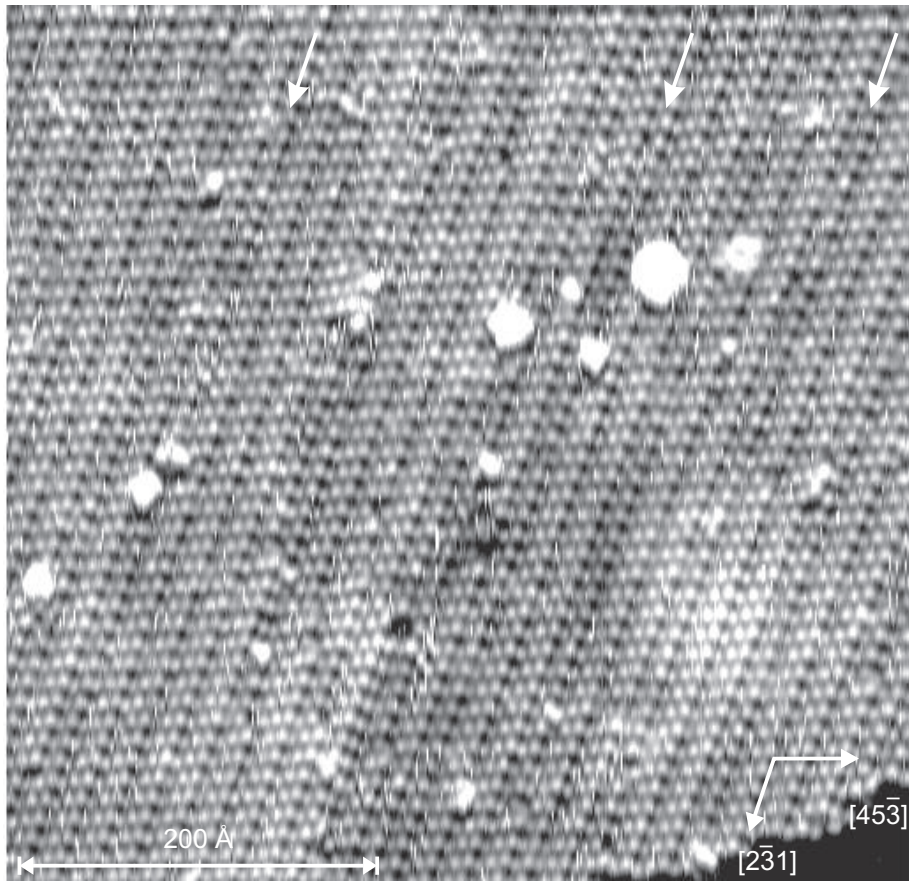


Abbildung 6.6: STM-Bild der GaAs(2 5 11)-Oberfläche.  $U_{Probe} = -2,6 \text{ V}$ ,  $I = 0,2 \text{ nA}$ .

ner Folgen von zwei oder vier statt drei Arsendimeren während des Wachsens leicht nachzuvollziehen. Da der Winkel zwischen den entsprechenden Oberflächen so klein ist, müssen aus der (2511)-Einheitszelle lediglich das oberste Arsen- und das oberste Galliumatom entfernt werden, um zu (3715) zu gelangen. Die Ausbildung einer so geringfügigen Unregelmäßigkeit ist nicht unwahrscheinlich. Wie Tab. 5.3 auf S. 83 zu entnehmen ist, verletzt die rekonstruierte (3715)-Oberfläche die Elektronen-Zählregel. Daher besitzt sie höchstwahrscheinlich eine höhere Energie als GaAs(2511). Dies gilt im übrigen ebenso für die den Vier-Dimer-Streifen entsprechende (51329)-Oberfläche. Der Ladungsüberschuß ist jedoch nur klein, und die Flächendichte der hängenden Bindungen ist auf der rekonstruierten (3715)-Oberfläche praktisch ebenso groß bzw. klein wie auf GaAs(2511) ( $8,185 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$  gegenüber  $8,176 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$ ; zum Vergleich:  $7,822 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$  für GaAs(001)- $\beta 2(2 \times 4)$ ). Der Energieunterschied zwischen den beiden Strukturen ist daher möglicherweise nur gering. Um diese Vermutung zu überprüfen, wurden für die Rekonstruktion in Abb. 5.12(b) ebenfalls Gesamtenergie-Berechnungen durchgeführt [153]. Für arsenreiche Bedingungen wurde die Oberflächenenergie der rekonstruierten GaAs(3715)-Oberfläche zu  $55 \text{ meV/\AA}^2$  bestimmt, nur  $2 \text{ meV/\AA}^2$  mehr als bei der GaAs(2511)-Oberfläche. Der Energieunterschied beträgt also in der Tat lediglich 4%. Daher ist GaAs(3715) als semistabil anzusehen. Ähnliches dürfte für die den Vier-Dimer-Streifen entsprechende Oberfläche gelten. Aus diesem Grunde ist die treibende Kraft für die Relaxation von Nicht-Drei-Dimer-Folgen in die normale (2511)-Struktur nur klein.

Eine einzelne Zwei-Dimer-Folge umgeben von Drei-Dimer-Folgen würde bedeuten, daß Drei-Dimer-Folgen, die in Richtung  $[2\bar{3}1]$  aneinandergrenzen, ungefähr in Richtung  $[45\bar{3}]$  gegeneinander verschoben wären. Dadurch entstünde eine Domänengrenze entlang dieser Richtung, an der lokal sehr ungünstige Bindungskonfigurationen vorlägen (Abb. 6.7). Daher ist es günstiger, einen ganzen Streifen aus Zwei-Dimer-Folgen zu formen.

Nachdem der Liniendefekt sich einmal gebildet hat, wird er aufgrund der geneigten Geometrie der (2511)-Ebene darüber hinaus kinetisch stabilisiert: Um einen Zwei-Dimer-Streifen in einen Drei-Dimer-Streifen umzuwandeln, müßten alle benachbarten Streifen ungefähr in Richtung  $[45\bar{3}]$  verschoben werden. Da die Streifen gegenüber der Oberflächenebene geneigt sind, können einzelne Atomlagen nicht über darunter liegende sozusagen „hinweggleiten“. Statt dessen müßten auch Bindungen gebrochen werden, die nicht senkrecht zur Oberflächenebene orientiert sind. Es wäre also ein signifikanter



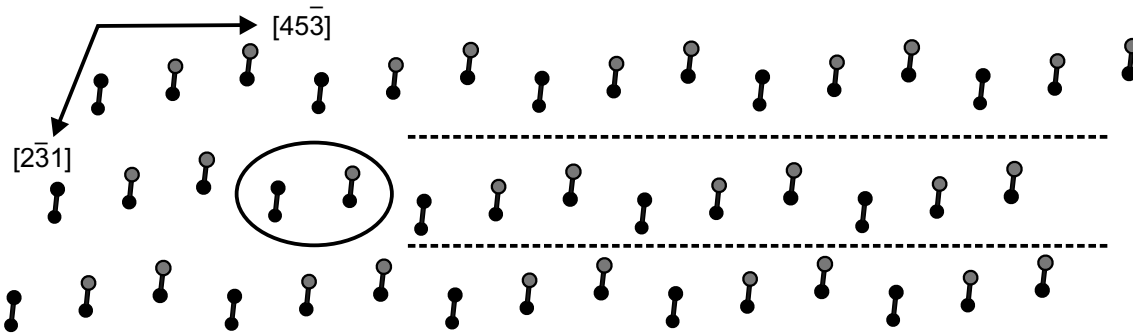


Abbildung 6.7: Schematische Darstellung einer doppelten hypothetischen Domänengrenze (gestrichelte Linien) auf GaAs(2 5 11), die sich aus einer einzelnen Zwei-Dimer-Folge (Ellipse) ergäbe.

Umbau der Atome in den obersten Lagen über die ganze Terrasse hinweg erforderlich. Dies schliesse auch das Entfernen von Atomen ein, die sich bereits in einer volumenähnlichen Umgebung befinden. Die großflächige Umordnung, die notwendig wäre, um ausschließlich Drei-Dimer-Streifen zu formen, bildet also eine kinetische Barriere. In Abb. 6.2(b) auf S. 102 wandelt sich tatsächlich ein Zwei-Dimer-Streifen in einen Drei-Dimer-Streifen um (s. Pfeil), aber dafür wechselt der benachbarte Streifen von drei zu zwei Dimeren.

Die obigen Überlegungen führen zu einer interessanten Spekulation. Da die Zwei-Dimer-Streifen die Elektronen-Zählregel verletzen, besitzen sie wahrscheinlich metallische Oberflächenzustände. Dies wird durch die Berechnung der elektronischen Struktur von GaAs(37 15) unterstützt [153]. Aus diesem Grunde könnten diese Streifen, eingebettet in die halbleitende GaAs(2 5 11)-Oberfläche, möglicherweise eindimensionale Systeme sein. Experimente zur elektronischen Struktur dieser Proben wären daher sehr vielversprechend.

Die durch die experimentellen Beobachtungen angeregten Berechnungen der Oberflächenenergien von GaAs(2 5 11) und GaAs(37 15) ermöglichen eine Abschätzung der jeweiligen Relevanz der allgemeinen Prinzipien zur Struktur von Halbleiter-Oberflächen (s. Abschnitt 2.1.2 auf S. 21). Der wesentliche Unterschied zwischen diesen beiden Rekonstruktionen ist, daß nur eine von beiden die Elektronen-Zählregel erfüllt. Die Anzahl an hängenden Bindungen ist dagegen auf beiden praktisch gleich niedrig. Die Rechnungen ergaben, daß die Differenz der Oberflächenenergien weniger als 4% beträgt. Dies zeigt, daß der wesentlich größere Gewinn an Stabilität durch die Dimerisie-

nung der Arsenatome erzielt wird (Prinzip 2: Minimierung der hängenden Bindungen). Das Erreichen eines halbleitenden Zustandes (Prinzip 5), wie es durch das Erfüllen der ECR gewährleistet wird, ist demgegenüber nur zweitrangig. Diese Erkenntnis geht über die Untersuchung einer speziellen Oberfläche hinaus und vertieft das *generelle* Verständnis für die Struktur von Halbleiter-Oberflächen.

Obwohl die Energie von GaAs(3715) höher ist als die von GaAs(2511), ist sie dennoch vergleichbar mit der der GaAs(001)-Rekonstruktionen. Dies läßt darauf schließen, daß sogar höherindizierte Oberflächen, für die keine die ECR erfüllende Rekonstruktion existiert, an der Ausbildung der Gleichgewichtsform des GaAs-Kristalls beteiligt sein könnten.

## 6.3 Weitere Experimente

### 6.3.1 RHEED

Während des Wachsens und Ausheilens wurde die Oberflächenqualität mit RHEED kontrolliert. Zur Entwicklung eines Strukturmodells ist die Analyse von RHEED-Mustern jedoch komplizierter als die Auswertung von LEED-Bildern. Da beide Geräte zur Verfügung standen, wurden die LEED-Daten verwendet. Während der Präparation von Proben mit MBE ist RHEED aber die Standardmethode zur Überprüfung der Oberflächenstruktur. In vielen Forschungsgruppen ist darüber hinaus sogar nur diese Methode zur in situ-Untersuchung der Proben vorhanden. Daher werden in Abb. 6.8 RHEED-Muster der GaAs(2511)-Oberfläche präsentiert. Diese Bilder wurden nach dem Wachstum nach Abkühlen der Proben auf Raumtemperatur aufgenommen. Die Reflexe waren dann besser zu erkennen als bei höheren Probertemperaturen, die Muster waren aber qualitativ gleich.

Der Zusammenhang zwischen Realraum und reziprokem Raum sowie zwischen LEED- und RHEED-Mustern wird für die Oberflächenstruktur von GaAs(2511) in Abb. 6.9 verdeutlicht. Da hier nur die Periodizitäten betrachtet werden, ist die Basis des zweidimensionalen Gitters irrelevant. Daher werden im Realraum äquivalente Stellen der Struktur einfach durch Punkte angezeigt, und im reziproken Raum werden Intensitätsunterschiede der Reflexe nicht berücksichtigt. In beiden Räumen sind die zwei gleichwertigen Einheitszellen eingezeichnet, die in Abschnitt 6.2.1 eingeführt wurden. LEED-Muster (Abb. 6.1) zeigen direkt die zweidimensionale Struktur des re-

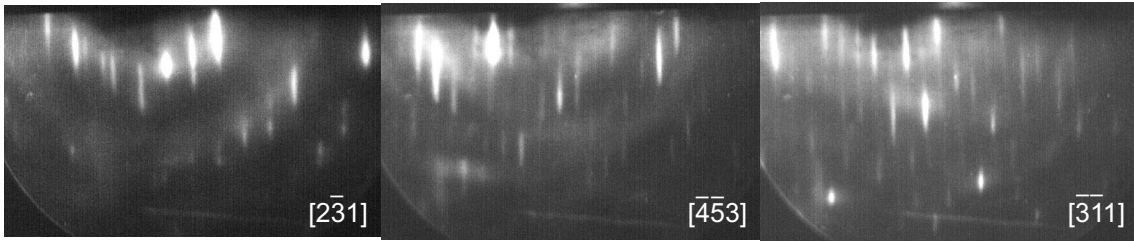


Abbildung 6.8: RHEED-Bilder der GaAs(2511)-Oberfläche. Die jeweilige Ausrichtung des Elektronenstrahls ist auf den Bildern angegeben, die Blickrichtung ist dazu entgegengesetzt.  $E = 3 \text{ keV}$ .

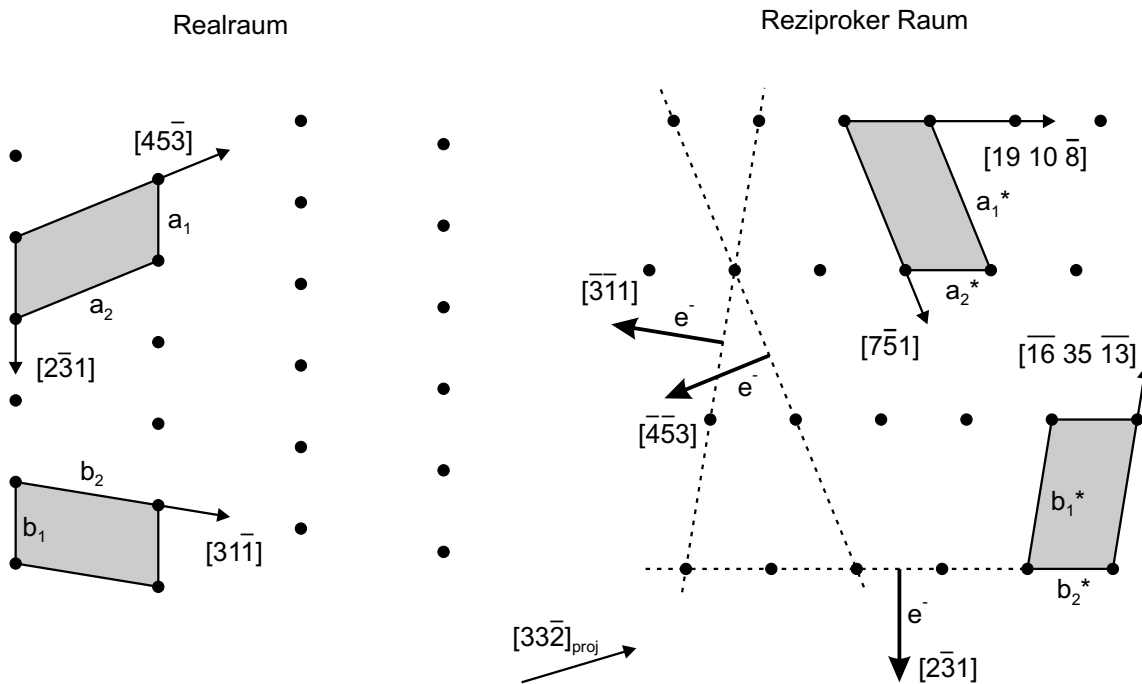


Abbildung 6.9: Oberflächenstruktur von GaAs(2511) im Realraum und im reziproken Raum. Die mit  $e^-$  gekennzeichneten Pfeile zeigen die den RHEED-Bildern in Abb. 6.8 entsprechenden Richtungen des Elektronenstrahls an. Die gestrichelten Linien stellen die dabei aufgenommenen eindimensionalen Schnitte durch den reziproken Raum dar.

ziproken Raums. RHEED-Muster stellen dagegen nur einen eindimensionalen Schnitt durch diesen Raum dar. Charakteristische RHEED-Bilder werden beobachtet, wenn der Elektronenstrahl entlang den Basisvektoren des Realraums gerichtet ist. Dann werden die im *reziproken* Raum dazu senkrecht gelegenen Abstände detektiert.

### 6.3.2 Mesoskopische Morphologie

Ein STM-Bild eines  $(0,6 \mu\text{m})^2$  großen Ausschnitts der GaAs(2511)-Oberfläche ist in Abb. 6.10 gezeigt. Durch das gesamte Bild verlaufen Stufen, die von links nach rechts abfallen. In einer bestimmten Richtung verlaufende Stufen sind charakteristisch für eine Vizinalfläche. Auf diese Weise wird kompensiert, daß die makroskopische Orientierung der Proben nicht (2511), sondern (3715) ist. Von (2511) gelangt man zu (3715) durch Verkippen um  $1,0^\circ$  ungefähr in Richtung  $[33\bar{2}]$ . Dies ist in Übereinstimmung mit der Richtung der Stufen in Abb. 6.10. Wenn eine einzelne Stufenkante über das ganze Bild vom oberen Rand zum unteren Rand verfolgt wird, ergibt sich eine *mittlere* Orientierung ungefähr senkrecht zu  $[33\bar{2}]$ . Bei Betrachtung eines kleineren Abschnitts einer Stufenkante ist jedoch zu erkennen, daß diese tatsächlich nur selten in dieser Richtung verläuft. Die Stufe ist also sehr rauh. Es treten viele spitze „Zungen“ auf (exemplarisch durch gestrichelte Linien angedeutet), die aus einer Terrasse auf die darunterliegende herausragen. Diese Zungen werden von Stufenkanten entlang zwei ausgezeichneten Richtungen begrenzt (s. Pfeile). An manchen Stellen verlaufen diese Stufenkanten über mehrere hundert Ångström gerade, also sind auf dieser kleineren Skala Stufen entlang diesen beiden Orientierungen glatt. Dies deutet darauf hin, daß diese Stufen energetisch besonders günstig sind. STM-Bilder derselben Probe bei stärkerer Vergrößerung zeigen, daß die eine Sorte dieser Stufen entlang  $[31\bar{1}]$  verläuft. Aufgrund des Winkels zu der anderen Sorte kann geschlossen werden, daß diese wahrscheinlich parallel zu  $[45\bar{3}]$  orientiert ist, dem anderen Basisvektor. Die in Abb. 6.10 gezeigte Oberfläche wurde bei  $580^\circ\text{C}$  präpariert. Auf Proben, die bei niedrigeren Temperaturen gewachsen wurden, sind die „Zungen“ ebenfalls zu sehen. Die sie begrenzenden Stufen sind jedoch weniger gerade.

Die Stufen begrenzen Terrassen, die teilweise mehr als  $1000 \text{ \AA}$  weit ausgedehnt sind. Damit sind sie sehr viel größer als auf den beiden stabilen höherindizierten GaAs-Oberflächen  $(113)\text{A}-(8 \times 1)$  (Abb. 5.5 und 5.9 auf S. 67 bzw. 77, Ref. [2]) und  $(114)\text{A}-\beta 2(2 \times 1)$  [26, 167]. Auf den Terrassen treten weder Inseln noch Löcher auf. Sehr kleine Inseln und Löcher wären bei dieser Auflösung nicht zu erkennen, wurden aber auch auf STM-Bildern mittelgroßer Bereiche der Oberfläche nicht beobachtet (vgl. Abb. 6.2(a) auf S. 102). Dies unterscheidet GaAs(2511) von den stabilen höherindizierten Flächen GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B-( $8 \times 1$ ) [26, 100] und GaAs(114)A- $\alpha 2(2 \times 1)$  [26, 167, 168]. Sogar auf der am häufigsten als Substrat verwendeten GaAs-Oberfläche  $(001)-(2 \times 4)$  gibt es

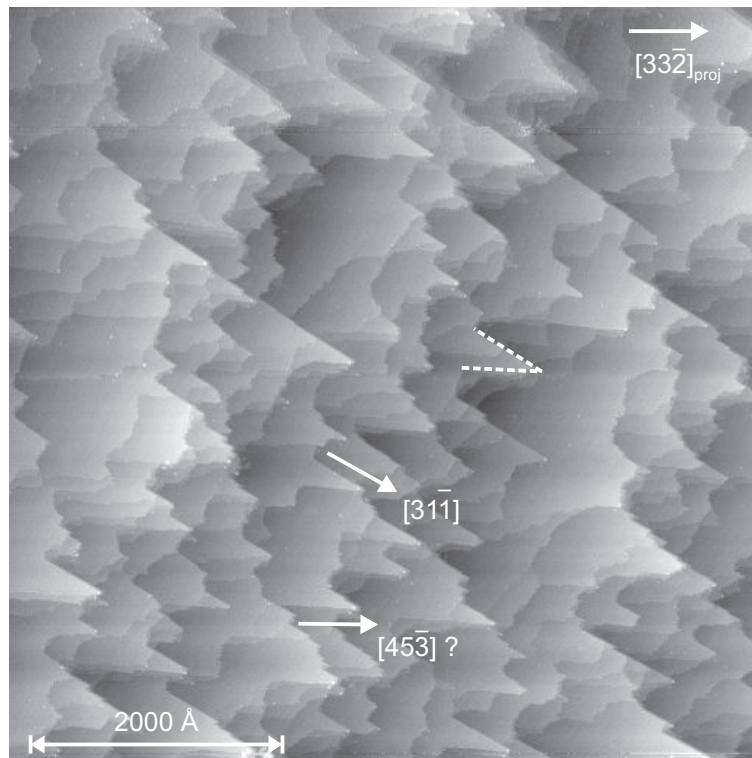


Abbildung 6.10: STM-Bild eines großen Ausschnitts der GaAs(2 5 11)-Oberfläche.  $U_{Probe} = -2,5 \text{ V}$ ,  $I = 0,3 \text{ nA}$ .

auf den Terrassen viele Löcher von der Größe mehrerer Einheitszellen [169–171]. Die GaAs(2511)-Oberfläche ist also sehr glatt, weswegen sie ein vielversprechendes Substrat für die Herstellung von Heterostrukturen ist. Die Abwesenheit von Inseln läßt darauf schließen, daß das Wachstum im Stufenfluß-Modus stattfindet. Die beste Oberflächenqualität wurde erzielt, indem die Proben nach dem MBE-Wachstum im As<sub>2</sub>-Strom bei Temperaturen zwischen 400 °C und 500 °C ausgeheilt wurden. Dies ist der typische Temperaturbereich für das Wachstum von InAs. Daher ist GaAs(2511) potentiell besonders geeignet als Substrat für das Wachstum von InAs/GaAs-Quantenpunkten. Diese bilden sich allerdings nicht auf allen GaAs-Oberflächen aus [119]. Experimente in dieser Richtung würden aber in jedem Fall dazu beitragen, die Faktoren für die Entstehung solcher Quantenpunkte besser zu verstehen.

### 6.3.3 Tempern im Ultrahochvakuum

Von GaAs(001) ist bekannt, daß sich je nach Präparationsbedingungen unterschiedliche Rekonstruktionen einstellen [41, 42]. Auf den GaAs(2511)-Proben wurden die Präparationsparameter daher in einem weiten Bereich variiert. Dies beinhaltete auch das Tempern von Proben im UHV, auf denen mit MBE eine Oberfläche guter Qualität hergestellt worden war. Die Proben wurden dabei 5–15 min lang auf bis zu 590 °C geheizt. Da zunächst bevorzugt Arsen desorbiert, werden auf diese Weise galliumreiche Strukturen erzeugt.

#### Ergebnisse

Für GaAs(2511) wurde während des Temporns mit RHEED beobachtet, daß die Reflexe diffuser und schwächer wurden, bis schließlich nur noch ein unscharfer Beugungskreis zu sehen war. Beim Abkühlen tauchten Reflexe wieder auf, das RHEED-Muster war jedoch noch immer deutlich schlechter ausgeprägt als vor dem Tempern.

Ein LEED-Bild einer so präparierten Oberfläche ist in Abb. 6.11 dargestellt. Der Untergrund ist stärker als bei den LEED-Bildern, die nach MBE-Präparation aufgenommen wurden (vgl. Abb. 6.1 auf S. 101), so daß weniger Reflexe sichtbar sind. Dennoch ist deutlich zu erkennen, daß sich das Muster verändert hat. Vor dem Tempern verliefen Reihen besonders heller Reflexe entlang  $[7\bar{5}1]$  und  $[19\ 10\ \bar{8}]$  (Abb. 6.1). In Abb. 6.11 dagegen sind Folgen von besonders hellen Reflexen entlang Richtungen orientiert, die nahe bei  $[\bar{1}6\ 35\ \bar{1}3]$  und  $[19\ 10\ \bar{8}]$  liegen. Auch der Abstand der Reflexe ist

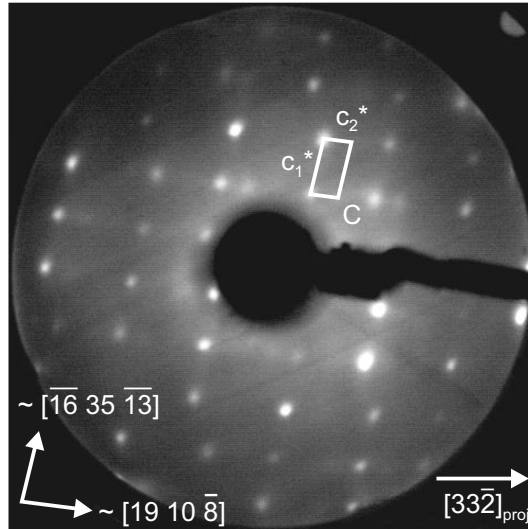


Abbildung 6.11: LEED-Bild der GaAs(2511)-Probe nach dem Tempern im UHV (5 min bei 575 °C).  $E = 57$  eV.

Tabelle 6.4: Experimentell ermittelte Abmessungen der Einheitszellen auf den getemperten GaAs(2511)-Proben. Zum Vergleich sind die Werte der idealen GaAs(2511)-Oberfläche ebenfalls angegeben.  $x$  steht je nach Zelle für  $b$ ,  $c$  bzw.  $d$ . Datensatz LEED: 6 Bilder aus 3 Präparationen; Datensatz STM: typischerweise 20 Meßwerte aus 4 Bildern.

Zelle	$x_1/\text{Å}$	$x_2/\text{Å}$	Winkel / °
$C$ (LEED)	$11,0 \pm 0,5$	$27,5 \pm 0,3$	$83,6 \pm 0,5$
$D$ (STM)	$11,4 \pm 1,1$	$9,8 \pm 1,1$	$\sim 90$
$B$ (ideal)	10,6	18,9	80,7

verschieden. Die in Abb. 6.11 eingezeichnete Einheitszelle  $C$  besitzt eine andere Form als die Zellen  $A$  und  $B$  in Abb. 6.1. Die experimentell ermittelten Abmessungen der Zelle  $C$  sind in Tab. 6.4 angegeben.

In Abb. 6.12 ist ein Übersichts-STM-Bild eines  $(0,6 \mu\text{m})^2$  großen Bereichs einer getemperten GaAs(2511)-Probe präsentiert. Es sind relativ gerade Stufenkanten zu sehen, die von links oben nach rechts unten verlaufen (z. B. als Fortsetzung des Pfeils). Diese geraden Stufenabschnitte sind typischerweise etwa  $1000 \text{ Å}$  lang. Wie die geraden Stufen fortgesetzt werden, ist nicht zu erkennen. Sie beginnen und enden in Bereichen mit einer gleichmäßigen Graustufe, also Regionen gleicher mittlerer Höhe. Ebene ausgedehnte Terrassen liegen im Gegensatz zu Abb. 6.10 nicht vor, die Oberfläche ist rauher. Dies erinnert an die Übersichtsbilder der GaAs(113)A-( $8 \times 1$ )-Oberfläche

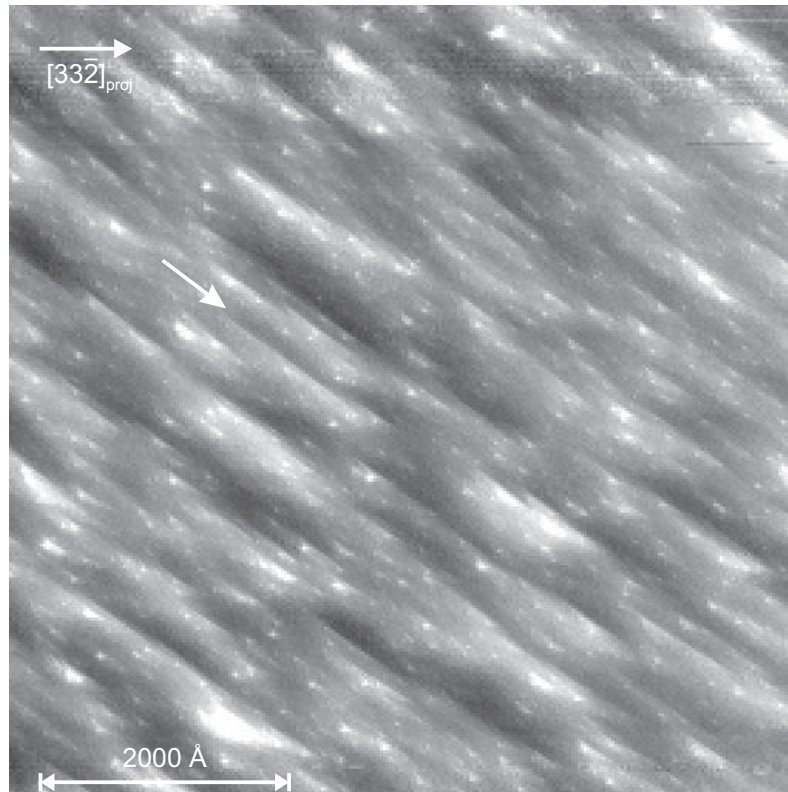


Abbildung 6.12: STM-Bild eines großen Ausschnitts der GaAs(2511)-Probe nach dem Tempern im UHV (15 min bei 590 °C).  $U_{Probe} = -2,5 \text{ V}$ ,  $I = 0,3 \text{ nA}$ .

(s. Abb. 5.9 auf S. 77). Da ein linearer Untergrund abgezogen wurde und die Oberfläche so rauh ist, scheinen auf den ersten Blick alle Bereiche des Bildes gleich hoch zu liegen. Bei genauerer Betrachtung der geraden Stufen wird jedoch deutlich, daß dies nicht zutrifft. Links unterhalb all dieser Stufen nimmt die Helligkeit von links unten nach rechts oben hin zu. Die Stufe selbst wird in dieser Richtung durch einen scharfen Wechsel von hellen zu sehr dunklen Grautönen angezeigt. Dies bedeutet, daß die Höhe der Oberfläche in der Richtung von links unten nach rechts oben im Mittel abnimmt. Dies steht in starkem Gegensatz zu der Orientierung der Stufen auf der MBE-präparierten Oberfläche (vgl. Abb 6.10).

Bei einer stärkeren Vergrößerung sind auf der Oberfläche Reihen von Buckeln zu erkennen, die von links oben nach rechts unten verlaufen (Abb. 6.13(a)). Die Buckel sind zu einem annähernd rechtwinkligen Gitter angeordnet. Die unterschiedlichen Graustufen zeigen an, daß die Buckel zu mehreren Lagen gehören. Es sind jedoch keine ausgedehnten Terrassen auszumachen. Statt dessen liegt ein unregelmäßiges Auf und



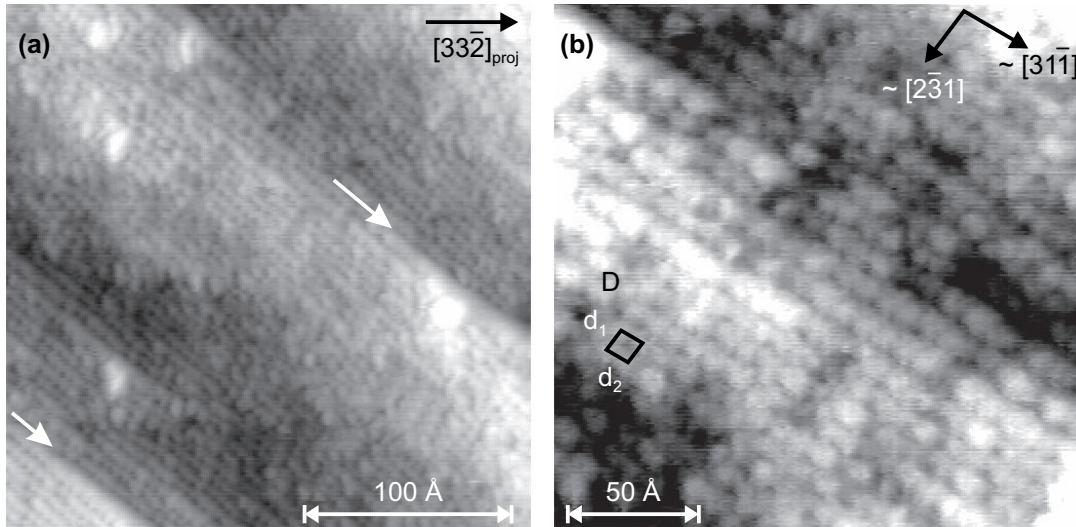


Abbildung 6.13: STM-Bilder der GaAs(25 11)-Oberfläche nach dem Tempern im UHV (15 min bei 590 °C). (a) Größerer Ausschnitt.  $U_{Probe} = -2,5$  V,  $I = 0,1$  nA. (b) Kleinerer Ausschnitt.  $U_{Probe} = -2,5$  V,  $I = 0,1$  nA.

Ab von sich nahe beieinander befindenden Buckeln vor. Nur an zwei Stellen (s. Pfeile) sind Stufenkanten klar zu sehen.

Auf dem hochauflösten STM-Bild in Unterabb. (b) werden die im vorigen Absatz beschriebenen Eigenschaften noch deutlicher. In diesem Bild ist eine beinahe quadratische Einheitszelle  $D$  markiert. Ihre Seitenlängen sind in Tab. 6.4 angegeben. Die Ordnung der Buckel erstreckt sich jeweils nur über wenige Einheitszellen. Daher ist nicht genau zu messen, ob die Einheitszelle tatsächlich rechteckig ist. Die Ausrichtung der Basisvektoren ist im Rahmen der Meßgenauigkeit in Übereinstimmung mit den LEED-Daten, ihre Längen sind es jedoch nicht.  $d_1$  ist so lang wie  $c_1$ , aber  $d_2$  ist deutlich kleiner als  $c_2$ .

## Diskussion

Das beinahe völlige Verschwinden der RHEED-Reflexe während des Temprens deutet darauf hin, daß dabei jegliche Fernordnung der Oberfläche zerstört wird. Während des Abkühlens bildet sich erneut eine regelmäßige Struktur aus, und es tauchen wieder Reflexe auf. Der hohe Untergrund sowohl in den RHEED- als auch in den LEED-Bildern zeigt aber an, daß die Oberfläche weniger regelmäßig ist als nach der MBE-Präparation. Dies wird durch die hohe Rauigkeit in den STM-Bildern unterstützt.

Da aber keine Aufspaltung von Reflexen auftritt, kann ausgeschlossen werden, daß die Oberfläche facettiert.

Die Einheitszelle der durch das Tempern erzeugten Oberfläche ist nicht kommensurabel zu der der (2511)-Ebene (s. Tab. 6.4). Daher ist es unwahrscheinlich, daß sich die Oberflächenatome zu einer anderen Rekonstruktion dieser Orientierung umordnen. Statt dessen ist zu vermuten, daß sich Bereiche einer nahe gelegenen Oberfläche formen, die unter galliumreichen Bedingungen stabiler ist als GaAs(2511). Diese Interpretation wird dadurch bekräftigt, daß die Stufen der Oberfläche im Mittel nun in einer gänzlich anderen Richtung verlaufen als vor dem Tempern. Dies bedeutet, daß die ebenen Abschnitte gegenüber der makroskopischen Probenorientierung (3715) in eine andere Richtung fehlorientiert sind, als das für (2511) der Fall ist.

Aus den LEED- und STM-Daten wurden die unterschiedlichen Einheitszellen  $C$  bzw.  $D$  extrahiert. Die Zuordnung einer Einheitszelle ist in den STM-Bildern schwieriger, da die lokale Periodizität nach typischerweise weniger als  $50 \text{ \AA}$  verletzt wird. Dies ist nur das Doppelte der aus den LEED-Aufnahmen ermittelten Länge  $c_2$ . Unter Berücksichtigung der Meßunsicherheit gilt  $c_2 = 3 \cdot d_2$ . Der Unterschied zwischen den Zellen  $C$  und  $D$  kann daher zwei Ursachen haben. Zum einen könnten die Buckel in den STM-Bildern unterschiedlichen Strukturelementen entsprechen, die durch die begrenzte Auflösung gleich erscheinen, und nur jeder dritte Buckel wäre tatsächlich äquivalent. Zum anderen könnte auf einer hypothetischen Oberfläche dieser Orientierung, die perfekt geordnet ist, alle drei Buckel eine leichte Versetzung auftreten. Die Beziehung zwischen den beiden Strecken  $c_2$  und  $d_2$  entspräche dann dem Zusammenhang auf GaAs(2511) zwischen  $a_2$  und dem Dimer-Dimer-Abstand in Richtung  $[12\bar{1}]$  auf den (137)-Streifen (s. Abb. 6.4 auf S. 106). Aufgrund der hohen Rauigkeit der realen Oberfläche wären diese Versetzungen in den STM-Bildern nicht von Störungen der Oberflächenordnung zu unterscheiden.

Die Zuordnung der Buckel zu Elementen in einem Strukturmodell ist auf der getemperten Oberfläche wegen der starken Unordnung noch schwieriger als auf der MBE-präparierten GaAs(2511)-Oberfläche. In den STM-Bildern in Abb. 6.13 wurden gefüllte Zustände detektiert. Diese werden auf Galliumarsenid typischerweise auf Arsen zurückgeführt. Auf galliumreichen Oberflächen können sich jedoch auch Galliumdimere bilden, die auf STM-Bildern ähnlich wie Arsendimere aussehen [172]. Im vorliegenden Fall ist das Auftreten von Galliumdimeren jedoch eher unwahrscheinlich: Zum einen wäre aufgrund der Geometrie eine Ga-Ga-Bindung noch stärker gegenüber

einer (2 5 11)-nahen Ebene verkippt als dies für As–As zutrifft. Daher müßte eine der beiden hängenden Bindungen des hypothetischen Galliumdimers in den Volumenkristall hineinweisen. Zum anderen wurden die Proben nur relativ moderat getempert (5–15 min bei maximal 590 °C). Unter diesen Bedingungen bleiben auf GaAs(114)A Arsendimere noch erhalten [26, 168].

In der Tat entsprechen sowohl die Ausrichtungen gegenüber der bekannten Richtung  $[3\bar{3}\bar{2}]$  als auch die Längen von  $c_1 \approx 11 \text{ \AA} \approx d_1$  sehr gut der von  $a_1 = b_1 = 10,6 \text{ \AA}$  auf GaAs(2 5 11). Daher ist es naheliegend, die Buckel in Abb. 6.13 wie auf der MBE-präparierten GaAs(2 5 11)-Oberfläche Arsendimeren zuzuordnen. In Ab. 6.13 wurde deswegen dem entsprechenden Basisvektor tendentiell die Richtung  $[2\bar{3}1]$  zugewiesen. Daraus ergibt sich, daß  $c_2$  und  $d_2$  zumindest ungefähr in die Richtung  $[31\bar{1}]$  weisen. Aus der ungefähren Orientierung der Basisvektoren im Realraum wurden dann die Richtungen im reziproken Raum ermittelt.

Wegen des hohen Grades an Rauigkeit ist die getemperte Oberfläche weniger interessant als die MBE-präparierte GaAs(2 5 11)-Oberfläche.

## 6.4 Zusammenhang mit InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten

### 6.4.1 Einführung

Die Bedeutung der Entdeckung von GaAs(2 5 11) als erste stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks geht über den Erkenntnisgewinn zur Struktur reiner Oberflächen hinaus. Dies wurde durch Experimente in einem anderen Materialsystem gezeigt, deren Ergebnisse in diesem Abschnitt vorgestellt werden. Die Versuche wurden von J. Márquez an derselben Apparatur durchgeführt wie die übrigen in der vorliegenden Arbeit beschriebenen. 1,8 Monolagen InAs wurden bei einer Temperatur von 450 °C auf einem GaAs(001)-Substrat abgeschieden. Die dabei entstandenen dreidimensionalen Inseln (vgl. Abschnitt 2.2.1) wurden in situ mit dem STM untersucht [26]. Mit Hilfe der Ergebnisse zu GaAs(2 5 11) konnten diese STM-Bilder verstanden und die Form der Inseln aufgeklärt werden.

Diese Resultate sind von hoher Relevanz für eines der am raschesten expandierenden aktuellen Forschungsgebiete, das Studium niederdimensionaler Halbleiterstrukt-

ren. Werden die dreidimensionalen Inseln durch Überwachsen vollständig in GaAs eingebettet, wird die Bewegungsfreiheit von Elektronen in ihnen wegen der unterschiedlichen Bandstruktur von InAs und GaAs auf null Dimensionen eingeschränkt (vgl. Kapitel 1). Daher werden diese Gebilde Quantenpunkte genannt. Da dieser Begriff gängiger ist, wird er im folgenden verwendet, obwohl der Schritt des Überwachsens in den hier gezeigten Experimenten nicht durchgeführt wurde. Aufgrund ihrer Quantennatur hängen die Eigenschaften von niederdimensionalen Strukturen maßgeblich von ihrer Form und Größe ab. Die Form von Quantenpunkten ist jedoch experimentell schwierig zu bestimmen und wird in der Literatur kontrovers diskutiert (Übersichten in Ref. [8, 173, 174]). Es wurden linsen-, kegel- und pyramidenförmige Quantenpunkte vorgeschlagen. Für letztere wurden unterschiedliche Seitenfacetten berichtet sowie in einigen Studien abgeschnittene Spitzen. Wegen des großen technologischen Potentials dieser Strukturen sind Beiträge zum Verständnis ihrer Bildung und Form sehr wichtig.

#### 6.4.2 Ergebnisse

In Abb. 6.14 werden hochaufgelöste STM-Bilder zweier solcher Quantenpunkte präsentiert. Die beiden Unterabbildungen sind vergrößerte Ausschnitte eines einzelnen STM-Bildes, das mehrere Quantenpunkte enthält. Auf diesem und ähnlichen Bildern sind auch Stufen des Substrats und Dimere der Benetzungsschicht aufgelöst. Somit gab es einen Maßstab, an dem die STM-Bilder kalibriert wurden. Daher waren zuverlässige Abstandsmessungen möglich. Am bemerkenswertesten ist, daß auf der Oberfläche der Quantenpunkte eine Struktur auf atomarer Skala aufgelöst ist. Durch Wechsel von Scan-Orientierung und -Richtung wurde sichergestellt, daß die Bilder nicht von Artefakten beeinflusst wurden. Die Seitenwände werden von mindestens sechs verschiedenen Facetten gebildet, auf einigen Quantenpunkten sind auch zehn Facetten zu erkennen. Die Spitzen der Quantenpunkte sind scharf ausgebildet. In Abb. 6.15 ist die Anordnung der Facetten schematisch in Aufsicht dargestellt.

Auf vier der Facetten sind regelmäßige Anordnungen von Buckeln zu erkennen, die in den beiden Unterabbildungen etwas unterschiedlich ausgeformt sind. Aus Symmetriegründen entsprechen diese Facetten kristallografisch äquivalenten Ebenen. Die Winkel zum Substrat zeigen, daß ihre Orientierung  $\{2\ 5\ 11\}$  oder eine nahe gelegene Ebene ist. Vergrößerungen der in Abb. 6.14 jeweils vorne rechts gelegenen Facetten

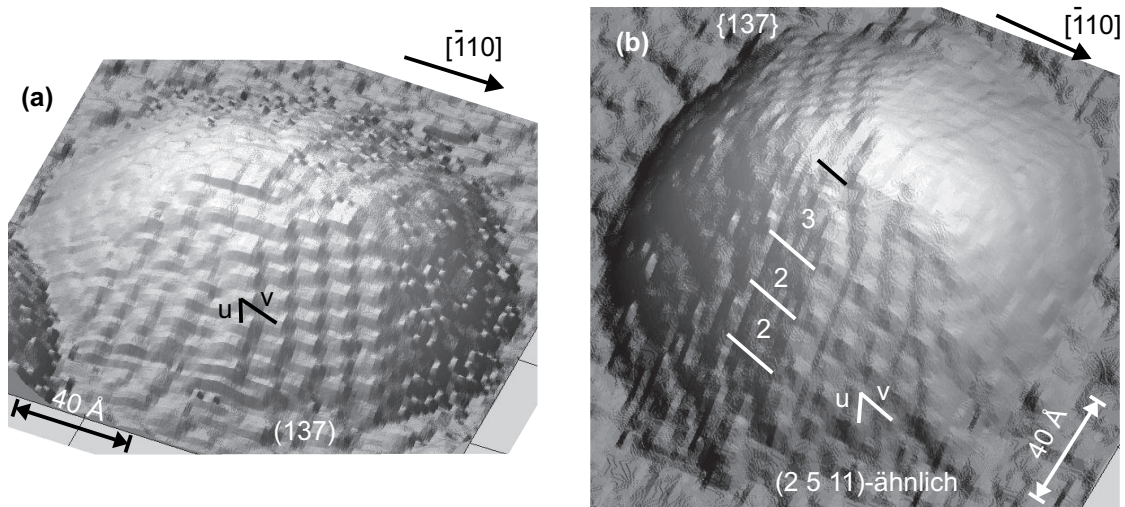


Abbildung 6.14: Hochaufgelöste STM-Bilder von zwei InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten. Die beiden Unterabbildungen sind vergrößerte Ausschnitte aus einem einzelnen STM-Bild.  $U_{Probe} = -2,3 \text{ V}$ ,  $I = 0,2 \text{ nA}$ .

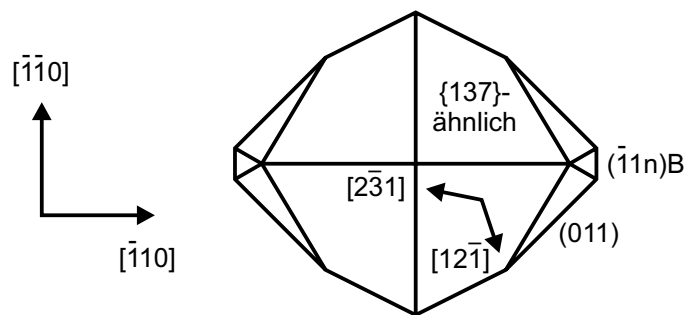


Abbildung 6.15: Schematische Darstellung der Form der Quantenpunkte in Aufsicht. Die mit  $(\bar{1}1n)B$  bezeichnete Facette liegt zwischen  $(\bar{1}11)B$  und  $(\bar{1}12)B$ .

sind in Abb. 6.16 gezeigt. Für die Darstellung wurde ein linearer Untergrund abgezogen, so daß die Facettenfläche in der Zeichenebene liegt. Der Abstand  $v$  in Abb. 6.16 ist mit  $10,5 \pm 0,2 \text{ \AA}$  in guter Übereinstimmung mit der Seitenlänge  $a_1 = 10,6 \text{ \AA}$  der (2511)-Einheitszelle in Richtung  $[2\bar{3}1]$ . Strenggenommen können aus den STM-Daten nur Abstände in der (001)-Ebene bestimmt werden. Daher muß  $a_1$  in diese Ebene projiziert werden, und der nominelle Wert verringert sich dadurch auf  $10,2 \text{ \AA}$ . Dies ändert jedoch nichts an der Aussage. Der Abstand  $u$  beträgt  $6,5 \pm 0,1 \text{ \AA}$  und entspricht der nominellen Entfernung von  $6,9 \text{ \AA}$  (projiziert  $6,3 \text{ \AA}$ ) zwischen zwei Dimeren in Richtung  $[12\bar{1}]$  auf den (137)-Streifen (vgl. Abb. 6.4(a) auf S. 106). Die Ausrichtung dieser Strecken im Verhältnis zum Substrat ist ebenfalls in Übereinstimmung mit den angegebenen Orientierungen. Daher ist es auf der Basis der STM-Bilder der GaAs(2511)-Oberfläche sinnvoll, die Buckel auf den Quantenpunkten Arsendimeren zuzuordnen. Dies wird dadurch unterstützt, daß die Präparationsbedingungen ähnlich waren. Die für die (2511)-Oberfläche charakteristischen Rinnen sind auf der Facette in Abb. 6.16(a) jedoch nicht zu sehen, die Anordnung der Dimere läßt sich vollständig durch eine Einheitszelle mit den Seiten  $u$  und  $v$  beschreiben. Daher ist die Orientierung dieser Facette (137). Der Winkel dieser Ebene zu (2511) beträgt  $2,3^\circ$ , und ihre relative Lage ist in dem stereografischen Dreieck in Abb. 6.3 auf S. 105 eingezeichnet. Die eindeutige Identifizierung der Facette wird wie bei der Bestimmung der Miller-Indizes der GaAs(2511)-Proben (vgl. S. 103) dadurch ermöglicht, daß die Längen der Basisvektoren nur diskrete Werte annehmen können.

Auf der vorderen Facette in Abb. 6.14(b) sind regelmäßige Verschiebungen zwischen den Dimeren zu erkennen, die durch Markierungen angezeigt werden. Wie in Abb. 6.16(b) deutlicher wird, entstehen auf diese Weise ein Drei-Dimer-Streifen an der Spitze des Quantenpunktes und drei Zwei-Dimer-Streifen darunter, von welchen der unterste nur rudimentär ausgebildet ist. Die Orientierung dieser Facette liegt daher näher bei (2511). Die Facette links hinten in Abb. 6.14(b) weist dagegen ebenfalls die regelmäßige {137}-Anordnung von Dimeren auf.

Unter Berücksichtigung aller 15 Quantenpunkte, die mit so einer hohen Auflösung charakterisiert wurden, ergibt sich für die Ausrichtung dieser Facetten folgendes: Die Basisstruktur ist eine Anordnung von Arsendimeren, die der {137}-Oberfläche entspricht. Diese Anordnung ist jedoch häufig gestört, wie auf den linken Facetten in Abb. 6.14 zu erkennen ist. Diese Störungen können auch die Rinnen und Streifen induzieren, wie sie von GaAs(2511) bekannt sind.

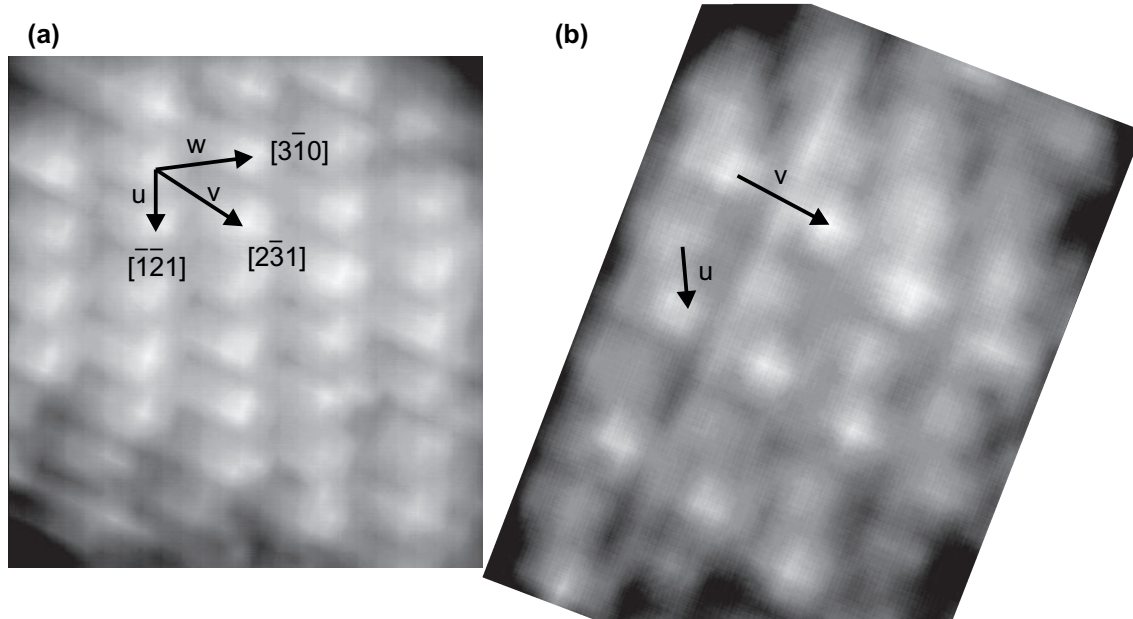


Abbildung 6.16: Vergrößerungen der vorne rechts gelegenen Facetten in Abb. 6.14.

Tabelle 6.5: Winkel zwischen den verschiedenen Facetten auf den Quantenpunkten und dem (001)-Substrat. Auf den (137)-Facetten wurde der Winkel statt über die Facettennormale über die  $[12\bar{1}]$ -Gerade durch die Dimere gemessen, da diese besser zu bestimmen war. Datensatz: typischerweise 10 Meßwerte aus 2 Bildern. Die Winkel zwischen  $(\bar{1}11)B$  bzw.  $(\bar{1}13)B$  und (001) sind  $54,7^\circ$  bzw.  $25,2^\circ$ .

Facette	$\{137\}$	$\{\bar{1}12\}B$	$\{110\}$
experimenteller Winkel / $^\circ$	$26,6 \pm 2,0$	$40,6 \pm 3,4$	$37,4 \pm 3,5$
geometrischer Winkel / $^\circ$	24,1	35,3	45,0

Die Bestimmung der Orientierungen derjenigen Facetten, auf denen keine atomaren Strukturen aufgelöst wurden, ist weniger eindeutig. Einige Quantenpunkte scheinen auf der rechten und linken Seite nur eine Facette zu haben (Abb. 6.14(b)). Die Winkel dieser Seitenwände zum Substrat passen am ehesten zur Orientierung  $\{\bar{1}12\}B$ . Andere Quantenpunkte sehen dagegen runder aus, was auf eine weitere Facette zwischen der  $\{137\}$ -ähnlichen und der  $\{\bar{1}12\}B$ -artigen hinweist (Unterabb. (a)). Diese ist jedoch nicht deutlich ausgeprägt.  $\{110\}$  ist die einzige bekannte stabile Oberfläche in diesem Winkelbereich. Die Winkel zwischen den verschiedenen Facetten und dem Substrat sind in Tab. 6.5 zusammengefaßt.

### 6.4.3 Diskussion

Ähnliche Ergebnisse wurden von anderen Forschungsgruppen berichtet, wie bereits in Abschnitt 5.5.1 erwähnt wurde. Lee et al. schlossen aus RHEED-Untersuchungen, daß die Quantenpunkte aus  $\{136\}$ -Facetten aufgebaut sind [19]. Eine TEM-Studie derselben Gruppe war in Übereinstimmung mit dieser Interpretation [174, 175], die auch in Artikeln anderer Autoren bestätigt wurde [176, 177]. Hasegawa et al. nahmen STM-Bilder auf, die dem in Abb. 6.14(a) sehr ähneln, gaben die Facettenorientierung aber mit  $\{125\}$  an [20, 120]. Referenzstudien auf planaren Proben dieser Orientierungen wurden nicht durchgeführt. Die Lage dieser Orientierungen zu (2511) und zu (137) ist wiederum dem stereografischen Dreieck zu entnehmen (Abb. 6.3 auf S.105).

Da (136) und (125) innerhalb von  $3,5^\circ$  um (137) und (2511) liegen, könnte vermutet werden, daß alle diese Beobachtungen auf *eine* Facettenorientierung zurückzuführen sind. Die idealen (137)-, (136)- und (125)-Oberflächen sind schematisch in Abb. 6.17 dargestellt, und die entsprechenden Abmessungen sind in Tab. 6.6 angegeben. Die Übereinstimmung mit den hier vorgestellten experimentellen Daten ist für (137) bei weitem am besten. Die Facetten auf den in Abb. 6.14 präsentierten Quantenpunkten können also mit den von Lee et al. [19] und Hasegawa et al. [20] vorgeschlagenen Orientierungen nicht erklärt werden. An dieser eindeutigen Unterscheidung zwischen sehr nahe beieinander gelegenen Ebenen zeigt sich die Überlegenheit der von uns angewandten Methode zur Identifizierung der Facetten, die auf dem Vergleich von atomar aufgelösten Strukturen auf den Quantenpunkten mit Referenzdaten von planaren Oberflächen basiert.

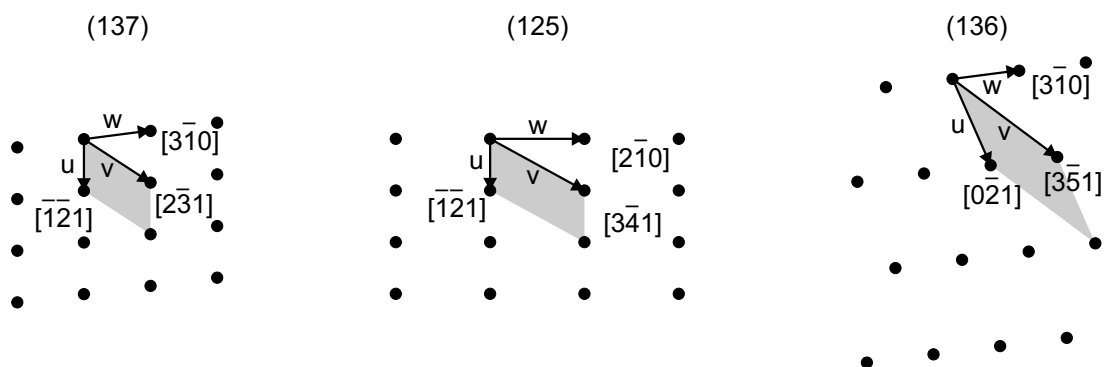


Abbildung 6.17: Schematische Darstellung der idealen Oberflächen, die als Facetten von Quantenpunkten diskutiert werden. Die Punkte entsprechen äquivalenten Stellen der Oberflächenstruktur.



Tabelle 6.6: Maße der Einheitszellen der idealen Oberflächen, die als Facetten von Quantenpunkten diskutiert werden (vgl. Abb. 6.17), und der experimentell ermittelten Einheitszelle (vgl. Abb. 6.16). Es sind sowohl die nominellen Längen angegeben als auch diejenigen, die sich durch Projektion der entsprechenden Richtungen in die (001)-Ebene ergeben. Datensatz: typischerweise 8 Meßwerte aus zwei Bildern.

Fläche	exp.	(137)		(125)		(136)	
		nom.	proj.	nom.	proj.	nom.	proj.
$u / \text{Å}$	$6,5 \pm 0,1$	6,9	6,3	6,9	6,3	12,6	11,3
$v / \text{Å}$	$10,5 \pm 0,2$	10,6	10,2	14,4	12,3	17,4	17,2
$w / \text{Å}$	$9,0 \pm 0,3$	8,9	8,9	12,6	12,6	8,9	8,9
Winkel $(u,w) / ^\circ$	$82,4 \pm 0,7$	82,6	81,9	90,0	90,0	73,6	71,6

Die unzweideutige Bestimmung der Facettenorientierung in der vorliegenden Arbeit wirft die Frage auf, ob auch Lee et al. [19] und Hasegawa et al. [20, 120] in Wirklichkeit {137}-ähnliche Facetten beobachteten. Mit RHEED und TEM lassen sich lediglich die Facettenwinkel in einem Querschnitt messen. Aufgrund der unvermeidbaren experimentellen Unsicherheit lassen sich daraus die Miller-Indizes nicht genau ermitteln. Dieses Problem tritt bei der Bestimmung der Abstände in Abb. 6.16 nicht auf, da diese nur diskrete Werte annehmen können. Wie aber in diesem Kapitel gezeigt wurde, existieren innerhalb des relevanten Winkelbereiches mit GaAs(2 5 11) und GaAs(3 7 15) bereits zwei zumindest semistabile Oberflächen. Der Innenwinkel der winkelförmigen RHEED-Reflexe in Ref. [19], auf dem die Zuordnung {136} beruht, beträgt  $56^\circ$ . Die entsprechenden theoretischen Werte sind  $55,6^\circ$  für {136}-Facetten und  $48,6^\circ$  für {137}-Facetten. Es erscheint also unwahrscheinlich, daß die winkelförmigen RHEED-Reflexe durch {137}-Ebenen hervorgerufen wurden.

In den STM-Bildern in Ref. [20, 120] ist kein Maßstab angegeben. Daher ist es nicht möglich abzuschätzen, inwieweit diese Daten auch mit der Orientierung {137} übereinstimmen könnten. Ohne die Vorkenntnis aus Studien auf planaren Proben, welche Strukturen in dem entsprechenden Winkelbereich auftreten können, ist die Interpretation solcher Bilder jedoch mit Sicherheit deutlich schwieriger.

Da selbst die sehr ähnlichen Ergebnisse von Lee et al. [19] und Hasegawa et al. [20] durch {137}-Facetten nicht eindeutig erklärt werden können, ist die Diskussion um die Form der Quantenpunkte also trotz der hier demonstrierten unzweifelhaften Iden-

tifizierung von  $\{137\}$ -Facetten keineswegs abgeschlossen. Es ist auch nicht zwingend notwendig, daß in allen Studien in der Literatur dieselbe Art von Quantenpunkten vorlag. Von Germanium-Quantenpunkten auf Silizium ist bekannt, daß ihre Form von den Präparationsbedingungen abhängt und sich während des Wachstums stark ändert [178–181]. Auch im System InAs/GaAs(001) wurde mit RHEED und AFM eine Formänderung bei Erhöhung der Wachstumstemperatur beobachtet [176]. Das für Anwendungen notwendige Überwachsen der Quantenpunkte mit einer weiteren Schicht GaAs kann die Form ebenfalls beeinflussen. García et al. berichteten für das Anfangsstadium des Überwachsens eine anisotrope Vergrößerung der Quantenpunkte sowie das Ausbilden von Löchern in der Mitte derselben [182]. Ob es während des Überwachsens zu einer Durchmischung von InAs und GaAs kommt, scheint ebenfalls von den Wachstumsbedingungen abzuhängen [182–185].

Die Besonderheit der in diesem Abschnitt vorgestellten Studie zu der Form von Quantenpunkten ist die Kombination mit den Untersuchungen auf den planaren (2511)-Proben und in der sphärischen Mulde in GaAs(113)A (Abschnitt 5.5.3). Zur Stabilität und Struktur der den Facetten zugeordneten Oberflächen lassen sich somit Aussagen treffen. Daher ermöglichen diese Ergebnisse zusammengenommen einen tieferen Einblick in den Prozeß der Bildung der Quantenpunkte. Dabei ist zwar zu berücksichtigen, daß die Quantenpunkte aus InAs und die planaren Proben aus GaAs bestehen. Aufgrund der bekannten Übereinstimmungen bei niederindizierten Oberflächen [186, 187] kann aber vorausgesetzt werden, daß Stabilität und Struktur der hier betrachteten Oberflächen für die beiden III-V-Verbindungen gleich sind.

Zunächst fällt auf, daß die Form der Quantenpunkte fast ausschließlich aus höherindizierten Facetten gebildet wird. Dies steht im Gegensatz zu theoretischen Modellen, in denen nur Beiträge von niederindizierten Oberflächen angenommen wurden [187]. Obwohl es auch stabile höherindizierte Oberflächen gibt, liegt ihre Energie höher als die der niederindizierten Flächen. Dies läßt darauf schließen, daß die Quantenpunkte keine Gleichgewichtsstrukturen sind, sondern daß ihre Form durch kinetische Prozesse bestimmt wird. In diesem Fall brauchen die Orientierungen der Facetten nicht stabilen Oberflächen zu entsprechen.

In der Tat besitzen die eindeutig identifizierten Facetten eher die Orientierung  $\{137\}$  als  $\{2511\}$ , obwohl sich aus den Experimenten auf den GaAs $\{2511\}$ -Proben und in der sphärischen Mulde in GaAs(113)A (Abschnitt 5.5.3) keine Hinweise auf eine Stabilität von GaAs(137) ergaben. Zudem verletzt diese Oberfläche die Elektronen-

Zählregel (Tab. 6.3 auf S. 107). Daß sich dennoch diese Ebene ausbildet, kann durch folgende Faktoren begünstigt werden: Von den Untersuchungen auf den GaAs(2511)-Proben ist bekannt, daß deren Struktur anfällig ist gegenüber Störungen. Auf den Facetten können solche Störungen leicht durch die Kanten oder die inhomogene Verspannungsverteilung im Quantenpunkt induziert werden. Außerdem würden auf die Facettenfläche nur etwa zehn Einheitszellen der (2511)-Rekonstruktion passen. Darüber hinaus fehlt zur Erfüllung der Elektronen-Zählregel auf der rekonstruierten GaAs(137)-Oberfläche nur ein viertel Elektron (Tab. 6.3). Die Flächendichte der hängenden Bindungen ist mit  $8,147 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$  sogar geringer als auf GaAs(2511) ( $8,176 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$ ). Daher könnte diese Oberfläche ähnlich wie GaAs(3715) eine niedrige Oberflächenenergie besitzen.

Die {137}-Struktur weist auf fast allen aufgelösten Facetten Störungen auf, also fehlende oder versetzte Dimere. Wie schon auf S. 103 erklärt wurde, wird bereits durch das Entfernen oder Hinzufügen weniger Atome die Facettenorientierung verändert. Auf diese Weise könnten möglicherweise auch {136}- und {125}-Facetten entstehen, wie sie von Lee et al. [19] und Hasegawa et al. [20] vorgeschlagen wurden.

Auch für die anderen Facetten in Abb. 6.14 ist anzuzweifeln, ob sie stabile Oberflächen bilden. GaAs( $\bar{1}12$ )B facettiert [67, 87, 88] (Kapitel 4), und die Zuordnung von {110} ist weniger gesichert. Die Abweichung vom geometrischen Winkel ist für diese Facette am größten (Tab. 6.5). Zudem würde eine  $\{\bar{1}12\}$ B-Facette rein geometrisch zwischen zwei {110}-Facetten nur als Schnittkante auftreten. Auch die Unterschiede zwischen dem Modell in Abb. 6.15 und der beobachteten Form der Quantenpunkte in Abb. 6.14 sind hauptsächlich auf die Zuordnung {110} zurückzuführen. Daher ist es gut möglich, daß die Facetten zwischen {137} und  $\{\bar{1}12\}$ B eine andere Ausrichtung als {110} besitzen. Weitere stabile Oberflächen sind in diesem Winkelbereich jedoch nicht bekannt.

Über die Kinetik der Prozesse, die während des Wachstums von Quantenpunkten eine Rolle spielen, ist noch wenig bekannt. Eine vollständige Erklärung der hier vorgestellten Ergebnisse ist daher zu diesem Zeitpunkt nicht möglich. Die Quantenpunkte scheinen jedenfalls nicht dem Minimum der Summe aus Verspannungs- und Oberflächenenergie zu entsprechen, wie dies im konventionellen Stranski-Krastanow-Prozeß angenommen wird. Es kann also gefolgert werden, daß dieser die Bildung von Quantenpunkten nur unzureichend beschreibt.

## 6.5 Zusammenfassung

Es wurden Untersuchungen auf planaren GaAs-Proben durchgeführt, die von (113) um  $9,7^\circ$  in Richtung  $[\bar{1}10]$  fehlorientiert sind. Das Ziel dieser Studie war, die genaue Orientierung und Struktur der stabilen Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks zu bestimmen, die durch die Experimente in der Mulde in GaAs(113)A entdeckt wurde. Aus LEED-Aufnahmen wurde eine schiefwinklige Einheitszelle ermittelt und auf eine gute Oberflächenqualität geschlossen. Die LEED-Daten sind in Übereinstimmung mit RHEED-Mustern, die während des Wachstums beobachtet wurden. Auf STM-Bildern sind mehr als  $1000 \text{ \AA}$  weit ausgedehnte Terrassen zu sehen. Diese sind aus in Richtung  $[2\bar{3}1]$  verlaufenden Streifen aufgebaut, die aus Folgen von drei Buckeln bestehen. Die Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit den Versuchen auf der Mulde. Die gleiche Oberfläche wurde nun also auch auf planaren Proben gefunden.

Die Miller-Indizes dieser neuen Oberfläche wurden zu (2511) bestimmt. Es wurde ein Strukturmodell für eine Rekonstruktion entwickelt, das auf geneigten Arsendimeren basiert. Dieses Modell erfüllt die Elektronen-Zählregel. Gesamtenergie-Berechnungen auf der Basis der Dichtefunktional-Theorie ergaben für diese Oberflächenstruktur den günstigen Energiewert von  $53 \text{ meV}/\text{\AA}^2$  [153]. Simulierte STM-Bilder, die aus der berechneten Struktur erzeugt wurden, stimmen sehr gut mit den experimentellen überein. Somit wird die ermittelte Struktur von einer Vielzahl von Daten gestützt.

Die Rekonstruktion ist aufgebaut aus Elementen, die zu den Ebenen (113) und (137) gehören. Da aber die Oberflächen, die diesen Strukturelementen entsprechen, nicht stabil sind, ist dies keine Form von Nanofacettierung.<sup>2</sup>

Auf der GaAs(2511)-Oberfläche treten auch Streifen auf, die aus Folgen von nur zwei Dimeren bestehen. Diese langreichweitige, geordnete Verletzung der Periodizität ist eine neue allgemeine Eigenschaft einer Oberflächenstruktur. Sie ist zurückzuführen auf die Semistabilität von GaAs(3715). Diese Oberfläche bestände ausschließlich aus Zwei-Dimer-Streifen. Obwohl die rekonstruierte GaAs(3715)-Oberfläche die Elektronen-Zählregel verletzt, ist ihre Oberflächenenergie mit  $55 \text{ meV}/\text{\AA}^2$  [153] nur 4% größer als die von GaAs(2511). Die Relaxation in die Drei-Dimer-Streifen der (2511)-Rekonstruktion ist aufgrund der geneigten Geometrie der Oberfläche kinetisch gehemmt. Dieses Phänomen ermöglicht ein besseres Verständnis der generellen Prinzi-

---

<sup>2</sup>Die stabile  $(8 \times 1)$ -Rekonstruktion auf GaAs(113)A besitzt eine andere Struktur als die (113)-Elemente auf GaAs(2511).

pien zur Struktur von Halbleiter-Oberflächen. Offensichtlich ist der Stabilitätsgewinn, der durch Dimerisierung, also Minimierung der hängenden Bindungen, erreicht wird, viel größer als derjenige, der durch das Erreichen eines halbleitenden Grundzustandes erzielt wird. Des weiteren wird spekuliert, daß die Zwei-Dimer-Streifen elektronisch eindimensionale Strukturen und für weitergehende Untersuchungen daher von hohem Interesse sind.

Auf Übersichts-STM-Bildern ist zu erkennen, daß sich Stufen bevorzugt entlang  $[31\bar{1}]$  und  $[45\bar{3}]$  ausbilden und die entsprechenden Stufenkanten besonders gerade sind. Daher sind diese Stufen wahrscheinlich energetisch besonders günstig.

Die Terrassengröße war auf den untersuchten Proben nur durch die Fehlorientierung von etwa  $1^\circ$  begrenzt. Zudem treten auf der GaAs(2 5 11)-Oberfläche weder Inseln noch Löcher auf. Daher ist diese Oberfläche ein vielversprechendes Substrat für die Herstellung von Heterostrukturen. Dies gilt wegen der ähnlichen Präparationsbedingungen insbesondere für das Wachstum von InAs-Quantenpunkten.

Durch Tempern von GaAs(2 5 11)-Proben im Ultrahochvakuum wird die Oberfläche sehr viel rauher, und die atomare Struktur ändert sich. Die kleinen ebenen Bereiche entsprechen vermutlich einer anders orientierten Oberfläche, die unter galliumreichen Bedingungen energetisch günstiger ist als GaAs(2 5 11).

In STM-Bildern von InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten wurden atomare Strukturen auf den Seitenflächen aufgelöst [26]. Durch Vergleich mit den Experimenten auf GaAs(2 5 11) wurde die Orientierung dieser Facetten eindeutig als  $\{137\}$  identifiziert. Die Form der Quantenpunkte wird durch höherindizierte Ebenen bestimmt, die als planare Oberflächen instabil sind. Dies legt nahe, daß die Bildung der Quantenpunkte durch kinetische Effekte beeinflusst und damit durch den konventionellen Stranski-Krastanow-Prozeß nur unzureichend beschrieben wird.

GaAs(2 5 11) ist die erste bekannte stabile Oberfläche eines Verbindungshalbleiters im Inneren des stereografischen Dreiecks. Die Entdeckung dieser komplizierten Oberfläche zeigt, daß stabile höherindizierte Oberflächen keine Ausnahme sind, und falsifiziert damit die Annahme, daß nur niederindizierte Oberflächen stabil sind. Nun stellt sich die Frage, was es noch für stabile Oberflächen geben mag. Darüber hinaus wurde ein besseres Verständnis der Struktur von Halbleiter-Oberflächen im allgemeinen und der Bildung von Quantenpunkten erzielt.

## 7 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden erstmals GaAs-Oberflächen untersucht, die im Inneren des stereografischen Dreiecks liegen, also weit entfernt von den niederindizierten Ebenen (001), (110) und (111). In vorherigen Studien wurden ausschließlich niederindizierte sowie einige auf dem Rand des Dreiecks gelegene Oberflächen charakterisiert. Verschieden orientierte GaAs-Substrate wurden für die vorliegende Arbeit mit MBE präpariert und in situ mit STM, LEED und RHEED analysiert. Die dabei beobachteten Oberflächen sind in Abb. 7.1 eingetragen. Zu Beginn der Arbeit standen Untersuchungen auf den schon von anderen Autoren charakterisierten höherindizierten Oberflächen GaAs(112)A und GaAs(113)A. Die hier vorgestellten Ergebnisse zu diesen Orientierungen führten zu Studien der Oberflächen GaAs(2 5 11) und GaAs(3 7 15) im Inneren des Dreiecks. Die Entdeckung und Strukturaufklärung von GaAs(2 5 11) als erste stabile GaAs-Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks ist die wichtigste Erkenntnis dieser Arbeit.

Die GaAs(112)-Oberflächen wurden zum ersten Mal in situ mit einer Realraum-methode untersucht. Diese Flächen sind nicht stabil. Auf der A-Seite entstehen fünf Facetten mit den Orientierungen (111), {110} und {124}, die sich zu Vertiefungen mit fünfeckigem horizontalen Querschnitt anordnen. Auf der B-Seite dagegen bilden sich invertierte Pyramiden mit den vier Seitenflächen ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )B,  $\{\bar{1}\bar{1}0\}$  und ( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B. Dabei ist bemerkenswert, daß sich auf der A-Seite keine einzelnen (113)A-Facetten statt der beiden {124}-Facetten bilden, obwohl GaAs(113)A eine niedrige Oberflächenenergie besitzt [3]. Das Auftreten der {124}-Facetten weist darauf hin, daß die entsprechende Oberfläche, die im Inneren des stereografischen Dreiecks liegt, stabil ist. Es ist jedoch zu berücksichtigen, daß diese Richtung nur auf ca. 5° genau bestimmt werden konnte.

Die Studie auf der GaAs(113)A-Oberfläche bestätigte das von Wassermeier et al. [2] vorgeschlagene Modell für die (8×1)-Rekonstruktion. Darüber hinaus wurde die Mor-

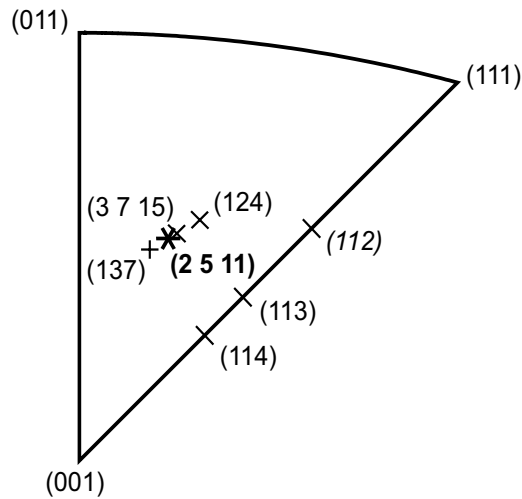


Abbildung 7.1: Stereografisches Dreieck mit den in dieser Arbeit beobachteten GaAs-Oberflächen sowie den drei niederindizierten Ebenen an den Ecken. GaAs(2511), (113) und (114) sind stabile höherindizierte Oberflächen. GaAs(112) ist instabil, und zweien der auf dieser Oberfläche auftretenden Facetten wurde die Orientierung {124} zugeschrieben. Abschnitte der Orientierung (3715) treten auf GaAs(113)A und auf GaAs(2511) auf. (137) wurde nur als Facette auf InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten beobachtet.

phologie der Oberfläche auf einer etwa  $1000 \text{ \AA}$  großen Skala untersucht, um der auf dieser Oberfläche beobachteten Anisotropie auf den Grund zu gehen. Stufen entlang  $[33\bar{2}]$  verlaufen über bis zu  $2000 \text{ \AA}$  gerade ohne jegliche Kinks. Stufen entlang  $[\bar{1}10]$  sind dagegen sehr rauh. Dieses Phänomen konnte durch Anwendung der Elektronen-Zählregel auf Modelle eindimensionaler Inseln erklärt werden. Diese Analyse legte zudem nahe, daß Wachstum hauptsächlich durch Anlagerung in Richtung  $[33\bar{2}]$  erfolgt. Des weiteren wurde gefolgert, daß die für GaAs(113)A-( $8 \times 1$ ) charakteristische Zickzack-Kette aus Arsendimeren ein besonders stabiles Strukturelement sein muß.

Unter gewissen Präparationsbedingungen weist diese Oberfläche auch auf einer mesoskopischen Skala eine Anisotropie auf, die sich in mehr als  $1 \mu\text{m}$  langen flachen Tälern entlang  $[33\bar{2}]$  manifestiert. An einigen Stellen vertiefen sich die Täler zu etwa ein viertel so großen Gräben, die von der Form langgestreckter Dreiecke sind. Die Gräben wurden erstmals atomar aufgelöst. Schräg ansteigende Stapel von Dimerketten bilden auf den Seitenwänden Abschnitte mit den Orientierungen (3715) bzw. (7315). Dies ist ein weiterer Hinweis auf eine im Inneren des stereografischen Dreiecks gelegene stabile Oberfläche. Die Analyse der Grabenstruktur zeigte, daß sie keine thermodynamischen

Ursachen haben kann. Es wurde ein neues Szenario für die Entstehung der Gräben vorgeschlagen, das eine hohe Diffusionsbarriere in Richtung  $[1\bar{1}0]$  zugrunde legt.

Die mesoskopische anisotrope Rauigkeit von GaAs(113)A könnte die Ursache für das Auftreten der  $\{124\}$ -ähnlichen Facetten auf GaAs(112)A sein. Wenn sich auf einer hypothetischen (113)A-Facette ein großer Graben bildet, entspricht dies einer Aufspaltung in zwei Facetten. Die Orientierung  $\{3\ 7\ 15\}$  ist wie  $\{124\}$  in Übereinstimmung mit den GaAs(112)A-Daten. Die GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B-Oberfläche ist dagegen relativ glatt [26, 100], weswegen auf der GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ )B-Oberfläche nur vier Facetten auftreten.

Sowohl aus den Versuchen auf GaAs(112)A als auch auf GaAs(113)A ergaben sich Hinweise auf eine unbekannte stabile Oberfläche im Inneren des stereografischen Dreiecks, die nahe bei (113) liegt. Wenn auf einer leicht fehlorientierten GaAs(113)A-Fläche eine regelmäßige Anordnung der geraden Stufen erzwungen werden könnte, wäre dies zudem möglicherweise ein geeignetes Substrat für das Wachstum von Quantendrähten. Beides motivierte die Untersuchung von Vizinalflächen zu GaAs(113)A. Um ein möglichst großes Spektrum solcher Flächen zugänglich zu machen, wurde eine Methode entwickelt, in Standardproben sphärische Mulden zu schleifen. Dazu wurde ein bereits vorhandenes, für einen anderen Zweck erworbenes Gerät eingesetzt. Nach der Ermittlung der günstigsten Präparationsparameter war die Erzeugung der Mulden mit relativ geringem Aufwand verbunden und ließe sich nun leicht auf andere Substrate übertragen.

Die Qualität der Muldenoberfläche wurde verifiziert durch das Auftauchen der bekannten LEED-Muster von GaAs(113)A und GaAs(114)A, wenn der Elektronenstrahl auf die entsprechenden Bereiche der Mulde gerichtet war. Auf der in Richtung  $[1\bar{1}0]$  gelegenen Seite der Mulde wurde mit LEED und STM eine neue stabile Oberfläche gefunden, die im Inneren des stereografischen Dreiecks liegt. Auf der gegenüberliegenden Seite wurde eine gespiegelte Struktur beobachtet, wie es aufgrund der Kristallsymmetrie zu erwarten ist. Die neue Fläche ist von (113) aus um  $(9 \pm 2)^\circ$  in Richtung  $[1\bar{1}0]$  gerichtet.

Zur detaillierten Erforschung der neuen Oberfläche wurden Experimente auf Proben aus einem entsprechend orientierten Wafer durchgeführt. Diese Daten sind in Übereinstimmung mit denen zu der Mulde. Die Miller-Indizes der stabilen Oberfläche wurden zu  $(2\ 5\ 11)$  bestimmt, und es wurde ein Strukturmodell entwickelt, das die Elektronen-Zählregel erfüllt. Die schiefwinklige Einheitszelle enthält eine gegen die Oberflächenebene geneigte Folge von drei Arsendimeren. Die Folgen sind in Richtung



[231] zu Streifen angeordnet. Dieses Modell wurde durch ab initio-Rechnungen und simulierte STM-Bilder von P. Kratzer bestärkt [153].

Auf dieser Oberfläche treten auch mehrere 100 Å lange Streifen auf, die aus Folgen von nur zwei Dimeren bestehen. Diese Streifen können als (3 7 15)-Nanofacetten aufgefaßt werden. Auf einer rekonstruierten GaAs(3 7 15)-Oberfläche gäbe es pro Einheitszelle einen Ladungsüberschuß von einem viertel Elektron, so daß die Elektronen-Zählregel verletzt würde. Die Anzahldichte der hängenden Bindungen wäre aber nur um 0,1% größer als auf GaAs(2 5 11). Ab initio-Rechnungen ergaben, daß die Oberflächenenergie von GaAs(3 7 15) lediglich 4% höher ist als die von GaAs(2 5 11) [153]. Die Relaxation in die energetisch günstigere Struktur ist aufgrund der geneigten Geometrie dieser Ebenen kinetisch gehemmt. GaAs(3 7 15) ist also als semistabil aufzufassen. Diese Ergebnisse ermöglichen es, die allgemeinen Prinzipien zur Struktur von Halbleiter-Oberflächen neu zu bewerten. Offensichtlich ist der Stabilitätsgewinn durch Minimierung der Anzahl der hängenden Bindungen viel größer als durch Erreichen eines halbleitenden Grundzustandes. Die geringe Oberflächenenergie von GaAs(3 7 15) legt außerdem nahe, daß diese Fläche an der Ausbildung der Gleichgewichtskristallstruktur von Galliumarsenid beteiligt sein könnte. Diese könnte daher generell auch solche höherindizierten Ebenen enthalten, für die es keine Rekonstruktionen gibt, die die Elektronen-Zählregel erfüllen.

Durch Tempern der GaAs(2 5 11)-Proben im UHV wird die Oberfläche sehr rauh. Die ebenen Abschnitte sind nur wenige Einheitszellen groß. Vermutlich entsprechen diese Bereiche einer Fläche anderer Orientierung, die unter galliumreichen Bedingungen energetisch günstiger ist. Dies weist auf eine weitere möglicherweise stabile Fläche im Inneren des stereografischen Dreiecks hin.

Mit Hilfe der Ergebnisse zu GaAs(2 5 11) konnten atomar aufgelöste STM-Bilder von InAs/GaAs(001)-Quantenpunkten interpretiert werden, die von J. Márquez [26] aufgenommen wurden. Die Orientierungen von vier der Seitenflächen wurden zweifelsfrei als {137} identifiziert. Da die entsprechende Oberfläche in der Mulde und auf den planaren Proben nicht beobachtet wurde, wird angenommen, daß sie nicht von niedriger Energie ist. Daher kann die Bildung der Quantenpunkte nicht vollständig mit dem Stranski-Krastanow-Prozeß erklärt werden.

Da sich auf der GaAs(2 5 11)-Oberfläche ausgedehnte Terrassen ohne Inseln oder Löcher bilden, stellt sie potentiell ein geeignetes Substrat für Heterostrukturen dar. Wegen der ähnlichen Präparationsbedingungen gilt dies insbesondere für das Wachs-

tum von InAs-Quantenpunkten. Des weiteren erscheinen Experimente zur elektronischen Struktur dieser Oberfläche sehr vielversprechend, da die (3 7 15)-Streifen möglicherweise eindimensionale Systeme sind.

Die Entdeckung von GaAs(2 5 11) widerlegt die Annahme, daß nur niederindizierte Oberflächen stabil sein können. Es stellt sich also die Frage, was es noch für singuläre Oberflächen geben mag.

# A Oberflächenenergien von Galliumarsenid

Die in der folgenden Tabelle zusammengefaßten Oberflächenenergien wurden mit Hilfe der Dichtefunktional-Theorie berechnet. Die hier angegebenen Werte gelten alle für arsenreiche Bedingungen.

Oberfläche	Energie / meV/Å <sup>2</sup>	Quelle
GaAs(001)- $\beta$ 2(2×4)	55	[31]
GaAs(001)-c(4×4)	45	[31]
GaAs(110)	45	[31]
GaAs(111)A-(2×2) (As-Trimer)	51	[31]
GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )B-(2×2) (As-Trimer)	43	[31]
GaAs(113)A-(8×1)	47	[3]
GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B-(1×1) (As-Doppellage)	43	[3]
GaAs(114)A- $\beta$ 2c(2×2)	46	[26, 188]
GaAs(2 5 11)-(1×1)	53	[153]
GaAs(3 7 15)-(1×1)	55	[153]

# B Anwendung der ECR auf eindimensionale Inseln auf GaAs(113)A

## B.1 Eindimensionale Inseln entlang $[33\bar{2}]$

Wie anhand von Abb. 5.6 auf S. 71 erklärt wurde, gibt es in Richtung  $[33\bar{2}]$  mehrere eindimensionale Inseln unterschiedlicher Breite. Die Anwendung der Elektronen-Zählregel auf diese Inseln kann vereinfacht werden, indem zunächst nur einzelne Segmente betrachtet werden. In Abb. B.1 ist die breiteste derartige Insel dargestellt. Sie enthält eine komplette  $(8 \times 1)$ -Einheitszelle. In Abb. 5.6(e) war diese Insel nur in der Seitenansicht dargestellt, nun ist auch die Aufsicht abgebildet. Die Insel läßt sich in die folgenden Segmenttypen aufspalten, die man sich am besten in der Seitenansicht veranschaulicht:

*D*: Zickzack-Kette aus Arsendimeren, 6 Å breit.

*G*: Graben zwischen zwei Dimerketten auf gleicher Höhe, 6 Å breit.

*LR*: Lagen-Stufe zwischen zwei Dimerketten, Aufstieg von links nach rechts, 4 Å breit.

*RL*: Lagen-Stufe zwischen zwei Dimerketten, Aufstieg von rechts nach links, 4 Å breit.

*RLt*: Stufe zwischen zwei Dimerketten, zwei Lagenabstände tief, Aufstieg von rechts nach links, 6 Å breit.

Für die Anwendung der ECR darf nicht nur die Insel selbst betrachtet werden, sondern es muß die gesamte Struktur berücksichtigt werden, die periodisch fortgesetzt

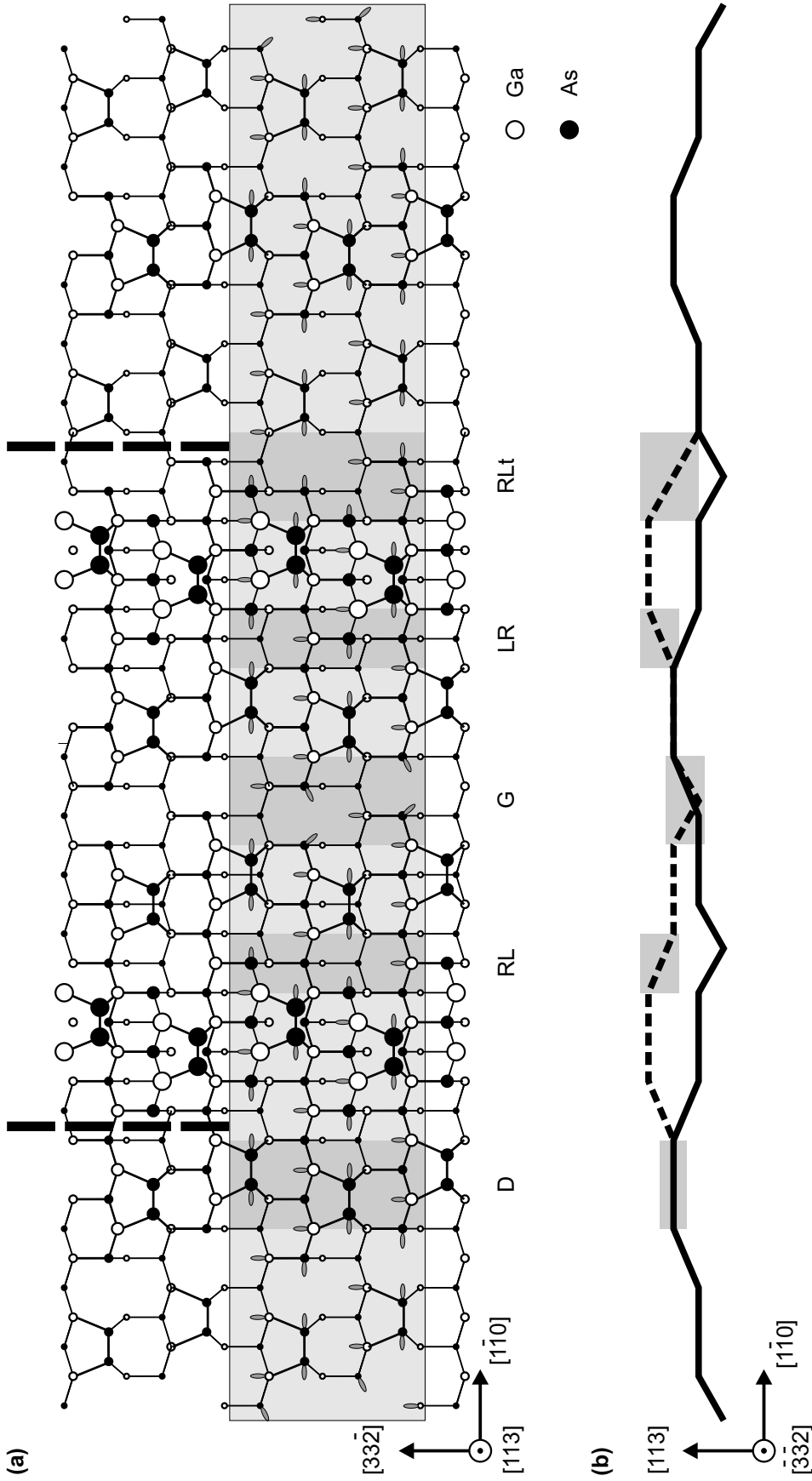


Abbildung B.1: Eindimensionale Insel entlang  $[3\bar{3}2]$ , die eine vollständige  $(8 \times 1)$ -Einheitszelle enthält. Die Beschriftungen D, G, LR, RL und RLt bezeichnen die Segmente, aus denen sich alle Inseln zusammensetzen lassen. Die Segmente selbst sind als dunkelgraue Rechtecke eingezeichnet. (a) Aufsicht. Die dicken gestrichelten Linien am oberen Bildrand deuten die Grenzen der eigentlichen Insel an. Das große hellgraue Rechteck ist die Einheitszelle der gesamten Struktur. (b) Seitenansicht (entspricht Abb. 5.6(e)).

werden kann. Diese wird in Abb. B.1(a) durch das hellgraue Rechteck begrenzt. Mit Hilfe der Segmenttypen läßt sich diese Struktur folgendermaßen beschreiben (Man orientiere sich an der Seitenansicht von links nach rechts):

$$G, D, LR, D, LR, D, RL, D, G, D, LR, D, RLt, D, LR, D, RL, D.$$

In Abb. B.1(b) ist das Element  $G$  auf die beiden Ränder aufgespalten, es wurde daher nur am Anfang gezählt.

Auf die gleiche Weise lassen sich auch alle anderen Inseln entlang  $[33\bar{2}]$  beschreiben. Anstatt also für jede Insel alle Elektronen in der jeweiligen großen Einheitszelle zu zählen, ist es einfacher, zunächst die Elektronenbilanz für jedes Segment einzeln zu bestimmen. Danach genügt es, die Segmente in den Inseln zu zählen und die entsprechenden ECR-Werte der Segmente aufzusummieren. Die Anwendung der ECR auf die Segmente ist in Tab. B.1 aufgeführt. Einige Atome mit hängenden Bindungen liegen genau auf der Grenze zwischen zwei Segmenten. Die entsprechenden Elektronen wurden dann nicht dem Segment  $D$ , sondern dem jeweils anderen Segment zugeordnet. Die Segmente  $LR$  und  $RL$  enthalten die gleiche Anzahl an hängenden Bindungen und Bindungen zwischen gleichartigen Atomen und sind daher äquivalent. Die Differenz aus den Summen der gelieferten und benötigten Elektronen ist der ECR-Wert des Segments. Ein negatives Vorzeichen bedeutet, daß so viele Elektronen fehlen, und ein positives Vorzeichen zeigt einen Elektronenüberschuß an. Die ECR-Werte aller Segmente sind in Tab. B.2 zusammengefaßt. Der ECR-Wert von  $RLt$  ist Null, da dieses Segment eine (110)-artige Nanofacette darstellt.

Nun wird mit Hilfe von Abb. 5.6 zu jedem Inseltyp die Anzahl der verschiedenen Segmente ermittelt. Wie schon erklärt wurde, muß dazu die Einheitszelle der gesamten Struktur berücksichtigt werden. Für die Inseln in Unterabb. (a)–(d) sind die Einheitszellen alle so groß wie die in Unterabb. (b) angegebene. An den beiden Seiten rechts und links enthält diese Einheitszelle jeweils eine Hälfte der  $(8 \times 1)$ -Einheitszelle des Substrats. Da diese die ECR erfüllt, könnte die Einheitszelle der Inselstruktur im Prinzip um diese Anteile verkürzt werden. Die sich dadurch ergebende periodische Struktur würde jedoch nicht mehr bis zur untersten Lage des Substrats reichen. Die Insel aus Unterabb. (e) ist in Abb. B.1 mit der dazugehörigen Einheitszelle noch einmal dargestellt. Da es für die Anwendung der ECR nicht auf die Reihenfolge innerhalb einer Insel ankommt, wurden in der folgenden Liste Segmente einer Sorte zusammengefaßt:

Tabelle B.1: Anwendung der Elektronen-Zählregel auf die einzelnen Segmente der eindimensionalen Insel entlang  $[33\bar{2}]$  (vgl. Abb. B.1)

(a) Segment  $D$

Bindungstyp	liefert	benötigt
2 Ga häng. B.	$2 \cdot \frac{3}{4} = 1\frac{1}{2}$	$2 \cdot 0 = 0$
4 As häng. B.	$4 \cdot \frac{5}{4} = 5$	$4 \cdot 2 = 8$
2 As-As	$2 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 5$	$2 \cdot 2 = 4$
Summe	$11\frac{1}{2}$	12

(b) Segment  $G$

Bindungstyp	liefert	benötigt
4 Ga häng. B.	$4 \cdot \frac{3}{4} = 3$	$4 \cdot 0 = 0$
4 As häng. B.	$4 \cdot \frac{5}{4} = 5$	$4 \cdot 2 = 8$
0 As-As	$= 0$	$= 0$
Summe	8	8

(c) Segmente  $LR$  und  $RL$

Bindungstyp	liefert	benötigt
3 Ga häng. B.	$3 \cdot \frac{3}{4} = 2\frac{1}{4}$	$3 \cdot 0 = 0$
2 As häng. B.	$2 \cdot \frac{5}{4} = 2\frac{1}{2}$	$2 \cdot 2 = 4$
0 As-As	$= 0$	$= 0$
Summe	$4\frac{3}{4}$	4

(d) Segment  $RLt$

Bindungstyp	liefert	benötigt
4 Ga häng. B.	$4 \cdot \frac{3}{4} = 3$	$4 \cdot 0 = 0$
4 As häng. B.	$4 \cdot \frac{5}{4} = 5$	$4 \cdot 2 = 8$
0 As-As	$= 0$	$= 0$
Summe	8	8

Tabelle B.2: ECR-Werte der verschiedenen Segmente

Segment	$D$	$G$	$LR$	$RL$	$RLt$
ECR-Wert	$-\frac{1}{2}$	0	$+\frac{3}{4}$	$+\frac{3}{4}$	0

- Eine Dimerkette *auf* der obersten Substratlage (Abb. 5.6(a))

$$6 \cdot D + G + 3 \cdot LR + RL + RLt = 6 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) + 0 + 4 \cdot \frac{3}{4} + 0 = 0.$$

- Zwei Dimerketten (Abb. 5.6(c))

$$6 \cdot D + 2 \cdot G + 2 \cdot LR + 2 \cdot RL = 6 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) + 0 + 4 \cdot \frac{3}{4} = 0.$$

- Eine Dimerkette *in* der obersten Substratlage (Abb. 5.6(d))

$$6 \cdot D + 2 \cdot G + 2 \cdot LR + 2 \cdot RL = 6 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) + 0 + 4 \cdot \frac{3}{4} + 0 = 0.$$

- Die Insel enthält eine vollständige Einheitszelle (Abb. 5.6(e) und Abb. B.1)

$$9 \cdot D + 2 \cdot G + 4 \cdot LR + 2 \cdot RL + RLt = 9 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) + 0 + 6 \cdot \frac{3}{4} + 0 = 0.$$

Bei jedem Inseltyp ist die Differenz zwischen den gelieferten und den benötigten Elektronen nach Aufsummierung über alle Segmente gleich Null. Damit wurde gezeigt, daß alle diese Inseln die Elektronen-Zählregel erfüllen.

## B.2 Eindimensionale Inseln entlang $[1\bar{1}0]$

In Richtung  $[1\bar{1}0]$  gibt es keine verschiedenartigen Inseltypen. Daher wurde das in Abb. 5.8 auf S. 73 gezeigte Modell einer solchen Insel nicht mehr in kleinere Segmente aufgespalten. Statt dessen wurden die Elektronen direkt in der in dieser Abbildung eingezeichneten Einheitszelle gezählt. Die Anwendung der ECR ist detailliert in Tab. B.3 dargestellt. Diese Insel verletzt die ECR.

Tabelle B.3: Anwendung der ECR auf die in Abb. 5.8 auf S. 73 gezeigte eindimensionale Insel entlang  $[1\bar{1}0]$

Bindungstyp	liefert	benötigt
42 Ga häng. Bind.	$42 \cdot \frac{3}{4} = 31\frac{1}{2}$	$42 \cdot 0 = 0$
34 As häng. Bind.	$34 \cdot \frac{5}{4} = 42\frac{1}{2}$	$34 \cdot 2 = 68$
10 As-As	$10 \cdot 2 \cdot \frac{5}{4} = 25$	$10 \cdot 2 = 20$
Summe	99	88



# Literaturverzeichnis

- [1] C. B. Duke, Chem. Rev. **96**, 1237 (1996).
- [2] M. Wassermeier, J. Sudijono, M. D. Johnson, K. T. Leung, B. G. Orr, L. Däweritz und K. Ploog, Phys. Rev. B **51**, 14 721 (1995).
- [3] J. Platen, A. Kley, C. Setzer, K. Jacobi, P. Ruggerone und M. Scheffler, J. Appl. Phys. **85**, 3597 (1999).
- [4] S. Shimomura, A. Wakejima, A. Adachi, Y. Okamoto, N. Sano, K. Murase und S. Hiyamizu, Jpn. J. Appl. Phys. **32**, L1728 (1993).
- [5] J. Platen, C. Setzer, W. Ranke und K. Jacobi, Appl. Surf. Sci. **123/124**, 43 (1998).
- [6] D. Bimberg, M. Grundmann, F. Heinrichsdorff, N. N. Ledentsov, V. M. Ustinov, A. E. Zhukov, A. R. Kovsh, M. V. Maximov, Y. M. Shernyakov, B. V. Volovik, A. F. Tsatsul'nikov, P. S. Kop'ev und Zh. I. Alferov, Thin Solid Films **367**, 235 (2000).
- [7] M. Grundmann, Physica E **5**, 167 (2000).
- [8] D. Bimberg, M. Grundmann und N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures* (Wiley, Chichester, 1999).
- [9] W. Wegscheider und G. Abstreiter, Phys. Bl. **54**, 1115 (1998).
- [10] H. Asahi, Adv. Mater. **9**, 1019 (1997).
- [11] E. Corcoran und G. Zorpette, *Diminishing Dimensions* in: *The Solid State Century*, Scientific American Special Issue (Oktober 1997).

- [12] M. Grundmann und D. Bimberg, Phys. Bl. **53**, 517 (1997).
- [13] B. G. Levi, Physics Today **49**(5), 22 (1996).
- [14] R. C. Ashoori, Nature **379**, 413 (1996).
- [15] M. J. Kelly, *Low-Dimensional Semiconductors* (Oxford University Press, Oxford, 1995).
- [16] M. A. Kastner, Physics Today **46**(1), 24 (1993).
- [17] M. A. Reed, Scientific American **268**(1), 98 (1993).
- [18] M. Sundaram, S. A. Chalmers, P. F. Hopkins und A. C. Gossard, Science **254**, 1326 (1991).
- [19] H. Lee, R. Lowe-Webb, W. Yang und P. C. Sercel, Appl. Phys. Lett. **72**, 812 (1998).
- [20] Y. Hasegawa, H. Kiyama, Q. K. Xue und T. Sakurai, Appl. Phys. Lett. **72**, 2265 (1998).
- [21] R. Nötzel, Z. Niu, M. Ramsteiner, H.-P. Schönherr, A. Trampert, L. Däweritz und K. H. Ploog, Nature **392**, 56 (1998).
- [22] A. Richter, G. Behme, M. Süptitz, C. Lienau, T. Elsaesser, M. Ramsteiner, R. Nötzel und K. H. Ploog, Phys. Rev. Lett. **79**, 2145 (1997).
- [23] R. Nötzel, J. Temmyo und T. Tamamura, Nature **369**, 131 (1994).
- [24] Y. J. Chun, S. Nakajima und M. Kawabe, Jpn. J. Appl. Phys. **35**, L1075 (1996).
- [25] K. Nishi, T. Anan, A. Gomyo, S. Kohmoto und S. Sugou, Appl. Phys. Lett **70**, 3579 (1997).
- [26] J. M. Márquez Bertoni, Dissertation (Technische Universität Berlin, 2000).
- [27] J. Platen, C. Setzer, P. Geng, W. Ranke und K. Jacobi, Microelectronics J. **28**, 969 (1997).
- [28] E. D. Williams und N. C. Bartelt, Ultramicroscopy **31**, 36 (1989).

- [29] C. Herring, Phys. Rev. B **82**, 87 (1951).
- [30] K. Jacobi, J. Platen und C. Setzer, phys. stat. sol. (b) **218**, 329 (2000).
- [31] N. Moll, A. Kley, E. Pehlke und M. Scheffler, Phys. Rev. B **54**, 8844 (1996).
- [32] W. Kleber, *Einführung in die Kristallographie*, 17., stark bearb. Aufl. von H.-J. Bausch, J. Bohm und I. Kleber (Verlag Technik, Berlin, 1990).
- [33] V. P. LaBella, H. Yang, D. W. Bullock, P. M. Thibado, P. Kratzer und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **83**, 2989 (1999).
- [34] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids* (Clarendon Press, Oxford, 1955).
- [35] J. A. Appelbaum, G. A. Baraff und D. R. Hamann, Phys. Rev. B **14**, 1623 (1976).
- [36] W. A. Harrison, J. Vac. Sci. Technol. **16**, 1492 (1979).
- [37] D. J. Chadi, J. Vac. Sci. Technol. A **5**, 834 (1987).
- [38] H. H. Farrell, J. P. Harbison und L. D. Peterson, J. Vac. Sci. Technol. B **5**, 1482 (1987).
- [39] M. D. Pashley, Phys. Rev. B **40**, 10 481 (1989).
- [40] D. J. Chadi, *Electron-Hole Counting Rule at III-V Surfaces: Applications to Surface Structure and Passivation* in: *The Structure of Surfaces III, Springer Series in Surface Sciences*, Vol. 24, editiert von S. Y. Tong, M. A. Van Hove, D. Takayanagi und X. D. Xie (Springer, Berlin, 1991), S. 532 ff.
- [41] P. Drathen, W. Ranke und K. Jacobi, Surf. Sci. **77**, L162 (1978).
- [42] L. Däweritz und R. Hey, Surf. Sci. **236**, 15 (1990).
- [43] E. Kaxiras, Y. Bar-Yam, J. D. Joannopoulos und K. C. Pandey, Phys. Rev. Lett. **57**, 106 (1986).
- [44] M. Haugk, J. Elsner, M. Sternberg und Th. Frauenheim, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 4523 (1998).
- [45] M. Pristovsek, H. Menhal, T. Wehnert, J.-T. Zettler, T. Schmidtling, N. Esser, W. Richter, C. Setzer, J. Platen und K. Jacobi, J. Cryst. Growth **195**, 1 (1998).

- [46] L. J. Whitman, P. M. Thibado, S. C. Erwin, B. R. Bennett und B. V. Shanabrook, Phys. Rev. Lett. **79**, 693 (1997).
- [47] A. R. Smith, R. M. Feenstra, D. W. Greve, M. S. Shin, M. Skowronski, J. Neugebauer und J. E. Northrup, J. Vac. Sci. Technol. B **16**, 2242 (1998).
- [48] J. E. Northrup und S. Froyen, Phys. Rev. B **50**, R2015.
- [49] S. Mirbt, N. Moll, A. Kley und J. D. Joannopoulos, Surf. Sci. **422**, L177 (1999).
- [50] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias und J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).
- [51] H. Lüth, *Surfaces and Interfaces of Solids* (Springer, Berlin, 1993).
- [52] M. A. Herman und H. Sitter, *Molecular Beam Epitaxy, Springer Series in Materials Science*, Vol. 7 (Springer, Berlin, 1996).
- [53] M. A. Herman und H. Sitter, Microelectronics J. **27**, 257 (1996).
- [54] M. R. Leys, J. Cryst. Growth **209**, 225 (2000).
- [55] Z. Zhang und M. G. Lagally, Science **276**, 377 (1997).
- [56] A. Y. Cho, J. Cryst. Growth **201/202**, 1 (1999).
- [57] M. Henzler und W. Göpel, *Oberflächenphysik des Festkörpers* (Teubner, Stuttgart, 1994).
- [58] D. P. Woodruff und T. A. Delchar, *Modern Techniques of Surface Science* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [59] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber und E. Weibel, Phys. Rev. Lett. **49**, 57 (1982).
- [60] L. J. Whitman, *Tunneling Microscopy and Spectroscopy* in: *Encyclopedia of Applied Physics*, Vol. 22, editiert von G. L. Trigg und E. H. Immergut (Wiley-VCH, Weinheim, 1998).
- [61] H. Neddermeyer, Rep. Prog. Phys. **59**, 701 (1996).
- [62] *Scanning Tunneling Microscopy I, Springer Series in Surface Sciences*, Vol. 20, editiert von H.-J. Güntherodt und R. Wiesendanger (Springer, Berlin, 1994).

- [63] M. P. Seah und W. A. Dench, *Surf. Interface Anal.* **1**, 2 (1979).
- [64] M. A. Van Hove, W. H. Weinberg und C.-M. Chan, *Low-Energy Electron Diffraction, Springer Series in Surface Sciences*, Vol. 6 (Springer, Berlin, 1986).
- [65] W. Braun, *Applied RHEED, Springer Tracts in Modern Physics*, Vol. 154 (Springer, Berlin, 1999).
- [66] M. Wutz, H. Adam, W. Walcher, *Handbuch Vakuumtechnik: Theorie und Praxis*, 6. durchges. und verb. Aufl. (Vieweg, Braunschweig, 1997).
- [67] J. Platen, Dissertation (Technische Universität Berlin, 1997).
- [68] C. Setzer, Dissertation (Technische Universität Berlin, 1997).
- [69] P. Geng, J. Márquez, L. Geelhaar, J. Platen, C. Setzer und K. Jacobi, *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 504 (2000).
- [70] A. R. Avery, D. M. Holmes, J. L. Sudijono, T. S. Jones und B. A. Joyce, *Surf. Sci.* **323**, 91 (1995).
- [71] X. Tong und P. A. Bennett, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 101 (1991).
- [72] M. Hanbücken, I. Vianey, A. Degiovanni, C. Jourdan, B. Röttger, R. Kliese und H. Neddermayer, *Appl. Surf. Sci.* **72**, 79 (1993).
- [73] K. Maruyama, M. Yoshikawa und H. Takigawa, *J. Cryst. Growth* **93**, 761 (1988).
- [74] E. Schröder-Bergen und W. Ranke, *Surf. Sci.* **236**, 103 (1990).
- [75] R. Hey, M. Wassermeier, J. Behrend, L. Däweritz, K. Ploog und H. Raidt, *J. Crystal Growth* **154**, 1 (1995).
- [76] R. Wiesendanger, *Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [77] H. F. Knapp und R. Guckenberger, *Tips in: Procedures in Scanning Probe Microscopies*, editiert von R. J. Colton, A. Engel, J. E. Frommer, H. E. Gaub, A. A. Gewirth, R. Guckenberger, W. M. Heckl, B. Parkinson und J. Rabe (Wiley, Chichester, 1998), S. 65 ff.

- [78] R. Guckenberger, *Image Processing, Evaluation and Presentation* in: *Procedures in Scanning Probe Microscopies*, editiert von R. J. Colton, A. Engel, J. E. Frommer, H. E. Gaub, A. A. Gewirth, R. Guckenberger, W. M. Heckl, B. Parkinson und J. Rabe (Wiley, Chichester, 1998), S. 22 ff.
- [79] R. Howland und L. Benatar, *A Practical Guide to Scanning Probe Microscopy* (Park Scientific Instruments, 1996).
- [80] K. Jacobi, J. Platen, C. Setzer, J. Márquez, L. Geelhaar, C. Meyne, W. Richter, A. Kley, P. Ruggerone und M. Scheffler, *Surf. Sci.* **439**, 59 (1999).
- [81] W. Ranke, *Physica Scripta* **T4**, 100 (1983).
- [82] A. Mazur und J. Pollmann, *Phys. Rev. B* **30**, 2084 (1984).
- [83] P. Hren, D. W. Tu und A. Kahn, *Surf. Sci.* **146**, 69 (1984).
- [84] K. Stiles und A. Kahn, *J. Vac. Sci. Technol. B* **3**, 1089 (1985).
- [85] D. J. Chadi, *J. Vac. Sci. Technol. B* **3**, 1167 (1985).
- [86] S. Subbana, H. Kroemer und J. L. Merz, *J. Appl. Phys.* **59**, 488 (1986).
- [87] R. Nötzel, N. N. Ledentsov, L. Däweritz, M. Hohenstein und K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 3812 (1991).
- [88] R. Nötzel, L. Däweritz und K. Ploog, *Phys. Rev. B* **46**, 4736 (1992).
- [89] M. Ilg, R. Nötzel und K. H. Ploog, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 1472 (1993).
- [90] N. D. Whitbread, J. S. Roberts, P. N. Robson und M. A. Pate, *Electron. Lett.* **29**, 2106 (1993).
- [91] P. A. Ramos und E. Towe, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1754 (1996).
- [92] P. A. Ramos und E. Towe, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3321 (1996).
- [93] L. Pavesi, M. Henini und D. Johnston, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 2846 (1995).
- [94] K. Fujita, H. Ohnishi, P. O. Vaccaro und T. Watanabe, *Microelectronics J.* **28**, 1019 (1997).

- [95] P. O. Vaccaro, K. Fujita und T. Watanabe, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**, 1948 (1997).
- [96] P. P. González-Borrero, E. Marega Jr., D. I. Lubyshev, E. Petitprez und P. Bas-maji, *J. Cryst. Growth* **175/176**, 765 (1997).
- [97] D. I. Lubyshev, P. P. González-Borrero, E. Marega Jr., E. Petitprez und P. Bas-maji, *J. Vac. Sci. Technol. B* **14**, 2212 (1996).
- [98] S. P. Guo, H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura und Y. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2738 (1997).
- [99] S. P. Guo, H. Ohno, A. Shen, Y. Ohno und F. Matsukura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, 1527 (1998).
- [100] J. Márquez, L. Geelhaar und K. Jacobi, *Phys. Rev. B* **62**, 9969 (2000).
- [101] R. Nötzel, J. Temmyo und T. Tamamura, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3557 (1994).
- [102] G. Biasiol, F. Reinhardt, A. Gustafsson und E. Kapon, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1831 (1997).
- [103] E. Kapon, F. Reinhardt, G. Biasiol und A. Gustafsson, *Appl. Surf. Sci.* **123/124**, 674 (1998).
- [104] C. B. Duke, C. Mailhiot, A. Paton, A. Kahn und K. Stiles, *J. Vac. Sci. Technol. A* **4**, 947 (1986).
- [105] C. Mailhiot, C. B. Duke, A. Paton, A. Kahn und K. Stiles, *J. Vac. Sci. Technol. B* **4**, 1083 (1986).
- [106] L. Ö. Olsson, M. Björkqvist, J. Kanski, L. Ilver und P. O. Nilsson, *Surf. Sci.* **366**, 121 (1996).
- [107] R. Nötzel, N. N. Ledentsov, L. Däweritz, K. Ploog und M. Hohenstein, *Phys. Rev. B* **45**, 3507 (1992).
- [108] O. Brandt, K. Kanamoto, Y. Tokuda, N. Tsukada, O. Wada und J. Tanimura, *Phys. Rev. B* **48**, 17 599 (1993).
- [109] Y. Hsu, W. I. Wang und T. S. Kuan, *Phys. Rev. B* **50**, R4973 (1994).

- [110] W. Braun, O. Brandt, M. Wassermeier, L. Däweritz und K. Ploog, *Appl. Surf. Sci.* **104**, 35 (1996).
- [111] C. Setzer, J. Platen, P. Geng, W. Ranke und K. Jacobi, *Surf. Sci.* **377-379**, 125 (1997).
- [112] 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).
- [113] M. Pristovsek, H. Menhal, T. Schmidling, N. Esser und W. Richter, *Microelectronics J.* **30**, 449 (1999).
- [114] M. Pristovsek, H. Menhal, J.-T. Zettler und W. Richter, *Appl. Surf. Sci.* **166**, 433 (2000).
- [115] R. Nötzel, H.-P. Schönherr, Z. Niu, L. Däweritz und K. H. Ploog, *J. Cryst. Growth* **201/202**, 814 (1999).
- [116] A. Gustafsson, F. Reinhardt, G. Biasiol und E. Kapon, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 3673 (1995).
- [117] Y. Nabetani, T. Ishikawa, S. Noda und A. Sasaki, *J. Appl. Phys* **76**, 347 (1994).
- [118] R. P. Mirin, J. P. Ibbetson, K. Nishi, A. C. Gossard und J. E. Bowers, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 3795 (1995).
- [119] B. A. Joyce, T. S. Jones und J. G. Belk, *J. Vac. Sci. Technol. B* **16**, 2373 (1998).
- [120] Q.-K. Xue, Y. Hasegawa, H. Kiyama und T. Sakurai, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 500 (1999).
- [121] S. M. Scholz, M. Morgenstern und K. Jacobi, *Surf. Sci.* **316**, 157 (1994).
- [122] M. Kawase, Y. Ishikawa und T. Fukui, *Appl. Surf. Sci.* **130-132**, 457 (1998).
- [123] H. P. Meier, R. F. Broom, P. W. Epperlein, E. van Gieson, C. Harder, H. Jaeckel, W. Walter und D. J. Webb, *J. Vac. Sci. Technol. B* **6**, 692 (1988).
- [124] T. Takamori, K. Watanabe und T. Fukunaga, *Electron. Lett.* **27**, 729 (1991).



- [125] K. Agawa, K. Hirakawa, N. Sakamoto, Y. Hashimoto und T. Ikoma, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 1171 (1994).
- [126] N. Sakamoto, K. Hirakawa und T. Ikoma, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1444 (1995).
- [127] W. Q. Li, P. K. Bhattacharya, S. H. Kwok und R. Merlin, *J. Appl. Phys.* **72**, 3129 (1992).
- [128] P. O. Vaccaro, H. Ohnishi und K. Fujita, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3854 (1999).
- [129] P. O. Vaccaro, M. Hirai, K. Fujita und T. Watanabe, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **29**, 2221 (1996).
- [130] M. Lomascolo, R. Cingolani, P. O. Vaccaro und K. Fujita, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 676 (1999).
- [131] M. Henini, S. Sanguinetti, S. C. Fortina, E. Grilli, M. Guzzi, G. Panzarini, L. C. Andreani, M. D. Upward, P. Moriarty, P. H. Beton und L. Eaves, *Phys. Rev. B* **57**, R6815
- [132] S. T. Stoddart, A. Polimeni, M. Henini, L. Eaves, P. C. Main, R. K. Hayden, K. Uchida und N. Miura, *Appl. Surf. Sci.* **123/124**, 366 (1998).
- [133] H. Xu, Q. Gong, B. Xu, W. Jiang, J. Wang, W. Zhou und Z. Wang, *J. Cryst. Growth* **200**, 70 (1999).
- [134] R. Nötzel, J. Menniger, M. Ramsteiner, A. Ruiz, H.-P. Schönherr und K. H. Ploog, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1132 (1996).
- [135] R. Nötzel, M. Ramsteiner, J. Menniger, A. Trampert, H.-P. Schönherr, L. Däweritz und K. H. Ploog, *Jpn. J. Appl. Phys.* **35**, L297 (1996).
- [136] R. Nötzel, U. Jahn, Z. Niu, A. Trampert, J. Fricke, H.-P. Schönherr, T. Kurth, D. Heitmann, L. Däweritz und K. H. Ploog, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2002 (1998).
- [137] K. H. Ploog und R. Nötzel, *Physica E* **3**, 92 (1998).
- [138] P. R. Pukite, G. S. Petrich, S. Batra und P. I. Cohen, *J. Cryst. Growth* **95**, 269 (1989).

- [139] M. D. Pashley, K. W. Haberern und J. M. Gaines, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 406 (1991).
- [140] G. R. Bell, M. Itoh, T. S. Jones und B. A. Joyce, *Surf. Sci.* **423**, L280 (1999).
- [141] J. Kim, M. C. Gallagher, R. F. Willis, J. Fu und D. L. Miller, *J. Vac. Sci. Technol. B* **11**, 1370 (1993).
- [142] V. Bressler-Hill, R. Maboudian, M. Wassermeier, X.-S. Wang, K. Pond, P. M. Petroff und W. H. Weinberg, *Surf. Sci.* **287/288**, 514 (1993).
- [143] K. Pond, R. Maboudian, V. Bressler-Hill, D. Leonard, X.-S. Wang, K. Self, W. H. Weinberg und P. M. Petroff, *J. Vac. Sci. Technol. B* **11**, 1374 (1993).
- [144] T. Ide, A. Jamashita und T. Mizutani, *Phys. Rev. B* **46**, 1905 (1992).
- [145] E. J. Heller und M. G. Lagally, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2675 (1992).
- [146] E. J. Heller, Z. Y. Zhang und M. G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 743 (1993).
- [147] D. I. Lubyshev, M. Micovic, D. L. Miller, I. Chizhov und R. F. Willis, *J. Vac. Sci. Technol. B* **16**, 1339 (1998).
- [148] T. Gritsch, D. Coulman, R. J. Behm und G. Ertl, *Surf. Sci.* **257**, 297 (1991).
- [149] S. Speller, J. Kuntze, T. Rauch, J. Bömermann, M. Huck, M. Aschoff und W. Heiland, *Surf. Sci.* **366**, 251 (1996).
- [150] Z. C. Niu, R. Nötzel, H. P. Schönherr, J. Fricke, L. Däweritz und K. H. Ploog, *J. Cryst. Growth* **187**, 333 (1998).
- [151] Z. C. Niu, R. Nötzel, U. Jahn, M. Ramsteiner, H.-P. Schönherr, J. Fricke, Z. B. Xiao, L. Däweritz und K. H. Ploog, *Appl. Phys. A* **67**, 135 (1998).
- [152] H.-J. Gossmann, F. W. Sinden und L. C. Feldman, *J. Appl. Phys.* **67**, 744 (1990).
- [153] L. Geelhaar, J. Márquez, P. Kratzer und K. Jacobi, angenommen bei *Phys. Rev. Lett.* (2001).
- [154] Y. Okada, T. Fujita und M. Kawabe, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 676 (1995).
- [155] M. Kasu und T. Fukui, *Jpn. J. Appl. Phys.* **31**, L864 (1992).

- [156] M. Shinohara und N. Inoue, Appl. Phys. Lett. **66**, 1936 (1995).
- [157] J.-Y. Ishizaki, K. Ohkuri und T. Fukui, Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 1280 (1996).
- [158] P. Hanesch und E. Bertel, Phys. Rev. Lett. **79**, 1523 (1997).
- [159] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **80**, 2018 (1998) (Kommentar zu Ref. [158]).
- [160] E. Bertel, K. Swamy und P. Hanesch, Phys. Rev. Lett. **80**, 2019 (1998) (Antwort auf Ref. [159]).
- [161] K. Swamy, E. Bertel und I. Vilfan, Surf. Sci. **425**, L369 (1999).
- [162] T. T. Tsong, D. L. Feng und H. M. Liu, Surf. Sci. **199**, 421 (1988).
- [163] Z. Gai, R. G. Zhao, H. Ji, X. Li und W. S. Yang, Phys. Rev. B **56**, 12 308 (1997).
- [164] Z. Gai, R. G. Zhao und W. S. Yang, Phys. Rev. B **57**, R6795 (1998).
- [165] Z. Gai, X. Li, R. G. Zhao und W. S. Yang, Phys. Rev. B **57**, R15 060 (1998).
- [166] Z. Gai, W. S. Yang, R. G. Zhao und T. Sakurai, Phys. Rev. B **59**, 15 230 (1999).
- [167] H. Yamaguchi, T. Yamada und Y. Horikoshi, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, L1490 (1995).
- [168] J. Márquez, P. Kratzer, L. Geelhaar, K. Jacobi und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **86**, 115 (2001).
- [169] A. R. Avery, D. M. Holmes, T. S. Jones, B. A. Joyce und G. A. D. Briggs, Phys. Rev. B **50**, 8098 (1994).
- [170] T. Hashizume, Q.-K. Xue, A. Ichimiya und T. Sakurai, Phys. Rev. B **51**, 4200 (1995).
- [171] A. R. Avery, C. M. Goringe, D. M. Holmes, J. L. Sudijono und T. S. Jones, Phys. Rev. Lett. **76**, 3344 (1996).
- [172] Q. Xue, T. Hashizume, J. M. Zhou, T. Sakata, T. Ohno und T. Sakurai, Phys. Rev. Lett. **74**, 3177 (1995).

- [173] J. Zou, X. Z. Liao, D. J. H. Cockayne und R. Leon, *Phys. Rev. B* **59**, 12 279 (1999).
- [174] W. Yang, H. Lee, T. J. Johnson, P. C. Sercel und A. G. Norman, *Phys. Rev. B* **61**, 2784 (2000).
- [175] H. Lee, W. Yang, P. C. Sercel und A. G. Norman, *J. Electron. Mater.* **28**, 481 (1999).
- [176] H. Saito, K. Nishi und S. Sugou, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1224 (1999).
- [177] S. Yoon, Y. Moon, T.-W. Lee, H. Hwang, E. Yoon und Y. D. Kim, *Thin Solid Films* **357**, 81 (1999).
- [178] M. Tomitori, K. Watanabe, M. Kobayashi und O. Nishikawa, *Appl. Surf. Sci.* **76/77**, 322 (1994).
- [179] G. Medeiros-Ribeiro, A. M. Bratkovski, T. I. Kamins, D. A. A. Ohlberg und R. S. Williams, *Science* **279**, 353 (1998).
- [180] T. I. Kamins, G. Medeiros-Ribeiro, D. A. A. Ohlberg und R. S. Williams, *J. Appl. Phys.* **85**, 1159 (1999).
- [181] F. M. Ross, R. M. Tromp und M. C. Reuter, *Science* **286**, 1931 (1999).
- [182] J. M. García, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus und P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- [183] P. B. Joyce, T. J. Krzyzewski, G. R. Bell, B. A. Joyce und T. S. Jones, *Phys. Rev. B* **58**, R15 981 (1998).
- [184] H. Eisele, O. Flebbe, T. Kalka, C. Preinesberger, F. Heinrichsdorff, A. Krost, D. Bimberg und M. Dähne-Prietsch, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 106 (1999).
- [185] O. Flebbe, H. Eisele, T. Kalka, F. Heinrichsdorff, A. Krost, D. Bimberg und M. Dähne-Prietsch, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17**, 1639 (1999).
- [186] Q.-K. Xue, T. Hashizume und T. Sakurai, *Progr. Surf. Sci.* **56**, 1 (1997).
- [187] N. Moll, E. Pehlke und M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **58**, 4566 (1998).
- [188] P. Kratzer, unveröffentlicht.

# Eigene Veröffentlichungen

## Artikel in Zeitschriften

### Erstautor

- L. Geelhaar, J. Márquez, P. Kratzer und K. Jacobi: *GaAs(2511) – A new stable surface inside the stereographic triangle*, angenommen bei Phys. Rev. Lett. (Februar 2001).
- L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi: *Experimental evidence for a stable GaAs surface near (113)*, Phys. Rev. B **62**, 6908–6911 (2000).
- L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi: *Step structure on GaAs(113)A studied by scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. B **60**, 15 890–15 895 (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**, 393–396 (1999).

### Koautor

- J. Márquez, L. Geelhaar und K. Jacobi: *Atomically resolved structure of InAs quantum dots*, angenommen bei Appl. Phys. Lett. (Februar 2001).
- J. Márquez, P. Kratzer, L. Geelhaar, K. Jacobi und M. Scheffler: *Atomic structure of the stoichiometric GaAs(114) surface*, Phys. Rev. Lett. **86**, 115–118 (2001).
- J. Márquez, L. Geelhaar und K. Jacobi: *Atomic structure of the GaAs( $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ )B-( $8 \times 1$ ) surface reconstruction*, Phys. Rev. B **62**, 9969–9972 (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**, 504–508 (2000).
- 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**, 59–72 (1999).

## Vorträge

- L. Geelhaar, J. Márquez, P. Kratzer und K. Jacobi: *Atomic structure of GaAs(2 5 11) – a new stable surface*, 2000 Materials Research Society Fall Meeting in Boston, USA (Dezember 2000).
- L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi: *Stufenstruktur auf GaAs(113)A*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Regensburg (März 2000).
- L. Geelhaar, J. Márquez und K. Jacobi: *Step structure on GaAs(113)A–(8×1) studied by scanning tunneling microscopy*, 18<sup>th</sup> European Conference on Surface Science in Wien, Österreich (September 1999).
- L. Geelhaar, J. Márquez, J. Platen, C. Setzer und K. Jacobi: *Morphology of high-index GaAs surfaces*, Growth and Transport Properties of Low-dimensional Semiconductor Quantum Structures: Workshop of the Sfb 296 and the Fritz Haber Institute of the Max Planck Society auf Schloß Ringberg (Februar 1999).
- L. Geelhaar, J. Márquez, K. Jacobi, A. Kley, P. Ruggerone und M. Scheffler: *A scanning tunneling microscopy study of the GaAs(112) surfaces*, Third International Workshop on Novel Index Surfaces in San Rafael, Spanien (Oktober 1998).
- L. Geelhaar, J. Platen, C. Setzer, J. Márquez, K. Jacobi, A. Kley, P. Ruggerone, M. Scheffler, C. Meyne und W. Richter: *Experimentelle und theoretische Untersuchungen der Morphologie von GaAs(112)-Oberflächen*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Regensburg (März 1998).

# Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde in der Abteilung Physikalische Chemie des Fritz-Haber-Instituts der Max-Planck-Gesellschaft im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 296 angefertigt.

Prof. Dr. K. Jacobi danke ich für die Betreuung meiner Promotion und die stete Diskussionsbereitschaft und Unterstützung. Bei Prof. Dr. M. Dähne bedanke ich mich für die Betreuung seitens der Technischen Universität Berlin. Prof. Dr. G. Ertl, dem Direktor der Abteilung Physikalische Chemie, gilt mein Dank für die Unterstützung dieses Projektes.

Besonders möchte ich mich bei J. Márquez für die fruchtbare Zusammenarbeit bedanken, die mir viel Spaß gemacht hat. Eine große Hilfe war die tatkräftige Unterstützung in allen Lebenslagen durch P. Geng, bei dem ich mich auch herzlich bedanke.

Den weiteren Mitgliedern der Arbeitsgruppe Jacobi, Dr. K. Bedürftig, C. Fan, Dr. J. Platen, M. Richard, Dr. C. Setzer, Dr. J. Wang und Y. Wang, sowie allen anderen Mitarbeitern in der Abteilung PC danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Dr. P. Kratzer gilt mein Dank für die Zusammenarbeit bei der Strukturbestimmung von GaAs(25 11) und viele lehrreiche Diskussionen über dieses Thema hinaus.

Bei Dr. W. Ranke, Dr. G. Abend, B. Beran, H. Kirmse und Dr. Y. Uchida bedanke ich mich für hilfreiche Diskussionen bezüglich der Präparation sphärischer Proben. G. Weinberg danke ich für ihre Hilfe beim Schleifen der Mulden und die Durchführung der SEM-Aufnahmen.

Dr. H. Over und Dr. M. Wassermeier gilt mein Dank für nützliche Diskussionen zu LEED bzw. STM.

Abb. 2.1, 5.12(b), 6.4 und 6.7 wurden mit Hilfe von BALSAC (Version 2.11, © K. Hermann 1991–9) erstellt. Bei Prof. Dr. K. Hermann bedanke ich mich für eine Einführung in sein Programm.

## *Danksagung*

I. Reinhardt, Dr. A. Terenji und Dr. S. Willmann danke ich für das Korrekturlesen des Manuskriptes.

Bei meiner Familie und meinen Freunden bedanke ich mich für die Unterstützung und die Aufmunterung, wenn wieder einmal etwas nicht so funktionierte wie erwartet.