



FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH

Institut für Festkörperforschung

**Untersuchungen von Grenzflächen
und Gitterbaufehlern in GaAs mit Hilfe
der Rastertunnelmikroskopie**

von

Gerhard Cox

Jül - 2382

September 1990

ISSN 0366-0885

2023

2023年1月1日

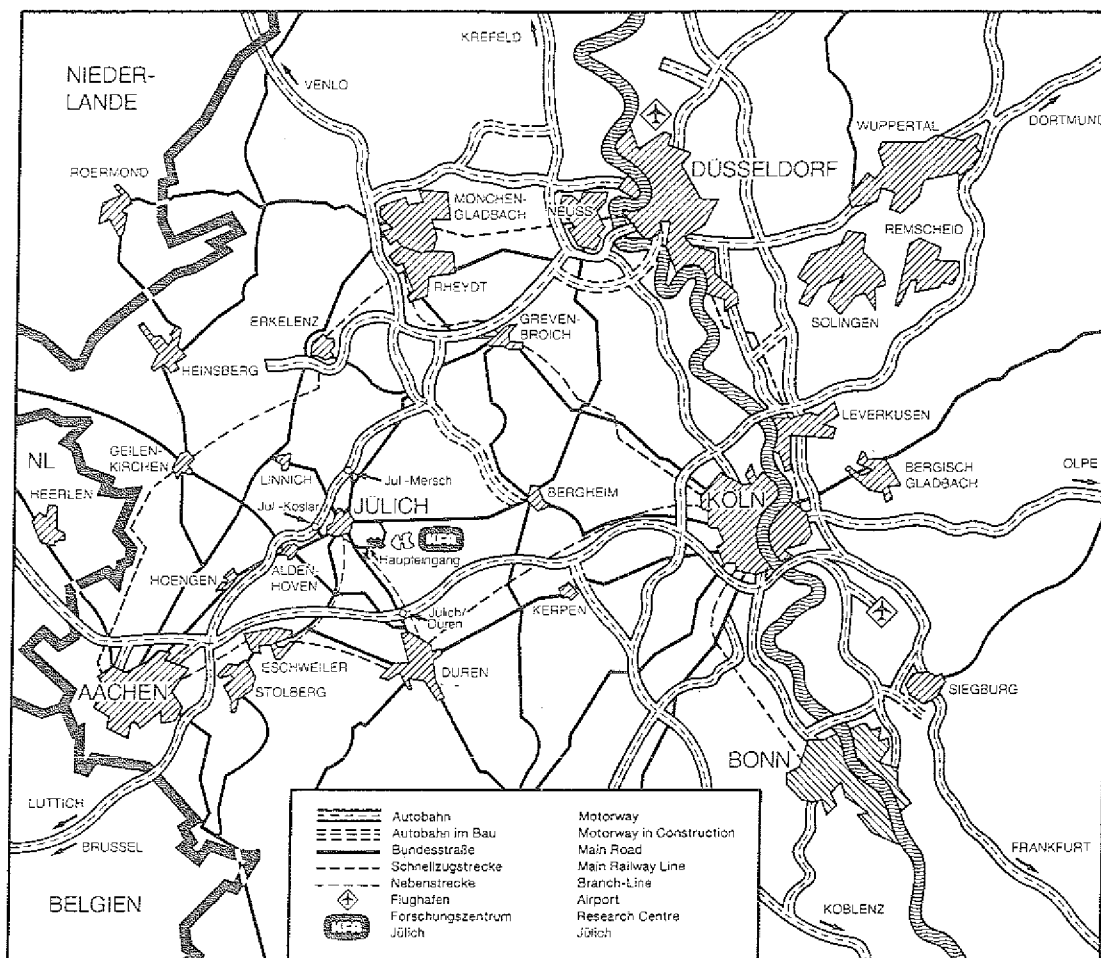
2023年1月1日

2023年1月1日

2023年1月1日

2023年1月1日

2023年1月1日



Als Manuskript gedruckt

Forschungszentrum Jülich: Berichte Nr. 2382
 Institut für Festkörperforschung Jül-2382
 D 82 (Diss. T.H. Aachen)

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK · Forschungszentrum Jülich GmbH
 Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)
 Telefon: 0 24 61/61-0 · Telefax: 0 24 61/61-61 03 · Telex: 833 556-70 kfa d



အထွေထွေအချက်အလက်

၁။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၂။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၃။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။

၄။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၅။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၆။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၇။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၈။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၉။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။
၁၀။ ဤစာချုပ်ကို အောက်ပါအတိုင်း ပြုစုထားပါသည်။

Untersuchungen von Grenzflächen und Gitterbaufehlern in GaAs mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie

von

Gerhard Cox

1. $\frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{p}$ bits per symbol

2. $\frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{p}$ bits per symbol

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Rastertunnelmikroskopie	
2.1	Einführung	4
2.2	Physikalische Grundlagen	5
2.3	Theoretische Grundlagen zur Bildinterpretation	8
2.3.1	Das Tersoff-Hamann-Modell	9
2.3.2	Erweiterung des Tersoff-Hamann-Modells für Halbleiter	16
2.4	Tunnelspektroskopie	19
3	Konzeption und Aufbau der RTM-Anlage	
3.1	Technische Grundlagen	21
3.1.1	Mechanische Aspekte	21
3.1.2	Das elektronische Regelsystem	23
3.2	Aufbau des Mikroskops	24
3.3	Die Elektronik	32
3.4	Aufbau der RTM-Anlage	40
3.4.1	Der Probentransfer	44
3.4.2	Die Spaltzange	46
4	Physikalische Grundlagen zum Experiment	
4.1	Struktur der GaAs-{110}-Spaltoberfläche	50
4.2	Versetzungen in GaAs	53
5	Spitzen- und Probenpräparation	
5.1	Spitzenpräparation	57
5.2	Probenpräparation	59

6	Beschreibung und Diskussion der Ergebnisse	
6.1	Unverformte Proben	63
6.1.1	Atomare Auflösung auf GaAs-(0 $\bar{1}\bar{1}$)	63
6.1.2	Tunnelspektroskopie	68
6.1.3	Spaltstufen	73
6.1.4	Punktdefekte	84
6.2	Diskussion der Ergebnisse für unverformte Proben	89
6.2.1	Spaltstufen	89
6.2.2	Punktdefekte	92
6.3	Versetzungen	95
6.3.1	Vollständige Versetzungen	97
6.3.2	Aufgespaltene Versetzungen	103
6.4	Diskussion der Ergebnisse für verformte Proben	118
7	Zusammenfassung	125
	Literaturverzeichnis	128

1 Einleitung

Aufgrund seiner interessanten physikalischen Eigenschaften - beispielsweise seiner hohen Ladungsträgerbeweglichkeit und der direkten Bandlücke - hat die Bedeutung des III-V-Halbleiters GaAs als Ausgangsmaterial für optoelektronische Schaltungen, Laser und schnelle Bauelemente in den letzten Jahren stark zugenommen [1]. Sowohl die Möglichkeit, undotiertes, semiisolierendes GaAs als Wafermaterial herzustellen, als auch seine kristallographische Ähnlichkeit zum AlGaAs machen GaAs zum viel verwendeten Ausgangsmaterial für Heteroepitaxieverfahren zur Herstellung definierter Übergitterstrukturen.

Im Gegensatz zum Si, das versetzungsfrei gezogen werden kann, liegt die Versetzungsdichte im GaAs zwischen 10^2 cm^{-2} und 10^4 cm^{-2} . Besonders bei optisch aktiven Bauelementen können diese Gitterstörungen im Laufe der Zeit zu einer Degradation der Bauelemente führen. Wegen der Versetzungen kann GaAs bisher nicht als Grundmaterial für hochintegrierte Schaltkreise verwendet werden. Über die Entstehung der Versetzungen bei der Kristallzucht und ihre Eigenschaften im Material ist bislang wenig bekannt. Die Aufklärung ihrer genauen geometrischen Struktur sowie ihrer elektronischen Eigenschaften ist derzeit Gegenstand intensiver Forschungsbemühungen.

Die Rastertunnelmikroskopie (RTM), die in den Jahren 1981 und 1982 von Binnig und Rohrer entwickelt wurde [2], ist sicherlich eine der wichtigsten experimentellen Neuerungen auf dem Gebiet der Oberflächenphysik. Das Rastertunnelmikroskop ermöglicht die atomar aufgelöste Abbildung von Oberflächen leitender und halbleitender Materialien.

In dieser Doktorarbeit wird die Rastertunnelmikroskopie zur Untersuchung von Versetzungen und strukturellen Defekten verwendet. Dieser experimentelle Zugang zum Studium von Gitterbaufehlern, der hier zum erstenmal durchgeführt wird, ermöglicht es, Informationen sowohl über die geometrische als auch über die elektronische Struktur von Gitterbaufehlern mit atomarer Auflösung zu erhalten.

Strukturelle Informationen von Volumengitterbaufehlern konnten bisher nur mit Hilfe der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) erhalten werden. Aufgrund von strahlungsinduziertem Versetzungsgleiten ist eine genaue Untersuchung

der Kernstruktur von Versetzungen in GaAs schwierig. Im Gegensatz zur RTM ist die TEM keine im eigentlichen Sinne direktabbildende Untersuchungsmethode im Realraum. Die komplexe Amplitude der Elektronenwellen ist aufgrund der Linsenfehler keine direkte Repräsentation der Objektstruktur. Die experimentellen Ergebnisse müssen daher durch ausführliche Bildsimulationsrechnungen abgesichert werden [3,4]. Darüber hinaus gelingt echte atomare Auflösung mit der TEM in GaAs nur in speziellen Fällen, bei denen Elektronenenergie, Objektivlinsenbrennweite und vor allem die Präparatdicke sorgfältig aufeinander abgestimmt sind.

Elektronische Eigenschaften von Gitterbaufehlern wurden bisher mit Methoden wie DLTS (Deep-Level-Transient-Spectroscopy) [5], Photolumineszenz [6] oder Hall Effekt [7] untersucht. Da diese Meßmethoden jedoch über ein großes Probenvolumen gemittelte Informationen liefern, ist eine Unterscheidung zwischen Effekten, die auf Versetzungen zurückzuführen sind, und solchen, die auf Punktdefekten beruhen, schwierig.

Da die RTM eine oberflächensensitive Meßmethode ist, werden die Durchstoßpunkte der Versetzungen auf einer GaAs-{110}-Spaltoberfläche untersucht. Die Spaltung erweist sich als geeignete Präparationsmethode, da sie eine saubere Oberfläche ohne große Beeinflussung der erzeugten Versetzungen liefert. Ein weiterer Vorteil der Spaltung ist darin zu sehen, daß die Spaltebene beim III-V Halbleiter GaAs senkrecht zum Burgersvektor des primär durch die Verformung angeregten Gleitsystems gelegt werden kann. Neben den Spaltoberflächen verformter Kristalle werden auch die unverformten Kristalle mikroskopiert. Schwerpunkt ist hier die Untersuchung von Spaltstufen und strukturellen Punktdefekten.

Da das Rastertunnelmikroskop mit Präparations- und Analysemöglichkeiten im Rahmen dieser Doktorarbeit selbst entwickelt und aufgebaut wurde, soll der experimentelle Aufbau im 3. Kapitel ausführlich beschrieben werden. Das Funktionsprinzip und die theoretischen Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie werden in Kapitel 2 beschrieben. Im 4. Kapitel erfolgt eine Darstellung der physikalischen Grundlagen, die zum Verständnis der Ergebnisse wichtig sind. Nach einer kurzen Besprechung der Spitzen- und Probenpräparation im 5. Kapitel werden im 6. Kapitel die Meßergebnisse vorgestellt und diskutiert. Dabei werden zunächst die Ergebnisse von unverformten GaAs-{110}-Spaltoberflächen besprochen: Nach einer Beschreibung der RTM-Bilder

mit atomarer Auflösung (Kap.6.1.1) werden die Resultate über Spaltstufen (Kap.6.1.2) und Punktdefekte (Kap.6.1.3) beschrieben und in Kapitel 6.2 abschließend diskutiert. Bilder von Versetzungen in verformtem Material werden in Kapitel 6.3 vorgestellt. Dabei wird unterteilt in vollständige Versetzungen (Kap.6.3.1) und aufgespaltene Versetzungen (Kap.6.3.2). Abschließend erfolgt eine Diskussion der Ergebnisse (Kap.6.4).

2 Rastertunnelmikroskopie

2.1 Einführung

Das Funktionsprinzip eines Rastertunnelmikroskops (RTM) ist denkbar einfach. Eine Metallspitze, die auf einem Dreibein aus Piezostäben sitzt, wird bis auf einige Zehntel Nanometer der Oberfläche einer elektrisch leitenden Probe angenähert, so daß die Elektronenwolken der Spitze und der Probe überlappen.

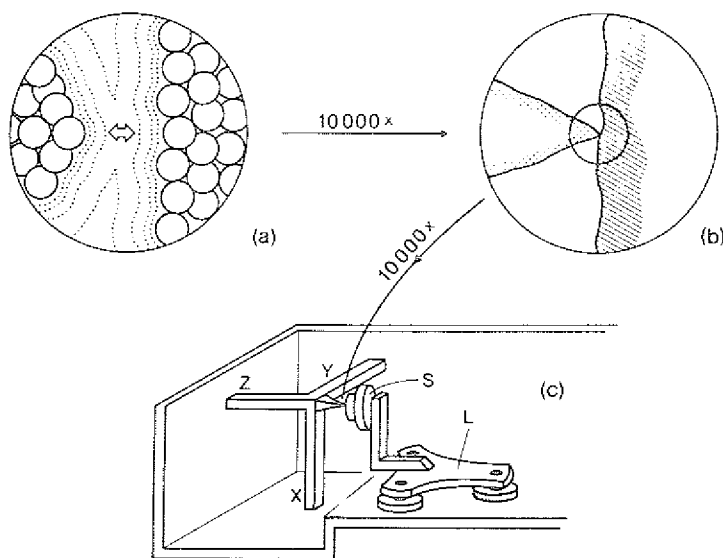


Abb. 2-1: Prinzipieller Aufbau eines Rastertunnelmikroskops: Als Sonde dient das vorderste Atom einer Metallspitze, dessen Elektronenverteilung mit der Probe S überlappt. Die Spitze kann mit Piezoelementen in allen drei Raumdimensionen (x,y,z) positioniert werden [2]. Der Abbildungsmaßstab ändert sich von Ausschnitt zu Ausschnitt um einen Faktor 10^4 .

Legt man zwischen beiden Elektroden eine Spannung an, so fließt aufgrund des

Überlapps der Elektronenwolken ein Tunnelstrom zwischen Metallspitze und Probe. Seine Größe variiert exponentiell mit dem Abstand zwischen Nadel und Probe; dies ist die eigentliche Ursache für die hohe laterale und vertikale Auflösung des RTM. Durch Anlegen geeigneter Rasterspannungen V_x und V_y an die Piezostäbe wird die Spitze in einem Rastermuster zeilenweise über die Oberfläche bewegt. Der Tunnelstrom I , der während des Rasterns zwischen Probe und Spitze fließt, ändert sich entsprechend der Oberflächentopographie. Diese Änderungen im Tunnelstrom werden von einer Regel-elektronik mit einem Referenzstrom I_0 verglichen und liefern eine Regelspannung V_z für den z-Piezostab. Dieser bewegt während des Rasterns die Nadel entsprechend den Konturen der Oberfläche auf und ab, so daß der gemessene Tunnelstrom I immer gleich dem Referenzstrom I_0 ist (sog. Konstantstrom-Betrieb). Die Auftragung der Regelspannung V_z gegen die Ortskoordinaten x und y auf einem Bildschirm liefert ein Bild der Oberflächentopographie der Probe.

Der enorme Erfolg der Rastertunnelmikroskopie in den letzten Jahren liegt darin begründet, daß es gelungen ist, Bilder von Oberflächen im Realraum mit atomarer Auflösung in allen drei Dimensionen zu erhalten [8-11]. Darüberhinaus liefert diese Mikroskoptechnik nicht nur Informationen über die Topographie der Oberfläche, sondern ermöglicht auch Aussagen über die lokale elektronische Struktur, wobei die beiden Informationen allerdings im allgemeinen nicht getrennt voneinander erhalten werden können. Einige der erfolgreichen Anwendungen der RTM waren beispielsweise: die topographische und elektronische Strukturbestimmung von Halbleiteroberflächen und deren Adsorbatsysteme [12-14], die atomare Auflösung von dichtgepackten Metalloberflächen [15,16], und die Untersuchung von organischen Molekülen und biologischen Materialien [17]. Um die Reinheit der Oberfläche zu gewährleisten, sind viele dieser Untersuchungen im Ultrahochvakuum (UHV) durchgeführt worden. Bei geeigneten Materialien läßt sich die Rastertunnelmikroskopie aber auch an Luft oder in Flüssigkeiten betreiben [18].

2.2 Physikalische Grundlagen

Das physikalische Prinzip der Rastertunnelmikroskopie beruht auf dem quantenmechanischen Tunneln von Elektronen durch eine Potentialbarriere. Abb. 2-2 verdeutlicht dies anhand zweier planarer Metalloberflächen, die durch eine dünne Isolatorschicht

(z.B. Vakuum) getrennt sind. Ein Elektron läßt sich quantenmechanisch durch eine Wellenfunktion beschreiben, die im Innern des Metalls periodisch ist, deren Amplitude aber nach außen hin exponentiell abfällt.

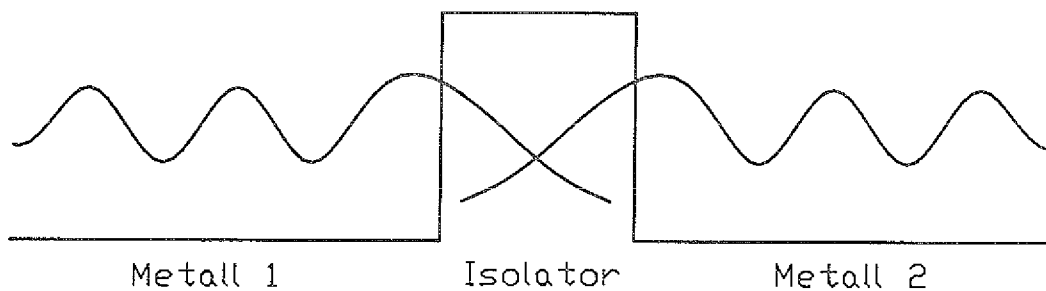


Abb. 2-2: Exponentieller Abfall der Wellenfunktionen zweier Elektronen ins Vakuum. Sind die beiden Oberflächen nahe genug zusammen, überlagern sich die Wellenfunktionen.

Bringt man die zwei planaren Elektroden so nahe zusammen, daß sie nur noch einige Zehntel Nanometer voneinander getrennt sind, so besteht aufgrund der von Null verschiedenen Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen außerhalb des Metalls für sie die Möglichkeit, durch die isolierende Schicht von einem Metall ins andere zu tunneln. Legt man zwischen beiden Elektroden eine Spannung an, so unterscheidet sich aufgrund der unterschiedlichen Energie die Tunnelwahrscheinlichkeit für Elektronen, die von rechts nach links tunneln, von der Tunnelwahrscheinlichkeit für Elektronen, die von links nach rechts tunneln, so daß zwischen beiden Elektroden, die durch eine isolierende Schicht getrennt sind, ein Tunnelstrom fließt.

Die Abhängigkeit des Tunnelstroms I von der Austrittsarbeit Φ , der angelegten Spannung U und der Breite d der Tunnelbarriere läßt sich am einfachsten mit Hilfe der eindimensionalen Tunneltheorie beschreiben [19]. Das Energiediagramm für den eindimensionalen Tunnelprozeß zwischen zwei Metallen mit gleicher Austrittsarbeit zeigt Abb. 2-3.

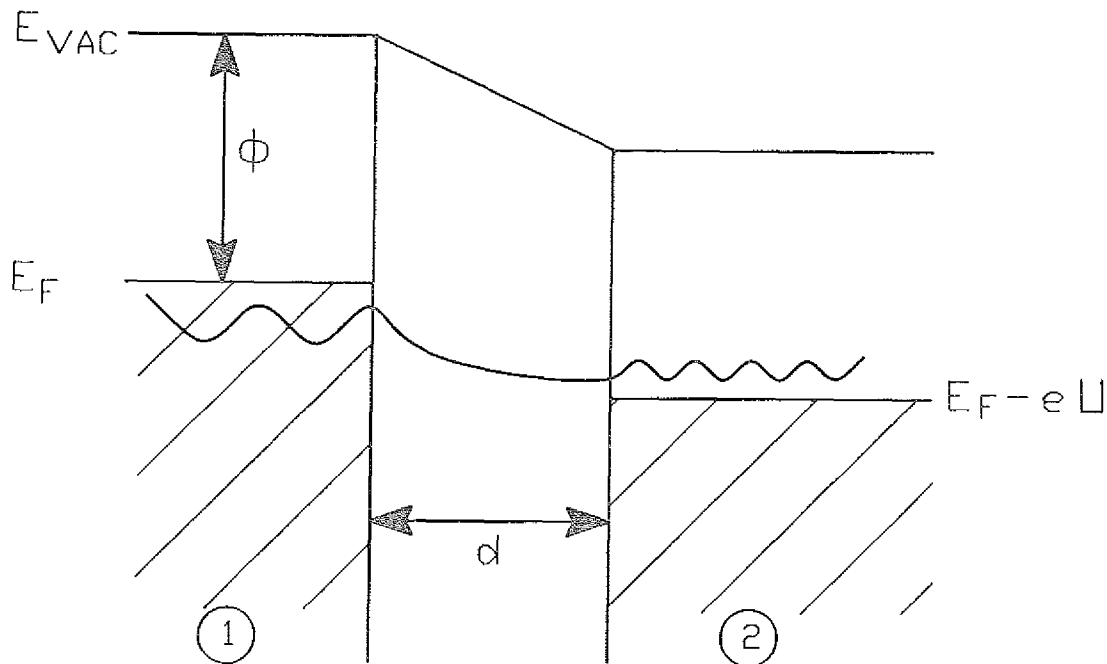


Abb. 2-3: Ein Elektron der Energie E im Leitungsband der Metallelektrode 1 durchtunnelt eine Potentialbarriere der Breite d und Höhe Φ und besetzt einen leeren Zustand der Metallelektrode 2, an der gegenüber der ersten Elektrode eine positive Spannung U anliegt.

Für den Tunnelstrom ergibt sich für kleine Spannungen U (d.h. $eU \ll \Phi$) die einfache Beziehung:

$$I \sim V \cdot \exp(-2\kappa d) \quad (1)$$

mit

$$\kappa = \left(\frac{2m\Phi}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Der Tunnelstrom variiert exponentiell mit dem Abstand d der Elektroden, d.h. für eine typische Barrierenhöhe von 4.5 eV sinkt der Tunnelstrom um eine Zehnerpotenz, wenn sich der Abstand um 0.1 nm ändert. Die Größe κ wird oft als inverse Dämpf-

fungslänge bezeichnet. Sie ist ein Maß für das exponentielle Abklingen der Wellenfunktion der Elektronen im Vakuum. Für $\Phi = 4.5 \text{ eV}$ ist $\kappa = 0.011 \text{ nm}^{-1}$. In Gleichung 1 ist der Tunnelstrom I proportional zur angelegten Spannung U , d.h. die Zahl der besetzten und unbesetzten Zustände in den Metallelektroden, die zum Tunnelstrom beitragen, ändert sich linear mit der Tunnelvorspannung.

Die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstromes vom Elektrodenabstand s ist die eigentliche Grundlage des RTM. Hält man während des Rasterns der Nadel über die Oberfläche den Tunnelstrom mit einem Regelmechanismus bis auf 10 % konstant, so variiert der Abstand zwischen Nadel und Probe um nur 0.005 nm. Deshalb kann man die RTM-Bilder in erster Näherung als Linien konstanter Höhe über der Oberfläche interpretieren. Die laterale Auflösung des RTM ist durch den Krümmungsradius der Spitze bestimmt, mit der die Oberfläche abgetastet wird. Da sich die Tunnelwahrscheinlichkeit exponentiell mit dem Abstand ändert, ist der Strom auf die kleine Minispitze beschränkt, die der zu untersuchenden Probenoberfläche am nächsten ist. Der Krümmungsradius dieser Minispitze ist wesentlich kleiner als der Krümmungsradius der Metallspitze, der typischerweise 100 - 200 nm beträgt. Im Idealfall ist der Tunnelstrom auf die vordersten Atome dieser Minispitze beschränkt. Typische Werte für die laterale Auflösung einer solchen Spitze liegen bei 0.3 - 0.5 nm.

2.3 Theoretische Grundlagen zur Bildinterpretation

Zum Verständnis von RTM-Bildern, besonders bei solchen, die Informationen über die atomare Struktur der Oberfläche wiedergeben, reicht die in Kap.2.2 vorgestellte, eindimensionale Theorie des Tunnelns zwischen zwei planaren Elektroden nicht mehr aus. Die einfache Interpretation der RTM-Bilder als Linien konstanter Höhe ist bei Bildern mit atomarer Auflösung nicht mehr gültig, da z.B. unklar ist, welche Funktion der Abstand d in der Gleichung 1 spielt. Des weiteren ist nicht berücksichtigt, daß der Tunnelstrom von Zuständen um das Fermi-niveau getragen wird, die für die Spitze und die Oberfläche eine komplexe geometrische und elektronische Struktur haben können.

Die Berechnung des Tunnelstroms als Funktion der Tunnelvorspannung und der Position der Spitze im Rahmen einer dreidimensionalen Tunneltheorie ist nicht exakt möglich, da man a priori die elektronische und geometrische Struktur der Spitze und

der Oberfläche nicht kennt. Der genaue Verlauf des Potentials zwischen Spitze und Oberfläche ist ebenfalls unbekannt, wobei Bildladungs- sowie Austausch- und Korrelationseffekte die Potentialbarriere zwischen den Elektroden beeinflussen können [20]. Für die Beschreibung des lokalisierten Festkörper-Vakuum-Festkörper Tunnelns, wie es beim RTM auftritt, wurden mehrere Theorien entwickelt.

Garcia et. al. behandeln das Problem im Rahmen der Streutheorie [21,22]. Probe und Spitze werden in einem Jellium Modell durch ein konstantes Potential beschrieben. Der Potentialbarriere zwischen Probe und Spitze wird eine räumliche Korrugation aufgeprägt, die der atomistischen Struktur der Elektroden Rechnung tragen soll. Der Tunnelstrom wird aus der Transmission einer von der Spitze durch die Tunnelbarriere in die Probe einfallenden Elektronenwelle berechnet.

Von N.D. Lang stammen theoretische Arbeiten, die für ein definiertes Spitzen- und Probenatom eine Berechnung des Tunnelstroms vornehmen [23-26]. Lang zeigte, daß die Auflösung des RTM empfindlich von der chemischen Beschaffenheit der Spitze und der elektronischen Struktur der Probenoberfläche beeinflusst werden kann.

Von Tersoff und Hamann [27,28] sowie von Baratoff [29] wurde eine Theorie entwickelt, die ausgehend von der Verwendung des Störansatzes nach Bardeen [30] zur Beschreibung des Tunnelprozesses eine anschauliche Bildinterpretation ermöglicht. Dieses Modell wird im folgenden Abschnitt näher beschrieben.

2.3.1 Das Tersoff-Hamann-Modell

Im von Tersoff und Hamann entwickelten Modell werden Spitze und Oberfläche als zwei getrennte Systeme betrachtet, die durch eine Potentialbarriere schwach gekoppelt sind, d.h. es wird vorausgesetzt, daß Anfangs- und Endzustände im Tunnelprozeß näherungsweise den ungestörten Zuständen der beiden Elektroden entsprechen (Abb. 2-4).

Der Tunnelstrom läßt sich dann in einer von Bardeen [30] durchgeführten, zeitabhängigen Störungsrechnung 1. Ordnung schreiben als:

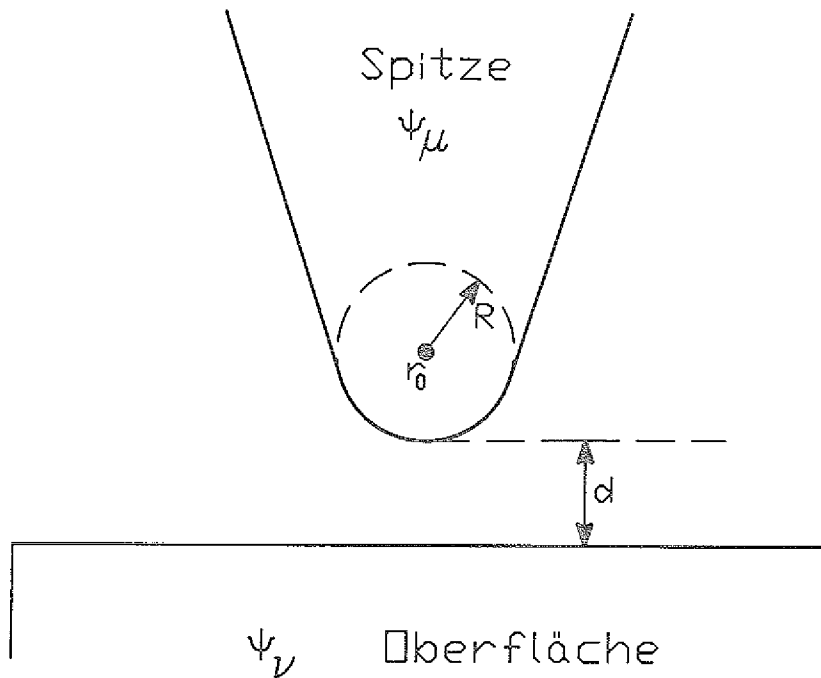


Abb. 2-4: Geometrie zwischen Spitze und Probe im Tersoff-Hamann Modell. Die Spitze mit Radius R am Ort r_0 und mit Wellenfunktion Ψ_μ befindet sich in einem Abstand d von der Oberfläche, die durch die Wellenfunktion Ψ_ν beschrieben wird.

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu,\nu} [1 - f(E_\mu - eU)] f(E_\nu) |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu) \quad (2)$$

Das Tunnelmatrixelement $M_{\mu,\nu}$ zwischen den Zuständen Ψ_μ der Spitze und Ψ_ν der Probe hängt vom Überlapp der Wellenfunktionen von Probe und Spitze ab. Die Fermifunktion $f(E)$ gibt die Verteilung der besetzten Zustände für die Probe und die der unbesetzten Zustände der Spitze an; die δ -Funktion gewährleistet die Energieerhaltung. Der Tunnelstrom lässt sich schreiben als Produkt der Tunnelwahrscheinlichkeiten zwischen den Zuständen Ψ_μ und Ψ_ν von Spitze und Probe mit den Besetzungswahrscheinlichkeiten für unbesetzte Zustände Ψ_μ und besetzte Zustände Ψ_ν . Die Wellenfunktionen Ψ_μ und Ψ_ν sind dabei die ungestörten Einteilchen-Wellenfunktionen von Spitze und Probe.

Für den Fall tiefer Temperaturen ($T \leq 300$ K) und kleiner Tunnelvorspannungen

($eU \ll \Phi$) wird der Tunnelstrom im wesentlichen von Elektronen an der Fermikante getragen. Gleichung 2 lässt sich dann durch Entwickeln der Fermifunktionen um E_F schreiben als:

$$I = \frac{2\pi e^2}{\hbar} U \sum_{\mu, \nu} |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_F) \delta(E_\nu - E_F) \quad (3)$$

Das Tunnelmatrizelement $M_{\mu, \nu}$ ist gegeben durch die Integration des Stromdichteoperators über eine beliebige Fläche in der Vakuumregion zwischen Spitze und Probe.

$$M_{\mu, \nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{S} (\Psi_\mu^* \nabla \Psi_\nu - \Psi_\nu \nabla \Psi_\mu^*) \quad (4)$$

Bei der Auswertung des Matrizelementes $M_{\mu, \nu}$ lässt sich die Wellenfunktion Ψ_ν für periodische Oberflächen in folgender Form angeben [28]:

$$\Psi_\nu(\vec{r}, E_F) = \Omega_s^{-1/2} \sum_{\vec{G}} a_G \exp \left[-(\kappa^2 + |\vec{\kappa}_g|^2)^{1/2} \cdot z \right] \exp(i\vec{\kappa}_g \cdot \vec{x}) \quad (5)$$

mit:

$$\kappa = \frac{(2m\Phi)^{1/2}}{\hbar}$$

$$\vec{\kappa}_g = \vec{k}_\parallel + \vec{G}$$

Hierbei ist $\vec{k}_\parallel$ ein Oberflächen-Blochwellenvektor und $\vec{G}$ ein reziproker Oberflächengittervektor. Ω_s ist das Spitzenvolumen. Die Koordinate z ist senkrecht und die Koordinate $\vec{x}$ ist parallel zur Oberfläche gewählt.

Die Wellenfunktion lässt sich als Summe von Oberflächen-Blochwellenvektoren schreiben, deren Amplitude ins Vakuum mit einer effektiven Abfalllänge

$$\kappa_{eff} = (\kappa^2 + |\vec{\kappa}_g|^2)^{1/2} \quad (6)$$

abklingt.

Da die mikroskopische Struktur der Spitze unbekannt ist, beschreibt man sie durch ein lokal sphärisches Potential mit Radius R am Ort $\vec{r}_0$ (s. Abb. 2-4). Die Kugelwelle der Spitze ist dann gegeben durch:

$$\Psi_\mu(\vec{r}, E_F) = \Omega_t^{-1/2} \cdot \kappa \cdot R \cdot \exp(\kappa R) \cdot \frac{\exp(-\kappa|\vec{r} - \vec{r}_0|)}{\kappa|\vec{r} - \vec{r}_0|} \quad (7)$$

mit Spitzenvolumen Ω_t und κ wie in Gleichung 5 (d.h. gleiche Austrittsarbeit für Spitze und Probe).

Damit läßt sich das Matrixelement $M_{\mu,\nu}$ berechnen, und man erhält für den Tunnelstrom:

$$I \sim U \cdot \exp(2\kappa R) \cdot \varrho_s(\vec{r}_0, E_F) \quad (8)$$

mit

$$\varrho_s(\vec{r}_0, E_F) = \sum_\nu |\Psi_\nu(\vec{r}_0)|^2 \delta(E_\nu - E_F) \quad (9)$$

$\varrho_s(\vec{r}_0, E_F)$ ist die Oberflächenzustandsdichte am Ort $\vec{r}_0$ bei der Fermienergie E_F . Da die Wellenfunktionen der Oberfläche exponentiell nach außen abklingen, d.h.

$$\Psi \sim \exp(-2\kappa(R + d))$$

erhält man wieder die in Gleichung 1 angegebene, exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstromes vom Abstand d

$$I \sim V \cdot \exp(-2\kappa d) \quad (11)$$

In vereinfachter Form läßt sich Gleichung 8 schreiben als

$$I \sim U \cdot \varrho_s(\vec{r}_0, E_F) \quad (12)$$

Das Tunnelmikroskop bildet also im Konstantstrom-Betrieb Konturen konstanter Oberflächenzustandsdichte um die Fermienergie E_F am Ort der Spitze $\vec{r}_0$ ab. Die Auflösung

des RTM ist dabei durch das Verhalten von $\varrho_s(\vec{r}_o, E_F)$ und den Spitzenradius R bestimmt.

Die Periodizität der Oberfläche erlaubt es, die Oberflächenzustandsdichte $\varrho_s(\vec{r}, E_F)$ nach reziproken Gittervektoren zu entwickeln. Da diese im Vakuum sehr schnell abfallen, kann man sich für genügend große Abstände von der Oberfläche bei der Entwicklung auf die niedrigsten von Null verschiedenen Fourierkomponenten beschränken.

$$\varrho_s(\vec{r}, E_F) = \varrho_o(z, E_F) + 2\varrho_{G_1}(z, E_F) \cdot \cos(\vec{G}_1 \cdot \vec{x}) \quad (13)$$

mit $\vec{G}_1$ als kleinstem reziproken Oberflächengittervektor.

Tersoff und Hamann schätzten die Dämpfung der beiden Terme auf der rechten Seite in Gleichung 13 ab, indem sie bei der Summation über reziproke Gittervektoren in Gleichung 5 nur die Terme berücksichtigten, für die die Abfalllänge am größten ist. Es folgt:

$$\varrho_o(z, E_F) \sim \exp(-2\kappa z)$$

und

$$\varrho_{G_1}(z, E_F) \sim \exp(-2[\kappa + G_1^2/4]^{1/2} \cdot z) \quad (14)$$

Gleichung 14 besagt, daß für genügend große Abstände von der Oberfläche nur Zustände vom Zentrum der Oberflächen-Brioullinzone zu $\varrho_o(z, E_F)$ beitragen, da in Gleichung 5 für $\vec{k}_G = 0$ die Abfalllänge am größten wird. Die größte Abfalllänge für ϱ_{G_1} tritt für Wellenvektoren auf, die am Rande der Oberflächen-Brioullinzone liegen, d.h. für $\vec{k}_\parallel = (1/2)\vec{G}_1$, wobei vorausgesetzt wird, daß der Abstand von der Oberfläche so groß ist, daß diese Komponenten schon genügend stark abgeklungen sind ($1/2 \vec{G}_1 \ll \kappa$).

Das Verhalten der Oberflächenzustandsdichte, gegeben durch Gleichung 13 und Gleichung 14 ist schematisch in Abb. 2-5 dargestellt. Die Nadel folgt im Konstantstrom-Betrieb Konturen konstanter Zustandsdichte, d.h. die Auslenkung z der Nadel senkrecht zur Oberfläche als Funktion der Rasterrichtung $\vec{x}$ ergibt sich als Schnittfläche der Oberfläche $\varrho_s(\vec{r}, E_F)$ mit einer Ebene $\varrho = \text{const}$, die durch die Tunnelbedingungen (i.e. Tunnelstrom und Tunnelvorspannung) bestimmt ist. Für $z = \text{const}$ ist die maximale Amplitude von $\varrho_s(\vec{r}, E_F)$ entlang $\vec{x}$ gegeben durch:

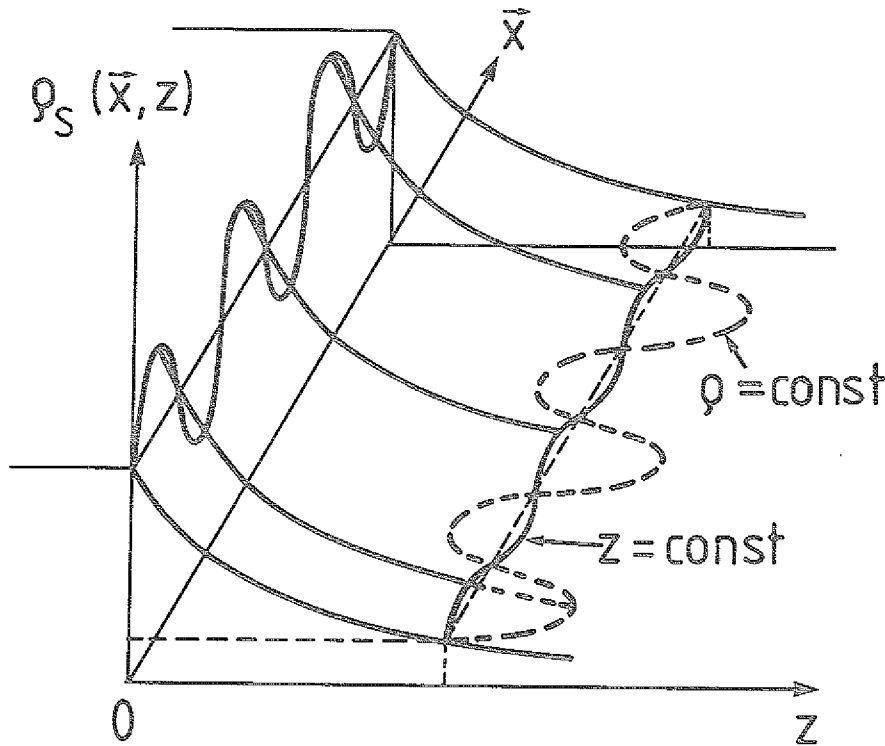


Abb. 2-4: Darstellung der Bewegungsrichtung der Nadel entlang der Oberfläche als Linie konstanter Oberflächenzustandsdichte [31].

$$\Delta \rho_s = 4 \rho_0 \quad (15)$$

Dieser Größe im Konstantstrom-Betrieb entspricht eine maximale Auslenkamplitude Δz der Nadel, die man als Korrugation bezeichnet. Bei Abständen, bei denen die Strukturen im RTM-Bild genügend geglättet sind (i.e. $\kappa \cdot \Delta z \ll 1$), läßt sich folgender Zusammenhang zwischen $\Delta \rho_s$ und Δz angeben:

$$\frac{\Delta \rho_s}{\rho_0} = -2\kappa \cdot \Delta z \quad (16)$$

Mit Gleichung 15 folgt für Δz

$$\Delta z \sim 2\kappa^{-1} \frac{\varrho_{G_1}(z)}{\varrho_0(z)} \quad (17)$$

Setzt man für $\varrho_{G_1}(z)$ und $\varrho_0(z)$ die in Gleichung 14 angegebenen Abfallängen ins Vakuum ein, so folgt für Δz :

$$\Delta z \sim 2\kappa^{-1} \cdot \exp\left(-\frac{G_1^2}{4\kappa} \cdot z\right) \quad (18)$$

mit

$$2\left(\kappa^2 + \frac{1}{4G_1^2}\right)^{1/2} \approx \frac{G_1^2}{4\kappa}$$

Die Korrugation Δz fällt exponentiell mit dem Abstand von der Oberfläche ab, wobei die Abfallänge ins Vakuum von der Gitterkonstante der Oberfläche abhängt.

Mit Gleichung 18 und Gleichung 14 kann man nun ein effektives Auflösungsvermögen für das RTM angeben. Die Fourierkomponente ϱ_{G_1} in Gleichung 14, die die Korrugation des RTM-Bildes bestimmt, ist gegenüber dem konstanten Beitrag ϱ_0 um einen Faktor $\exp((-G_1^2/4)z)$ unterdrückt. Dies kann als Faltung der Fourierkomponente ϱ_{G_1} mit einer Gaussfunktion

$$F(x) = \exp\left(\frac{-\kappa x^2}{z}\right) \quad (19)$$

mit einer Halbwertsbreite

$$L = 1.66 \cdot \left(\frac{z}{\kappa}\right)^{1/2} \quad (20)$$

interpretiert werden. Ersetzt man in Gleichung 20 die Koordinate z durch die für die Spitze relevante Größe $R+d$ (s. Abb. 2-4), so folgt für die Auflösung des RTM:

$$L_A = 1.66 \cdot \left(\frac{R+d}{\kappa}\right)^{1/2} \quad (21)$$

Für $R \gg d$ ist die Auflösung im wesentlichen durch den Durchmesser der Spitze bestimmt. Für $R \leq d$ ist die Auflösung durch den Abstand der Nadel von der Oberfläche

gegeben, der durch Erhöhung des Tunnelstromes oder durch Erniedrigung der Tunnelvorspannung verringert werden kann.

Eine Berechnung der Oberflächenzustandsdichte $\rho(\bar{E}, E_F)$ in Abhängigkeit vom Abstand z von der Oberfläche ermöglicht nun im Rahmen des Tersoff-Hamann Modells den Vergleich mit experimentell gewonnenen RTM-Bildern. Für die (3x1) und (2x1) Rekonstruktion der Au-(110)-Oberfläche wurde bei der Annahme eines Spitzenradius von 0.9 nm eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erzielt [27,28].

Dem Modell von Tersoff und Hamann liegen mehrere einschränkende Näherungen zugrunde: periodische Oberflächen mit nicht stark lokalisierten Oberflächenzuständen, keine Abhängigkeit der Oberflächenzustände von der Tunnelvorspannung, Vernachlässigung von Bildladungs- und Korrelationseffekten zwischen Probe und Spitze, Näherung der Spitze durch sphärisches Potential. Diese Näherungen treffen im allgemeinen nur auf Metalloberflächen zu. Dort variiert die Zustandsdichte der Oberfläche mit der Position der Atome, und die Maxima in den RTM-Bildern mit atomarer Auflösung können direkt mit den Atompositionen korreliert werden.

2.3.2 Erweiterung des Tersoff-Hamann-Modells für Halbleiter

Für Halbleiteroberflächen mit lokalisierten Oberflächenzuständen und Diskontinuitäten an den Bandkanten treffen die in Kap.2.3 genannten Näherungen nicht mehr zu. Das RTM "sieht" bei Halbleiteroberflächen die "Dangling Bonds" der Oberflächenatome, die nicht mit den Atompositionen übereinstimmen müssen und eine komplizierte Abhängigkeit von der Tunnelvorspannung aufweisen können, wie sie z.B. für die Si-(111)-(2x1) Rekonstruktion beobachtet wurde [35].

Abb. 2-5 zeigt ein Energiediagramm für das Tunneln zwischen einem Halbleiter und einem Metall für positive und negative Tunnelvorspannung. Bei einer positiven Vorspannung der Probe gegenüber der Nadel tunneln die Elektronen aus besetzten Zuständen der Nadel in unbesetzte Zustände des Leitungsbandes der Probe; bei negativer Tunnelvorspannung fließt der Tunnelstrom aus besetzten Zuständen der Probe in unbesetzte Zustände der Nadel. Die den verschiedenen Tunnelvorspannungen entsprechenden Bilder geben jeweils die räumliche Verteilung der Valenzband- und Leitungsbandzustände

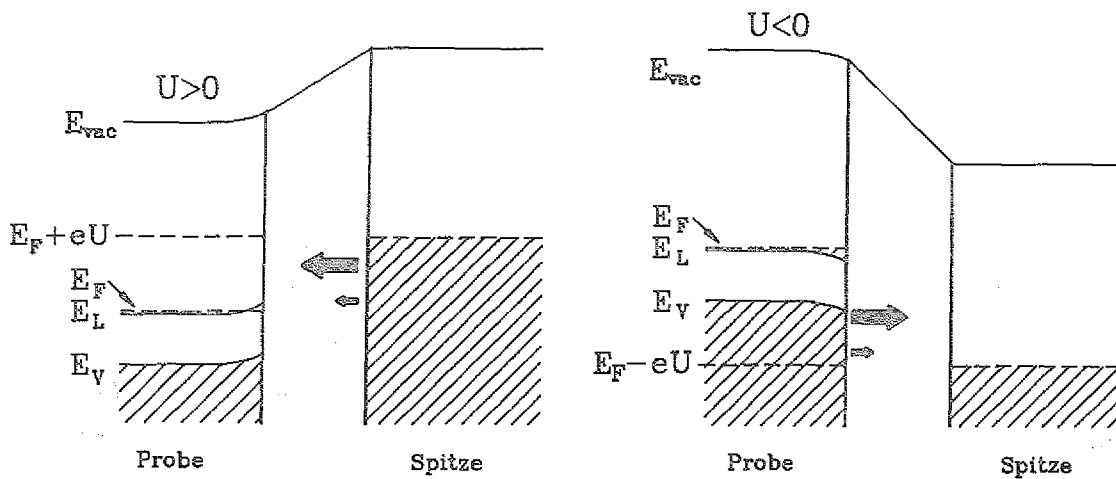


Abb. 2-5: Banddiagramm für das Tunneln zwischen einem Halbleiter und einem Metall. Eine durch den Abfall der Tunnelvorspannung hervorgerufene Bandverbiegung an der Halbleiteroberfläche ist angedeutet.

wieder, die qualitativ verschieden sein kann. Ein besonders anschauliches Beispiel dafür ist die GaAs-(110)-Spaltoberfläche. Aufgrund der Rekonstruktion der Oberflächenatome sind die Valenzbandzustände vorzugsweise beim As-Atom lokalisiert, während die Leitungsbandzustände hauptsächlich beim Ga-Atom konzentriert sind. Je nach Tunnelvorspannung sollten in den RTM-Bildern die Ga- und die As-Atome separat zu sehen sein. Dies wurde von Tersoff und Hamann aufgrund theoretischer Berechnungen vorhergesagt [28], und später von Feenstra und Mitarbeitern experimentell bestätigt [33]. Die GaAs-(110)-Spaltoberfläche und deren RTM-Bilder werden in dieser Arbeit noch eingehend besprochen werden.

Wegen der höheren Tunnelvorspannung bei Halbleitern tragen nicht nur Zustände am Fermi-niveau E_F , sondern Zustände in einem Energiefenster $E_F \pm eU$ zum Tunnelstrom bei. In Erweiterung der von Tersoff-Hamann abgeleiteten Gleichung 12 läßt sich der Tunnelstrom wie folgt angeben [24,34]:

$$I \sim \int_{E_F}^{E_F - eU} dE \varrho_t(E - eU) \varrho_s(E) T(E, eU) \quad (22)$$

mit

$$T(E, eU) = \exp(-2z[\bar{\Phi} - E + \frac{eU}{2}]^{1/2}) \quad (23)$$

$T(E, eU)$ ist der Transmissionskoeffizient, der den exponentiellen Abfall der Zustandsdichte der Oberfläche ins Vakuum als Funktion der Energie und der Tunnelvorspannung beschreibt. $\bar{\Phi}$ ist dabei die mittlere Barrierenhöhe zwischen Probe und Spitze ($\bar{\Phi} = 1/2(\Phi_1 + \Phi_2)$). Nimmt man die Zustandsdichte der Spitze als konstant an (für metallische Spitzen ist aufgrund des s-Wellencharakters der Metallatome die Abhängigkeit der Zustandsdichte von der Energie gering), so ergibt sich der Tunnelstrom als Integral der Zustandsdichte der Oberfläche, gewichtet mit dem Transmissionskoeffizienten $T(E, eU)$. Wegen der Energieabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten tragen in dem Energiefenster ($E_F, E_F \pm eU$) die zur jeweiligen Energie gehörenden Zustände unterschiedlich zum Tunnelstrom bei. Bei positiver Vorspannung der Probe gegenüber der Nadel ist der Tunnelstrom am größten für Zustände bei der Energie $E_F + eU$ und am geringsten für Zustände an der Leitungsbandkante. Bei negativer Vorspannung tragen Zustände an der Valenzbandkante hauptsächlich zum Tunnelstrom bei (s. Pfeile in Abb.(2-5)). Als Konsequenz daraus können z.B. energetisch tief liegende Valenzbandzustände mit dem RTM im Konstantstrom-Modus nicht abgebildet werden. Der maximale Transmissionskoeffizient für die jeweilige Tunnelvorspannung ist gegeben durch:

$$T_{max} = \exp(-2z[\bar{\Phi} - \frac{|eU|}{2}]^{1/2}) \quad (24)$$

Gleichung 24 beschreibt in niedrigster Ordnung die Abhängigkeit des Tunnelstroms von der angelegten Vorspannung und der Barrierenhöhe B mit

$$B = \bar{\Phi} - \frac{|eU|}{2} \quad (25)$$

Die größte Schwierigkeit bei der theoretischen Berechnung von RTM-Bildern für verschiedene geometrische Modelle besteht in der Berechnung der Zustandsdichte $\varrho(\vec{r}, E)$. Im einfachsten Fall kann man diese durch Superposition von sphärisch-symmetrischen

Atomladungsdichten berechnen, was bei Halbleiteroberflächen wie Si(111) (7x7) den Vergleich zwischen verschiedenen theoretischen Modellen und dem Experiment ermöglicht [35]. Im allgemeinen funktioniert diese Methode aber nur für Halbleiter mit relativ großer Oberflächeneinheit zelle, bei denen die Strukturmerkmale in der Einheit zelle lokalisiert sind (z.B. Si(7x7)). Für chemisch heterogene Halbleiteroberflächen (z.B. GaAs) oder für Halbleiteroberflächen mit Oberflächenzuständen in der Bandlücke (z.B. Si(100)) führen diese Berechnungen zu falschen Resultaten, da die räumliche Anordnung der mit den Oberflächenatomen lokalisierten Zustände nicht mit den Atompositionen übereinstimmen muß. Berechnungen der Zustandsdichte für diese Halbleiteroberflächen unter Berücksichtigung der Rekonstruktion sind zur Zeit nur auf Großrechenanlagen möglich, so daß im Gegensatz zur Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) bei der RTM noch keine einfache Möglichkeit zur quantitativen Bildsimulation besteht.

2.4 Tunnelspektroskopie

Die Tunnelspektroskopie bietet die Möglichkeit, orts- und energieaufgelöst Informationen über die Oberflächenzustandsdichte zu erhalten. Experimentell geschieht dies durch Aufnahme von Strom-Spannungskennlinien ($I(U)$ -Kennlinien) oder durch Messung der Leitfähigkeit als Funktion der angelegte Vorspannung ($dI(U)/dU$ Kennlinien) bei konstantem Abstand der Nadel von der Oberfläche. Bei konstantem Strom [36] oder konstantem Tunnelwiderstand [37] durchgeführte Spektroskopieversuche zeigten, daß Abstandseffekte in der Transmissionsfunktion in den $I(U)$ -Kennlinien dominieren können. Experimentell ist die Bedingung, bei konstantem Abstand $I(U)$ -Kennlinien aufnehmen zu können, nicht trivial zu erfüllen. Zu diesem Zweck unterbricht man für die Zeit, die man zur Aufnahme einer Kennlinie benötigt, den Regelkreis und friert den Abstand der Nadel zur Oberfläche ein [38-39]. Diese sogenannte "Sample- and-Hold" (S/H)-Technik hat sich besonders bei Halbleitern als nützlich erwiesen, da aufgrund der Bandlücke bei aktivem Regelkreis ab einer gewissen Tunnelvorspannung kein Strom mehr fließen kann und die Nadel in die Oberfläche getrieben wird. Außerdem kann man mit dieser Technik die Vorspannung kontinuierlich von positiven zu negativen Werten hin variieren und damit sowohl unbesetzte als auch besetzte Zustände spektroskopieren.

Nach Gleichung 22 erhält man durch Differenzieren:

$$\frac{dI}{dU} \sim \varrho_s(eU) \cdot T(E, eU) \quad (26)$$

Die differentielle Leitfähigkeit ist unter Vernachlässigung von Spitzeneffekten proportional zur Zustandsdichte, gewichtet mit der Transmissionsfunktion in einem Energiefenster eU . Um diese aus den Daten herausmitteln zu können, schlugen Feenstra und Mitarbeiter ein einfaches Normierungsverfahren vor [40]. Sie dividierten die differentielle Leitfähigkeit dI/dU durch die Leitfähigkeit I/U , was der logarithmischen Ableitung $d \ln I / d \ln U$ entspricht, und glätteten die $I(U)$ -Kennlinien an den Bandkanten, um ein Divergieren der Größe $d \ln I / d \ln U$ zu vermeiden. Die normalisierte Leitfähigkeit $\overline{d \ln I / d \ln U}$, die man nach Aufnahme von Kennlinien auf einem Computer berechnen kann, ist dann ein relativ direktes Maß für die Oberflächenzustandsdichte und ermöglicht einen Vergleich mit theoretischen Berechnungen oder Photoemissionsmessungen [41].

3 Konzeption und Aufbau der RTM-Anlage

In diesem Kapitel wird die experimentelle Realisierung des RTM beschrieben. Zuerst werden einige allgemeine technische Aspekte dargestellt, die den Aufbau eines RTM betreffen. Dann erfolgt eine Darstellung des mechanischen und elektronischen Aufbaus des RTM sowie eine Beschreibung der UHV-Anlage.

3.1 Technische Grundlagen

Ein Tunnelmikroskop besteht im wesentlichen aus drei Funktionsgruppen:

- a) dem mechanischen Teil, bestehend aus Probe, Spitze und einer Positioniereinrichtung, welche Probe und Spitze relativ zueinander bewegt;
- b) der Elektronik für Strommessung, Abstandsregulierung und Meßdatenerfassung;
- c) einem Bildverarbeitungssystem zur Aufbereitung und Darstellung der Meßdaten.

Ein RTM muß in der Lage sein, Strukturen einer Oberfläche bis hin zu atomaren Dimensionen abzubilden. Die dafür notwendigen Anforderungen an die Mechanik und Elektronik des Instrumentes werden in den folgenden zwei Kapiteln besprochen.

3.1.1 Mechanische Aspekte

Für eine einfache Abschätzung der erlaubten mechanischen Störungen kann man davon ausgehen, daß diese unterhalb eines Zehntels der Abstände liegen müssen, die man mit dem RTM auflösen will. D.h. bei atomarer Auflösung müssen die Störungen in lateraler Richtung kleiner als 0.02 nm sein, während sie in vertikaler Richtung aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit zwischen Strom und Spannung unter 0.002 nm liegen müssen.

Trotz dieser Forderung nach extrem geringen mechanischen Störungen muß man in der Lage sein, die Nadel von einer makroskopischen Entfernung von der Oberfläche (~ 0.5 mm) bis in den 10 nm Bereich so an diese anzunähern, daß die Nadel nicht durch unbeabsichtigten Kontakt mit der Oberfläche beschädigt wird.

Während des Experiments müssen unkontrollierte Relativbewegungen von Probe

und Nadel durch mechanische Störungen vermieden werden. Diese ergeben sich sowohl durch äußere Einflüsse wie z.B. Gebäudeschwingungen, Bodenunruhen, Schallanregungen etc. als auch durch interne Störeinflüsse wie z.B. thermische Ausdehnungen und mechanische Eigenresonanzen des Mikroskops. Äußere Störungen können durch geeignete Standortwahl und Schwingungsdämpfungssysteme unterdrückt werden. Interne Störquellen lassen sich durch eine geschickte Konstruktion und durch geeignete Werkstoffauswahl minimieren. Das RTM sollte nur aus wenigen Baueinheiten bestehen und so steif und kompakt wie möglich gebaut sein. Dies erhöht die Eigenresonanz-Frequenzen des Instruments und macht es unempfindlicher gegen äußere Störeinflüsse [42].

Neben einer Grobpositionierung von Probe und Spitze benötigt man für das Experiment eine Feinpositionierung, die den Abstand zwischen Probe und Nadel in z- Richtung reguliert und die Nadel in einem Raster von bis zu $0.1 - 1 \mu\text{m}^2$ mit den oben genannten Toleranzen in (x,y) Richtung über die Oberfläche bewegt. Dafür werden derzeit ausschließlich Piezokeramiken auf Bariumtitanatbasis [43] verwendet. Die Piezotranslatoren müssen eine Relativbewegung der Nadel in x, y und z-Richtung gegenüber der Probe ermöglichen. Je nach Tunnelmikroskoptyp sind verschiedene Translatoren entwickelt worden [2,44]. Der älteste und am häufigsten verwendete Typ besteht aus drei Piezostäben, die zu einem Dreibein montiert werden, an dem die Nadel befestigt wird. Die Probe ist dabei auf einem Transfermechanismus befestigt, der eine Relativbewegung der Nadel gegenüber der Probe ermöglicht (vergl. Abb. 2-1). Die Verwendung von Piezoröhrchen, wie sie von Binnig et. al. vorgeschlagen wurde [45,46], ermöglicht eine besonders elegante Art, alle drei Bewegungen mit einem Piezoaktuator auszuführen. Außerdem benötigt man hier für die Auslenkung viel geringere Spannungen als bei Piezostäben, und aufgrund ihrer Kompaktheit haben Piezoröhrchen eine höhere Resonanzfrequenz als Piezodreibeine.

Da jeder Punkt des Meßrasters mechanisch, d.h. durch Bewegen von Nadel oder Probe, angefahren werden muß, ist die Aquisitionszeit für ein Bild durch die Geschwindigkeit der Positionierung bestimmt. Diese kann umso größer gewählt werden, je höher die mechanischen Eigenresonanz-Frequenzen des RTM sind. Für eine kurze Meßzeit ist auch hier eine möglichst kompakte Bauweise des RTM wichtig.

3.1.2 Das elektronische Regelsystem

In den meisten RTM-Anwendungen wird das Mikroskop im Konstantstrom-Modus betrieben, d.h. der Tunnelstrom wird in Abhängigkeit des Ortes (x,y) auf der Oberfläche konstant gehalten. Das dazu benötigte Regelsystem ist die wichtigste Einheit der RTM-Elektronik und verdient ebenso große Beachtung wie der mechanische Aufbau.

Ganz allgemein umfaßt eine Regelung die in Abb. 3-1 dargestellten Elemente [47]:

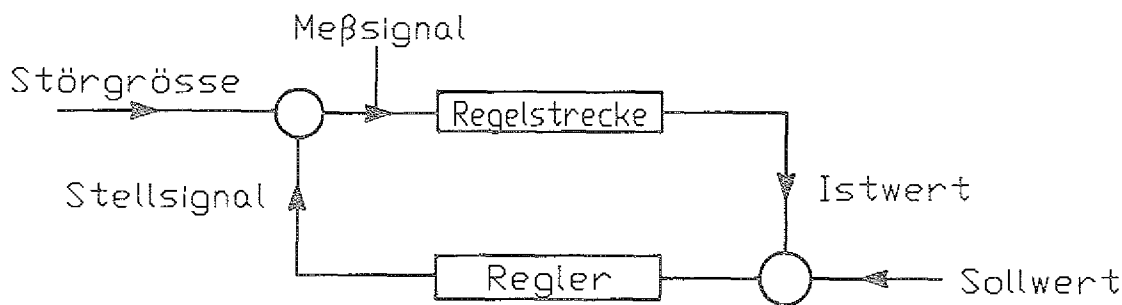


Abb. 3-1: Prinzipieller Aufbau eines Regelsystems.

Das Meßsignal ist der Tunnelstrom I als Funktion des Ortes (x,y,z) und der Tunnelvorspannung V , wobei für den Regelkreis die Abhängigkeit von der Normalkomponente z wesentlich ist. Der Tunnelstrom wird einer Regelstrecke zugeführt, die das Meßsignal in eine Spannung umwandelt. Dies ergibt einen Istwert, der die eigentliche Regelgröße darstellt. Dieser Istwert wird mit einem Sollwert verglichen, der den Tunnelstrom festlegt, bei dem getunnelt werden soll. Die Differenz zwischen Ist- und Sollwert wird einem Regler zugeführt, der ein Stellsignal in Form einer elektrischen Spannung an einen Piezoaktuator gibt, der durch Abstandsänderung der Nadel von der Oberfläche die Abweichung des Istwertes vom Sollwert ausregelt.

Die Aquisitionszeit für ein Bild ergibt sich aus der Zeit, die der Regelkreis benötigt, um bei einer sprunghaften Regelabweichung den vorgegebenen Sollwert wieder zu erreichen. Diese Einschwingzeit des Regelkreises an einem Rasterpunkt (x,y) kann nicht beliebig verringert werden, da ab einer bestimmten Grenzfrequenz die Rückkopplung des

Systems aufgrund der Phasenschiebung instabil wird [48]. Die maximale Grenzfrequenz ist durch die Grenzfrequenzen der einzelnen elektronischen Komponenten, die mechanische Resonanzfrequenz des Mikroskops und die kapazitiven Kopplungen zwischen Probe und Nadel bzw. zwischen Probe und z-Piezo bestimmt [49,50].

3.2 Aufbau des Mikroskopes

Der mechanische Aufbau des RTM folgt in seinen Grundzügen einer Konstruktion, die von K. Besocke entwickelt wurde [51]. Die wesentlichen Merkmale dieses Mikroskoptyps sind in Abb. 3-2 dargestellt.

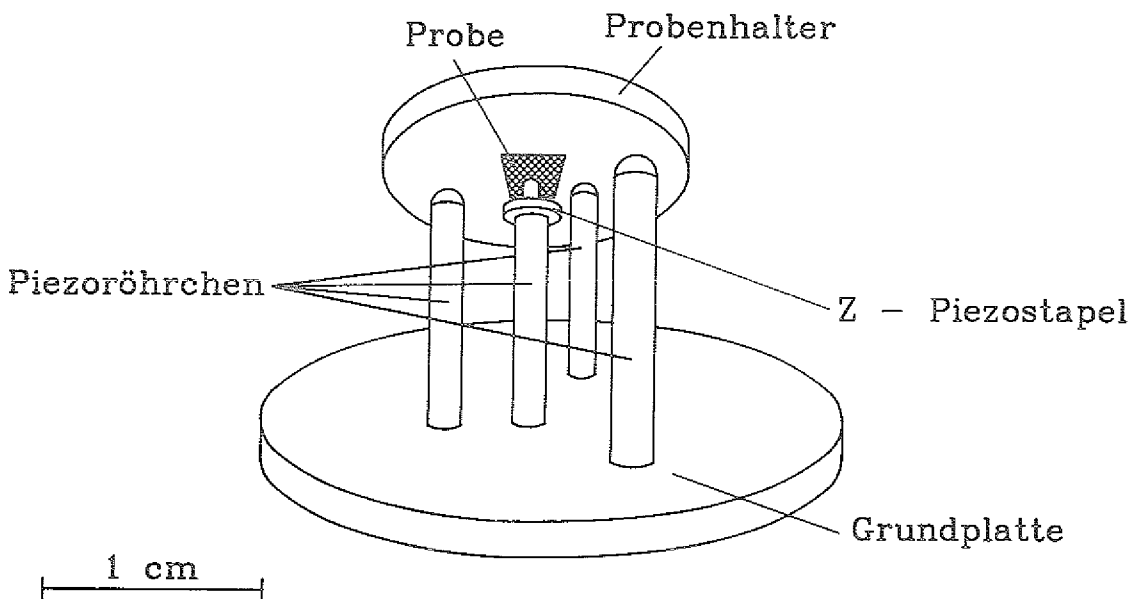


Abb. 3-2: Prinzipieller Aufbau des RTM.

Vier radial polarisierte Piezoröhrchen sind auf einer Grundplatte montiert. Die drei äußeren Röhrchen sind in Form eines gleichseitigen Dreiecks mit einer Kantenlänge von 12 mm auf der Grundplatte angebracht. Auf dem oberen Ende der Röhrchen sind drei Hartmetallkugeln aufgeklebt, auf denen die Probe abgelegt wird. Das Rasterröhrchen mit der Nadel ist in der Mitte dieses Dreiecks angebracht. Um die (x,y) Rasterbewegung

von der z-Bewegung zu entkoppeln, wurde auf das innere Röhrchen ein kleiner Piezostapel aufgebracht, in dessen Mitte die Nadel in einem speziellen Nadelhalter sitzt.

Diese Konstruktion besitzt gegenüber älteren Mikroskoptypen, wo Probe und Nadel voneinander getrennt angebracht waren [2,49], folgende Vorteile. Da Probe und Nadel auf vier auf einer Grundplatte montierten Röhrchen aus gleichem Material angebracht sind, ist das Mikroskop automatisch temperaturkompensiert, weil Temperaturschwankungen nicht zu einer Relativbewegung zwischen Nadel und Probe führen. Dies hat den großen Vorteil, daß während des Experiments nur ein geringes Wegdriften des untersuchten Probenbereichs erfolgen kann. Gegenüber Driftraten von einigen nm/min bei RTMs mit separat angebrachter Nadel und Probe liegen bei diesem Mikroskop die beobachteten Driftraten im Bereich von nur einigen nm/Tag [52]. Ein weiterer Vorteil des symmetrischen Aufbaus ist die relativ geringe Empfindlichkeit des Instruments gegenüber niederfrequenten mechanischen Störungen, da sich bei diesen Probe und Nadel in Phase bewegen. Wegen seines kompakten Aufbaus ist dieses RTM unempfindlich gegen Schallankopplung, zumal diese beim Einsatz im Vakuum nur über die Wand der Vakuumkammer erfolgen kann. Die Konstruktion der Rastereinheit, bestehend aus Röhrchen und Piezostapel, ermöglicht Rasterfrequenzen von durchschnittlich 20 Hz im Konstantstrom-Betrieb, so daß man für die Aufnahme eines Bildes von 512×512 Punkten weniger als 30 Sekunden benötigt. Dies ist um mehr als eine Größenordnung besser als die Aquisitionszeiten, die für konventionelle (x,y,z) Piezo-Dreibein-Rastervorrichtungen angegeben werden [52].

Der Aufbau eines Piezoröhrchens ist in Abb. 3-3 dargestellt. Das Röhrchen ist außen und innen metallisiert, wobei die Innenmetallisierung am unteren Ende des Röhrchens nach außen herumgeführt ist. Die Außenmetallisierung ist entlang von vier vertikalen Linien, die jeweils um 90° versetzt sind, entfernt worden, so daß man vier separate Elektroden erhält. Die Innenmetallisierung liegt zusammen mit dem Mikroskop auf Masse.

Legt man an zwei gegenüberliegenden Elektroden jeweils eine positive und eine negative Spannung an, so zieht sich aufgrund der radialen Polarisierung der eine Teil zusammen, während der andere gestreckt wird. Es erfolgt also eine Biegung des Röhrchens, die effektiv aufgrund der verschiedenen Längenskalen (Biegung im nm Bereich, Länge des Röhrchens 10 mm) einer horizontalen Bewegung entspricht.

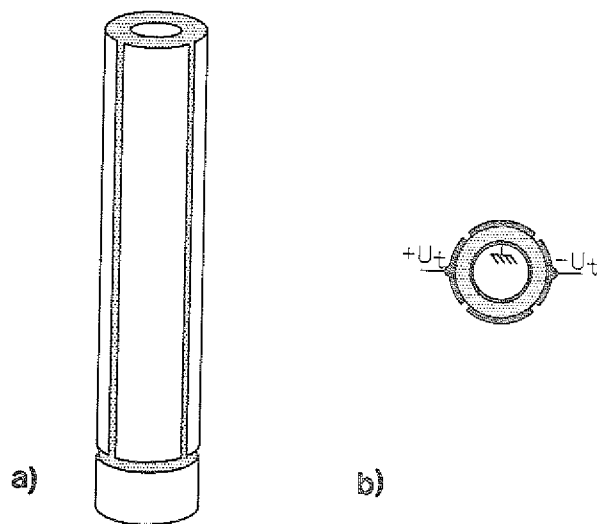


Abb.3-3: Aufbau eines Piezoröhrchens: a) Ansicht; b) Querschnitt.

Die mit einem Sloan-Dektak Profilmeßgerät gemessenen Auslenkfaktoren der hier verwendeten Piezoröhrchen [53] betrugen im Biegemodus 10nm/V , so daß eine Versorgungsspannung von $\pm 15\text{V}$ eine genügend große Auslenkung ergibt. Das dynamische Verhalten der Röhrchen wurde mit einem Laser-Heterodyn-Interferometer gemessen. Die niedrigste Resonanzfrequenz der Röhrchen im unbelasteten Zustand betrug $\sim 20\text{kHz}$. Bei einer Auslenkfrequenz von 10kHz wurde die Linearität der Auslenkung für Spannungen zwischen 0.1V und 20V gemessen; es wurden keine Abweichungen von dieser festgestellt.

Da Piezokeramiken oberhalb der Curietemperatur depolarisieren, wurde die Temperaturfestigkeit der Auslenkung überprüft. Nach mehrmaligem 24-stündigem Aufheizen der Röhrchen auf 200°C wurde keine Verringerung der Auslenkung durch eine eventuelle Depolarisation festgestellt, d.h. die Piezokeramiken überstehen unbeschadet die für das UHV notwendigen Ausheiztemperaturen von 180°C .

Die äußeren Röhrchen dienen zur Feinpositionierung der Probe gegenüber der Nadel. In vertikaler Richtung erlauben sie eine Höhenjustierung von 200nm bei einer Versorgungsspannung von $\pm 50\text{V}$. In horizontaler Richtung kann man während des Rasterns

durch Anlegen geeigneter Offsetspannungen an die äußeren Röhrrchen die Probe gegenüber der Nadel um maximal $1\text{ }\mu\text{m}$ in (x,y) verschieben, um so bei atomarer Auflösung (typische Rasterweite: $10\times 10\text{ nm}^2$) innerhalb eines Bereiches von $1\times 1\text{ }\mu\text{m}^2$ verschiedene Bereiche auf der Oberfläche anschauen zu können. Des weiteren ist man in der Lage, durch Anlegen entsprechender Spannungssignale an die äußeren Röhrrchen die Probe im UHV in jede beliebige Richtung zu bewegen. Das Prinzip ist in Abb. 3-4 skizziert.

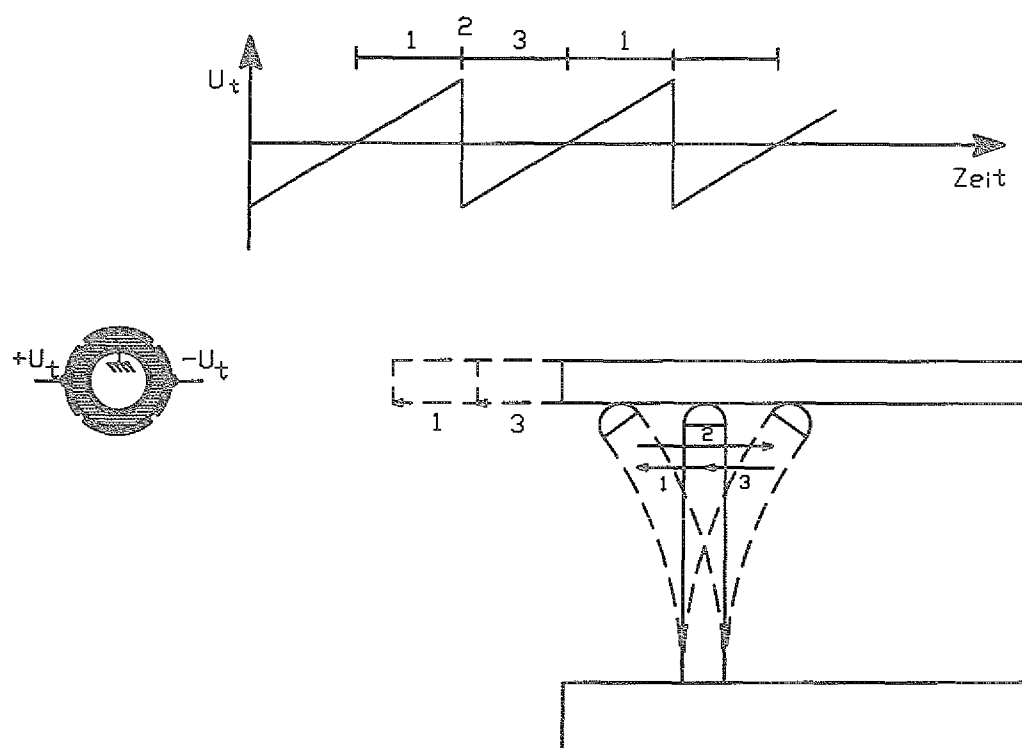


Abb. 3-4: Verschiebung der Probe im UHV mit Hilfe der äußeren Piezoröhrrchen [51].

An zwei gegenüberliegenden Elektroden eines Röhrrchens wird eine Sägezahnspannung angelegt. Auf der langsam ansteigenden Flanke der Spannung verbiegt sich das Röhrrchen mit dem daraufliegenden Probenhalter. Ist die abfallende Flanke des Sägezahns steil genug, so kann der Probenhalter der Bewegung des Röhrrchens nicht mehr folgen und bleibt aufgrund seiner Trägheit an der Stelle liegen. Auf diese Weise kann man die Probe in Schrittweiten zwischen 5 nm und 100 nm mit Geschwindigkeiten bis zu $10\text{ }\mu\text{m/s}$ bewegen. Das Verschieben der Probe im UHV erwies sich bei der Untersuchung von Spaltproben als sehr sinnvoll. Oft wiesen die Spaltoberflächen lokale Unterschiede

in der Spaltqualität auf, so daß die Nadel durch Verschieben der Probe über einen Oberflächenbereich mit guter Spaltqualität positioniert werden konnte.

Das innere Röhrchen dient zur (x,y,z) Positionierung der Nadel. Die (x,y) Positionierung erfolgt wiederum über den Biegemodus. Bei Auslenkfaktoren von 10 nm/V beträgt der maximal abtastbare Oberflächenbereich $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ bei einer Versorgungsspannung von $\pm 50 \text{ V}$. Da die Piezoröhrchen oft Wanddickenunterschiede von bis zu 10% aufweisen, schien es wenig ratsam, neben der (x,y) Rasterbewegung auch die z-Bewegung mit ihnen auszuführen. Aufgrund der Wanddickenunterschiede dehnt sich das Röhrchen nicht senkrecht aus, sondern erfährt immer eine gewisse Verbiegung bei der Vertikalauslenkung, die bei atomarer Auflösung gering ist. Überlagert man aber der z-Bewegung die wesentlich größere (x,y) Bewegung, so kommt es zu einem Übersprechen zwischen der Horizontal- und Vertikalauslenkung. Um dies zu verhindern, wurde auf das innere Röhrchen ein 0.8 mm hoher und 4 mm breiter z-Piezostapel aufgeklebt, mit dem die Vertikalauslenkung der Nadel ausgeführt wird.

Eine andere Möglichkeit zur separaten Ausführung der z-Bewegung bestünde darin, die Rasterbewegung mit den äußeren Röhrchen auszuführen und das innere Röhrchen nur für die z-Bewegung zu verwenden. Dabei aber muß der ganze Probenhalter mit Probe bewegt werden. Dies führt zu Problemen an den Umkehrpunkten der Rasterbewegung, da der Probenhalter ihr aufgrund seiner Trägheit nicht folgen kann. Außerdem ist die Resonanzfrequenz der äußeren Röhrchen durch das Gewicht unseres Probenhalters auf ungefähr 3 kHz herabgesenkt [42], was während des Rasterns besonders in den Umkehrpunkten zum Anregen von Schwingungen führen kann.

Der z-Piezostapel besteht aus vier 0.2 mm dicken Piezoplaten [54], die auf beiden Seiten mit speziell gering ausgasendem Leitsilberepoxy [55] kontaktiert und zusammengeklebt wurden (Abb. 3-5). Für den Nadelhalter wurde in die Mitte des Piezostapels ein 1 mm breites Loch gebohrt. Die beiden Außenflächen des Stapels und seine mittlere Fläche sind miteinander elektrisch verbunden und bilden die Außenelektrode, die aus Abschirmungsgründen auf Masse gelegt wird. Die Innenelektrode, an der die z-Piezospannung angelegt wird, besteht aus den beiden Flächen, die unmittelbar unterhalb der Außenflächen liegen. Sie sind am Rand ebenfalls miteinander durch Leitsilberepoxy verbunden. Die Auslenkung des Stapels wurde wiederum mit dem Sloan-Dektak

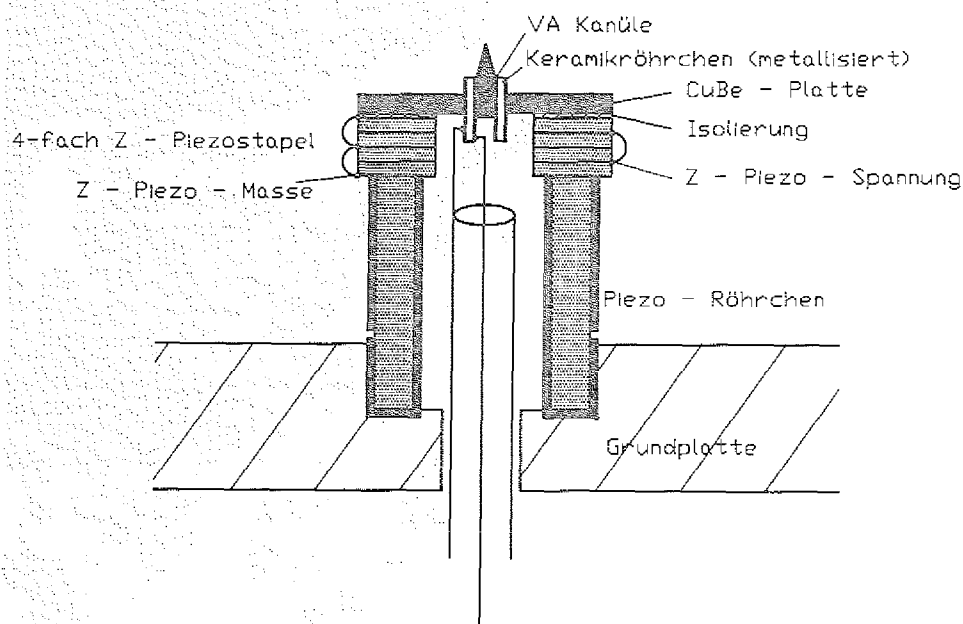


Abb.3-5: Aufbau des Rasterröhrchens mit z-Piezostapel und Nadelhalter.

Profilmeßgerät gemessen; sie beträgt 1 nm/V. Die Linearität der Auslenkung wurde mit dem Laser-Heterodyn Interferometer überprüft. Bei Spannungen zwischen 0.2 V und 20 V wurde keine Abweichung von der Linearität festgestellt. Die Resonanzfrequenz des Stapels für den Streckmodus liegt bei 100 kHz, also weit über der Resonanzfrequenz des Biegemodus des Rasterröhrchens.

Die Halterung der Nadel besteht aus einer Hartmetallkanüle, die in ein Keramikröhrchen eingeklebt ist, dessen Außenwand metallisiert ist. Das Keramikröhrchen wird in eine Bohrung eines CuBe-Plättchens eingeklebt und mit diesem elektrisch leitend verbunden. Der Tunnelstromdraht ist mit Leitsilberepoxy an der Kanüle befestigt und zur Abschirmung mit einem Draht umwickelt, der an die Außenmetallisierung des Keramikröhrchens angebracht ist. Damit soll ein kapazitives Übersprechen von z-Piezo- oder Rasterspannungen auf das hochohmige Tunnelstromkabel vermieden werden. Die CuBe-Platte mit dem Nadelhalter wird isoliert auf den z-Piezo aufgeklebt, um die Abschirmmassen von Nadel und z-Piezo voneinander zu isolieren.

Abb.3-6 zeigt ein Photo des Mikroskops mit den oben beschriebenen Baueinhei-

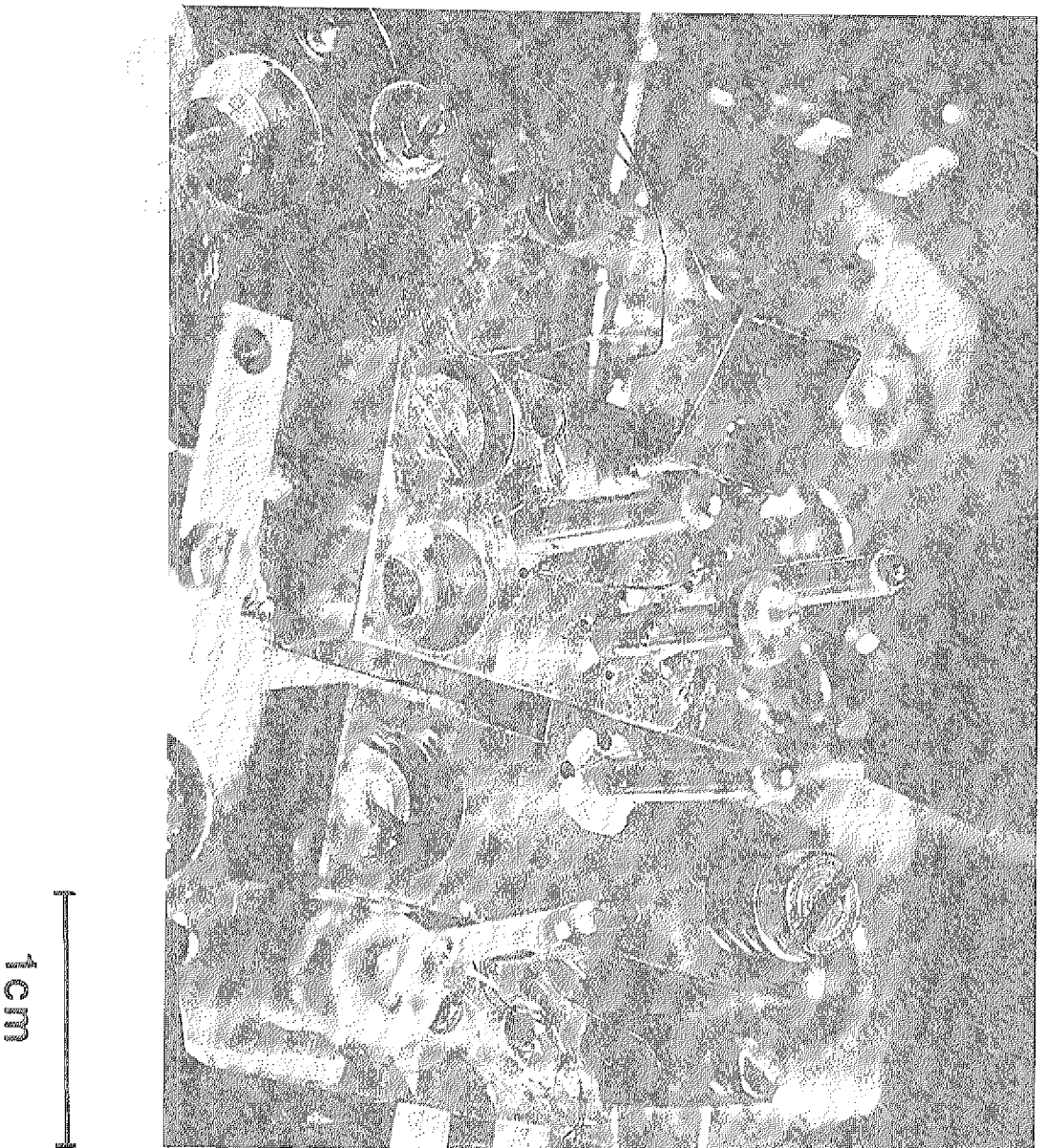


Abb. 3-6: Aufnahme des aufgebauten RTM.

ten. Auf der linken Seite erkennt man ein Siliziumplättchen, das als Umlenkspiegel wirkt. Man kann damit bei aufgelegter Probe von oben durch ein Lichtmikroskop eine Grobpositionierung der Probe vornehmen.

Die Grobannäherung der Nadel an die Probe erfolgt mechanisch. Wie Abb. 3-6 zeigt, ist die Grundplatte, auf dem die Röhren angebracht sind, zweigeteilt. Das Rasterröhrchen mit der Nadel und zwei der Außenröhren sind auf der linken Platte montiert; das dritte Außenröhrchen ist separat auf der rechten Platte eingeklebt. Eine Seite dieser Platte ist an die sich darunter befindende VA-Platte festgeschraubt, während die andere

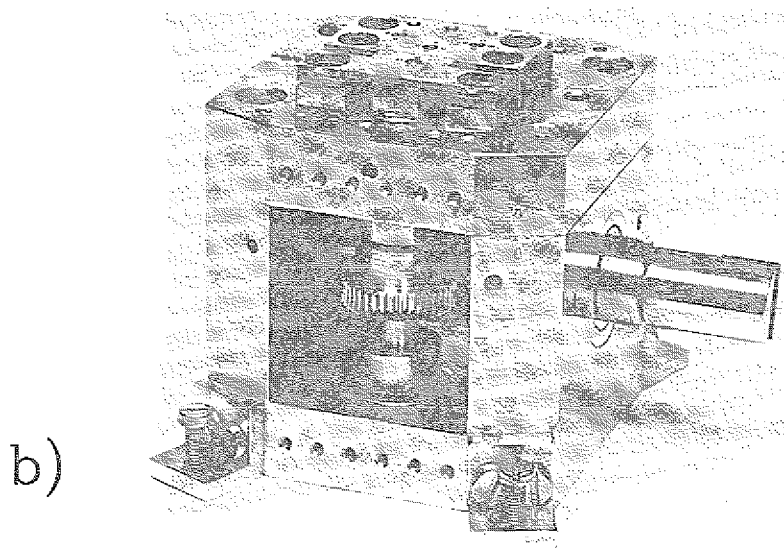
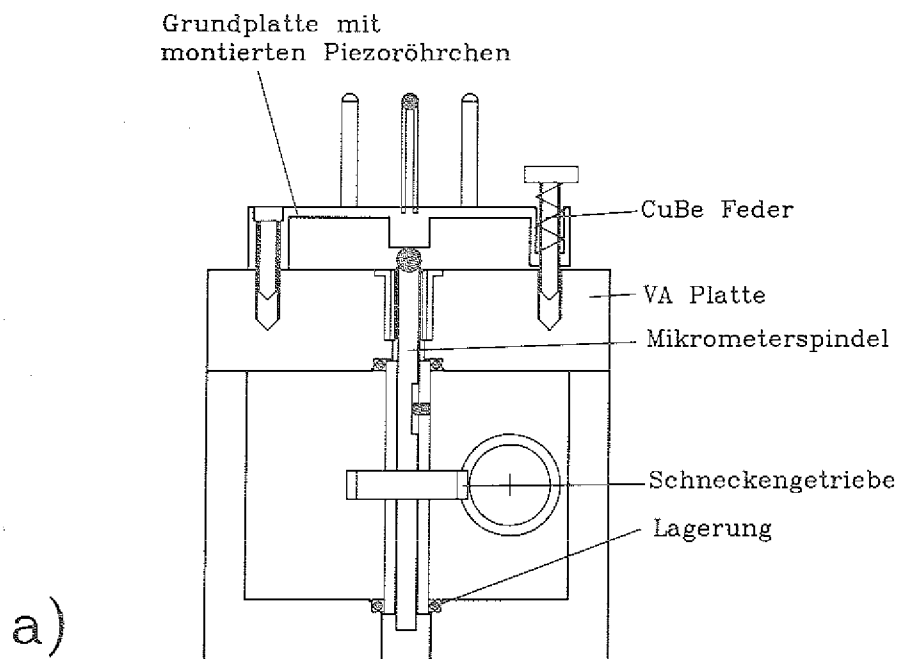


Abb.3-7: a) Konstruktion der Grobännäherung; b) Photo des Unterbaus. Die Piezoröhrchen waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht montiert.

nur mit Hilfe einer CuBe-Feder an die VA-Platte angedrückt wird. Die so befestigte Platte ist an beiden Enden angeschlitz, um eine zusätzliche Federwirkung zu erzielen (Abb. 3-7). Sie kann von unten mit einer Hartmetallkugel, die auf einer Mikrometerspindel ruht, um 2 mm auf- und abbewegt werden. Der Innentrieb der Mikrometerspindel ist mit einem Schneckengetriebe verbunden, das seitwärts an eine UHV-Drehdurchführung ankoppelt, die mit einem Schrittmotor von außen gedreht werden kann. Mikrometerspindel und Schneckengetriebe ergeben eine Übersetzung von 1:80. Bei einer Drehung der Drehdurchführung in 1°-Schritten ergibt sich eine Höhenänderung des äußeren Röhrchens um 35 nm pro Grad. Dies bewirkt an der Stelle der Nadel eine Abstandsänderung um 10 nm. Der Gesamthub der Grobannäherung zwischen Probe und Nadel beträgt 0.5 mm, d.h. Spaltoberfläche und Nadel müssen mit einer Genauigkeit von ungefähr 0.3 mm vorpositioniert werden. Erfolgt die Grobannäherung durch langsames Drehen per Hand, so zieht eine Elektronik beim ersten Tunnelkontakt durch Anlegen einer Spannung an den z-Piezostapel die Nadel sofort zurück. Die Feinannäherung erfolgt dann mit Hilfe der äußeren Röhrchen. Bei Verwendung des Schrittmotors erfolgt die Annäherung in 0.5° Schritten. Nach jedem Schritt wird eine Rampenspannung an die äußeren Röhrchen angelegt, die die Probe um 100 nm der Nadel nähert. Wenn kein Tunnelkontakt erfolgt, wird der nächste Schritt ausgeführt. Nach der Grobannäherung kann die Drehdurchführung vom Schneckengetriebe entkoppelt werden, um eine direkte Verbindung zwischen RTM und Vakuumkammer zu vermeiden.

Das gesamte RTM ruht auf vier VA-Ringen unterschiedlicher Masse, zwischen denen sich Viton-Stücke [56] befinden. Dies stellt einen Tiefpaßfilter 4. Ordnung dar, der hochfrequente Schwingungen wie z.B. Schall, der an die Kammerwand ankoppelt, dämpft.

Das gesamte Mikroskop mit Probenhalter hat seine niedrigste Resonanzfrequenz bei ungefähr 3 kHz. Diese ist durch das Gewicht des Probenhalters bedingt, der die Resonanzfrequenz der äußeren Röhrchen im Biegemodus auf den obigen Wert herabsenkt.

3.3 Die Elektronik

Die Elektronik zur Regelung und Steuerung des RTM sowie zur Datenerfassung gliedert sich in fünf separate Baueinheiten:

- den Rastergenerator zu Ablaufsteuerung;
- die Regelektronik zur Strommessung, Abstandsregelung und Datenaufbereitung;
- die Rasterelektronik zu separaten Ansteuerung der Piezoröhrchen;
- die Elektronik zur Erzeugung der Tunnelvorspannung für verschieden Betriebsarten;
- den Rechner zur Bildspeicherung und Datenaufbereitung.

Der Rastergenerator erzeugt die (x,y) Rasterspannungen mit wählbarer Rasterfrequenz sowie die Steuerpulse für die Bildaufnahme und für die verschiedenen Betriebsarten des Mikroskops.

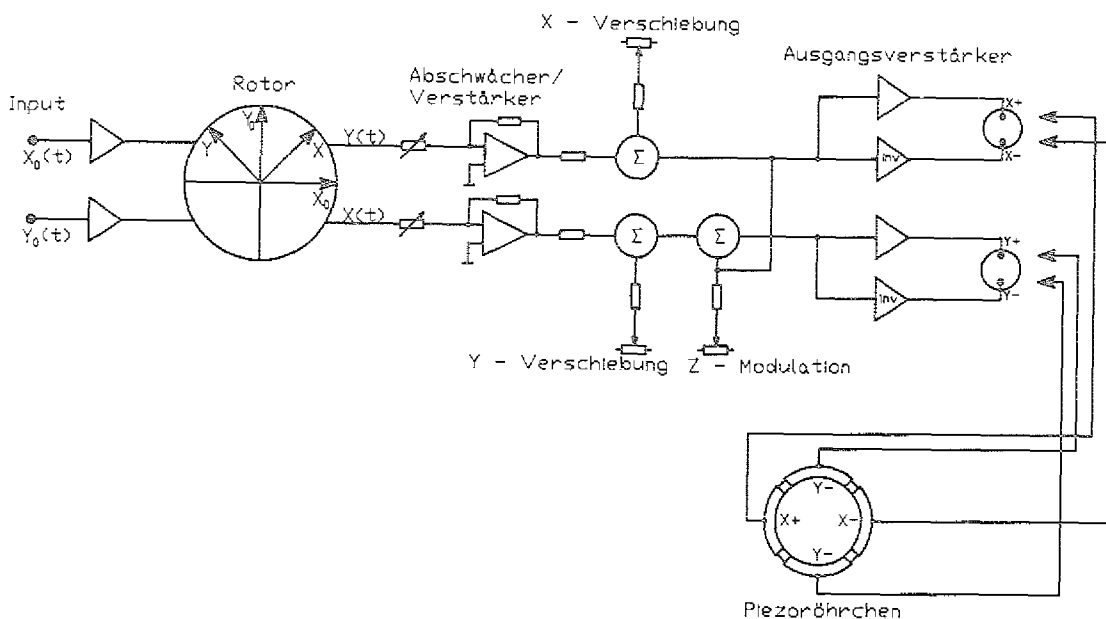


Abb. 3-8: Aufbau der Ansteuerung des Rasterröhrchens.

Die Rasterspannungen gehen zur Rasterelektronik, die das Rasterröhrchen bzw. die Außenröhrchen ansteuert; sie ist für beide Fälle symmetrisch aufgebaut. Die Ansteuerung des Rasterröhrchens ist schematisch in Abb. 3-8 gezeigt.

Die beiden von dem Rastergenerator erzeugten Ablenkspannungen V_x und V_y können

variabel abgeschwächt bzw. verstärkt werden. Damit lassen sich Rasterfenster variabler Größe zwischen $1 \times 1 \text{ nm}^2$ und $1 \times 1 \text{ } \mu\text{m}^2$ wählen. Der nachfolgende Rotor (oder sin-cos Potentiometer) ermöglicht das variable Drehen der Rasterrichtung. Dies erwies sich bei den GaAs-Proben von großem Vorteil, da die Probenoberfläche bedingt durch die Justage und die Grobannäherung oft eine leichte Neigung ($\sim 1^\circ - 3^\circ$) zur Nadel aufweist. Diese Neigung ist im RTM-Bild der wesentlich geringeren atomaren Korrugation überlagert, so daß letztere im Bild kaum noch sichtbar ist. Durch Drehung der Rasterrichtung läßt sich das langsam variierende z-Piezo-Signal aufgrund der Oberflächenneigung parallel zur y-Auslenkung der Nadel legen. Da diese wesentlich langsamer erfolgt als die x-Auslenkung, kann man solche Bildschrägen durch eine Hochpaßankopplung (Zeitkonstante 0.1-1 s) des z-Piezsignals an die Bildaufnahme abfiltern. Des weiteren ermöglicht das Drehen der Rasterrichtung eine schnelle Unterscheidung zwischen periodischen z-Piezsignalen als Folge äußerer Störungen oder der atomaren Korrugation der Oberfläche. Im letzteren Fall ändert sich deren Richtung mit Drehung der Rasterrichtung.

Hinter dem Rotor lassen sich variable Offsetspannungen aufaddieren, die so ein Verschieben des Rasterfensters in einem Bereich von $1 \times 1 \text{ } \mu\text{m}^2$ in beliebiger Richtung ermöglichen. Dies erleichtert zum einen erheblich die systematische Suche nach Versetzungen durch diagonales Verschieben des Rasterausschnittes; zum anderen können bei atomarer Auflösung interessante Details in die Bildmitte geschoben werden.

Den beiden Rasterspannungen kann hinter dem Rotor ein weiteres Modulationssignal aufaddiert werden (Z-Modulationseingang), das zwei Funktionen hat. Durch Anlegen einer Rechteckspannung erzielt man eine definierte Auslenkung des Rasterröhrchens, dem der z-Piezo folgen muß. Neben der Eichung der z-Achse ermöglicht dies ein Einstellen und Optimieren der Regelzeit im Konstantstrom-Betrieb. Des weiteren läßt sich in Verbindung mit der Tunnelspektroskopie statt der Tunnelvorspannung der Abstand der Nadel von der Oberfläche modulieren und die damit verbundene Stromänderung aufnehmen. Nach Gleichung 1 ist die Ableitung des Tunnelstroms nach dem Tunnelabstand proportional zur Wurzel aus der lokalen Austrittsarbeit Φ . Man kann also durch Aufnahme von Strom-Abstandskennlinien ($I(d)$ -Kennlinien) lokal die Austrittsarbeit bestimmen oder mit Hilfe eines Lock-In Verstärkers, dem das Tunnelstromsignal zugeführt wird, die Ableitung des Tunnelstroms nach dem Tunnelabstand als Funktion

des Ortes (x,y) messen und damit orts aufgelöst Änderungen in der Austrittsarbeit z.B. an Stufen bestimmen.

Am Ausgang der Rasterelektronik wird die jeweilige Ablenkspannung zusätzlich invertiert und kann durch Hochspannungsverstärker wahlweise um das fünffache symmetrisch verstärkt werden. Das maximale Rauschen der Ausgangsverstärker bei angeschlossenen Piezoröhrchen liegt je nach Verstärkerstufe bei 0.5 mV bei einer Ausgangsspannung von maximal ± 10 V bzw. bei 1 mV bei einer Ausgangsspannung von ± 50 V. Begrenzt man die Bandbreite der Ausgangsverstärker auf 20 kHz, wo die erste Resonanzfrequenz der Piezoröhrchen im Biegemodus liegt, so verringert sich das Ausgangsrauschen auf ein Fünftel, so daß bei Auslenkfaktoren von 10 nm/V die Bewegungen des Röhrchens aufgrund des Rauschens der Ausgangsverstärker kleiner als 0.01 nm sind. Die symmetrischen Ausgangsspannungen werden in der Vakuumkammer mittels 50 μ m dicker, verdrehter und Kaptonisolierter Drähte den Röhrchen zugeführt. Die Verdrehung verhindert ein Übersprechen der Signale auf andere Zuführungen.

Der wichtigste Teil der Elektronik ist die Regelektronik, die schematisch in Abb. 3-9 dargestellt ist. Sie besteht aus zwei Baueinheiten: dem Vorverstärker, der den Tunnelstrom in eine Spannung wandelt, und der Regeleinheit, die den Tunnelstrom konstant regelt und die Ausgangsspannung für den z-Piezo liefert. Der Vorverstärker besteht aus einem speziellen Operationsverstärker mit hochohmigem Eingang [57], der als Strom-Spannungswandler arbeitet. Bei einem Feedbackwiderstand von 1 M Ω ergeben sich für Tunnelströme von 0.1 - 1 nA Ausgangsspannungen von 0.1 - 1 mV, die in einer nachgeschalteten zweiten Verstärkerstufe um einen Faktor 100 verstärkt werden. Aufgrund des hochohmigen Tunnelwiderstands sollten die Kabelkapazitäten zwischen Nadel und Vorverstärker möglichst klein gehalten werden, um eine möglichst hohe Grenzfrequenz des Operationsverstärkers zu gewährleisten. Kleine Kabelkapazitäten lassen sich durch eine kurze Leitungsführung erzielen. Deshalb wurde der Vorverstärker direkt an einer isolierten BNC-Buchse in einem Abstand von 5 cm zur Nadel an der UHV-Kammer angebracht, was bei einer Kabelkapazität von 12 pF eine Grenzfrequenz von 30 kHz ergibt. Um ein Übersprechen von Rastersignalen auf das hochohmige Tunnelstromkabel zu vermeiden, wurde dieses isoliert in einem VA-Röhrchen verlegt.

Um während der Tunnelspektroskopie das kapazitive Übersprechen zwischen Probe

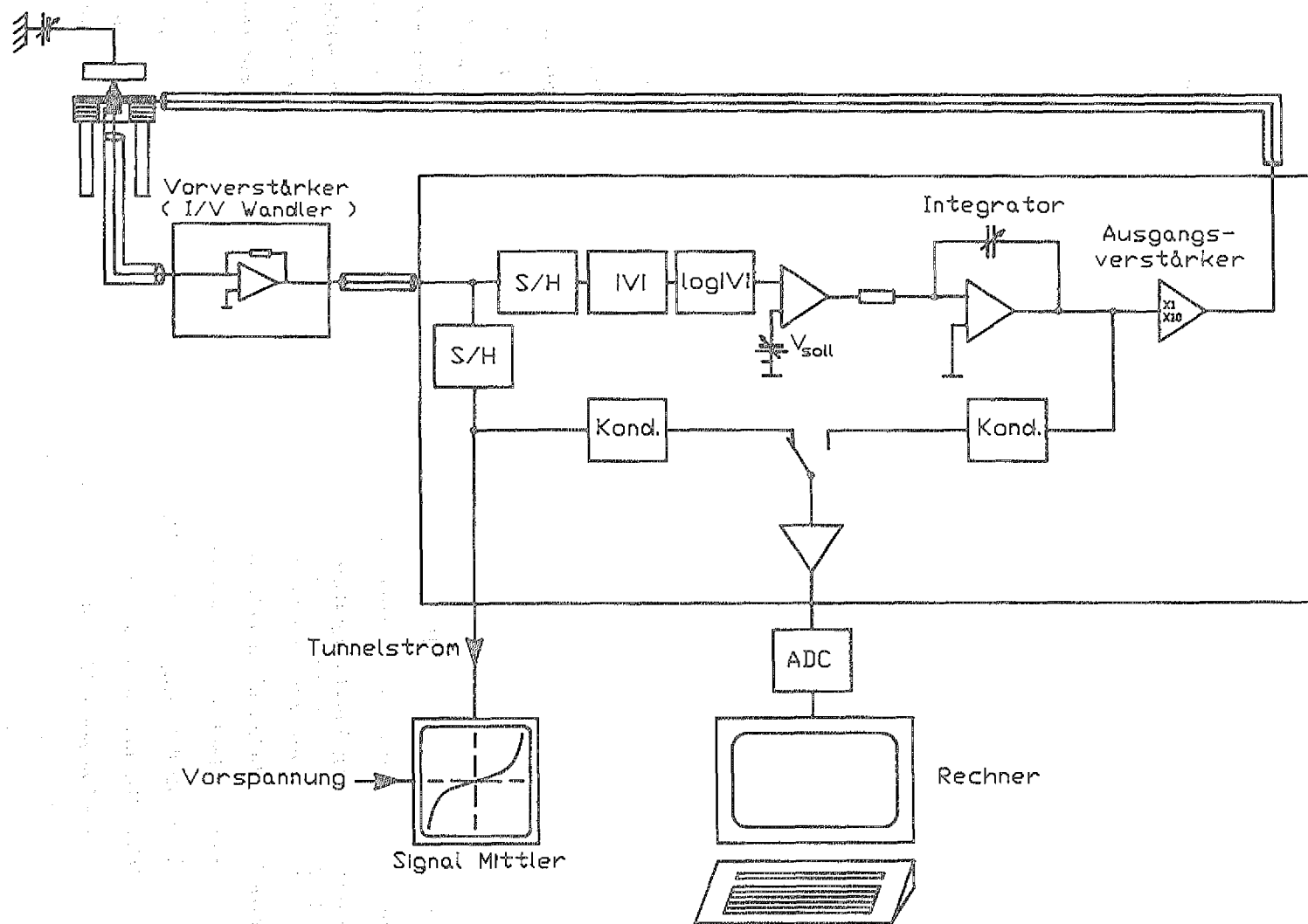


Abb.3-9: Aufbau des Regelkreises.

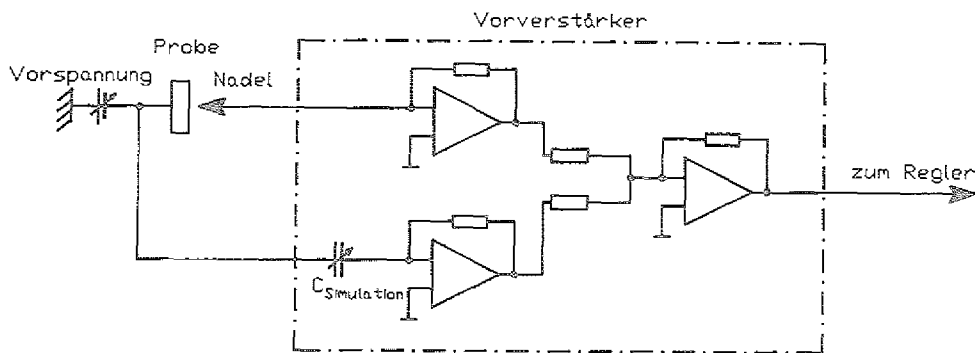


Abb.3-10: Aufbau der Kompensationseinheit.

und Nadel bei Änderung der Tunnelvorspannung zu verringern, wurde eine Kompensations-einheit in den Vorverstärker integriert. Die Tunnelvorspannung wird über eine variable Kapazität, die im Idealfall den gleichen Wert hat wie die Kapazität zwischen Nadel und Probe, auf den Eingang eines identischen Operationsverstärkers gelegt (Abb. 3-10). Die Kapazität zwischen Nadel und Probe wird weitgehend durch die Geometrie von Spitze plus Halterung und Probe bestimmt und ändert sich bei einer Abstandsänderung nicht. Für unser Mikroskop hat sie einen Wert von ~ 0.1 pF. Während der Operationsverstärker für den Tunnelstrom sowohl den resistiven Tunnelanteil als auch den kapazitiven Anteil vom Übersprechen verstärkt, wird über die Simulationskapazität am zweiten Operationsverstärker nur der kapazitive Anteil verstärkt. Subtrahiert man die Ausgänge beider Operationsverstärker, so läßt sich der Anteil am gemessenen Strom als Folge des kapazitiven Übersprechens weitgehend unterdrücken. Bei Anlegen einer Rechteckspannung als Tunnelvorspannung beträgt das kapazitive Übersprechen am Vorverstärkerausgang ~ 100 mV mit einer Zeitkonstanten von $2 \mu\text{s}$. Ohne Kapazitätskompensation beträgt das Übersprechen 5 V mit einer Zeitkonstanten von 0.5 ms.

Hinter dem Vorverstärker folgt die eigentliche Regeleinheit bestehend aus Betrag-logarithmierer, Vergleichler und Integrator. Da der Tunnelstrom je nach Polarität der Vorspannung sein Vorzeichen wechselt, wird vor dem Logarithmierer der Absolutbetrag gebildet. Das Logarithmierungsglied linearisiert die Regelstrecke und liefert eine Regelgröße,

die proportional zum Abstand ist. Der Vergleich bildet die Differenz dieses Signals mit einer eingestellten Sollspannung U_0 . Diese Differenz entspricht der Regelabweichung des durch U_0 vorgegebenen Sollabstands vom Istabstand bzw. des Sollstroms vom Tunnelstrom. Dieses Fehlersignal wird dann dem Rückkopplungsverstärker zugeführt, der aus einem Integrator mit variabler Zeitkonstante besteht (I-Regler [47]). Das Stellsignal wird über einen Ausgangsverstärker dem z-Piezostapel zugeführt, wobei der I-Regler durch die Piezoauslenkung den Istabstand der Nadel von der Oberfläche so einregelt, daß die Abweichung vom Sollabstand minimal wird.

Bei einer Versorgungsspannung von ± 15 V bzw. ± 50 V beträgt die maximale Vertikalauslenkung des z-Piezostapels 30 nm bzw. 100 nm. Das Ausgangssignal des Integrators wird über einen Konditionierer, der das Signal der Bildaufnahmeelektronik anpaßt, über einen AD-Wandler dem Rechner zugeführt, der zusammen mit den Steuerpulsen des Rastergenerators (Pixel-, Zeilen- und Bildtaktimpuls) das RTM-Bild aufbaut.

Die Grenzfrequenz des Regelkreises, d.h. die Frequenz, bei der die Regelung instabil wird, ist durch die mechanische Resonanzfrequenz des RTM bestimmt, da sie mit 3 kHz die niedrigste Anregungsfrequenz hat. Die Grenzfrequenzen der einzelnen elektronischen Komponenten liegen um mindestens einen Faktor 10 darüber.

In der Praxis ergaben sich je nach Stabilität der Tunnelspitze für den stabilen Betrieb des Regelkreises Einschwingzeiten von 2 ms - 0,5 ms, so daß die durchschnittliche Aquisitionszeit für ein Bild bestehend aus 512x512 Pixeln zwischen 2 Min und 30 Sek. liegt.

Die Regelelektronik wurde in Form von einzelnen Einschüben modular aufgebaut, so daß die Platinen einzelner Komponenten nach dem Testen separat modifiziert werden konnten. Nachdem die Elektronik den RTM-Betrieb bei stabiler atomarer Auflösung ermöglichte, wurde die Elektronik für die lokale Tunnelspektroskopie implementiert.

Dazu wurde hinter dem Vorverstärker ein Sample-and-Hold (S/H)-Glied [39,47] in den Regelkreis eingebaut, das während der Spektroskopie in dem dafür erforderlichen Zeitintervall die Regelung ausschaltet und den Abstand der Nadel von der Probe auf einen konstanten Wert einfriert. Die minimale Akquisitionszeit für eine Strom-Spannungs-(I(U))-Kennlinie bestehend aus 2096 Punkten beträgt 2 ms. Die Stromwerte werden

über ein zweites S/H-Glied an einen Signalmittler [58] weitergegeben, der periodisch die $I(U)$ -Kennlinien lokal aufnimmt und automatisch über die aufgenommenen Kennlinien mittelt. Die gemittelten Spektren können dann von dem Rechner ausgelesen und weiterverarbeitet werden. Für ein Signal/Rauschverhältnis der Größenordnung 10 benötigt man 100 Kennlinien pro Ortskoordinate, was einer Aufnahmezeit von 200 ms für eine gemittelte Kennlinie entspricht.

Alternativ zur Aufnahme von $I(U)_{d=\text{const}}$ -Kennlinien an einem Punkt der Oberfläche lassen sich mit der derzeitigen Elektronik ein Bild bei aktivem Regelkreis mit einer Vorspannung U_0 und ein Strombild bei einer Vorspannung U_1 gleichzeitig aufnehmen. Dazu wird an jedem geradzahigen Pixelpunkt die Vorspannung von U_0 auf U_1 geändert und die Regelspannung auf den Wert U_0 eingefroren. Die Pixelpunkte mit ungeradzahigen Werten entsprechen dann dem RTM-Bild bei aktivem Regelkreis, die geradzahigen Pixelwerte hingegen dem Strombild. Die beiden Bilder können hinterher mit Hilfe des Rechners separiert werden. Mit dieser Aufnahmetechnik erhält man orts aufgelöste Strombilder für Tunnelvorspannungen, die in der Bandlücke des Halbleiters liegen oder entgegengesetzte Polarität zur Tunnelvorspannung bei aktivem Regelkreis haben.

Zusammengefaßt ermöglicht die derzeitige Elektronik folgende Betriebsarten:

- Konstantstrom-Bilder bei aktivem Regelkreis
- Konstantstrom-Bilder bei aktivem Regelkreis mit zeilenweiser Umschaltung der Tunnelvorspannung
- gleichzeitige Aufnahme eines Konstantstrom-Bildes bei aktivem Regelkreis und eines Strombildes bei frei wählbarer Vorspannung
- Aufnahme von lokalen $I(U)_{d=\text{const}}$ - und $I(z)_{U=\text{const}}$ -Kennlinien

Da die Tunnelspektroskopie erst gegen Ende der Doktorarbeit implementiert wurde, werden im Kap.6.1.2 nur einige Beispiele vorgestellt.

Aufnahme und Darstellung der Daten erfolgt mit einem IBM-PC-AT Rechner, der mit einer vom Zentralinstitut für Elektronik (ZEL) des Forschungszentrums Jülichs entwickelten Digitalsignalprozessorkarte [59] für schnelle Bildverarbeitung und einer hochauflösenden Graphikkarte [60] ausgerüstet ist. Die Programme zur Bildaufnahme und Bildauswertung wurden im Rahmen einer Doktorarbeit ebenfalls im ZEL entwickelt

[61]. In allen Bildern ist das Koordinatensystem so gewählt, daß die Bildzeilen parallel oder senkrecht zu den Rasterzeilen liegen. Die z-Koordinate wird durch eine Grauwerteskala mit 256 Werten dargestellt. Den Höhen werden hellere und den Senken dunklere Grauwerte zugeordnet, so daß ein anschauliches Bild entsteht. Alternativ dazu läßt sich die z-Piezoauslenkung durch Höhenlinien mit gefüllten Flächen darstellen, was einen besonders plastischen Eindruck der Oberfläche erzeugt.

3.4 Aufbau der RTM-Anlage

Um eine Kontamination der Spaltoberfläche durch die umgebende Atmosphäre zu vermeiden, muß das Tunnelexperiment unter Ultrahochvakuumbedingungen ($p \leq 10^{-7}$ Pa) durchgeführt werden. Des weiteren benötigt man eine Möglichkeit zur Probenpräparation sowie weitere Analysemöglichkeiten, um die Probe in Bezug auf ihre kristalline Beschaffenheit und chemische Zusammensetzung charakterisieren zu können.

Die UHV-RTM-Anlage wurde als Zweikammersystem, bestehend aus RTM- und Analysenkammer mit einer separaten Probenschleuse, konzipiert (Abb. 3-11). Dies ermöglicht den Spitzenwechsel beim RTM ohne gleichzeitige Belüftung der Probe, da diese während der Zeit des Spitzenwechsels und des anschließenden Ausheizens der RTM-Kammer in die Analysenkammer transferiert werden kann. Des weiteren wurde die RTM-Kammer so konzipiert, daß grundsätzlich die Möglichkeit besteht, das Mikroskop auf He-Temperatur im UHV abzukühlen. Um die gesamte Anlage möglichst unempfindlich gegen Ankopplung von akustischen Schwingungen zu machen und deren Eigenresonanzen zu erhöhen, wurden die Wände beider Kammern aus 5 mm dickem VA-Stahl gefertigt (üblich sind 2.5 mm).

Die Schleuse, die an die Analysenkammer angeflanscht ist, ermöglicht einen schnellen Probentransfer in die Analysen- oder RTM-Kammer ohne Unterbrechung des UHV. Sie wird mit einer Turbomolekularpumpe mit einem Saugvermögen von 200 l/s gepumpt, wobei Möglichkeiten zur Probenheizung und Spitzenpräparation integriert sind. Der Probentransfer geschieht mit Hilfe einer Magnettransferstange (Transferweg 1 m), die an die Schleuse angeflanscht ist.

In der Analysenkammer, die durch eine Ionengetterpumpe mit einem Saugvermögen

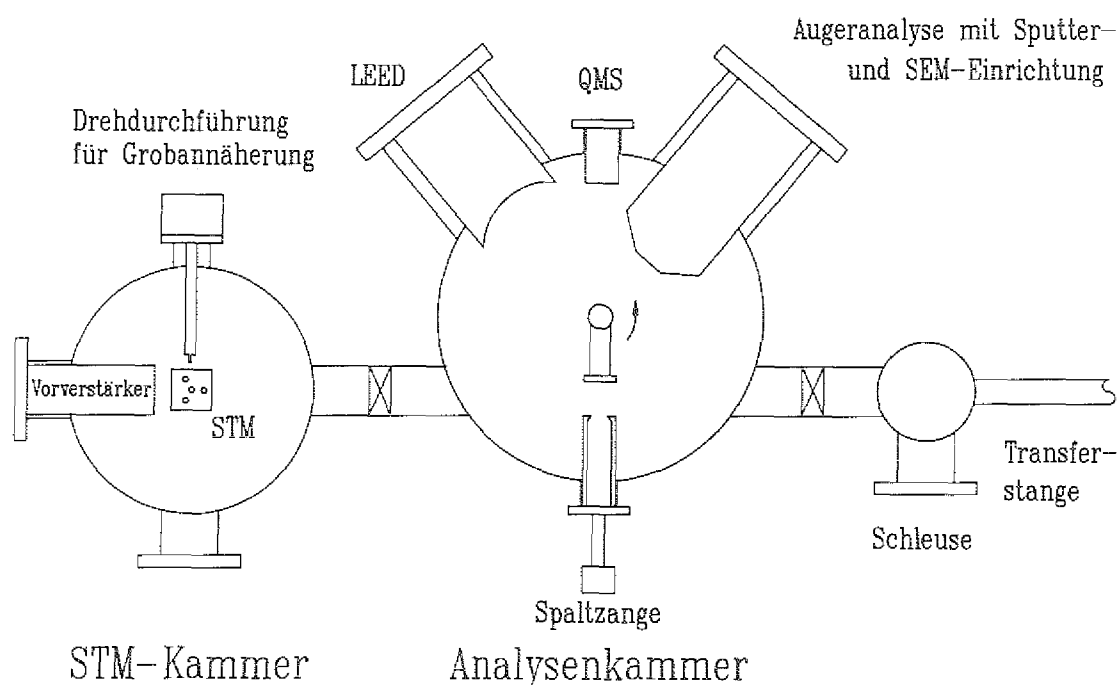


Abb. 3-11: Aufbau der UHV-RTM-Anlage.

von 400 l/s und eine Titanverdampferpumpe mit Stickstoffkühlfalle gepumpt wird, befinden sich eine selbstkonstruierte Spaltzange zur Probenpräparation, ein Quadrupolmassenspektrometer (QMS) und als Analyseeinrichtungen ein 3-Gitter LEED (Low-Energy-Electron-Diffraction) [62] und ein 10 kV-Zylinderspiegelanalysator (CMA) mit integrierter Elektronenkanone [63]. Das LEED System ermöglicht die Strukturuntersuchung der Oberfläche mittels niederenergetischer Elektronenbeugung [64] und erlaubt Aussagen über die kristalline Beschaffenheit der Oberfläche. Der CMA wird für die Augerelektronenspektroskopie (AES) [65] verwendet, mit dessen Hilfe die Oberfläche auf ihre chemische Zusammensetzung untersucht werden kann. Die Elektronenquelle des CMA ermöglicht mit einem seitlich von oben angebrachten Channeltron als Sekundärelektronendetektor den Betrieb eines einfachen Rasterelektronenmikroskops, mit

dem verschiedene Bereiche auf der Oberfläche lokalisiert und analysiert werden können. Außerdem ist eine Beurteilung der Spaltqualität der Oberfläche möglich. Mit einer ebenfalls seitlich von oben angebrachten Sputterkanone [66] kann man die Probe durch Beschuß mit Argon-Ionen reinigen. Mit Hilfe eines Fünfachsen-Manipulators [67] kann die Probe von der Transferstange übernommen und vor das LEED oder den CMA positioniert werden. Der Probenhalter wird auf dem Manipulator mittels zweier Molybdänklemmen auf eine Molybdänplatte geklemmt, die von hinten durch Elektronenstrahlbeschuß bis auf 1100° C aufgeheizt werden kann.

Die RTM-Kammer, die über ein Ventil mit einem kurzen Membranbalg mit der Analysenkammer verbunden ist, wird ebenfalls mit einer 230 l/s-Ionengetterpumpe und einer Titanverdampferpumpe mit Kühlschild gepumpt. In das Kühlschild sind sechs Kupferstäbe hart eingelötet, die zur Aufnahme des Stickstoffkühlschildes bei Abkühlung des Mikroskops dienen. Die Vorevakuierung nach dem Belüften erfolgt mittels zweier Sorptionspumpen.

Beide Kammern können mit Ausheizkästen separat ausgeheizt werden. Nach 24-stündigem Ausheizen bei einer Temperatur von 180° C und einer 24-stündigen Abkühlphase liegt der Druck in beiden Kammern unter 10^{-8} Pa. Die Restgasanalyse mit dem QMS zeigt in beiden Kammern ein UHV-typisches Massenspektrum mit H_2 , CO, CH_x , H als Restgaskomponenten, wobei die Reihenfolge abnehmender Intensität entspricht.

Die gesamte Anlage hat eine Masse von ca. 700 kg und wird von einem Rahmen aus Eisenträgern gehalten, der eine Grundfläche von ungefähr $0.6 \times 1.3 \text{ m}^2$ hat. Der Eisenrahmen hängt an einem weiteren Gerüst aus Eisenträgern, das auf vier pneumatischen Schwingungsdämpfern [68] ruht, die zwei Meter über dem Boden auf vier separate Kalksandsteinfundamente gestellt sind. Abb. 3-12 zeigt ein Photo der gesamten RTM-Anlage.

Die Schwingungsdämpfer mit einer vertikalen Resonanzfrequenz von 1 Hz und einer horizontalen Resonanzfrequenz von 2 Hz schirmen die Anlage gegen niederfrequente Gebäudeschwingungen ab. Der Auflagepunkt des Gerüsts befindet sich 1.3 m über dem Stahlrahmen, der in etwa die Schwerpunktshöhe der Anlage bildet. Dadurch wirkt die gesamte Aufhängung als starres Pendel, was die Anlage besonders unempfindlich gegen horizontale Störschwingungen von außen macht. Die gesamte Apparatur ist im Kel-



Abb.3-12: Die Aufnahme zeigt die UHV-RTM Anlage mit RTM Kammer links, der Analysenkammer mit Manipulator in der Mitte und der Schleuse mit Magnettransferstange rechts.

lergeschoß in einer elektromagnetisch abgeschirmten Kabine untergebracht, wobei die Kabine mit den Kalksandsteinfundamenten von einer Tieftemperaturanlage übernom-

men werden konnte.

Die Schwingungsdämpfung des RTM erwies sich im Experiment als sehr effektiv: Während pneumatische Schwingungsdämpfer eine niederfrequente externe Schwingungsdämpfung gewährleisten, sorgen durch Viton getrennte VA-Ringe im UHV für eine hochfrequente Dämpfung. Eine Störung in den RTM-Bildern durch Ankopplung externer Schwingungen wurde nicht festgestellt. Selbst vorbeifahrende LKWs - das Labor liegt direkt an einer Straße - sowie die im Keller gegenüber untergebrachten Notstromaggregate verursachten keine Störungen im Experiment. Auch die Ankopplung akustischer Schwingungen an die Kesselwand war so gering, daß keine Störungen als Folge von Klimaanlage oder Lüftern elektronischer Geräte bei RTM-Bildern mit atomarer Auflösung bemerkt wurden.

3.4.1 Der Probentransfer

Da die Querschnittsfläche der zu untersuchenden Proben zwischen $4 \times 4 \text{ mm}^2$ und $3 \times 3 \text{ mm}^2$ beträgt, benötigt man einen Probenhalter, mit dem die Probe auf das RTM abgelegt werden kann. Die Proben werden in der Mitte des Probenhalters in einer vier-eckigen Aussparung von der Seite mit einer VA-Schraube und einem sich dazwischen befindenden Goldblech festgeklemmt. Der Probenhalter hat auf der Oberfläche drei 4 mm breite und 0.3 mm tiefe, polierte Ausfräsungen. An diesen Stellen liegt der Probenhalter auf den Hartmetallkugeln der äußeren Röhrchen auf, über die die Tunnelvorspannung an die Probe angelegt wird. Die Ausfräsungen erleichtern ein Vorpositionieren des Probenhalters während des Transfers auf das RTM und verhindern, daß die Probe bei der Verschiebung auf dem RTM durch Anlegen der Transportpulse an die äußeren Röhrchen von diesen herunterfällt.

Auf beiden Seiten des Probenhalters befindet sich eine 2 mm breite Längsbohrung. Eine an der Transferstange befestigte Transportgabel wird bei der Probenaufnahme durch diese beiden Bohrungen des Probenhalters gesteckt. Die Transportgabel besteht aus zwei VA-Stäben, die sich zum vorderen Ende hin von 2 mm auf 0.5 mm Durchmesser verjüngen. Nach dem Spalten der Probe läßt sich der Probenhalter mit Hilfe eines Dorns auf den vorderen Teil der Transportgabel ziehen, wo er wegen des dünneren Durchmessers der VA-Stifte nur noch locker aufliegt. Die Probe wird dann in die Ho-

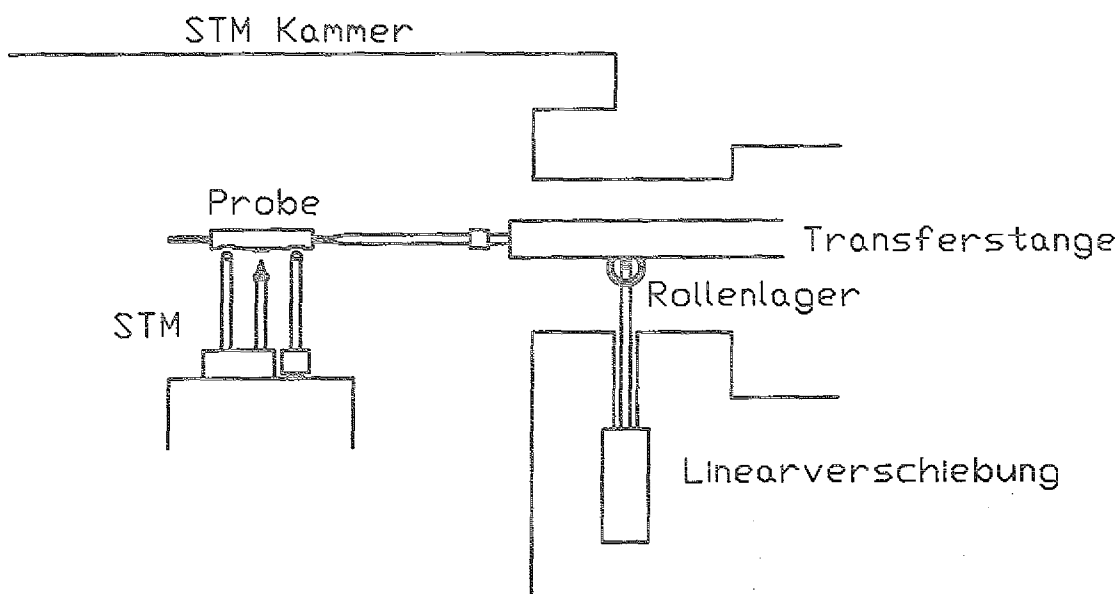


Abb. 3-13: Transport der Probe auf das Tunnelmikroskop.

horizontal gedreht und in die RTM-Kammer transferiert. Damit der Probenhalter über das RTM positioniert und abgelassen werden kann, befindet sich am Verbindungsrohr zur Analysenkammer eine von unten angebrachte UHV-Lineardurchführung, an deren Ende ein Zylinderrollenlager angebracht ist (Abb. 3-13). Dieses Rollenlager wird mit der Lineardurchführung von unten in eine Nut eingefädelt, die entlang der Transferstange eingefräst wurde. Es ermöglicht während des Hochschiebens der Transferstange eine leichte Vorwärtsbewegung und verhindert gleichzeitig eine unkontrollierte Drehung der Transferstange. Nach dem Positionieren der Probe über dem RTM wird die Transferstange mit der Lineardurchführung heruntergelassen, bis der Probenhalter auf den Hartmetallkugeln aufliegt und die 0,5 mm dünnen Enden der Transferstange frei in den Bohrungen des Probenhalters hängen. Die Transferstange kann dann ohne Gefahr in die Schleuse zurückgezogen werden. Beim Rücktransport in die Analysenkammer oder Schleuse verfährt man in umgekehrter Reihenfolge, wobei der Probenhalter mit Hilfe der piezoelektrischen Positionierung so verschoben werden kann, daß die Einführung der

Transportgabel in die Löcher des Probenhalters ohne Schwierigkeiten möglich ist.

3.4.2 Die Spaltzange

Ein weiteres technisches Problem stellte der Bau einer Zange zur Spaltung des Kristalls dar. Dabei mußte beachtet werden, daß aufgrund der begrenzten Grobannäherung von 0.5 mm die Spaltoberfläche in Bezug auf die Probenhalteroberfläche einen Abstand von 0.2 ± 0.1 mm haben muß. Des weiteren muß die Spaltzange entlang ihrer Achse beweglich sein, um sie vor den Kristall positionieren zu können.

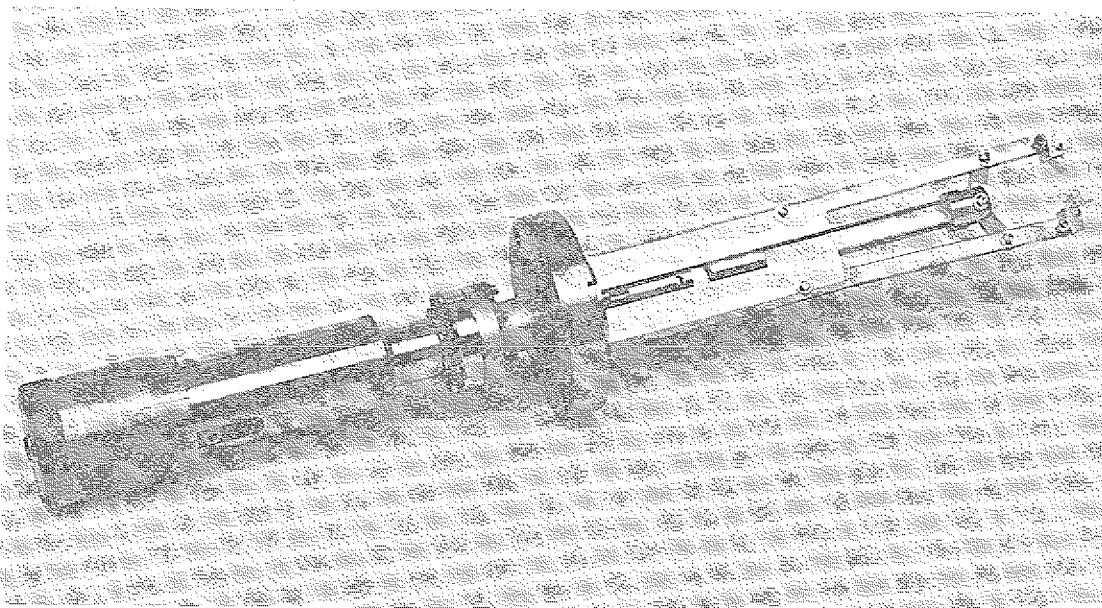


Abb.3-14: Aufnahme der Spaltzange.

Die Spaltzange besteht aus zwei Spaltkeilen, die am Ende von zwei VA-Stangen befestigt sind (Abb.3-14). Diese VA-Stangen sind mit Hilfe zweier Stifte am hinteren Ende drehbar in eine Halterung eingepaßt, die an einem drehbaren CF-35-Flansch festgeschraubt ist. Kurz unterhalb der Spaltkeile sind die VA-Stangen mittels zweier drehbarer Verbindungsstücke mit einem Innentrieb verbunden, der am hinteren Ende in einer Führung läuft und an einer Lineardurchführung montiert ist. Letztere ist an einem CF-16-Flansch befestigt, der wiederum mit dem CF-35-Flansch verbunden ist, so

daß das Ganze eine Einheit bildet. Das Verschieben des Innentriebs mittels der Linear-durchführung bewirkt eine zangenähnliche Bewegung der beiden Spaltkeile. Diese sind aus Hartmetall geschliffen, wobei die beiden Enden einen Winkel von 30° bilden. Das vordere Ende der Spaltkeile ist plan geschliffen und liegt bei der Spaltung am Probenhalter an. Die Spaltzange ist mit einem verstellbaren Federbalg in horizontaler Richtung an der Analysenkammer befestigt.

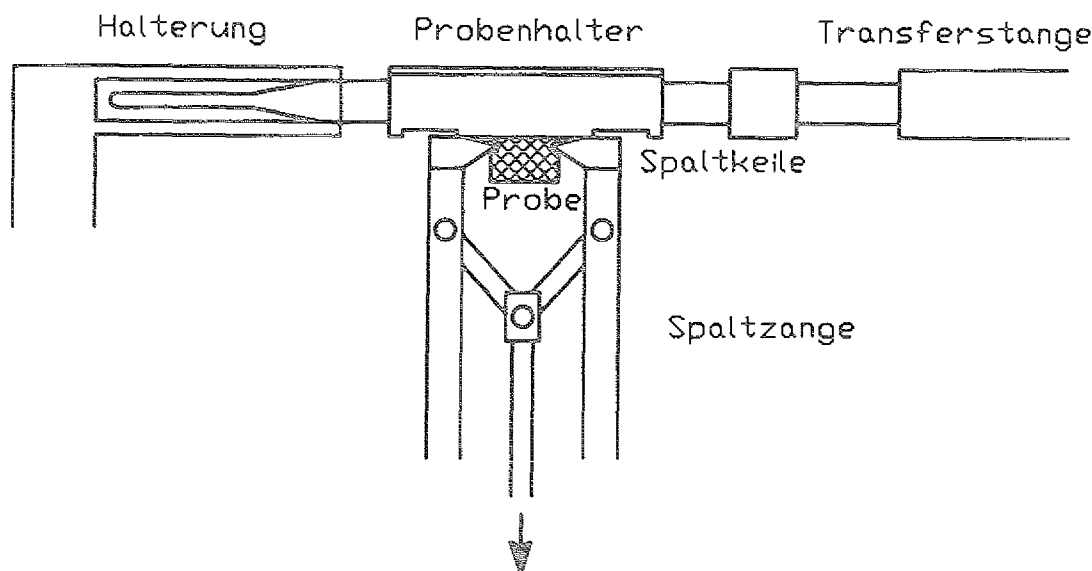


Abb. 3-15: Schemazeichnung der Spaltvorrichtung.

Beim Spalten wird die Transportgabel, auf der sich der Probenhalter befindet, mit dem vorderen Teil in eine Halterung eingeschoben, die als Widerlager dient (Abb. 3-15). Da während des Spaltens eine Verbindung zwischen Analysenkammer und Schleuse besteht (in letzterer herrscht ein Druck von 10^{-6} Pa), wurde zwischen beiden eine Ringblende angebracht, die bei durchgeschobener Transferstange eine Druckdifferenz um einen Faktor 10^2 aufrechterhält und damit die Spaltung und den Probentransport des Kristalls unter UHV-Bedingungen erlaubt. Nach dem Einfädeln der Transfergabel in die Halterung wird die Spaltzange mit den Spaltkeilen vor den Probenhalter geschoben, bis die vorderen Ende der Spaltkeile am Probenhalter anliegen. Die Spaltprobe hat an gegenüberliegenden Flächen zwei Spaltkerben, in die durch Zusammenziehen

der Spaltzange die Spaltkeile eingeführt werden. Die Justage der Spaltprobe kann mit einem Fernrohr, das schräg von oben an einem Fenster angebracht ist, überprüft werden. Da der Probenhalter auf dem hinteren Teil der Transportgabel ein wenig Spiel hat, kann sich der Spalkristall in den Spaltkeilen selber justieren; es ist nur darauf zu achten, daß bei der Vorjustage beide Spaltkeile gleichmäßig mit ihren Flächen an den Außenkanten der Spaltkerben anliegen. Beim weiteren Zusammendrücken der Spaltkeile erhöht sich der Druck auf die Außenkanten der Spaltkerben, bis der vordere Teil des Kristalls abplatzt und auf ein Netz herunterfällt.

Die auf diese Weise gespaltenen Kristalle, ob verformt oder unverformt, hatten spiegelnde Oberflächen, die manchmal von makroskopischen Spaltstufen durchzogen waren. Die Spaltung war dabei so präzise, daß die Spaltoberfläche immer im Bereich der Grobannäherung des RTM lag.

4 Physikalische Grundlagen zum Experiment

Zur Untersuchung von Volumendefekten in Halbleitern mit dem RTM muß man im UHV eine saubere Oberfläche präparieren, auf der die Durchstoßpunkte der Volumenversetzungen untersucht werden können. Da die Oberflächenpräparation die Volumendefekte nicht beeinflussen soll, entfallen Präparationstechniken, bei denen die Oberfläche durch Beschuß mit Edelgasionen gesäubert und die dabei entstandenen Defekte durch anschließendes Aufheizen ausgeheilt werden. Besonders letzteres würde ein unkontrolliertes Bewegen der Versetzungen im Kristall hervorrufen und zum Ausheilen der Versetzungen führen. Das Spalten ermöglicht dagegen eine Präparation von sauberen Oberflächen bei Raumtemperatur, wobei die Bewegung der Versetzungen auf ein Minimum begrenzt wird.

Aufgrund ihrer gerichteten Bindungen lassen sich Halbleiteroberflächen nur auf bestimmten kristallographischen Flächen spalten. Bei Elementhalbleitern wie Silizium oder Germanium sind dies die $\{111\}$ -Flächen, da diese die dichtgepacktesten Ebenen im Kristall sind, zwischen denen die Bindungen am leichtesten aufbrechen. Bei Verbindungshalbleitern bestehend aus Elementen der III. und V. Hauptgruppe ist die Spaltung nur entlang der $\{110\}$ -Fläche möglich, da nur bei dieser Fläche jede Schicht sowohl aus Atomen der III. als auch der V. Hauptgruppe besteht und damit elektrisch neutral ist.

Im allgemeinen weisen Halbleiteroberflächen eine Rekonstruktion auf, d.h. aufgrund der fehlenden Bindungspartner nach außen hin weichen die geometrische und die elektronische Struktur wesentlich von der im Volumen ab. Ursache dafür sind die gerichteten Bindungen der Halbleiteratome im Kristall. Wegen der Hybridisierung der Atomwellenfunktionen entlang bestimmter kristallographischer Richtungen sind die Zustände stark lokalisiert, was an der Oberfläche mangels Bindungspartnern nach außen zu aufgebrochenen Bindungen führt. Diese Dangling Bonds sind Orbitale, die nur teilweise besetzt sind. Da eine solche Oberfläche häufig energetisch ungünstig ist, findet eine Energiereduktion statt, deren Mechanismen vielfältig sind und von der speziellen Oberfläche abhängen. Bei Halbleitern werden die Dangling Bonds häufig durch Dimerisation von Oberflächenatomen gesättigt ($\text{Si}(111) 2 \times 1$) [69] oder durch Rehybridisierung oder Bindung von Adatomen minimiert ($\text{Si}(111) 7 \times 7$) [69]. Darüber hinaus kann ein Ladungstransfer auftreten, bei dem eine Ladungsverarmung oder -anreicherung der Dangling

Bonds bis hin zu einer vollständigen Umbesetzung oder Nichtbesetzung der Dangling Bonds stattfindet (GaAs-(110)-(1x1)).

Um einen Vergleich der RTM-Bilder mit geometrischen Modellen oder bereits vorhandenen TEM-Untersuchungen von Versetzungen zu ermöglichen, sollten den Versetzungsstrukturen auf der Oberfläche keine zusätzlichen geometrischen Rekonstruktionseffekte überlagert sein. Aus diesem Grunde wurde als Untersuchungsmaterial der III-V Verbindungshalbleiter GaAs gewählt, da seine (110)-Spaltoberfläche eine einfache (1x1)-Rekonstruktion aufweist, d.h. die Flächeneinheit zelle hat dieselben Abmessungen wie die in einer (110)-Fläche im Volumen. Darüberhinaus führt die Rekonstruktion zu einer Umbesetzung der Dangling Bonds an der Oberfläche, was eine separate Abbildung der Ga- bzw. As-Atome mit dem RTM ermöglicht.

Des weiteren eignet sich die (110)-Oberfläche zum Studium von Versetzungen, weil bei der Erzeugung von Versetzungen durch eine plastische Verformung das Primärgleitsystem so gewählt werden kann, daß der Burgersvektor des Primärgleitsystems mit der Flächennormale der Spaltoberfläche übereinstimmt.

Im nächsten Abschnitt wird die geometrische und elektronische Struktur der (110)-Oberfläche genauer beschrieben. Die möglichen Versetzungsstrukturen in GaAs werden im darauffolgenden Abschnitt dargestellt.

4.1 Die Struktur der GaAs-(110)-Spaltoberfläche

Der Verbindungshalbleiter GaAs kristallisiert in der Zinkblendestruktur, wobei die Elementarzelle einer (110)-Ebene im Kristallvolumen jeweils ein Ga- und ein As-Atom enthält und somit elektrisch neutral ist. Im Festkörper bilden die Atome auf einer (110)-Ebene Zick-Zack Ketten mit alternierenden Ga- und As-Atomen entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung aus. Jedes Ga- und As-Atom bindet ein Elektron in einem halbgefüllten Dangling Bond. Die Elementarzelle hat eine (1x1)-Periodizität, ist rechtwinklig und wird von den Basisvektoren $\vec{a}_1 = \vec{a}_0/\sqrt{2}$ und $\vec{a}_2 = \vec{a}_0$ mit $a_0 = 0.565 \text{ nm}$ (Gitterkonstante) gebildet. Die Elementarzelle hat eine zweizählige Symmetrie mit einer parallel zu $\vec{a}_2$ verlaufenden Spiegelachse (Abb. 4-1).

Abb. 4-1

Wie in LEED-Bildern leicht zu erkennen ist, bleibt diese Symmetrie auf der (110)-

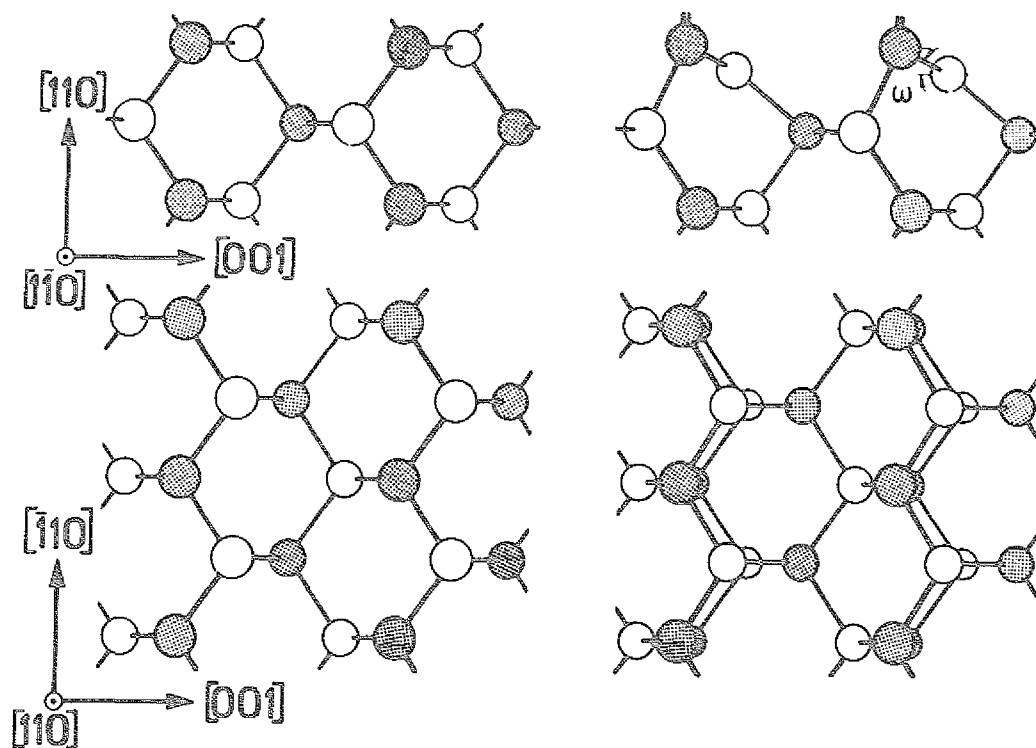


Abb. 4-1: Seitenansicht (oben) und Aufsicht (unten) der GaAs-(110)-Fläche im Volumen (links) und der rekonstruierten (110)-Oberfläche (rechts) [70]. Punktierte Kreise entsprechen den As-Atomen, offene Kreise den Ga-Atomen.

Oberfläche erhalten, d.h. eine Verschiebung der Atome (Relaxation) kann nur noch parallel zu $\vec{a}_2$ oder senkrecht zur Oberfläche erfolgen. Wie anhand quantitativer Auswertungen von LEED Intensitätsmessungen gezeigt wurde, behält die (110)-Oberfläche ihre (1x1)-Periodizität bei, jedoch relaxiert das Ga-Atom um ~ 0.05 nm zum Substrat hin, während das As-Atom von dort um 0.014 nm wegverschoben wird [71], d.h. das As-Atom bewegt sich um 0.065 nm relativ zum Ga-Atom aus der Oberfläche heraus. Man nimmt heute an, daß sich aufgrund der stark gerichteten kovalenten Bindung die Bindungslängen bei der Relaxation der Oberflächenatome nicht wesentlich ändern (sog. "bond length conservation" [72]). Die Relaxation kann durch eine Rotation der As-Ga-Bindung aus der (110)-Ebene mit Hilfe eines Rotations- oder "Buckling" winkels ω beschrieben werden, der die Abweichung der Ebene, in der die Oberflächenatome lie-

gen, von einer ungestörten (110)-Ebene beschreibt; er beträgt für das GaAs 27° [71]. Die Rotationsrelaxation bewirkt neben der vertikalen auch eine geringfügige horizontale Verschiebung der Oberflächeneinheit zelle gegenüber den darunterliegenden Schichten (Abb. 4-1), die für das Ga-Atom 0.041 nm und für das As-Atom 0.033 nm beträgt [73]. Die Relaxationen der 2. und 3. Schicht gegenüber der 1. Schicht sind mit weniger als 0.001 nm gering.

Die treibende Kraft für die Relaxation der Oberflächenatome ist elektronischer Natur. Das Aufbrechen kovalenter Bindungen beim Spalten verursacht eine Rehybridisierung der Bindungorbitale, um die elektronische Oberflächenbindungsenergie zu verringern. Dies bewirkt eine Verzerrung des Gitters analog dem Jahn-Teller Effekt im Kristallvolumen, wobei sich die stabile Konfiguration als Gleichgewicht zwischen Energiegewinn aufgrund der Rehybridisierung einerseits und dem Energieaufwand aufgrund der elastischen Verzerrung des Gitters andererseits einstellt. Bei der GaAs-(110)-Oberfläche streben die Oberflächenatome unter Beibehaltung der kovalenten Bindung mit ihren verbleibenden drei nächsten Nachbaratomen zu ihrer atomaren Konfiguration hin. Dies hat zur Folge, daß sich die jeweils mit einem Elektron halbgefüllten Zustände über dem Ga- und As-Atom durch Ladungstransfer vom Ga- zum As-Atom umwandeln in einen unbesetzten Zustand beim Ga-Atom und einen besetzten Zustand, der über dem As-Atom lokalisiert ist. Modellrechnungen für die Energiedispersionskurven der planaren (110)-Oberfläche zeigen, daß die mit dem As verbundenen, besetzten Oberflächenzustände unterhalb der Valenzbandkante liegen, während die mit dem Ga-Atom verbundenen, unbesetzten Zustände in der oberen Hälfte des Leitungsbandes lokalisiert sind [73]. Durch die Rotationsrelaxation werden diese unbesetzten Zustände ebenfalls aus der Bandlücke heraus über die Leitungsbandkante verschoben; dies wurde experimentell durch Messungen der Energiedispersionskurven mittels Photoemissionsspektroskopie [74] verifiziert. Da wegen der Rekonstruktion der (1x1) Oberfläche die Oberflächenzustände aus der Bandlücke herausgeschoben werden, ist das Fermi-niveau an der Oberfläche identisch mit dem im Volumen und durch die Dotierkonzentration festgelegt. Bezüglich des Fermi-niveaus spricht man deshalb beim GaAs von einer ungepinnten Oberfläche.

4.2 Versetzungen in GaAs

Der III-V Halbleiter GaAs kristallisiert in der Zinkblendestruktur. Sein Atomgitter ist aus zwei kubisch flächenzentrierten (kfz)-Untergittern aufgebaut, die gegeneinander um das Viertel einer Raumdiagonalen verschoben sind. Die zweiatomige Basis führt zu zwei Klassen von $\{111\}$ -Ebenen; die eng benachbarten Ga- und As- $\{111\}$ -Ebenen (Gitterebenenabstand $a/(4\sqrt{3})$) sind über drei kovalente Bindungen pro Einheitszelle miteinander verbunden, die weit entfernten Ga- und As- $\{111\}$ -Ebenen (Gitterebenenabstand $3a/(4\sqrt{3})$) hingegen nur über eine Bindung pro Einheitszelle (Abb. 4-2).

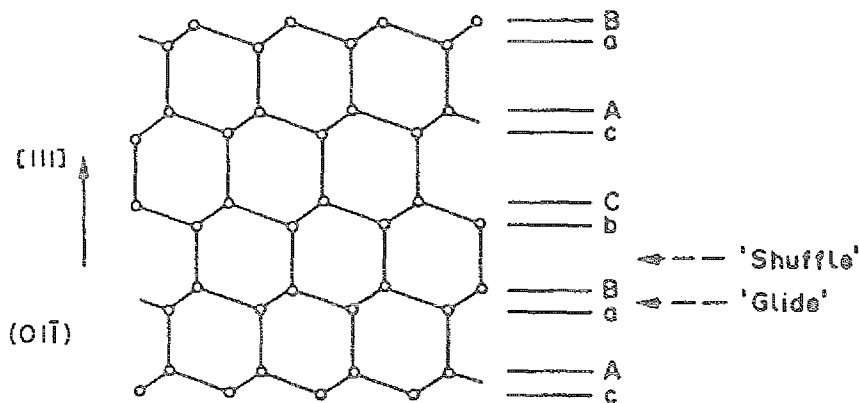


Abb. 4-2: Projektion des Zinkblendegitters auf eine (110)-Ebene. Rechts ist die Stapelfolge der dichtgepackten $\{111\}$ -Ebenen für die beiden Untergitter eingezeichnet.

Vollständige Versetzungen sind im Zinkblendegitter in der Regel auf den $\{111\}$ -Ebenen angeordnet. Ihre Burgersvektoren sind vom Typ $a/2 \langle 110 \rangle$ und entsprechen dem kürzesten Gittertranslationsvektor auf einer $\{111\}$ -Ebene. Liegt die Gleitebene einer Versetzung zwischen den eng benachbarten $\{111\}$ -Ebenen, so spricht man von einer "glide(-set)"-Versetzung; Versetzungen hingegen, deren Gleitebenen zwischen den weit entfernten Ebenen liegen, werden "shuffle(-set)"-Versetzen genannt [75].

Die elastische Energie einer Versetzung ist proportional zum Quadrat des Burgersvektors, so daß im allgemeinen nur der kürzeste Translationsvektor als Burgersvektor

auftritt [76]. Erlaubt die Kristallstruktur eine Aufteilung des kürzesten Translationsvektors in mehrere Teilvektoren, dann erfolgt die Aufspaltung einer vollständigen Versetzung in zwei Partialversetzungen, zwischen denen ein Stapelfehler auftritt.

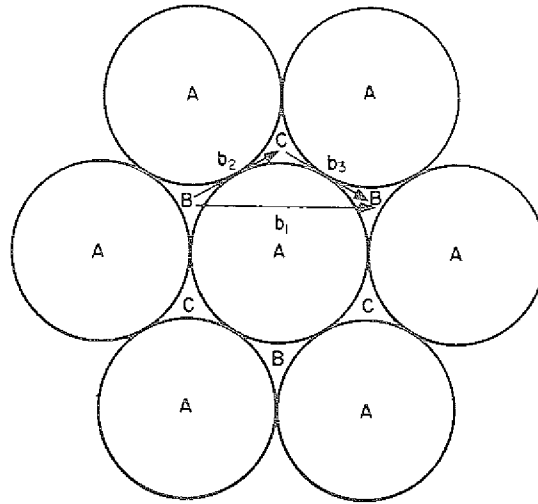


Abb. 4-3: Schema der Aufspaltung eines vollständigen Burgersvektors; die Kugel A symbolisiert die Doppelebene A-a aus Abb. 4-2.

Abb. 4-3 zeigt die Stapelfolge der (111)-Ebenen in einem kfz-Gitter in einer (111)-Projektion. Während bei einer vollständigen Versetzung der Burgersvektor vom Typ $a/2 \langle 110 \rangle$ die Atompositionen B ineinander überführt, wird bei einer Partialversetzung das Atom am Ort B entlang der $\langle 211 \rangle$ -Richtung auf die Atomposition C verschoben. Der dadurch entstehende intrinsische Stapelfehler ABCACABC... wird durch eine zweite Translation entlang $\langle 211 \rangle$ wieder rückgängig gemacht. Die dazugehörige Burgersvektorgleichung hat die Form:

$$\vec{b} = \frac{a}{2}[110] \rightarrow \frac{a}{6}[211] + \frac{a}{6}[12\bar{1}] = \vec{b}_{1p} + \vec{b}_{2p} \quad (27)$$

Durch die Aufspaltung reduziert sich die elastische Energie der Versetzung um 33%; allerdings muß für den Stapelfehler Energie aufgebracht werden. Da die beiden Burgersvektoren der Partialversetzungen einen Winkel von 120° bilden, stoßen sie sich mittels

ihrer Fernfelder ab. Die Aufspaltungsweite der Partialversetzungen ergibt sich aus dem Gleichgewicht der elastisch abstoßenden Kräfte zwischen ihnen und dem Anwachsen der Stapelfehlerenergie.

Im Vergleich zu Metallen bewirkt die stark gerichtete, kovalente Bindung im Halbleiter eine Verengung des Versetzungskerns und eine Vergrößerung der Kernenergie. Aus Symmetriegründen ändert sich die Kernenergie einer Versetzung periodisch bei deren Bewegung entlang der Gleitebene. Diese gitterperiodische Änderung in der Kernenergie, die man Peierls Potential nennt, ist bei diamantähnlichen Halbleitern wesentlich größer als bei Metallen [75]. Sie bewirkt, daß im GaAs die Versetzungen im allgemeinen entlang den dichtgepackten $\langle 110 \rangle$ -Richtungen verlaufen, d.h. entlang der Minima der Peierlstäler auf den $\{111\}$ -Ebenen. Aus diesem Grunde dominieren in Halbleitern Schrauben- und 60° -Versetzungen (der Typ der Versetzung wird durch den Winkel zwischen Burgersvektor und Linienrichtung charakterisiert).

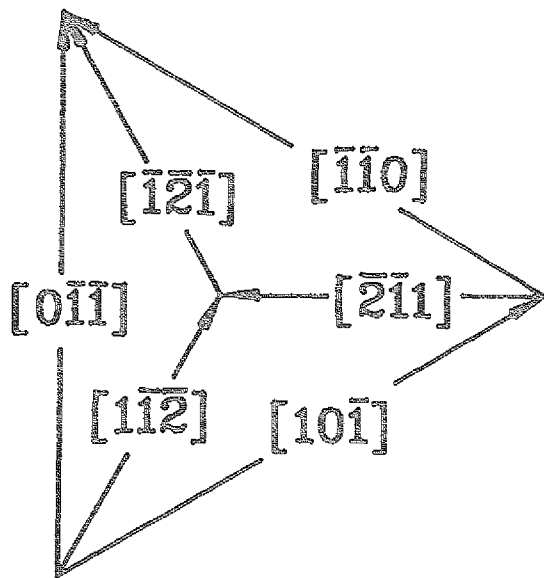


Abb. 4-4: Die $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 211 \rangle$ -Richtungen in der $(1\bar{1}1)$ -Primärgleitebene.

Abb. 4-4 zeigt die möglichen Richtungen der Burgers- und Partialburgersvektoren in der $(1\bar{1}1)$ -Primärgleitebene. Eine vollständige Schraubenversetzung mit Burgersvektor $a/2[0\bar{1}1]$ und Linienrichtung parallel zum Burgersvektor spaltet in zwei

30°-Partialversetzungen mit Burgersvektoren $a/6[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$ und $a/6[1\bar{1}\bar{2}]$ auf. Eine 60°-Versetzung mit Burgersvektor $a/2[0\bar{1}\bar{1}]$ und Linienrichtung parallel zu $[10\bar{1}]$ dissoziiert in eine 30°-Partialversetzung mit Burgersvektor $a/6[1\bar{1}\bar{2}]$ und in eine 90°-Partialversetzung mit Burgersvektor $a/6[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$.

Aus energetischen Gründen erfolgt die Aufspaltung zwischen zwei eng benachbarten $\{111\}$ -Ebenen (also im Glide-Set), obwohl im Shuffle-Set die weiter voneinander entfernten $\{111\}$ -Ebenen schwächer aneinander gebunden sind. Im Glide-Set entstehen bei der Aufspaltung zwar dreimal so viele gebrochene Bindungen wie im Shuffle-Set, aber die Elektronenorbitale der gebrochenen Bindungen sind im Kern so gerichtet, daß sie die Bildung von kovalenten Ersatzbindungen begünstigen (Rekonstruktion des Versetzungskerns) [77]. Des weiteren ist im Glide-Set die elastische Verzerrungsenergie der Versetzungen geringer als im Shuffle-Set.

Im GaAs kommt aufgrund der zweiatomigen Basis jeder Versetzungstyp in zwei Varianten vor. Im Glide-Set nennt man Versetzungen, die im Kern aus As-Atomen bestehen α -Versetzen, und solche, die im Kern aus Ga-Atomen bestehen, β -Versetzen; im Shuffle-Set ist die Benennung umgekehrt. 60°- α -Versetzen spalten im Glide-Set in je eine 30°- α - und eine 90°- α -Partialversetzung auf; Schraubenversetzungen bestehen aus einer 30°- α - und einer 30°- β -Partialversetzung.

Aufgrund ihrer unterschiedlichen Terminierung im Kern unterscheiden sich α - und β -Versetzen im allgemeinen in ihren physikalischen Eigenschaften. Im GaAs sind die α -Versetzen wesentlich beweglicher als die β -Versetzen, wobei der Unterschied stark von der Dotierung abhängt [78]. Bei plastischen Prozessen wird das Versetzungsgleiten deshalb vor allem von den α -Versetzen bestimmt. Bei einer Rekonstruktion der Bindungen im Versetzungskern entstehen Ga-Ga- bzw. As-As-Bindungen, die unterschiedliche elektronische Eigenschaften haben sollten. Ob die Kerne der Partialversetzungen in III-V-Halbleitern wie im Si rekonstruiert sind [78] oder nicht, ist mangels Meßmethoden mit atomarer Auflösung bis heute eine offene Frage.

5 Spitzen- und Probenpräparation

In diesem Kapitel werden die verschiedenen Schritte besprochen, die zur Präparation von Tunnelspitzen und von verformten sowie unverformten GaAs-Proben nötig waren. Die beschriebenen Präparationsmethoden wurden von Herrn D. Szyuka im Rahmen einer Diplomarbeit entwickelt [79].

5.1 Spitzenpräparation

Eine sorgfältige Spitzenpräparation ist für eine stabile atomare Auflösung, bei der der Tunnelstrom an einem eindeutig bestimmten Spitzenatom lokalisiert sein muß, unerlässlich. Eine typische Spitze, wie sie für Feldemissionsquellen benützt wird, weist einen Krümmungsradius von ~ 100 nm auf, besitzt immer zumindest aber an ihrer Spitze eine Formation von exponierten Atomen, die die atomare Auflösung ermöglichen. Diese Minispitzen sind jedoch oft sehr instabil und degradieren im Verlauf des Experiments sehr schnell. Außerdem kann es beim Vorhandensein mehrerer Minispitzen bei einer rauen Spitzenoberfläche durch Hin- und Herspringen des Tunnelstroms zu Instabilitäten kommen, so daß keine atomare Auflösung mehr möglich ist. Doppelspitzeneffekte, wo der Strom von zwei Minispitzen getragen wird oder definiert an bestimmten Stellen auf der Oberfläche (z.B. Stufen, Adsorbate) von einer Minispitze zur anderen übergeht, können periodische Strukturen vortäuschen, die auf der Oberfläche nicht vorhanden sind [80].

Zunächst wurden Spitzen aus polykristallinem Wolframdraht (Durchmesser: 0.25 mm) verwendet, doch gingen wir später zu Spitzen aus einkristallinem Wolframdraht (Durchmesser: 0.26 mm und Längsachse in $[111]$ -Richtung) über, da diese im Experiment stabiler waren. Der Grund dafür dürften die relativ offene Struktur der (111) -Ebene und die damit verbundene höhere Bindungsenergie der Atome auf dieser Fläche sein. Demgegenüber weisen Spitzen aus polykristallinem Draht bedingt durch den Ziehvorgang eine starke Textur entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung auf, so daß die Kristallfläche an der Spitze von der energetisch niedrigeren (110) -Ebene gebildet wird. Wegen der höheren Bindungsenergie der Atome auf der (111) -Oberfläche dürften sich einmal gebildete Minispitzen, bestehend aus einem kleinen Cluster von Metallatomen, stabiler sein als auf der (110) -Oberfläche.

Die Spitzen wurden elektrolytisch in NaOH nach einer von Michely entwickelten Methode geätzt [81]. Sie zeigten in TEM-Aufnahmen einen durchschnittlichen Krümmungsradius von nur 5 nm [79], der damit deutlich unter der sonst üblichen Größenordnung von 100 nm liegt. Die Konusform der Spitzen erwies sich in SEM-Aufnahmen als relativ stumpf, was für das Experiment günstig war, da Spitzen mit einem lang zulaufenden dünnen Ende während des Rasterns leicht zu Schwingungen angeregt werden können.

Nach dem Ätzen wurden die Spitzen in warmem destilliertem Wasser, in Aceton und Propanol gereinigt, um Ätzreste zu entfernen. Um den Krümmungsradius der Spitzen zu überprüfen und eventuell vorhandene Oxydreste zu entfernen, wurden die Spitzen nach dem Reinigen mit einem Halter in die Schleuse eingebaut und durch Anlegen einer negativen Hochspannung bei einem Druck von 10^{-5} Pa mittels Feldemission von Elektronen gereinigt. Bei guten Spitzen trat ab 600 V Feldemission auf, die sich dann innerhalb weniger Minuten bei einem Emissionsstrom von $1 \mu\text{A}$ bei 300 V stabilisierte. Durch die an der Spitze auftretenden, hohen elektrischen Felder wurden anscheinend Oxydpartikel von der Spitze gerissen, so daß sich die für die Feldemission benötigte Spannung halbierte.

Danach wurden die Spitzen aus der Schleuse herausgenommen und in das RTM eingesetzt, wobei die Zeit des Transfers möglichst kurz gehalten wurde, um ein erneutes starkes Oxydieren zu vermeiden. In der RTM-Kammer befand sich zur in-situ Präparation eine selbstgebaute Elektronenkanone. Bei einem Neondruck von 10^{-3} Pa wurde sie zur Ionisation der Edelgasatome eingesetzt, die bei einem Sputterstrom von $\sim 0.5 \mu\text{A}$ die auf 100 V hochgelegte Spitze für ca. 20 Min beschossen.

Mit den so präparierten Spitzen konnte in 90% der Fälle bei der ersten Grobannäherung atomare Auflösung erzielt werden, die dann bei vorsichtigem Experimentieren (kein mechanischer Kontakt der Spitze mit der Oberfläche) für ca. zehn Meßtage stabil blieb. Danach wurde der Tunnelstrom zunehmend instabil, was auf adsorbierte Restgasatome auf Spitze und Probe zurückzuführen ist.

Im Prinzip wäre es nun möglich, die Spitze durch eine kontrollierte Feldverdampfung (Anlegen einer Hochspannung an die Spitze bei gleichzeitigem Hochheizen) in situ zu säubern und wieder anzuschärfen. Aufgrund der kompakten Bauweise unseres Nadelhalters sowie der dünnen Zuführungen zur Nadel besteht dazu aber bei unserem RTM

im Augenblick keine Möglichkeit.

5.2 Probenpräparation

Ausgangsmaterial für alle Spaltproben waren halbkreisförmige, bootgezogene GaAs-(111)-Wafer (Durchmesser 2 Zoll) der Firma Wacker Chemietronic mit einer n-leitenden Si-Dotierkonzentration von 10^{18}cm^{-3} .

Aus den 3.6 mm dicken Scheiben wurden für die unverformten Proben kleine Quader ($3.6 \times 3.6 \times 5 \text{ mm}^3$) herausgesägt, die mit 0.2 mm breiten und 0.5 mm tiefen Spaltkerben versehen wurden. Um an den Außenflächen der Proben ohmsche Kontakte anzubringen, wurden gegenüberliegende Außenflächen mit Silber bedampft und eine Kapazität von $1 \mu\text{F}$ bei einer Spannung von 50 V über die aufgedampften Kontakte entladen. Durch die Energie des Entladungsfunkens schmolz die Probenoberfläche lokal auf, und die Schottkybarriere zwischen Silberschicht und Halbleiterkristall wurde zerstört. Nach nochmaligem Aufdampfen entstanden großflächige, niederohmige Kontakte ($R \sim 10 - 100 \Omega$), die einen Spannungsabfall der Tunnelvorspannung an einer zwischen Kristall und Probenhalter auftretenden Schottkybarriere verhinderten. Aus dem unverformten Material wurden Kristalle mit drei unterschiedlichen Spaltrichtungen präpariert ($[11\bar{1}]$ $[2\bar{1}1]$ und $[100]$).

Bei der Spaltung muß verhindert werden, daß die Druckfront, die beim Zusammendrücken der Spaltkeile entsteht, aus der gewünschten $\{110\}$ -Ebene in eine andere $\{110\}$ -Ebene ausbricht. Die Gefahr dafür ist umso größer, je kleiner der Winkel zwischen der Spaltrichtung und der Schnittgeraden der konkurrierenden Spaltebenen ist [82]. Der Spaltriß geht dann eventuell in Treppenstufen durch den Kristall oder bricht vollständig in eine andere Spaltebene aus. Die günstigste Richtung, d.h. der größte Winkel, ergibt sich für die $[100]$ -Druckrichtung; die $[2\bar{1}1]$ -Richtung ist die ungünstigste Spaltrichtung. Da sich dies in unseren Spaltexperimenten bestätigte, wurden die verformten Proben nur noch entlang $[100]$ gespalten.

Die Proben für die plastische Verformung bestanden aus 20 mm langen Quadern mit der Längsrichtung entlang $[213]$ und den kurzen Kantenrichtungen entlang $[\bar{1}\bar{1}1]$ und $[4\bar{5}\bar{1}]$. Abb. 5-1 zeigt die Geometrie beim Präparieren einer Verformungsprobe aus

einer $(\bar{1}\bar{1}1)$ -Fläche mit der $[213]$ -Verformungsrichtung und der späteren $[0\bar{1}\bar{1}]$ -Flächennormalen der Spaltebene.

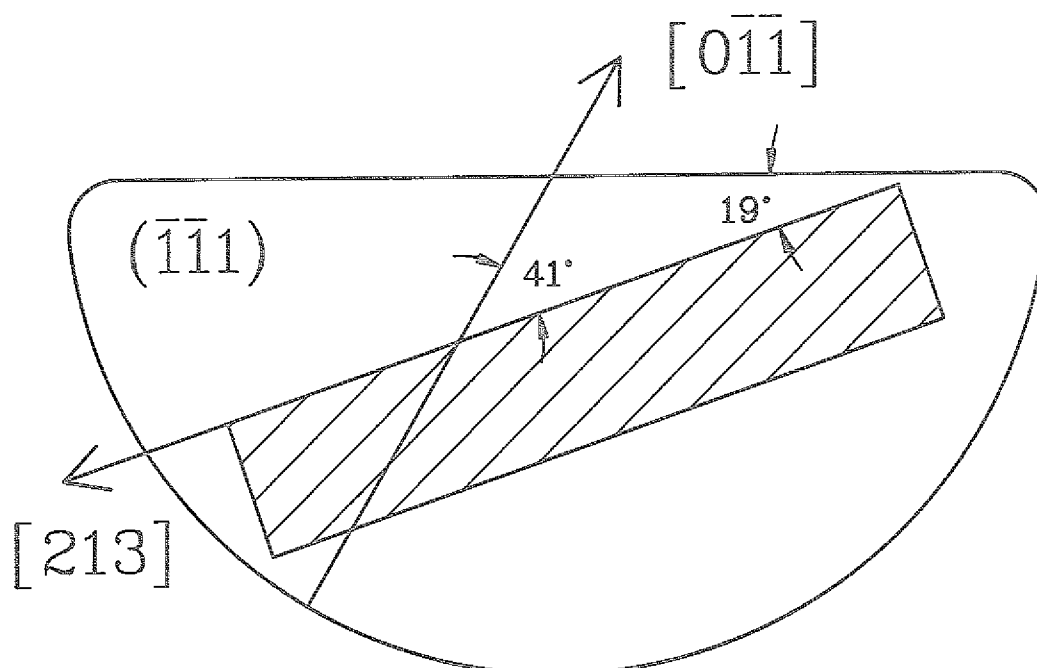


Abb. 5-1: Präparation einer Verformungsprobe (schraffiert) aus einem $(\bar{1}\bar{1}1)$ -Wafer.

Die Indizierung der Geraden und Ebenen folgt einer Konvention, die von der $[213]$ -Richtung als Verformungsrichtung ausgeht. Dies führt zur $(\bar{1}\bar{1}1)$ -Primärgleitebene, zur $(\bar{1}\bar{1}1)$ -Quergleitebene, zur konjugierten Gleitebene $(1\bar{1}\bar{1})$ und zur unerwarteten Gleitebene (111) $[121]$.

Unter einem Gleitsystem versteht man eine $\{111\}$ -Gleitebene mit einem darinliegenden Burgersvektor $a/2 \langle 110 \rangle$. Die Anregung eines bestimmten Gleitsystems bei der plastischen Verformung erfolgt zum einen über die Temperatur und zum anderen über die Spannung, die in einer Gleitebene entlang einer bestimmten Gleitrichtung wirkt. Multipliziert man den Kosinus des Winkels zwischen Verformungsrichtung und Gleitebenennormale mit dem Kosinus des Winkels zwischen Spannungsrichtung und Gleitrichtung, so erhält man einen Wert, der als Schmidfaktor bezeichnet wird [83]. Für eine bestimmte Verformungsrichtung können den verschiedenen Gleitsystemen bestimmte Schmidfaktoren zugeordnet werden. Je höher der Schmidfaktor eines bestimm-

ten Gleitsystems ist, desto eher wird dieses Gleitsystem bei der plastischen Verformung angeregt. Für die $[213]$ -Verformungsrichtung ist das Primärgleitsystem mit dem Schmidfaktor 0.47 (theoretisches Maximum 0.5) gegeben durch $(1\bar{1}1) [0\bar{1}\bar{1}]$. Der Burgersvektor steht dabei senkrecht auf der Spaltoberfläche, die statt der üblichen (110) -Ebene nun eine $(0\bar{1}\bar{1})$ -Ebene ist. Im Vergleich dazu fällt das Sekundärgleitsystem $((1\bar{1}1), [\bar{1}\bar{1}1])$ mit Schmidfaktor 0.35 bereits deutlich ab.

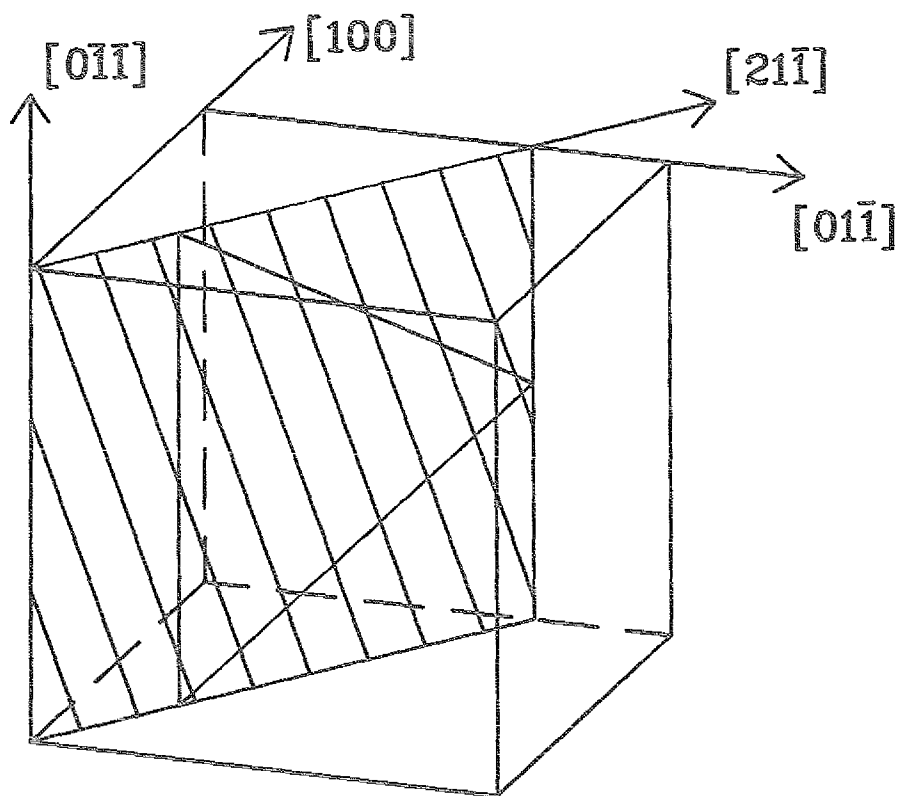


Abb. 5-2: Geometrie der Spaltproben: Die primäre Gleitebene ist schraffiert; die Spaltfläche liegt oben. Die Richtungen in der Primärgleitebene kennzeichnen die möglichen $\langle 110 \rangle$ -Burgersvektoren.

Die präparierten Quader wurden bei Herrn Prof. Alexander im Institut für Metallphysik an der Universität Köln in einer speziellen Verformungsapparatur (umgebaute

Zwick-Prüfmaschine) bei 400 °C unter Argon-Schutzgasatmosphäre bei 40 MPa Druck entlang der $[213]$ Richtung (etwa 20 MPa im Primärgleitsystem) plastisch verformt. Der hohe Druck wurde dabei erst gegen Ende der Verformung angelegt, um die erwünschte hohe Abgleitung zu erzielen. Bis auf die einmalige Erhöhung gegen Ende der Verformung blieb die angelegte Last konstant, d.h. es handelte sich um ein statisches Kriechverfahren, bei dem die Verfestigung des Kristalls durch die zeitliche Ausdehnung der Verformung und nicht durch in kurzer Zeit auf hohe Werte wachsende Spannungen (dynamische Verformung) erfolgt. Während der Verformung verkürzten sich die Kristalle um 3 - 5%. Beim Abkühlen des Kristalls blieb die Last angelegt, um eine Relaxation der Versetzungen zu verhindern.

Aus einer verformten Probe entstanden zwei Spaltproben ($5 \times 3.5 \times 2.5 \text{ mm}^3$) mit den Kantenrichtungen $[0\bar{1}\bar{1}]$, $[100]$ und $[01\bar{1}]$ (Abb. 5-2). Die $[0\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung ist die primäre Burgersvektorrichtung sowie die Normale der Spaltoberfläche. Die $[21\bar{1}]$ -Richtung ist Schnittgerade zwischen Spaltoberfläche und primärer Gleitebene. Neben der primären Burgersvektorrichtung sind auf der Primärgleitebene die zwei weiteren möglichen $\langle 110 \rangle$ -Sekundärburgersvektoren eingezeichnet, die mit dem Primärburgersvektor ein gleichseitiges Dreieck bilden und unter einem Winkel von 30° die Oberfläche durchstoßen.

6 Beschreibung und Diskussion der Ergebnisse

Nach einer anderthalbjährigen Aufbau- und Testphase waren ab Januar 1989 zunächst Messungen an unverformten GaAs-Proben im UHV vorgenommen worden, bevor dann im Sommer 1989 mit der Untersuchung der verformten GaAs-Proben begonnen werden konnte. Die Messungen an unverformten GaAs-Proben dienten dem Zweck, das Funktionieren des RTM unter UHV-Bedingungen mit atomarer Auflösung zu demonstrieren sowie Mikroskopieerfahrung mit dem selbstgebauten RTM an der GaAs-Oberfläche zu sammeln. Bis dahin waren Feenstra und Mitarbeiter vom IBM Labor in Yorktown Heights (USA) die einzigen, die mit einem RTM Untersuchungen an einer GaAs-(110)-Spaltoberfläche vorgenommen hatten [13]. Ihre detaillierten mikroskopischen und spektroskopischen Untersuchungen dienten als Ausgangspunkt für unsere Messungen [33,84].

6.1 Unverformte Proben

6.1.1 Atomare Auflösung auf GaAs-(0 $\bar{1}\bar{1}$)

Abb.6-1 zeigt die atomare Auflösung des As- und des Ga-Untergitters. Beide RTM-Bilder wurden im Konstantstrom-Betrieb bei aktivem Regelkreis mit negativer bzw. positiver Tunnelvorspannung separat voneinander aufgenommen. Die Helligkeitsmaxima in beiden Bildern entsprechen je nach Polarität den Positionen der besetzten bzw. unbesetzten Oberflächenzustände, die, wie in Kap.4.1 erläutert, über den As- bzw. Ga-Atompositionen lokalisiert sind. Der laterale Abstand der Helligkeitsmaxima beträgt 0.4 nm entlang [0 $\bar{1}\bar{1}$] und 0.56 nm entlang [100], was mit den Abmaßen der Oberflächeneinheitszelle übereinstimmt.

Zur Verdeutlichung zeigt Abb. 6-2 schematisch die Aufsicht auf die (0 $\bar{1}\bar{1}$)-Oberfläche. Die Indizierung stimmt mit der aus Abb. 5-2 überein.

Die Variation der Grauwerte entlang der [100]-Richtung entspricht einer Korrugationsamplitude von 0.03 nm. Der Winkel zwischen der [0 $\bar{1}\bar{1}$]- und der [100]-Richtung beträgt 95° und ist damit um 5° größer als der geometrische Wert. Dies ist auf eine leichte Verzerrung der Rasterbewegung des inneren Röhrchens zurückzuführen: Da

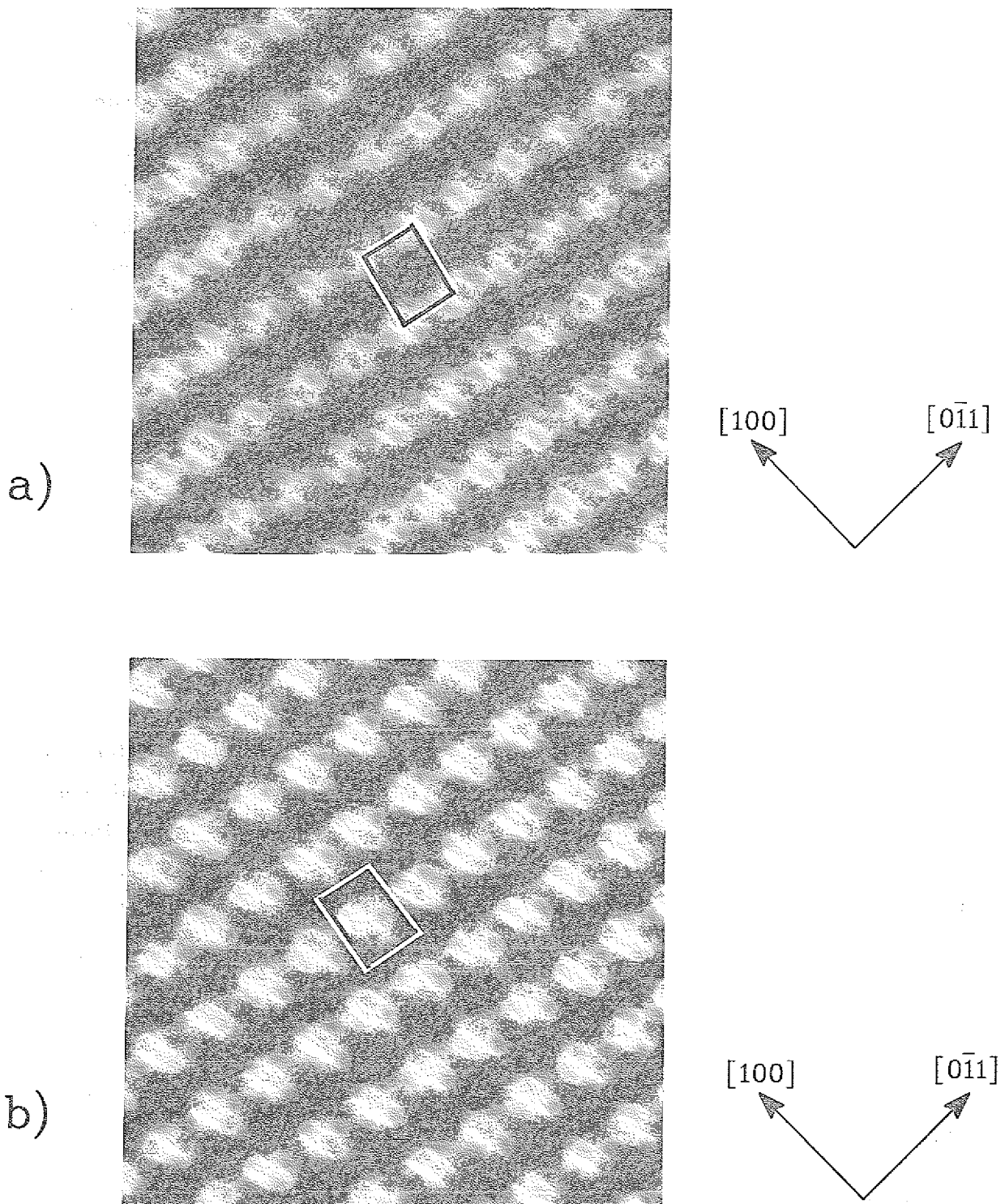


Abb.6-1: Atomare Auflösung des As- und Ga-Untergitters: (a) As, b) Ga). In beiden Bildern ist die Einheitszelle durch ein Rechteck gekennzeichnet.

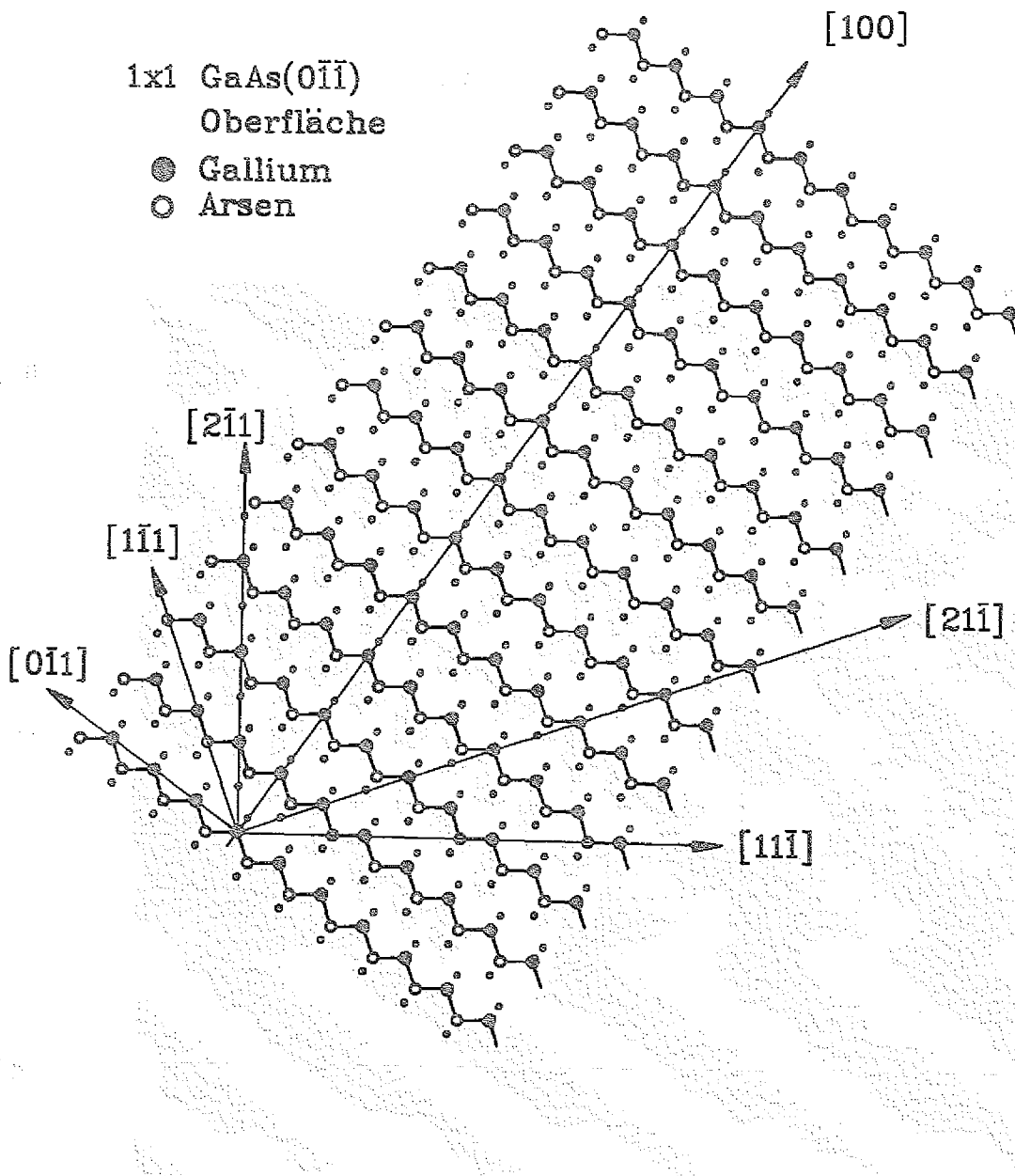
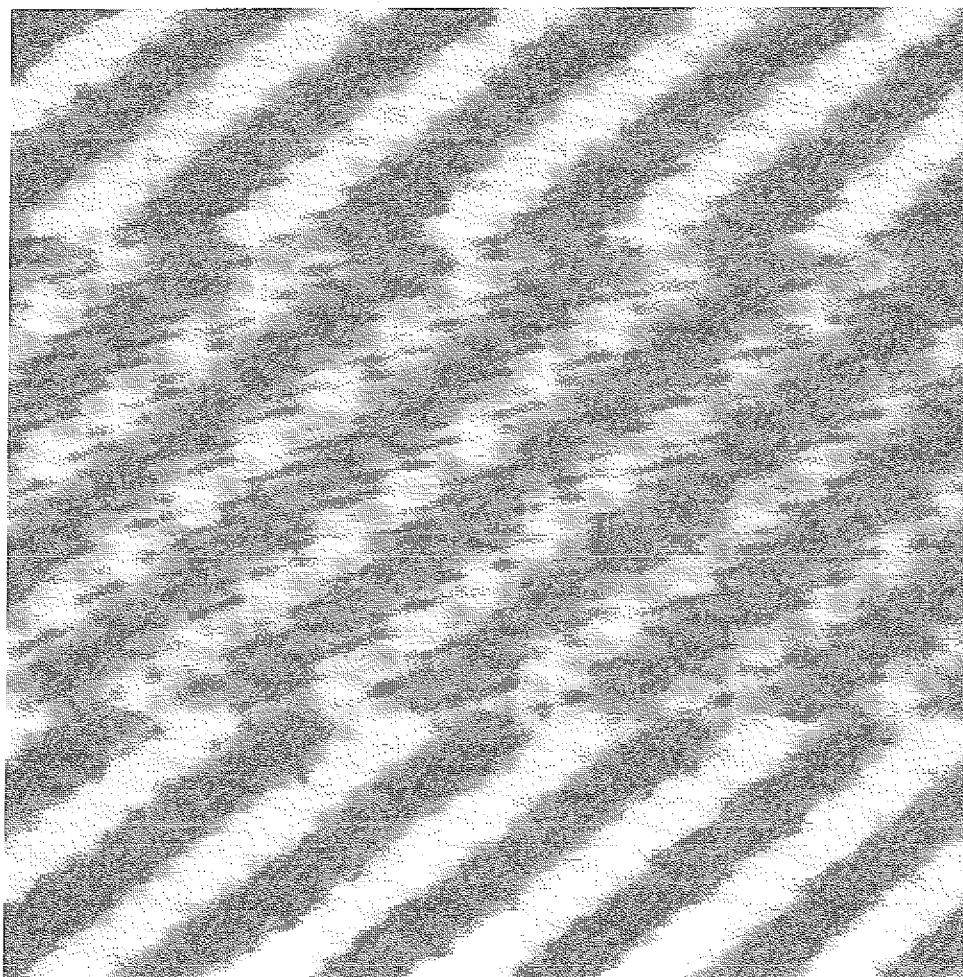


Abb. 6-2: Schema der (0 $\bar{1}\bar{1}$) Oberfläche. Die Atome der obersten Lage sind durch große Punkte, die der darunterliegenden Lage durch kleine Punkte dargestellt.

die beiden Elektroden für die x- und y-Auslenkung auf einem Röhrchen integriert sind, kommt es aufgrund der inhomogenen Röhrchenwandstärke zu einer leicht verzerrten Auslenkung. Wählt man als Auflösungsvermögen des RTM die Halbwertsbreite

der Grauwertevariation entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung, so ergibt sich für die GaAs-($0\bar{1}\bar{1}$)-Oberfläche für unser Mikroskop eine Auflösung von etwa 0.2 nm. Die in Kap.3.1 formulierten Bedingungen an die mechanische und elektronische Stabilität des Instrumentes sowie seine UHV-Tauglichkeit waren damit unter Beweis gestellt.



As

Ga

As

Abb.6-3: Atomare Auflösung auf dem As- und Ga-Untergitter; in der Mitte des Bildes wurde die Vorspannung von -4 V auf +2 V umgepolt.

Abb.6-3 zeigt ein RTM-Bild, bei dem während des Rasterns die Tunnelvorspannung von -4 V auf +2 V umgepolt wurde. Je nach Polarität "sieht" das Mikroskop

entweder das As- oder das Ga-Untergitter. Die Abstände der Ga- bzw. As-[0 $\bar{1}$ 1]-Reihen in [100]-Richtung betragen in diesem Bild im Mittel 0.24 nm statt der 0.12 nm, die man aufgrund des geometrischen Modells der Oberfläche erwarten würde. Dies liegt anschaulich gesprochen daran, daß die besetzten und unbesetzten Dangling Bonds nicht senkrecht über den Oberflächenatomen stehen, sondern aufgrund der Rotationsrelaxation der Atome seitlich von ihnen weggerichtet sind (Abb. 4-1). Feenstra und Mitarbeiter, die einen etwas geringeren Wert von 0.21 nm für den Abstand der jeweiligen Untergitter entlang [100] erhielten, bestimmten durch Vergleich mit berechneten RTM-Bildern den Rotationswinkel ω und erzielten gute Übereinstimmung mit bereits vorhandenen LEED-Resultaten [33]. Abb. 6-3 veranschaulicht die Vermischung von geometrischen und elektronischen Effekten in einem RTM-Bild. Die räumliche Anordnung der Dangling Bonds und ihre Besetzung oder Nichtbesetzung hängen sowohl von der geometrischen als auch von der elektronischen Struktur der Oberfläche ab. Dies erschwert auf der einen Seite die Bildinterpretation anhand rein geometrischer Modelle, ermöglicht aber auf der anderen Seite durch quantitative Bildauswertung den Zugang zu Größen wie dem Rotationswinkel, die im RTM-Bild nicht direkt zugänglich sind.

Die direkte Abbildung beider Untergitter durch einfaches Umpolen der Tunnelvorspannung gelang relativ selten. Atomare Auflösung des As-Untergitters wurde jedoch bei nicht allzu abgenutzter Nadel regelmäßig erreicht. Dies läßt sich wie folgt erklären: Bei der Grobannäherung oder während des Rasterns bleibt durch Kontakt der Spitze mit der Oberfläche ein kleiner GaAs-Cluster an dieser haften; dieser Cluster an der Spitze, über den nun der Tunnelstrom fließt, bildet mit der Metallspitze eine Schottky-Diode mit gleichrichtenden Eigenschaften aus. Bei positiver Probenvorspannung sperrt der Metall-Halbleiter Kontakt. Deshalb mußten in solch einem Fall statt der üblichen 1 - 2 V Werte von 4 - 5 V für die Vorspannung gewählt werden, um den Tunnelstrom stabil zu halten und einen Kontakt der Nadel mit der Oberfläche zu vermeiden. Die atomare Auflösung war aber wegen ständiger Sprünge im Tunnelstrom sehr instabil. Auch lösten sich beim Umpolen der Tunnelvorspannung des öfteren Teile von der Spitze und bedeckten den bis dahin untersuchten Oberflächenbereich, der dann natürlich einer weiteren Untersuchung nicht mehr zugänglich war. Die Auflösung des As-Grundgitters blieb durch die Anwesenheit eines GaAs-Clusters auf der Spitze unberührt. Hier floß der Tunnelstrom in Durchlaßrichtung, und es wurden Bilder mit stabiler atomarer Auflösung bis hin zu

-1 V erzielt.

6.1.2 Tunnelspektroskopie

Da die Methodik der Tunnelspektroskopie erst im letzten halben Jahr dieser Doktorarbeit experimentell verwirklicht wurde, werden hier nur einige Beispiele für diese Technik angeführt.

Abb. 6-4a zeigt eine charakteristische Strom-Spannungs-($I(U)$)-Kennlinie für eine n-dotierte GaAs-Oberfläche. Die $I(U)$ -Kennlinie wurde lokal an einem Punkt der Oberfläche bei einer positiven Probenvorspannung von +2 V im Regelkreis mit der in Kap.3.3 beschriebenen Sample-and-Hold-Technik aufgenommen und über 300 Spannungsrampen gemittelt.

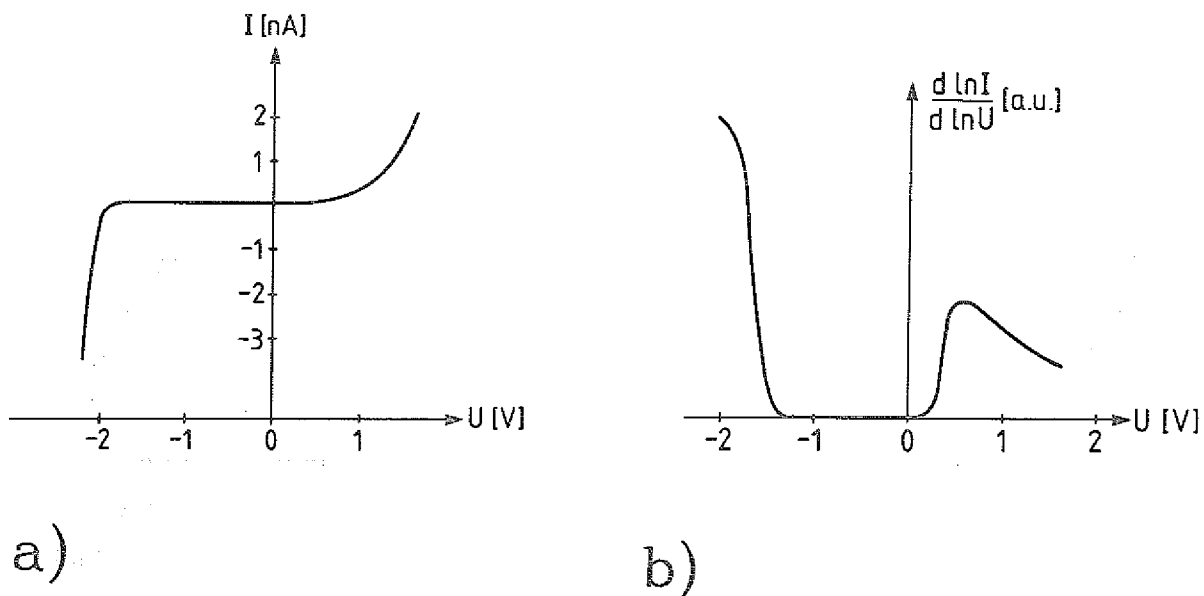


Abb. 6-4: a) Gemittelte Strom-Spannungskennlinie, die an einem Ort der Oberfläche aufgenommen wurde; b) logarithmische Ableitung der Kennlinie.

Bei positiver Vorspannung tunneln die Elektronen von der Spitze in das unbesetzte Leitungsband und umgekehrt bei negativer Probenvorspannung aus besetzten Valenzbandzuständen der Probe in die Spitze. Deutlich zu erkennen ist der exponentielle An-

stieg des Tunnelstroms bei positiven und negativen Vorspannungswerten, die oberhalb bzw. unterhalb der Bandlücke des GaAs liegen. Da bei einer Dotierung von 10^{18} cm^{-3} Si-Atomen das Fermi-niveau schon im Leitungsband liegt (entarteter Halbleiter), setzt der Tunnelstrom für positive Probenvorspannungen schon bei 0.5 V ein, bei negativer Vorspannung hingegen erst bei -1.5 V. Die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstromes von der Vorspannung wird durch den Transmissionskoeffizienten in Gleichung 23 beschrieben, der sich exponentiell mit der Vorspannung ändert. Um die Zustandsdichte zu verdeutlichen, ist in Abb. 6-4b die Größe $\overline{d \ln I / d \ln U}$ in Abhängigkeit von der Vorspannung aufgetragen. Wie in Kap. 2.5 beschrieben, läßt sich durch Auftragung dieser normierten Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der Vorspannung der Einfluß der Transmissionsfunktion auf die $I(U)$ -Kennlinie weitgehend eliminieren. Man erkennt deutlich die Bandlücke von 1.4 eV und den Einsatz der Valenz- und Leitungsbandkante. Die Ergebnisse stimmen gut mit theoretischen Berechnungen der Oberflächenzustandsdichte für die GaAs-(110)-Oberfläche überein [85].

Statt der Vorspannung läßt sich ebenso der Abstand der Nadel von der Oberfläche variieren und die damit verbundene Stromänderung detektieren. Abb. 6-5 zeigt eine solche $I(d)$ -Kennlinie. Die Modulationsspannung von 150 mV, die einer Abstandsänderung von 0.3 nm entspricht, wurde dabei an das innere Rasterröhrchen angelegt und die Stromänderung mit der Sample-and-Hold-Technik gemessen. Man erkennt den exponentiellen Anstieg des Tunnelstroms bei Verringerung des Tunnelabstandes. Wie erwartet, ändert sich der Tunnelstrom um ungefähr eine Größenordnung bei einer Abstandsänderung von 0.1 nm. Trägt man die Stromwerte logarithmisch über dem Abstand auf, so ergibt sich eine Gerade, deren Steigung mit der Barrierenhöhe B (Gleichung 25) in Beziehung gesetzt werden kann [86].

$$B = 95.2 \text{ eV nm}^{-2} \left[\frac{d \ln I}{dz} \right]^2 \quad (28)$$

Diese ist nach Gleichung 25 mit der Austrittsarbeit von Probe und Spitze verknüpft. Aus der gemessenen $I(d)$ -Kennlinie läßt sich also unter Kenntnis der Austrittsarbeit der Spitze und der angelegten Vorspannung die lokale Austrittsarbeit der Probe bestimmen. Für die oben gezeigte $I(d)$ -Kennlinie ergibt sich mit einer Austrittsarbeit von 4.5 eV für die Wolframspitze und einer angelegten Vorspannung von 2 V bei einer experimentell

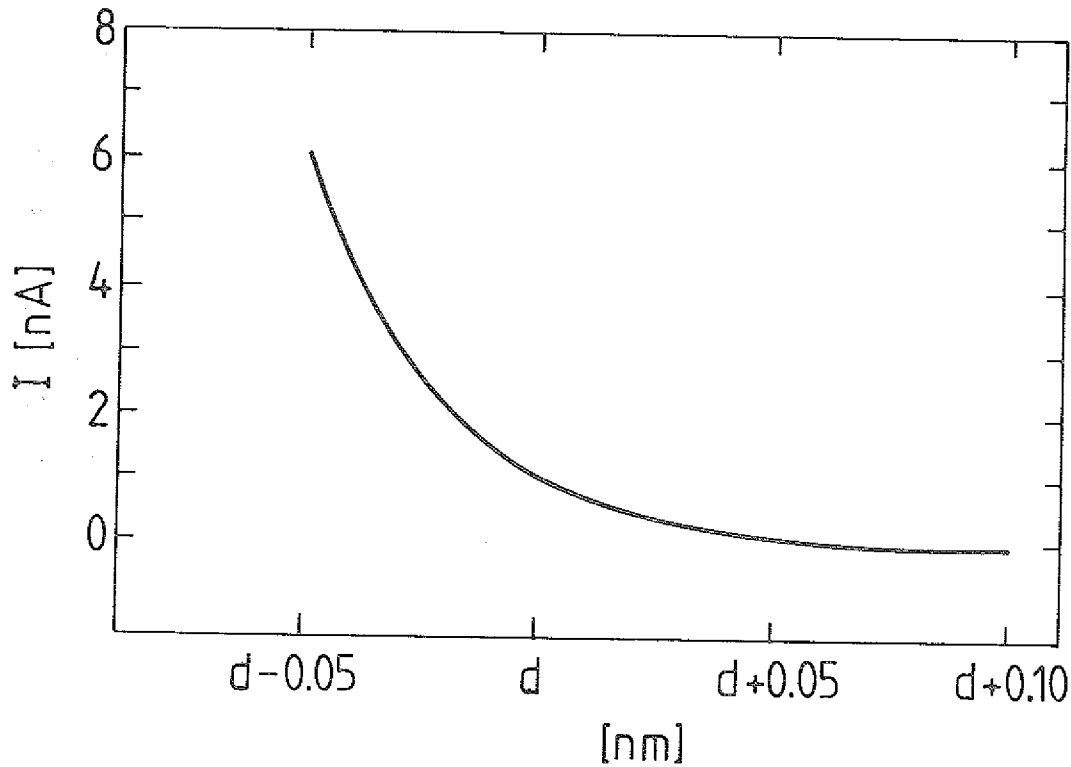


Abb. 6-5: Strom-Kennlinie bei Variation des Abstandes: der Abstand d entspricht dem Abstand der Nadel im Konstantstrom-Modus bei einem Tunnelstrom von 1 nA und einer Vorspannung von +2 V.

bestimmten Barrierenhöhe von 3.4 eV eine Austrittsarbeit von $\Phi_{\text{GaAs}} = 4.3 \pm 0.7$ eV. Der relativ hohe Fehler von 30% in der Austrittsarbeit ist bestimmt durch die Ungenauigkeit in der Abstandseichung, die mit 5% angenommen wurde. Vernachlässigt man Banddefekte, die durch einen Spannungsabfall der Tunnelvorspannung an der Probenoberfläche hervorgerufen werden könnten, so ist die Austrittsarbeit für GaAs gegeben durch [70].

$$\Phi_{\text{GaAs}} = E_{\text{vac}} - E_F = I_0 - E_g + W_n \quad (29)$$

Die Ionisationsenergie I_0 ist der Abstand der Vakuumenergie von der Valenzbandkante. Für GaAs-(110) beträgt ihr Wert 5.5 eV [70]. Der Abstand $W_n = E_C - E_F$ der Leitungsbandkante vom Fermi-niveau hängt von der Dotierkonzentration ab. Für eine n-Dotierung von 10^{18} cm^{-3} ist $W_n = 0.054$ eV, d.h. das Fermi-niveau liegt etwas oberhalb der Leitungsbandkante. Damit ergibt sich eine Austrittsarbeit von 4.1 eV, was

eine relativ gute Übereinstimmung mit dem experimentell ermittelten Wert von 4.3 eV bedeutet.

Als letztes Beispiel für die Anwendung der Tunnelspektroskopie zeigt Abb. 6-6 zwei Bilder eines auf der GaAs-(0 $\bar{1}\bar{1}$)-Oberfläche häufig vorgefundenen Adsorbattyps. Das rechte Bild wurde bei einer Vorspannung von $U_0 = -2$ V mit aktivem Regelkreis aufgenommen und entspricht dem normalen RTM-Bild im Konstantstrom-Betrieb. Das linke Bild dagegen wurde bei einer Tunnelvorspannung von $U_1 = +2$ V bei ausgeschaltetem Regelkreis aufgenommen und gibt die Stromänderung bei gleichem Tunnelabstand wie bei dem mit U_0 aufgenommenen Bild wieder. Helle Bereiche entsprechen hohem Tunnelstrom, dunkle Bereiche niedrigem Tunnelstrom. Beide Bilder wurden gleichzeitig aufgenommen, indem nach jedem Pixelpunkt die Vorspannung von U_0 auf U_1 geändert und der Regelkreis unterbrochen wurde (s. Kap.3.3). Damit ist eine eindeutige Zuordnung von Strukturmerkmalen in beiden Untergittern möglich.

Auf dem rechten Bild erkennt man die As-Atomreihen entlang [0 $\bar{1}\bar{1}$]. Das Adsorbat erscheint ungefähr in der Mitte des Bildes als heller, ovaler Fleck mit einer Ausdehnung von ungefähr 1.5 nm. Das Strombild auf der linken Seite zeigt die Ga-Atomreihen entlang [0 $\bar{1}\bar{1}$]. Hier erscheint das Adsorbat als dunkler Fleck mit ungefähr derselben Ausdehnung wie der helle Fleck im linken Bild. Das adsorbierte Molekül trägt also nur bei negativer Vorspannung, wenn die Elektronen aus besetzten Valenzbandzuständen tunneln, zum Tunnelstrom bei. Das Molekül induziert bei der Adsorption einen besetzten Zustand in der Bandlücke oder im Valenzband, der nur bei negativer Vorspannung zum Tunnelstrom beiträgt. Ähnliche Aufnahmen wurden von Feenstra et. al. für negativ geladene Sauerstoffatome auf GaAs veröffentlicht [32].

Die hier gezeigten Beispiele demonstrieren die Einsatzfähigkeit der im Rahmen dieser Doktorarbeit entwickelten Tunnelspektroskopie. Durch Aufnahmen lokaler $I(U)$ -Kennlinien lassen sich Informationen über die Oberflächenzustandsdichte gewinnen. Durch Modulation des Abstandes läßt sich die lokale Barrierenhöhe bestimmen, die mit der Austrittsarbeit in Beziehung gesetzt werden kann. Darüber hinaus lassen sich durch simultane Aufnahme von RTM- und Strombildern bei entgegengesetzter Spannung gleichzeitig beide Untergitter abbilden, wobei man beim Vorhandensein lokaler Defekte oder Adsorbate zusätzliche Informationen über deren elektronische Aktivität

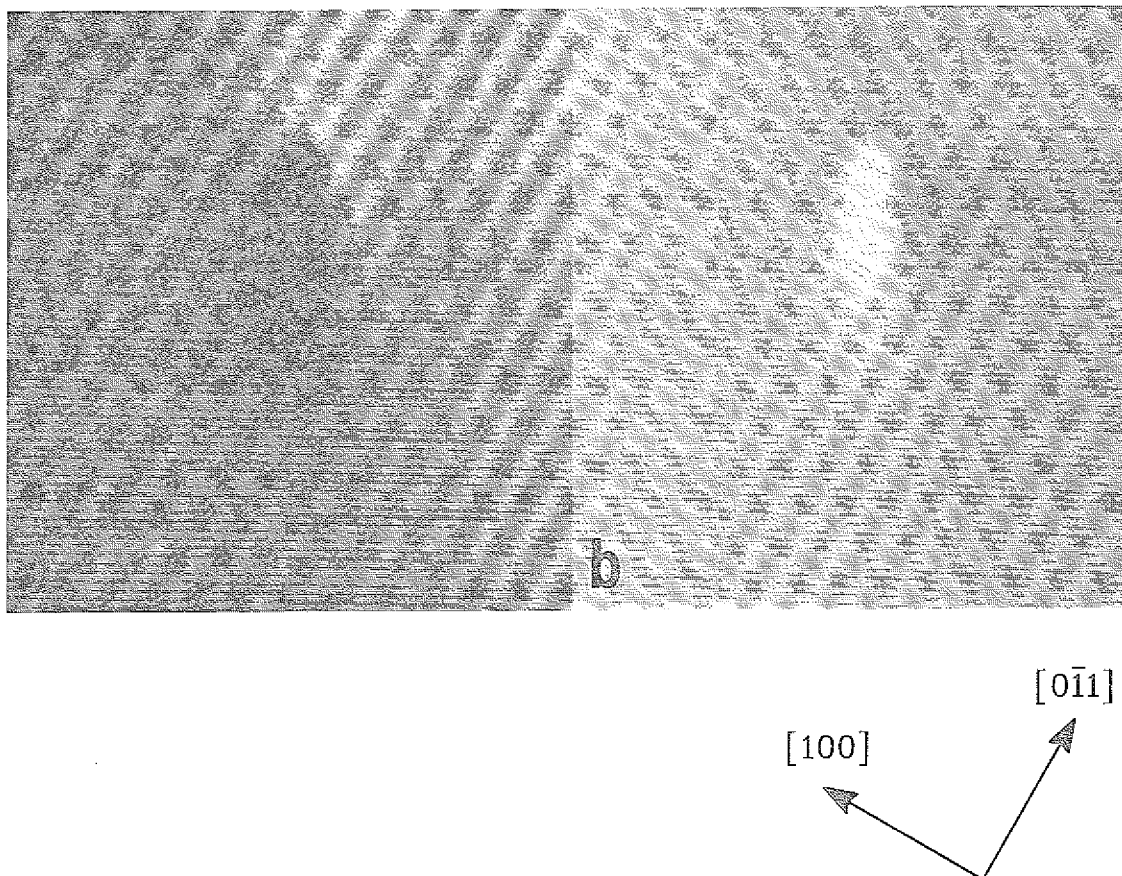


Abb. 6-6: Strombild (a) und normales RTM-Bild (b), die gleichzeitig aufgenommen wurden.

erhält.

Die hier entwickelte Tunnelspektroskopie erlaubt noch nicht die Aufnahme von $I(U)$ -Kennlinien an vorgegebenen Punkten auf der Oberfläche. Darüberhinaus gestaltete sich im Experiment die gleichzeitige Abbildung beider Untergitter durch die oben besprochene Technik wegen dabei auftretender Spitzeninstabilitäten als schwierig. Diese Instabilitäten führten nicht nur zum Verlust der atomaren Auflösung, sondern machten aufgrund von auftretenden Kontakten der Spitze mit dem untersuchten Probenbereich eine weitere Untersuchung unmöglich. Aus diesem Grunde wurde bei der Untersuchung der verformten Kristalle auf den Einsatz der Spektroskopie verzichtet.

6.1.3 Spaltstufen

Gespaltene Halbleiteroberflächen bilden keine perfekten Spaltflächen aus, sondern weisen je nach Spaltqualität eine gewisse Anzahl von Spaltstufen auf, deren Dichte die Lage des Fermi-niveaus an der Oberfläche beeinflussen kann [87].

Zur Untersuchung der bei der Spaltung entstehenden Stufen, deren Höhen und Richtungen wurden GaAs-Kristalle mit drei verschiedenen Spaltrichtungen ($[11\bar{1}]$, $[21\bar{1}]$, $[100]$) präpariert. Die unterschiedlichen Spaltqualitäten ergaben sich automatisch aus der Anwendung zweier verschiedener Spalttechniken. Bei der ersten Spalttechnik besaßen die Kristalle nur eine Spaltkerbe, in der die Schneidkante eines Spaltkeils ruhte. Die Schneidkante des gegenüberliegenden, zweiten Spaltkeils war stumpf geschliffen und bildete beim Spalten eine Art Widerlager. Als Spaltkeile wurden geschliffene Aluminiumoxydkeile verwendet, die später gegen Keile aus Hartmetall ausgetauscht wurden, da sich die Aluminiumoxydkeile als zu spröde erwiesen und ihre Schneidkanten beim Spalten immer wieder ausbrachen. Diese Spalttechnik ergab nur eine mäßige Spaltqualität. Obwohl sich auf den $4 \times 4 \text{ mm}^2$ großen Spaltflächen spiegelnde Bereiche befanden, waren die Oberflächen oft von makroskopisch sichtbaren Spaltstufen hoher Dichte durchzogen. Oft brachen die Proben an den Kanten in andere $\{110\}$ -Spaltebenen aus.

Bei der daraufhin angewendeten Spalttechnik wurden die Proben mit zwei Spaltkerben versehen (Abb. 3–15), so daß der auf den Kristall ausgeübte Druck von beiden Seiten gleichmäßig erfolgte. Das Anbringen der Spaltkerben erfolgte auf einem drehbaren Probenhalter, so daß die Parallelität der Spaltkerben gewährleistet war. Die auf diese Weise gespaltenen Kristalle besaßen optisch spiegelnde Oberflächen, die nur von wenigen makroskopisch sichtbaren Spaltstufen durchzogen waren.

Abb. 6–7 zeigt zwei RTM-Bilder unterschiedlicher Rastergröße, die von einem Oberflächenbereich eines in $[11\bar{1}]$ -Richtung gespaltenen Kristalls mit schlechter Spaltqualität aufgenommen wurde. Man erkennt eine hohe Anzahl von schmalen, dreieckförmigen Terrassen, die durch Stufen mit einer gemessenen Stufenhöhe von 0.2 nm voneinander getrennt sind. Es handelt sich also um monoatomar hohe Stufen, deren Höhe auf einer $\{110\}$ -Oberfläche durch $h = a_0/2\sqrt{2} = 0.199 \text{ nm}$ gegeben ist. Die einatomar hohen, dreieckförmigen Terrassen waren manchmal durch 2 nm hohe Stufen getrennt, die entlang der $[11\bar{1}]$ -Spaltrichtung verliefen. Die Stufenrichtungen der Terrassen bilden einen

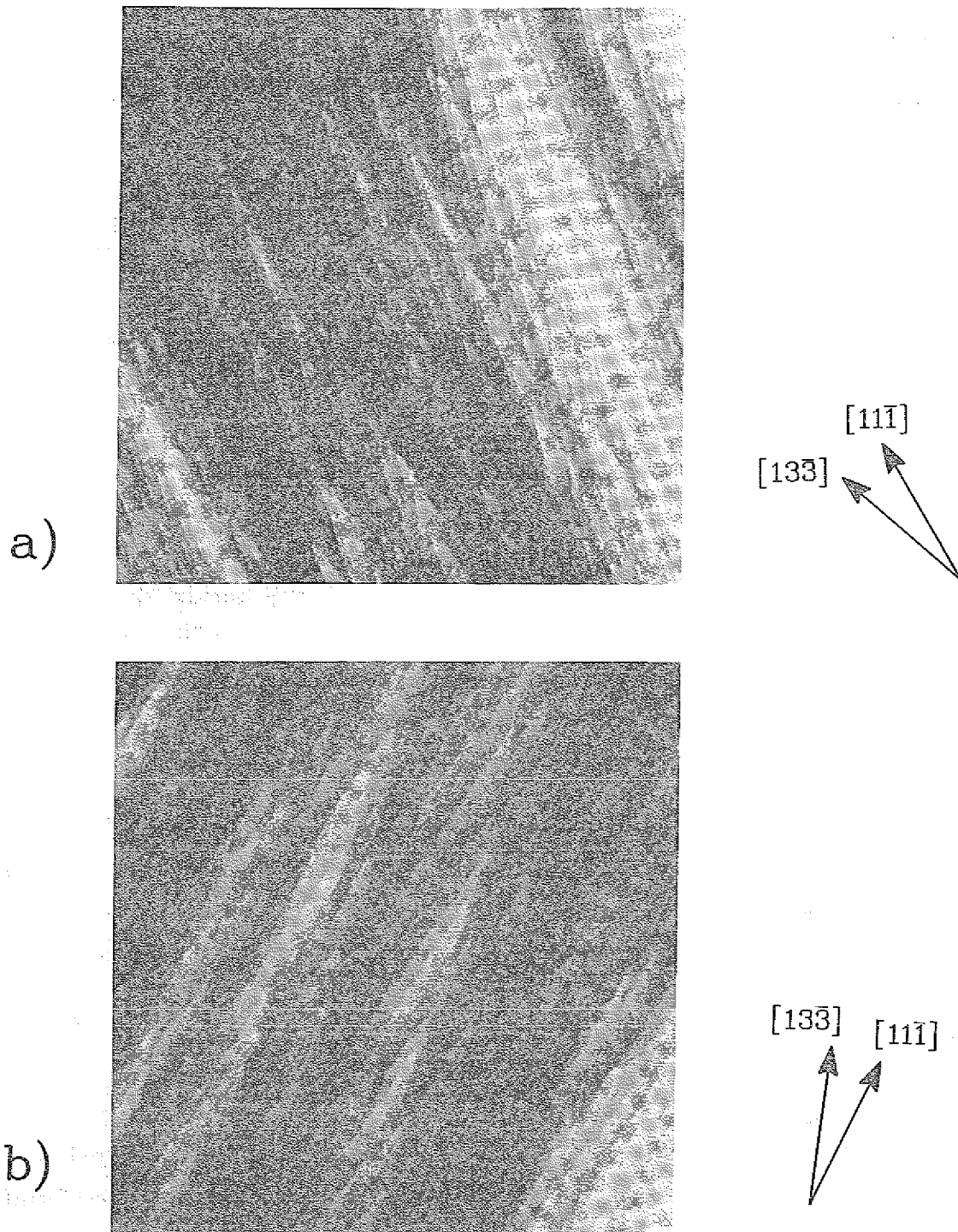


Abb.6-7: RTM-Bilder eines schlecht gespaltenen Oberflächenbereichs, aufgenommen bei negativer Probenvorspannung von -3 V: a) $0.3 \times 0.3 \mu\text{m}^2$ b) $0.1 \times 0.1 \mu\text{m}^2$. Die Rasterrichtung bei b) ist gegenüber a) um 40° gedreht.

Winkel von 22° , wobei die eine Richtung durch die Spaltrichtung und die andere durch die $[13\bar{3}]$ -Richtung gegeben ist. Die Terrassen haben eine durchschnittliche Länge von 20 nm, eine Breite von 3 nm und weisen entlang der Spaltrichtung eine Neigung von ungefähr $\alpha = 0.5^\circ$ zur $(0\bar{1}\bar{1})$ -Oberfläche auf. Die Neigung ist in den gezeigten RTM-Bildern durch die in Kap.3.3 beschriebene Hochpaßankopplung des z-Piezsignals an die Bildaufnahme abgefiltert, um die Stufenstruktur über den ganzen Rasterbereich sichtbar zu machen. Für Stufen mit monoatomarer Höhe ist für kleine Winkel α die Anzahl der Kantenatome direkt proportional zu $\tan \alpha$, was auch für eine unregelmäßige Stufenanordnung gilt [88]. Bei einem Wert von 0.008 für $\tan \alpha$ entspricht dies einem Anteil von etwa 9% Kantenatomen in der Oberfläche, was bei $8.85 \cdot 10^{14}$ Atomen/cm² für die $(0\bar{1}\bar{1})$ -Oberfläche zu einer Dichte von $7.7 \cdot 10^{13}$ cm⁻² Kantenatomen führt.

Abb. 6-8 zeigt einen verkleinerten Ausschnitt des in Abb. 6-7b dargestellten Oberflächenbereichs. Man erkennt drei Terrassen mit den in $[0\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung laufenden As-Reihen. Die Stufen der Terrassen laufen entlang $[0\bar{1}\bar{1}]$ und sind unregelmäßig von Kinken durchsetzt, die durch die $[0\bar{1}\bar{1}]$ - und die dazu senkrechte $[100]$ -Richtung begrenzt werden. Die $[13\bar{3}]$ -Richtung kommt durch Einbau der Kinken in die $[0\bar{1}\bar{1}]$ -Stufe nach durchschnittlich jedem dritten Atom zustande. Des weiteren ist die Stapelfolge der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Ebenen gut zu erkennen. Die atomaren Reihen auf der oberen Terrasse enden in einer Kinkposition an der monoatomaren Stufe genau zwischen den Reihen der darunterliegenden Terrasse. Die weißen Flecken auf dem Bild sind typisch für aus der Restgasatmosphäre adsorbierte Moleküle. Wahrscheinlich handelt es sich um polare Moleküle wie CO oder CO₂, die, wie eine Restgasanalyse zeigte, neben H₂ in der Größenordnung von 10^{-10} Pa in der RTM-Kammer vorhanden waren. Ihre Anwesenheit auf der Oberfläche nahm im Verlauf eines Experiments stetig zu. Anhand über mehrere Wochen hintereinander aufgenommener RTM-Bilder wird ihr Haftkoeffizient auf 10^{-5} abgeschätzt.

Allen Bereichen mit schlechter Spaltqualität war die hohe mikroskopische Stufendichte von über $5 \cdot 10^6$ Stufen/cm gemeinsam. Die Form der Terrassen und ihre Stufenrichtungen variierten mit der Spaltrichtung. So hatte beispielsweise die Spaltoberfläche eines in $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung gespaltenen Kristalls in einem Bereich schlechter Spaltung Terrassen mit einer Breite von 10 nm, die durch monoatomare Stufen entlang $[100]$ getrennt waren. Bei allen Spaltoberflächen von schlechter Spaltqualität waren die Terrassen immer nur durch monoatomar hohe Stufen getrennt. Die Bereiche hoher Stufendichte, die

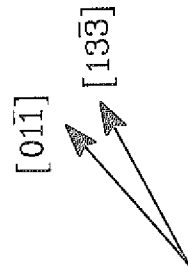
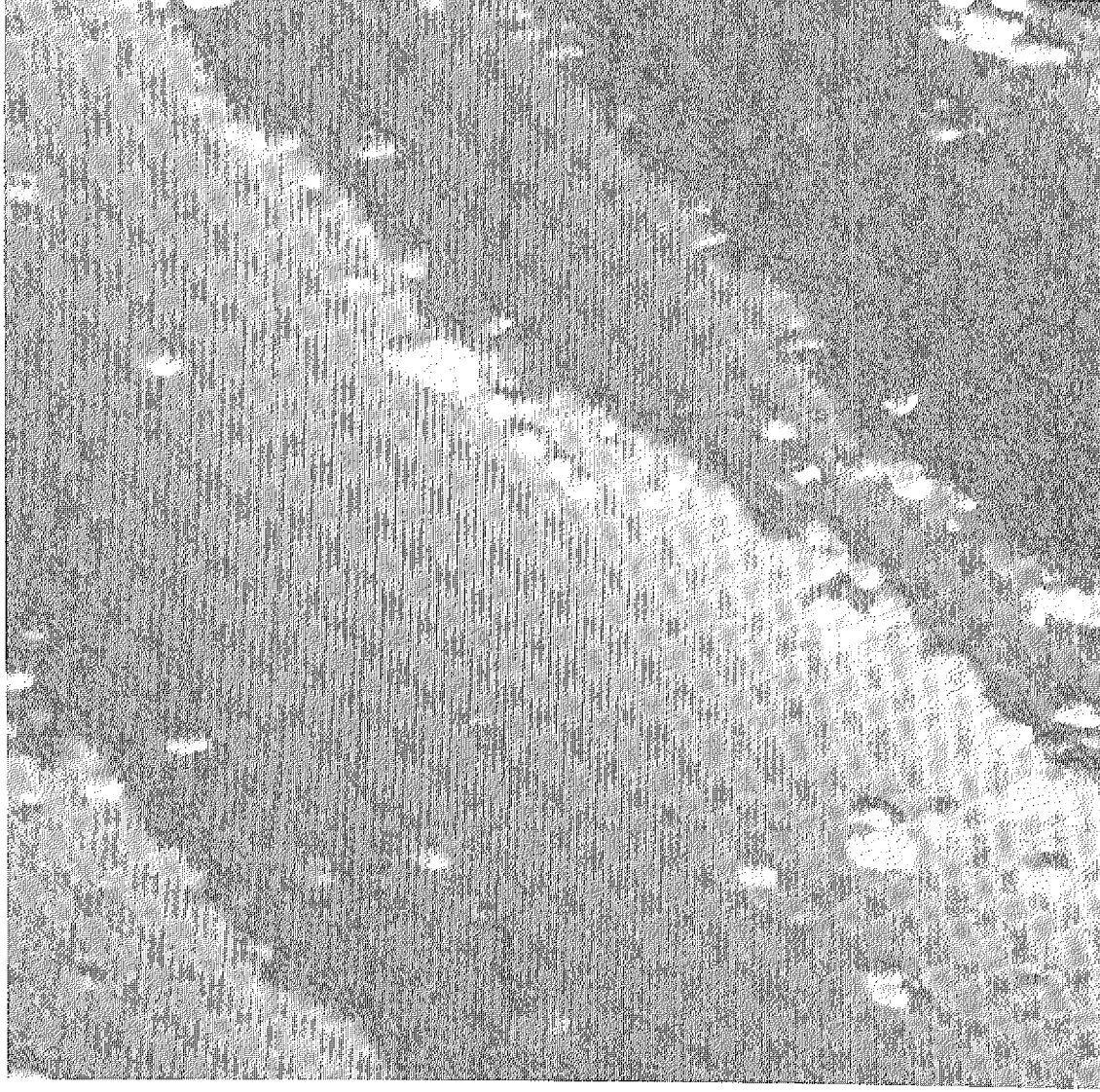


Abb. 6-8: Atomare Auflösung eines Ausschnitts von Abb. 6-7b; Rasterweite: $28 \times 28 \text{ nm}^2$.

mit dem RTM abgebildet wurden, zeigten immer eine regelmäßige Stufenanordnung, deren Präsenz sich aber in LEED-Bildern nicht bemerkbar machte. Die LEED-Reflexe von schlecht gespaltenen Kristallen zeigten keine energieabhängige Verbreiterung oder Aufspaltung der Reflexe, wie man es für Oberflächen erwarten sollte, die eine unregelmäßige oder regelmäßige Stufenanordnung über makroskopische Dimensionen hin zeigen [89].

Für qualitativ gut gespaltene $(0\bar{1}\bar{1})$ -Oberflächen mit zwei gegenüberliegenden Spaltkerben ergaben sich optisch glatte Spaltoberflächen, die auf mikroskopischer Skala über mehrere Mikrometer große, atomar flache Terrassen aufwiesen. Nur sehr selten wurden auf gut gespaltenen Oberflächen Stufen gefunden, die dann wiederum in den meisten Fällen monoatomar waren.

Auf einer in $[2\bar{1}\bar{1}]$ gespaltenen Oberfläche liefen die Stufen entlang den Diagonalen der Oberflächeneinheitszellen (Abb. 6-9a). Am Kreuzungspunkt der Stufen bildeten sich monoatomar hohe Stufen entlang den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen aus. Im gezeigten Bild beträgt der Winkel zwischen den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen 72° , was mit dem theoretischen Wert von 70.5° gut übereinstimmt.

Abb. 6-9b zeigt einen vergrößerten Ausschnitt vom Kreuzungsbereich der Stufen aus Abb. 6-9a. Man erkennt wiederum deutlich die in $[0\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung verlaufenden As-Atomreihen, die an den monoatomaren Stufen zwischen den As-Reihen der darunterliegenden Terrasse enden. Die Stufe entlang $[2\bar{1}\bar{1}]$ hat eine relativ geradlinige Struktur bestehend aus As-Atomen, die über 4-5 Atomabstände auf einer $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Geraden liegen. Dazwischen bilden sich wiederum Kinken in $[100]$ -Richtung aus, wobei sich über kurze Atomabstände lokal auch andere Stufenrichtungen ausprägen können. Dies erkennt man im unteren Teil der $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Stufe, wo drei As-Atome eine lokale Stufe in $[100]$ -Richtung ausbilden. Die $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Stufe zeigt auf atomarer Skala eine sehr gezackte Struktur. Die Stufe besteht aus lokalen Untereinheiten, die im Mittel von zwei As-Atomen entlang $[100]$ gefolgt von einer Kinke mit den Kantenrichtungen $[100]$ und $[0\bar{1}\bar{1}]$ gebildet werden. Dadurch ergibt sich im Mittel wiederum eine $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Stufenrichtung.

Die $\langle 211 \rangle$ -Richtungen auf der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Oberfläche verbinden benachbarte Ketten von Ga- und As-Atomen (Abb. 6-2). Die Flächen, die durch die $\langle 211 \rangle$ -Stufen offengelegt werden, liegen in den (111) Ebenen, die je nach Abschluß der Ga-As-Ketten entlang $[0\bar{1}\bar{1}]$ Ga oder As terminiert sein können. Die vielen Kinken in der $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Stufe lassen

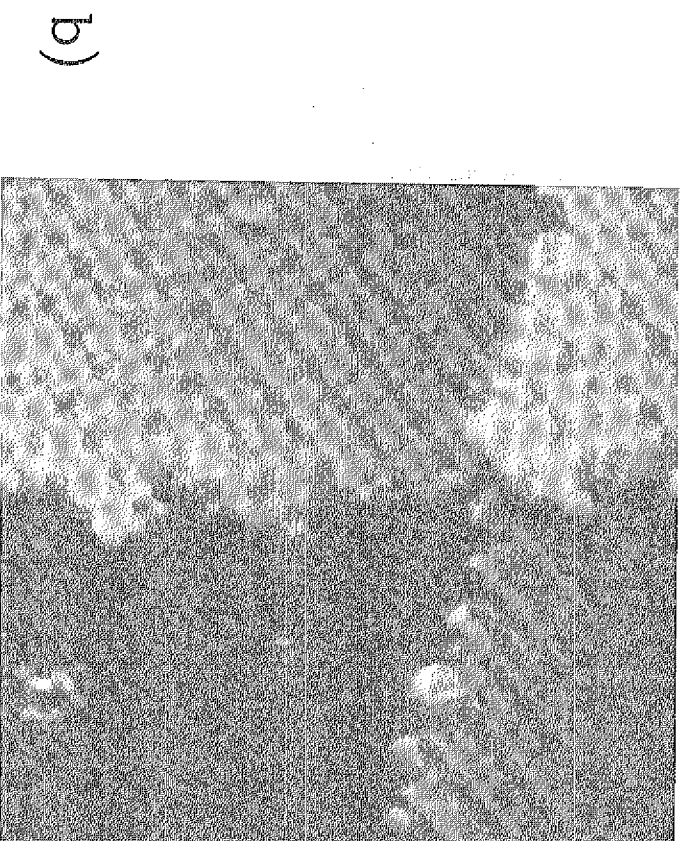
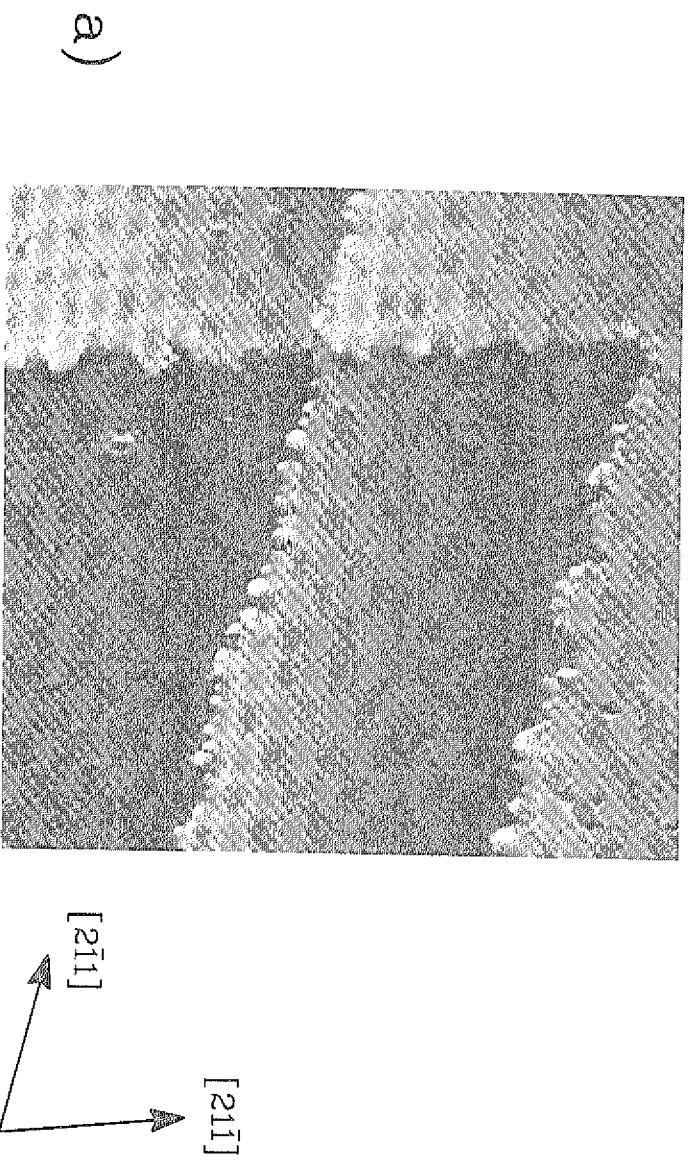
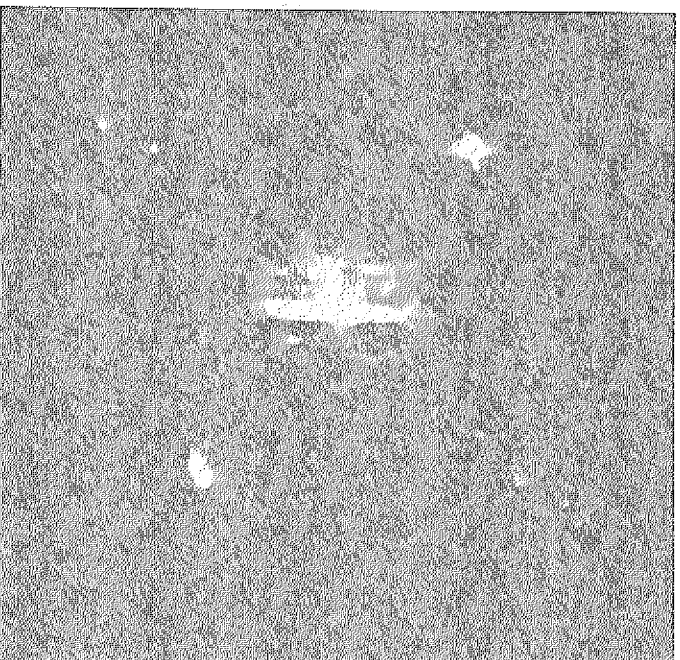


Abb. 6-9: a) Monotonar hohe Spaltstufen entlang den Diagonalen der Oberflächeneinheit; b) vergrößerter Ausschnitt des Kreuzungsbereichs der Stufen.

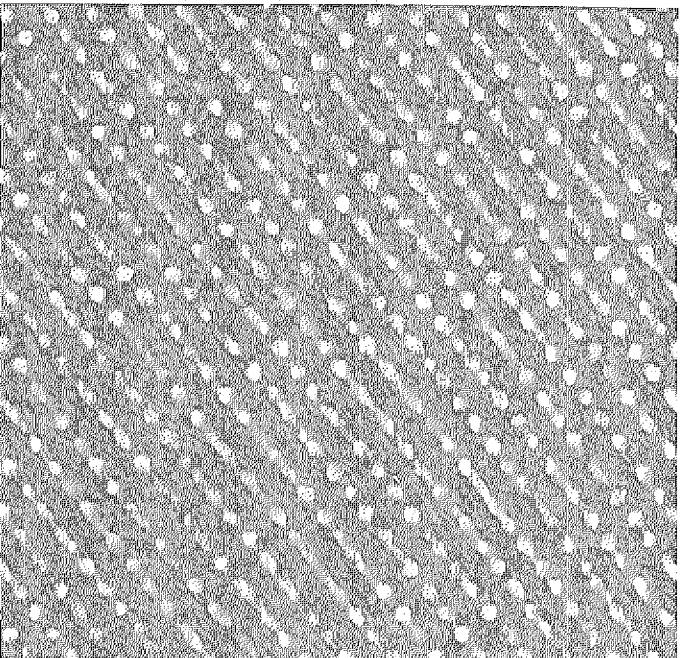
sich dadurch erklären, daß die Terminierung bei dieser Stufe nicht einheitlich mit As- oder Ga-Atomen erfolgt, sondern benachbarte Ga-As Ketten an der Stufenkante in $[2\bar{1}1]$ abwechselnd von As- und Ga-Atomen terminiert sind. An beiden Stufen haben die As-Atome denselben Kontrast wie jene auf den Terrassen. Entlang der $[2\bar{1}1]$ -Stufenrichtung werden sie manchmal von ungefähr 0.5 nm breiten, hellen Flecken überdeckt, die wahrscheinlich an der Stufe adsorbierte Restgasatome sind.

Auffallend an den Terrassen ist eine Überstruktur entlang der $[0\bar{1}1]$ -As-Atomreihen. Besonders deutlich ist dies in der Fouriertransformierten des Bildes zu erkennen, wo neben den Reflexen, die zu der $[0\bar{1}1]$ -Richtung gehören, zwei weitere Satellitenreflexe zu sehen sind (Abb. 6-10a). Die entsprechende Modulation im Realraum entlang der $[0\bar{1}1]$ -As-Reihen ist in Abb. 6-10b durch Fourierabfilterung des $1/f$ Untergrundes für einen 10 nm^2 Bereich einer Terrasse besonders hervorgehoben. Entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung erfolgt im Abstand von durchschnittlich fünf Atomen eine erhöhte Korrugation für zwei benachbarte As-Atome. Die Erhöhung der Korrugationsamplitude setzt sich entlang der $[100]$ -Richtung über 5-8 Atomabstände fort und verschiebt sich dann entlang $[0\bar{1}1]$ um 2-3 Atompositionen. Entlang der $[100]$ -Richtung enden die Atompaare mit erhöhter Korrugation an den Stufenkanten, ohne sich auf den darunterliegenden Terrassen fortzusetzen. Diese Überstruktur konnte nur auf den hier abgebildeten Terrassen mit monoatomaren Stufen entlang den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen beobachtet werden.

Als letztes Beispiel für die beobachteten Spaltstufen zeigt Abb. 6-11 eine Stufe entlang $[2\bar{1}1]$, die auf einer in $[100]$ -Richtung gut gespaltenen Oberfläche gefunden wurde. Die Stufe begrenzt eine dreieckförmige Terrasse, deren andere Stufenrichtung entlang $[11\bar{1}]$ läuft. Im Gegensatz zu Abb. 6-7 befand sich diese Terrasse allein auf einer sonst atomar glatten Oberfläche. Abb. 6-11a zeigt ein Bild, das mit starker Hochpaßankopplung des z-Piezsignals an den Rechner aufgenommen wurde, um die atomare Struktur auf beiden Terrassen sichtbar zu machen. Anhand der Einheitszelle erkennt man den Stufenverlauf entlang der Diagonalen der Oberflächeneinheitszelle. Der gemessene Wert zwischen der $[2\bar{1}1]$ -Stufenrichtung und der $[100]$ -Richtung beträgt 40° und liegt damit um 5° über dem geometrischen Wert von 35.2° . Dies ist wiederum auf die in Kap. 6.1.1 erwähnte Verzerrung durch das Piezoröhrchen beim Rastern zurückzuführen. Die Messung der Stufenhöhe mit dem geeichten z-Piezo ergab einen Wert von 0.6 nm, was einer Stufenhöhe von drei Atomlagen entspricht. Dies ist konsistent mit



a)



b)

Abb. 6-10: a) Fouriertransformierte von Abb. 6-9a; b) Modulation entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung im Realraum.

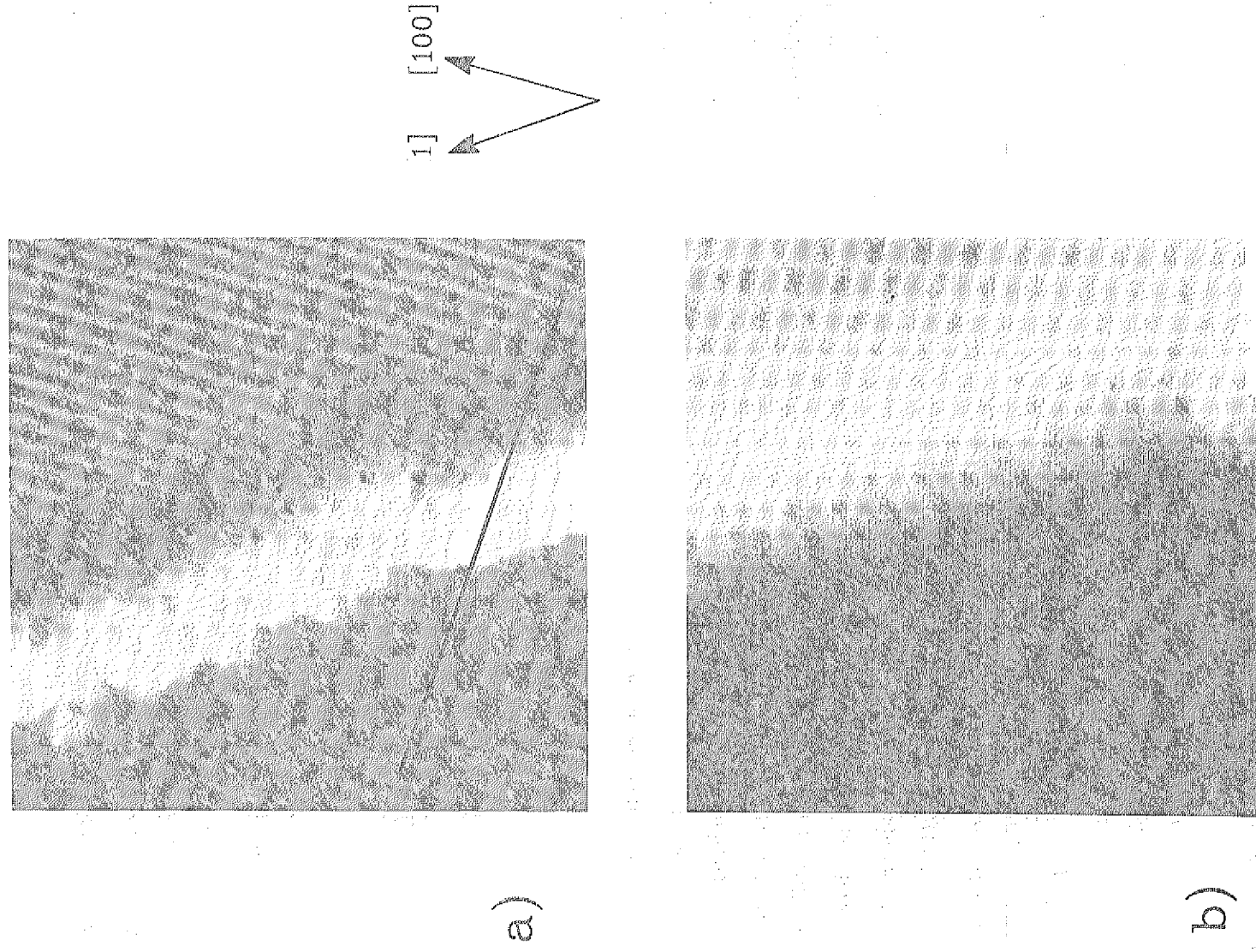


Abb. 6-11: a) Dreifachstufe aufgenommen mit starker Hochpaßankopplung; b) verkleinerter Ausschnitt ohne Hochpaßankopplung.

dem Verlauf der As-Reihen entlang $[0\bar{1}1]$.

Wie die Linie in Abb. 6-11a zeigt, tritt an der Stufe entlang den $[0\bar{1}1]$ -As-Reihen ein Phasensprung auf, der immer nur durch Stufenhöhen mit ungeradzahligem Atomlagen erzeugt wird. Da die Stufenstruktur durch die Hochpaßankopplung beeinflusst werden kann (die Hochpaßankopplung bewirkt eine Differenzierung des Bildes), wurde von einem kleineren Ausschnitt der Stufe ein Bild ohne Hochpaßankopplung aufgenommen (Abb. 6-11b). Um die atomare Struktur auf beiden Terrassen sichtbar zu machen, wurden die Grauwertunterschiede entsprechend der Höhendifferenz beider Terrassen mit Hilfe des Rechners verringert. Die Stufenstruktur besteht aus 1.5 nm langen, hellen Streifen, die entlang der zweiten Diagonalen der Oberflächeneinheit zelle in $[2\bar{1}1]$ -Richtung laufen und an den As-Atomreihen der oberen Terrasse enden. Entlang der $[2\bar{1}1]$ -Richtung haben die Streifen denselben Abstand wie die As-Atome auf der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Oberfläche.

Abb. 6-12 zeigt die Aufsicht und den Querschnitt eines geometrischen Modells dieser Stufe. Die hellen Streifen in Abb. 6-11a entlang der $[2\bar{1}1]$ -Richtung entsprechen der Projektion von Ga-As Ketten auf die $(0\bar{1}\bar{1})$ -Ebene, die in $[10\bar{1}]$ -Richtung schräg die Stufe hinunterlaufen. Die Stufe verläuft treppenförmig entlang $[2\bar{1}1]$ und setzt sich aus drei benachbarten, einfachen $[2\bar{1}1]$ -Stufen zusammen, die eine $(\bar{1}\bar{3}\bar{1})$ -Facette ausbilden. Je nach Terminierung der $(\bar{1}\bar{3}\bar{1})$ -Oberfläche ergeben sich für das As-Atom ein bzw. zwei freie Bindungen. Die Tatsache, daß die Stufe heller erscheint als die obere Terrasse, kann auf eine verminderte Austrittsarbeit der relativ hochinduzierten $(\bar{1}\bar{3}\bar{1})$ -Facette gegenüber der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Oberfläche zurückgeführt werden. Da der Strom exponentiell von der Austrittsarbeit abhängt, führt eine verminderte Austrittsarbeit zu einer Stromerhöhung, auf die der Regelkreis durch Zurückziehen der Nadel reagiert. Eine Erhöhung der lokalen Zustandsdichte durch die zwei freien Bindungen pro As-Atom auf der $(\bar{1}\bar{3}\bar{1})$ -Facette sollte sich in den Konturen eines Konstantstrom-Bildes nicht so stark bemerkbar machen, da der Tunnelstrom nur proportional zur lokalen Zustandsdichte zunimmt.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß auf allen Spaltoberflächen der Großteil der gefundenen Stufen (>90%) Stufenhöhen von einer Atomlage aufwiesen. Auf schlecht gespaltenen Oberflächen ergab sich auf verschiedenen Bereichen der Oberfläche eine hohe Dichte von Spaltstufen ($> 5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$), wobei die Stufenrichtung nicht mit der

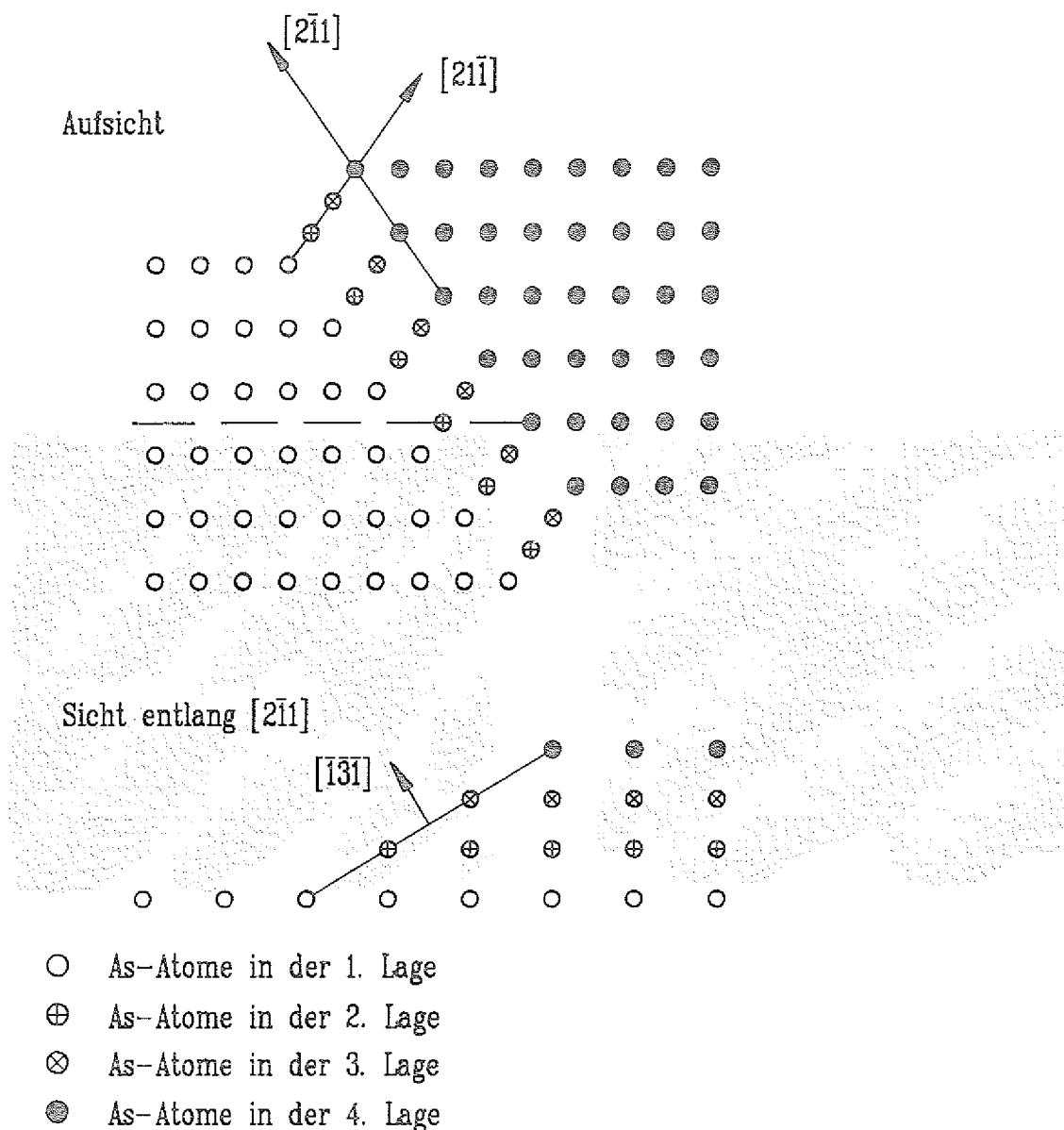


Abb. 6-12: Modell zur Dreifachstufe in Abb.6-11.

Spalttrichtung übereinzustimmen brauchte. Gut gespaltene Oberflächen zeichneten sich durch ca. $1\mu\text{m}^2$ große, atomar flache Terrassen aus, die manchmal von Stufen entlang den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen durchzogen waren. Die Spaltstufendichte gut gespaltener Proben lag unter 10^4 cm^{-1} .

6.1.4 Punktdefekte

In Abb. 6–8 sind entlang den $[0\bar{1}1]$ -As-Reihen kleine, 0.08 nm tiefe Löcher zu sehen, wie sie ebenfalls von Feenstra et. al. beobachtet wurden [32]. Solche Punktdefekte wurden auf dem As-Untergitter auf allen Spaltoberflächen gefunden, traten aber bei hoher Spaltstufendichte, d.h. bei mikroskopisch schlechter Spaltung häufiger auf. Abb. 6–13 zeigt zwei Punktdefekte auf dem As-Untergitter in hoher Auflösung.

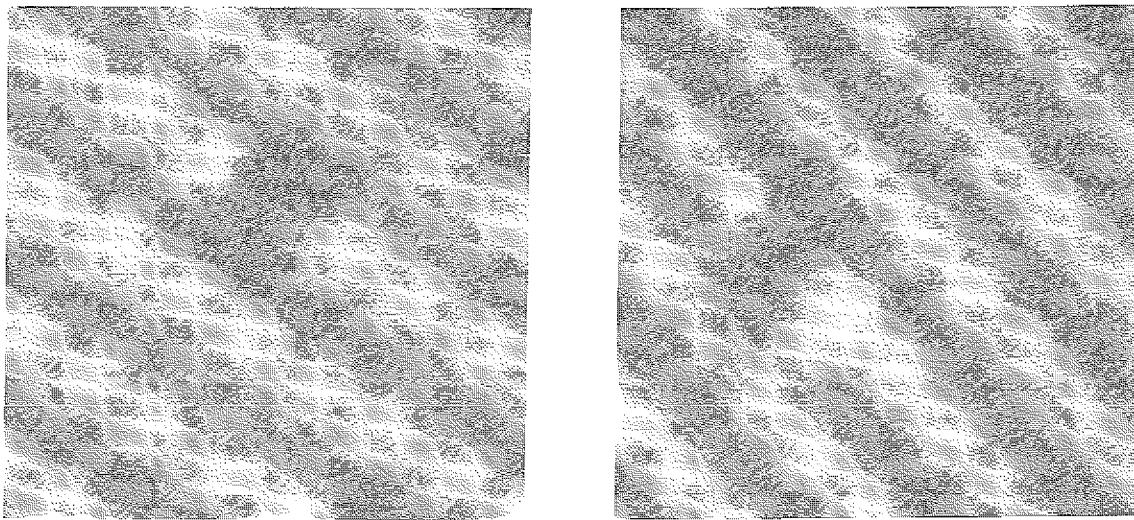


Abb. 6-13: Punktdefekte auf dem As-Untergitter: Die Rasterweiten in beiden Bildern betragen ungefähr 2.5×2.5 nm.

Deutlich erkennt man die lokale Begrenzung der Punktdefekte auf genau einen As-Gitterplatz. Die Punktdefekte in Abb. 6–8 haben im RTM-Bild denselben Kontrast wie die Kinken an den Stufen in Abb. 6-8. Die laterale Größe der Punktdefekte war in einem Spannungsbereich von -4 V bis -1.5 V unabhängig von der angelegten Probenvorspannung. Auf schlecht gespaltenen Oberflächen betrug die Dichte der As-Punktdefekte ungefähr 10^{12} cm^{-2} , was einem relativen Anteil von $2 \cdot 10^{-3}$ As-Atomen entspricht.

Auf dem Ga-Untergitter wurden ebenfalls Punktdefekte beobachtet. Abb. 6–14 zeigt

ein RTM-Bild, das bei einer positiven Probenvorspannung von +2 V aufgenommen wurde. Deutlich sind wiederum die Ga-Atomreihen entlang $[0\bar{1}1]$ zu sehen.

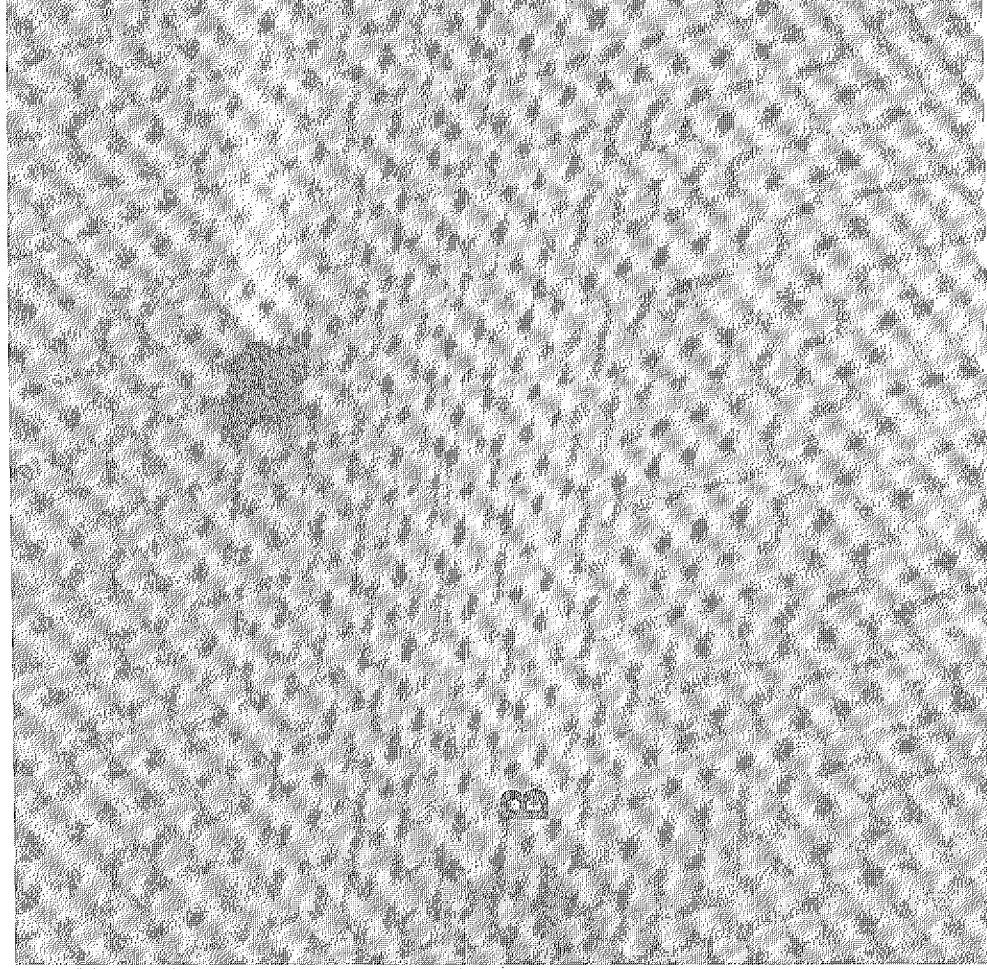


Abb. 6-14: Punktdefekte auf dem Ga-Untergitter: Die Rasterweite beträgt $16 \times 16 \text{ nm}^2$.
Der mit B gekennzeichnete Bereich ist in Abb. 6-15 abgebildet.

Entlang dieser Reihen erkennt man drei etwa 0.08 nm tiefe Löcher, die wiederum auf einem Gitterplatz lokalisiert sind. Die den Defekten in den $[0\bar{1}1]$ -Reihen benachbarten Ga-Atome erscheinen gelegentlich heller, was auch bei den As-Punktdefekten manchmal beobachtet wurde. In der oberen Hälfte ist ein isolierter Defektcluster zu erkennen, der in seiner Ausdehnung acht Ga-Atomen entspricht. Der helle Bereich rechts neben dem Defektcluster ist ein Artefakt, der durch die Hochpaßankopplung des Signals an den Rechner hervorgerufen wird.

Im Gegensatz zu den As-Punktdefekten zeigen die Ga-Punktdefekte eine starke Kontraständerung bei Variation der Vorspannung. Abb. 6-15 zeigt die in Abb. 6-14 mit B markierten Punktdefekte bei einer Tunnelvorspannung von +2 V (Abb. 6-15a) und +1.4 V (Abb. 6-15b). Abb. 6-15b zeigt an der Stelle der beiden isolierten Punktdefekte ein 2 nm breite und 0.2 nm tiefe Vertiefung. Beide Bilder wurden hintereinander aufgenommen. Um die Lage der Punktdefekte in Bezug auf die Vertiefung analysieren zu können, zeigt Abb. 6-15c eine mit Hilfe des Rechners ausgeführte Addition der beiden Bilder. Man erkennt, daß die beiden Punktdefekte genau in der 2 nm breiten Vertiefung liegen.

Die große laterale Ausdehnung der Ga-Punktdefekte bei einer Vorspannung von 1.4 V läßt sich durch eine an den Ga-Punktdefekten lokalisierte, negative Ladung erklären. Diese negative Ladung hat zwei Auswirkungen auf die Konturen eines RTM-Bildes [32]. Erstens modifiziert ihr Coulombpotential die lokale Zustandsdichte, was bei negativer Ladung zu einer Abnahme der Zustandsdichte an der Leitungsbandkante führt; dies beeinflusst die RTM-Konturen innerhalb eines Durchmessers von 1 nm um den Punktdefekt. Zweitens wird die negative Ladung des Punktdefektes durch die positive Ladung der Dotieratome abgeschirmt, die in Oberflächennähe um den Defekt herum eine Raumladungszone ausbilden. Das abgeschirmte Coulombpotential des geladenen Punktdefektes hat die Form [90]:

$$\Phi(r) = -\frac{e}{\epsilon} \cdot \frac{\exp(-r/R_s)}{r} \quad (29)$$

wobei ϵ die Dielektrizitätskonstante ist, e die Elementarladung, R_s die charakteristische Abschirmlänge und r der Abstand vom Defekt. Ein negativ geladener Punktdefekt hat ein Potential $\Phi > 0$, was eine positive Bandverbiegung zur Folge hat. Dies führt zu ei-

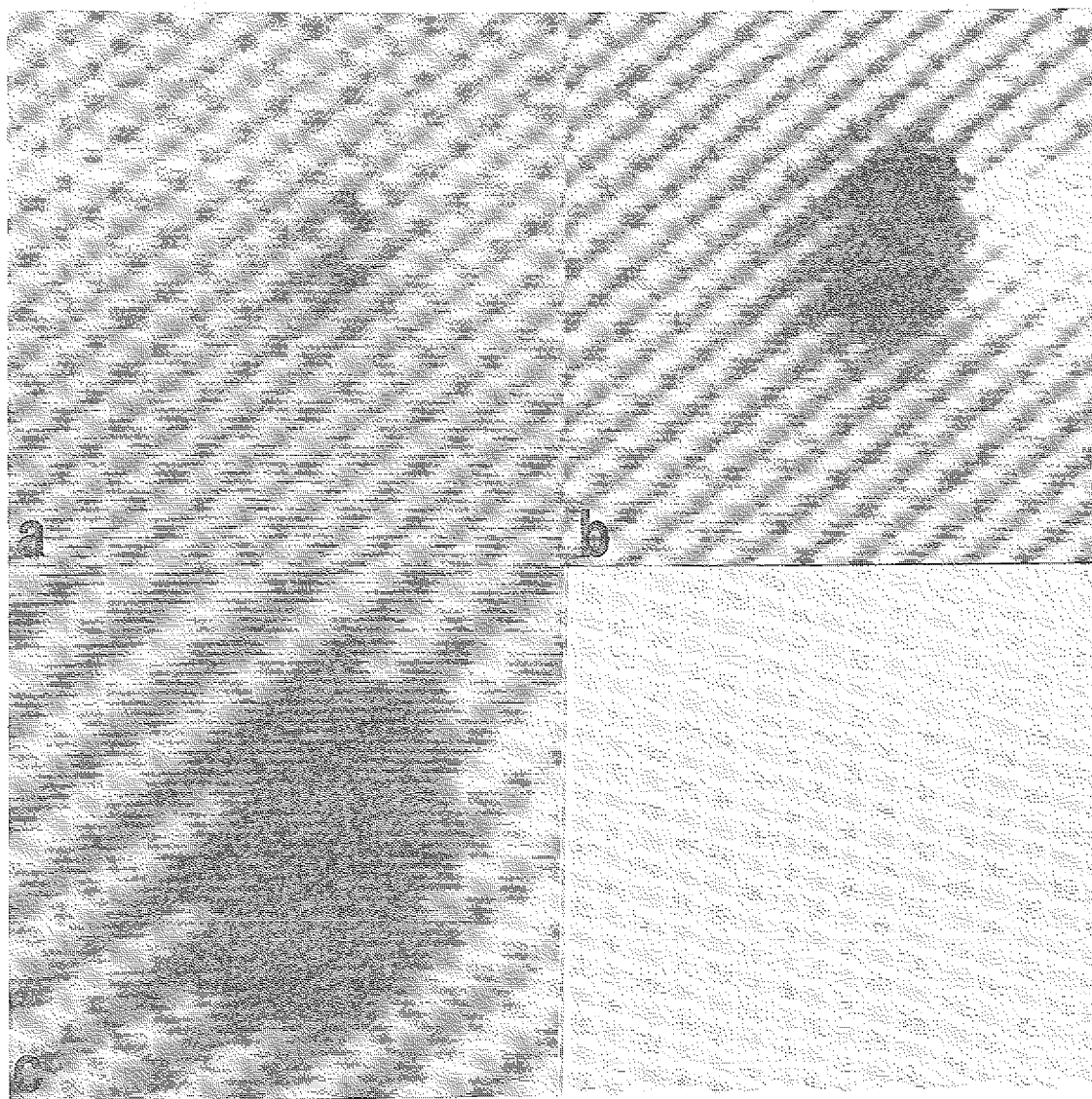


Abb.6-15: Spannungsabhängigkeit der lateralen Ausdehnung der Ga-Punktdefekte: a) +2 V Vorspannung; b) +1.4 V Vorspannung; c) Addition und Ausschnittvergrößerung der beiden Bilder.

ner verminderten Zustandsdichte um den Punktdefekt und damit zu einer Abnahme des Tunnelstroms bei positiver Probenvorspannung, auf die das RTM im Konstantstrom-Betrieb durch Heranbewegen der Nadel an die Oberfläche reagiert. Die Raumladungszone der positiv geladenen Donatoren macht sich in einer Bandverbiegung bemerkbar, die zu einer Verschiebung der $I(U)$ -Kennlinien zu höheren Tunnelvorspannungen führt [91]. Da diese Verschiebung jedoch nicht auf der Oberfläche räumlich lokalisiert ist, in dem Sinne, daß sie im Einsatz des Tunnelstroms in der $I(U)$ -Kennlinie über der Oberfläche variiert, macht sie sich im Konstantstrom-Bild nicht bemerkbar [91]. Die Höhenänderung in Abb. 6-15b kann also direkt auf eine Änderung der Zustandsdichte durch das Coulombpotential des negativ geladenen Punktdefektes zurückgeführt werden.

Stroscio et. al. berechneten im Falle der Adsorption negativ geladener Sauerstoffatome auf die GaAs-{110}-Oberfläche die Änderung der Zustandsdichte in Abhängigkeit vom lateralen Abstand vom Defekt [91]. Es ergab sich eine Abnahme des Tunnelstroms für positive Vorspannung im Bereich um den Defekt, wobei die Breite der Abnahme je nach Abstand der Nadel von der Oberfläche zwischen 1 nm und 1.5 nm betrug. Dies stimmt mit dem hier beobachteten Wert von 2 nm für zwei benachbarte geladene Punktdefekte gut überein.

Abb. 6-15a zeigt, daß bei höheren Tunnelvorspannungen der Einfluß des Coulombpotentials der Punktdefekte auf die Konturen konstanten Stroms im RTM-Bild stark abnimmt. Die beiden Punktdefekte erscheinen hier lokalisiert auf den Ga-Atomplätzen als 0.2 nm breite Vertiefungen. Wie in Kap. 2.4 erläutert, tunneln die Elektronen bei positiver Probenvorspannung von der Spitze in die unbesetzten Zustände des Leitungsbandes. Der Tunnelstrom ergibt sich dabei als Integral der Zustandsdichte gewichtet mit der Transmissionsfunktion, wobei über alle Zustände, die zum Tunnelstrom beitragen können, integriert wird. Aufgrund des flacheren Abfalls ins Vakuum von energetisch höher gelegenen Zuständen wird der Tunnelstrom zu 90% von Zuständen getragen, die an der Fermikante der Spitze liegen [92]. Bei höheren Vorspannungen macht sich also eine Verringerung der Zustandsdichte an der Leitungsbandkante weniger bemerkbar, da ihr Beitrag zum Tunnelstrom sowieso gering ist. Im Fall der Adsorption von Sauerstoff auf GaAs-{110} zeigten Stroscio et. al. [32], daß für Tunnelvorspannungen an der Leitungsbandkante der Tunnelstrom über einer negativen Punktladung um einen Faktor

10 reduziert ist. Für höhere Vorspannungen beträgt diese Reduktion jedoch nur noch die Hälfte, was sich im Konstantstrom-Bild aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand nur wenig bemerkbar macht.

6.2 Diskussion der Ergebnisse für unverformte Proben

Im letzten Kapitel wurden ausgewählte Meßergebnisse von $\{110\}$ -Spaltoberflächen unverformter GaAs Kristalle dargestellt. Bevor die Meßergebnisse für verformte GaAs-Kristalle vorgestellt werden, sollen die der unverformten Kristalle im Hinblick auf Spaltstufen und Punktdefekte im Zusammenhang mit anderen Veröffentlichungen diskutiert werden.

6.2.1 Spaltstufen

Über die mikroskopische Struktur von Spaltstufen auf GaAs- $\{110\}$ -Spaltoberflächen ist bisher wenig bekannt. Feenstra et. al. verwendeten für ihre RTM-Untersuchungen 0.5 mm dicke, Si-dotierte Wafer, deren Spaltflächen mehrere Mikrometer große, perfekte Terrassen ausbildeten, die durch hohe Stufen getrennt waren [13]. Isolierte, monoatomar hohe Stufen wurden sehr selten beobachtet. Wie die RTM-Messungen zeigten, waren aufgrund der geringen Waferdicke ihre Spaltoberflächen immer von guter Spaltqualität.

In einer weiteren RTM-Untersuchung beobachteten Möller et. al. auf entlang $[100]$ gespaltenen, $6 \times 6 \text{ mm}^2$ großen Spaltoberflächen dreieckige Facetten mit Stufenrichtungen entlang den $[100]$ -, $[211]$ - und $[411]$ -Richtungen, wobei die Stufen entlang $[100]$ immer zwei Atomlagen hoch waren [93]. Für die anderen beiden Stufenrichtungen wurden sowohl ein- als auch zweiatomare hohe Stufen beobachtet. Die hohe Stufendichte läßt auf eine schlechte Spaltqualität schließen. Die Autoren nahmen die geometrische Analyse vor, ohne atomare Auflösung erzielt zu haben. Eine Kontrolle der Stufenhöhe über die Stapelfolge ist damit ebenso wenig möglich wie eine Kontrolle der Stufenrichtungen durch Vergleich mit der atomaren Struktur. Weiterhin ist kritisch anzumerken, daß ohne genaue Kenntnis der atomaren Struktur der Stufen Aussagen über die die $\langle 211 \rangle$ -Stufen abschließenden Atomsorten gemacht werden. Solche Aussagen sind nur für entlang der Stufenrichtung perfekt verlaufende Stufen zulässig.

Im Gegensatz zu Möller et. al. [93] beobachten wir auf unseren Spaltoberflächen mit wenigen Ausnahmen nur monoatomar hohe Spaltstufen, deren Richtungen und Dichte von Probe zu Probe variierten. Bei schlecht gespaltene Proben ergab sich eine ähnlich hohe Stufendichte wie in den Bildern von Möller et. al. [93]. Wie diese fanden wir eine hohe Dichte von dreieckförmigen Terrassen, deren eine Stufenrichtung durch die Spaltrichtung gegeben war. Dies deutet darauf hin, daß die Stufendichte durch ein Abgleiten der Druckfront entlang der Spaltrichtung in eine dazu senkrechte, kristallographische Richtung hervorgerufen wird. Die Abgleitung erfolgt dabei auf mikroskopischer Skala nicht durch Ausbildung großer, durch hohe Stufen getrennter Terrassen, sondern durch Ausbildung kleiner, 20 nm langer und 3 nm breiter Terrassen, die durch monoatomare Stufen getrennt sind. Die dadurch entstehende hohe Anzahl von ungefähr $7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ Kantenatomen kann durch extrinsische Oberflächenzustände in der Bandlücke das Fermivieveau der Oberfläche festlegen, was experimentell für schlecht gespaltene Oberflächen durch orts aufgelöste Kontaktpotentialdifferenzmessungen [87] und Oberflächenphotospannungsmessungen [94] nachgewiesen wurde. Den monoatomar hohen Stufen kommt hier besondere Bedeutung zu, da die Atome an den Stufenkanten keine vollständige relaxierte Konfiguration wie an der Oberfläche einnehmen können [95]. Dadurch könnten besonders die mit den Ga-Atomen assoziierten Dangling Bond-Zustände vom Leitungsband in die Bandlücke verschoben werden, wie theoretische Bandstrukturechnungen für die unrelaxierte {110}-Oberfläche vorhersagen [73]. Bandverbiegungen aufgrund lokalisierter Oberflächenzustände in der Bandlücke machen sich in den Konturen eines Konstantstrom-Bildes nicht bemerkbar, da die Festlegung des Fermi-niveaus über die ganze Oberfläche erfolgt. Da die Festlegung des Fermi-niveaus an der Oberfläche jedoch die Valenz- und Leitungsbandkante in Bezug auf das Fermi-niveau im Volumen verschiebt, sollte sich dies bei der lokalen Tunnelspektroskopie in einer Verschiebung der $I(U)$ -Kennlinien für schlecht gespaltene Oberflächen bemerkbar machen (s. Kap. 6.1.2).

Für gut gespaltene Oberflächen stimmen unsere Ergebnisse mit denen von Feensta et. al. [13] überein. Es ergaben sich Mikrometer große Terrassen, die selten von monoatomar hohen Stufen entlang der $\langle 211 \rangle$ -Richtungen durchzogen waren. Eine mit dem RTM untersuchte gute Spaltoberfläche wies auch makroskopisch gesehen eine glatte Spaltoberfläche auf, die nur sehr selten von mit dem Auge sichtbaren Stufen durchzogen

war. Mikroskopisch schlechte Spaltoberflächen wiesen dagegen makroskopisch betrachtet eine hohe Anzahl von sichtbaren Spaltstufen auf, wobei der Kristall an den Kanten manchmal vollständig in eine andere $\{110\}$ -Spaltebene ausbrach.

Die von uns beobachteten monoatomar hohen Stufen wiesen entlang ihrer kristallographischen Richtung keine durchgehend einheitliche Struktur auf, sondern waren oft von Kinken unterbrochen oder bildeten, wie im Falle der $\langle 211 \rangle$ -Stufen, lokal über kurze Atomabstände andere Stufenrichtungen aus.

Die Richtung der Stufen variierte von Probe zu Probe, wobei kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Stufen- und Spalttrichtung festgestellt werden konnte; nur die monoatomare Höhe der Stufen war ein Merkmal aller Spaltproben. Dies deutet darauf hin, daß die Ausbildung der Stufenrichtungen von lokalen Spannungen während des Spaltprozesses bestimmt wird, wobei sich Stufen entlang niedrig induzierter Richtungen leichter ausbilden. Die beim Spaltprozeß aufgebrauchte Energie scheint aber nur zur Ausbildung monoatomarer Stufen auszureichen.

Über die Überstruktur entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung, die auf den Terrassen mit Stufen entlang den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen gefunden wurde, lassen sich im Augenblick nur Vermutungen anstellen. Da im RTM-Bild elektronische und strukturelle Effekte überlagert sind, läßt sich nicht sagen, ob diese Überstruktur durch eine Variation in der Zustandsdichte oder durch ein geometrisches Hervorstehen von benachbarten As-Atomen aus der Spaltoberfläche hervorgerufen wird. Letzteres könnte sogar ersteres hervorrufen, da eine Variation des Bucklingwinkels auch eine energetische Verschiebung der mit den As-Atomen verbundenen Oberflächenvalenzbandzustände bewirken sollte. Die Tatsache, daß die Modulation entlang einer kristallographischen Richtung verläuft, schließt eine periodische Störschwingung von außen als Ursache für die Überstruktur aus. Doppelspitzeneffekte scheinen ebensowenig als Möglichkeit in Betracht zu kommen, da bei diesen die Modulation entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung nicht variieren, sondern sich über das ganze Bild fortsetzen müßte. Im Augenblick läßt sich nicht eindeutig sagen, ob die Überstruktur in der Korrugation durch die spezielle Stufenform hervorgerufen wird oder ob z.B. durch die Spitze induzierte elektronische Zustände auf der Oberfläche [96] eine solche Korrugation hervorrufen können.

6.2.2 Punktdefekte

Die auf beiden Untergittern gefundenen Punktdefekte erscheinen in den RTM-Bildern entlang den $[0\bar{1}1]$ -Atomreihen als 0.08 nm tiefe Vertiefungen mit der lateralen Ausdehnung eines Ga- bzw. As-Atomgitterplatzes. Die Ausdehnung des As-Punktdefektes war unabhängig von der angelegten Vorspannung, woraus geschlossen werden kann, daß der As-Punktdefekt auf der $\{110\}$ -Oberfläche von n-dotiertem GaAs elektrisch neutral ist. Die Ausdehnung des Ga-Punktdefektes variierte dagegen stark mit der angelegten Vorspannung, was durch eine aufwärtsgerichtete Bandverbiegung, hervorgerufen durch eine negative Ladung der Punktdefekte, erklärt werden kann.

Die Lokalisierung der Punktdefekte auf einem Ga- oder As-Gitterplatz läßt den Schluß zu, daß es sich bei diesen Defekten um intrinsische Defekte der Oberfläche handelt und nicht um Adsorbate, die, wie Abb. 6–8 zeigt, einen viel breiteren und für die beiden Untergitter entgegengesetzten Kontrast hervorrufen. Als intrinsische Defekte kommen Leerstellen ($V_{\text{Ga}}, V_{\text{As}}$), Antisitedefekte (As auf Ga-Platz (As_{Ga}) oder Ga auf As-Platz (Ga_{As})), Dotieratome ($\text{Si}_{\text{Ga}}, \text{Si}_{\text{As}}$) und Fremdatome in Betracht. Aufgrund der relativ hohen Konzentration der Punktdefekte (10^{12} cm^{-2}), die auf schlechten Spaltoberflächen gefunden wurde, können Fremdatome als Ursache für die Punktdefekte ausgeschlossen werden, da deren Konzentration im Volumen nur $10^{12} - 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ beträgt [122].

Bei den As-Punktdefekten fällt auf, daß sie auf den RTM-Bildern denselben Kontrast zeigen wie die Kinkpositionen an den Stufen. Da letztere fehlenden As-Atomen entsprechen, handelt es sich bei den As-Punktdefekten mit großer Wahrscheinlichkeit um Leerstellen, die auf der n-leitenden Oberfläche elektrisch neutral sind. Andere Erklärungsansätze lassen sich aus Ladungsneutralitätsgründen weitgehend ausschließen.

Ein Ga_{As} -Antisitedefekt wirkt sowohl auf der Oberfläche als auch im Volumen als doppelter Akzeptor (Ladungszustände 0, -, -), da im neutralen Zustand sein höchst gelegenes Niveau doppelt unbesetzt und somit vollständig leer ist [97]. Theoretische Berechnungen von Baraff und Schlüter [98] für das Volumen und von Allen et. al. [99] für die Oberfläche zeigen, daß die einfach und doppelt negativ geladenen Zustände des Ga_{As} -Antisitedefektes in der Bandlücke liegen, was für das Volumen experimentell von Bourgoin [100] bestätigt wurde. Auf der $\{110\}$ -Oberfläche eines n-dotierten GaAs-Kristalls sollte der Ga_{As} -Defekt also zweifach negativ geladen sein, wobei aufgrund der

damit verbundenen Aufwärtsbandverbiegung der Defekt als delokalisierte weißer Fleck (erhöhte Zustandsdichte um den Defekt) auf dem As-Untergitter im RTM-Bild erscheinen müßte.

Ein Si-Atom geht im Volumen vorzugsweise auf Ga-Plätze, wo es als Donator wirkt. Entsprechend ist ein Si_{As} -Dotieratom ein einfacher Akzeptor, der ebenso wie der Ga_{As} -Defekt negativ geladen sein sollte.

Im Gegensatz zu den Antisitedefekten haben die As- und Ga-Leerstellen amphoteren Charakter, da in beiden Fällen nur eine ungerade Anzahl von Elektronen entfernt wird, so daß das höchste besetzte Niveau im neutralen Zustand nur halb besetzt ist. Im Volumen bilden die s- und p-Zustände der vier Dangling Bonds um eine Leerstelle ein symmetrisches A_2 -Niveau und ein dreifach degeneriertes antisymmetrisches T_2 -Niveau aus [101]. Berechnungen von Dow und Smith [102] und Beyer et. al. [85] zeigen, daß an der Oberfläche die Zustände mischen, wobei die dreifach degenerierten T_2 -Niveaus aufgespalten und in ihrer Energie abgesenkt sind. Da an der Oberfläche um eine Leerstelle nur drei Dangling Bonds existieren, reduziert sich die Anzahl der T_2 -Zustände von drei auf zwei. Die Energieniveaus der drei gebundenen Zustände liegen nach theoretischen Berechnungen für die Oberfläche alle in der Bandlücke [102]. Eine As-Leerstelle sollte also für n-GaAs auf der Oberfläche negativ geladen sein. Für die berechneten Niveaus der A_1 - und T_2 -Zustände werden jedoch schon in der Literatur für das Volumen stark unterschiedliche Werte angegeben [85]. Gitterrelaxationseffekte um die Leerstelle, die einen großen Einfluß auf den Abstand der Energieniveaus mit T_2 -Symmetrie vom A_1 -Niveau haben, werden bei den Berechnungen nicht berücksichtigt. Die experimentell gefundene Neutralität der Leerstellen läßt sich durch eine Verschiebung der Energieniveaus erklären. Der energetisch höchst gelegene T_2 -Zustand befände sich dann als Resonanz im Leitungsband, während der darunterliegende halbgefüllte T_2 -Zustand Zustand sich in der Nähe der Leitungsbandkante befinden müßte.

Die negative Ladung des Ga-Punktdefektes schließt seine Interpretation als As_{Ga} aus, da sich dieser, wie Experimente [100] und theoretische Berechnungen [98] zeigen, als Donator mit den möglichen Ladungszuständen $(0, +, ++)$ verhält. Auf einer stark n-dotierten Oberfläche sollte dieser Defekt neutral sein.

Für eine Ga-Leerstelle ist die Aufspaltung der Energieniveaus an der Oberfläche

ähnlich wie für eine As-Leerstelle, wobei der halbgefüllte Zustand der Ga-Leerstelle im neutralen Zustand ungefähr 0.5 eV unterhalb der Leitungsbandkante liegt und gegenüber dem Volumen nach oben verschoben ist [98]. Bei einer n-dotierten Probe würde dies eine negative Ladung der Ga-Leerstelle erklären. In der Tat sagen Berechnungen von Baraff und Schlüter [98] für das Volumen bei n-GaAs einen dreifach negativ geladenen Zustand voraus (V_{Ga}^{3-}). In ESR-Experimenten an n-GaAs zeigte sich jedoch, daß die Ga-Leerstelle im Volumen instabil ist und in den Komplex $As_{Ga} + V_{As}$ zerfällt. Ob die Oberfläche die Stabilität einer Ga-Leerstelle begünstigt, ist unklar, zumal die Instabilität der Ga-Leerstelle nach den Berechnungen unverständlich ist, da die Anwesenheit vieler Elektronen die Stabilität der negativen Ga-Leerstelle gegenüber dem positiven Komplex $As_{Ga} + V_{As}$ eher begünstigen sollte [103].

Ein Dotieratom Si_{Ga} ist im Volumen ein Donator mit den Ladungszuständen (0,+). Auf der Oberfläche müßte ein solcher Defekt je nach Dotierung neutral oder positiv geladen sein. Erfahrungen in verschiedenen Labors zeigen, daß Si-dotierte GaAs-Kristalle sehr häufig schlechtere Spaltoberflächen aufweisen als Te-dotierte Kristalle [104]. Die Proben unterscheiden sich dahingehend, daß Te-Atome As-Atome substituieren, während Si-Atome vorzugsweise Ga-Plätze besetzen. Um das unterschiedliche Spaltverhalten zu erklären, schlugen Clemens und Mönch [105] vor, daß sich Te- und Si-Atome auf der Oberfläche unterschiedlich verhalten. Während in einem einfachen Bild die Dangling Bonds der Te- und As-Atome auf der Oberfläche gefüllt sind, sollten die Dangling Bonds der Si- und Ga-Atome leer sein. Das zusätzliche Elektron des Si-Donators könnte jedoch an der Oberfläche einen Zustand des Dangling Bonds des Si-Atoms besetzen und so einen Oberflächenakzeptorzustand induzieren, der für ein unterschiedliches Spaltverhalten der Si- und Te-dotierten Kristalle verantwortlich sein könnte. Die beobachtete Dichte der Punktdefekte von ungefähr 10^{12} cm^{-2} auf der Oberfläche läßt sich mit einer Volumenkonzentration von 10^{18} cm^{-3} Si-Dotieratomen erklären.

Abschließend läßt sich festhalten, daß sich die As-Punktdefekte aufgrund ihres Ladungsverhaltens und ihrem den Kinken an den Stufen vergleichbaren Kontrast am besten als Leerstellen erklären lassen. Für die Ga-Punktdefekte müssen sowohl Leerstellen als auch Si-Dotieratome in Betracht gezogen werden. Definitive Aussagen lassen sich nur durch zusätzliche Experimente mit p-dotierten Proben machen, die aufgrund des

amphoteren Verhaltens der Leerstellen eine Ladungsumkehr zeigen müßten. Zur genaueren Charakterisierung der Defekte wäre sicherlich eine gleichzeitige Abbildung der As- und Ga-Untergitter durch z.B. zeilenweiser Umpolung der Vorspannung bei aktivem Regelkreis wünschenswert. Dies ist jedoch wegen des damit oft verbundenen Auftretens von Spitzeninstabilitäten nicht möglich. Zusätzliche Informationen sollte wiederum der Einsatz der lokalen Tunnelspektroskopie liefern, da, wie Berechnungen von Beyer [85] zeigen, die Ga- und As-Leerstellen in der Bandlücke ausgeprägte Maxima in der Zustandsdichte haben, die sich in $I(U)$ Kennlinien bemerkbar machen müßten.

6.3 Versetzungen

Seit seiner Erfindung vor acht Jahren wurde das RTM bislang nur selten zur Untersuchung von Strukturdefekten eingesetzt. Die bisherigen Veröffentlichungen berichten vornehmlich von Defekten auf der Oberfläche, beispielsweise von Phasengrenzen verschieden orientierter, rekonstruierter Bereiche auf Halbleiteroberflächen [92] oder von den mit der Rekonstruktion der Au (111)-Oberfläche auftretenden Partialversetzungen als Folge einer Stapelfolgeänderung in der Oberfläche [106]. Nur in einer einzigen RTM Untersuchung wurde von Versetzungen berichtet, die zufällig vom Volumen auf eine PbS (001)-Spaltoberfläche treffen [107]. Die dort angebotene Interpretation eines gestörten Oberflächenbereichs mit Hilfe von Versetzungen ist jedoch unbefriedigend, da sie sich lediglich auf ein einziges, zudem undeutliches Bild stützt. Die in dieser Arbeit gezeigten RTM-Bilder von Versetzungen in GaAs, die durch eine kontrollierte Probenpräparation erzeugt wurden, sind die ersten ihrer Art [108].

Vor der RTM-Untersuchung der verformten Proben wurde an einer Vergleichsprobe eine TEM-Analyse (Philips EM 430) vorgenommen, um Informationen über die durch die plastische Verformung angeregten Gleitsysteme zu erhalten. Die beobachtete Versetzungsdichte betrug ungefähr 10^8 cm^{-2} . Wie die TEM-Analyse zeigte, wurden durch die Verformung zwei Gleitsysteme angeregt, die beide in der $(1\bar{1}1)$ -Primärgleitebene lagen. Das erste mit Schmidfaktor 0.47 hatte den Burgersvektor $a/2 [0\bar{1}\bar{1}]$, lag also senkrecht zur Spaltebene; das zweite mit Schmidfaktor 0.35 besaß den Burgersvektor $a/2 [\bar{1}\bar{1}0]$ unter 30° zur Spaltoberfläche. Zwei weitere, für die gewählte Verformungsgeometrie mögliche Gleitsysteme mit Schmidfaktor 0.35 ((111) , $[01\bar{1}]$) bzw. Schmidfaktor 0.29

$((\bar{1}\bar{1}1), [\bar{1}0\bar{1}])$ konnten in der TEM-Analyse als nicht angeregt gefunden werden. Die in der Primärgleitebene angeregten Versetzungen waren in der Mehrzahl Schrauben- und 60° -Versetzungen, deren Aufspaltung in Partialversetzungen in einem Einzelfall untersucht und nachgewiesen wurde. Des weiteren wurden in $\langle 211 \rangle$ -Richtung laufende Stufendipole sowie kleine Versetzungsringe gefunden. Die im TEM beobachteten Versetzungen entsprachen damit der in der Literatur für die Hochlastverformung bei 400°C bereits bekannten Verteilung [109,110].

Im RTM-Experiment wurden die verformten Proben in $[100]$ -Richtung gespalten; sie zeigten trotz ihrer plastischen Verformung eine optisch gute Spaltqualität. Die Spaltstufendichte variierte von Spaltprobe zu Spaltprobe. Bei schlechten Spaltungen bestand die mikroskopische Oberflächenstruktur ähnlich wie in Abb. 6-6 aus dreieckförmigen Terrassen, die durch einatomar hohe Stufen getrennt waren. Die Stufenrichtungen lagen entlang der $[100]$ -Spaltrichtung sowie der $[21\bar{1}]$ -Richtung, waren aber lokal sehr unregelmäßig ausgebildet. Ihre Dichte lag in der Größenordnung von 10^6cm^{-1} . Bei einer guten Spaltung wurden nur wenige Spaltstufen gefunden, die wie bei unverformten Proben entlang den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen verliefen.

Die mit dem Tunnelmikroskop beobachtete Versetzungsdichte betrug 10^8cm^{-2} , was einer Dichte von einer Versetzung pro Quadratmikrometer entspricht. Die Versetzungen waren nicht gleichmäßig über die Oberfläche verteilt; vielmehr wurden in der Nähe einer Versetzung oft zwei bis drei weitere Versetzungen gefunden, was auf ein Gleiten der Versetzungen in Bändern durch den Kristall während der Verformung zurückzuführen ist. Die beobachtete Versetzungsdichte war für typische Rasterweiten des Mikroskopes von $0.01\mu\text{m}^2$ bei atomarer Auflösung immer noch sehr gering, so daß es oft einen ganzen Tag in Anspruch nahm, eine Versetzung zu finden.

Bei der Suche nach Versetzungen orientierte man sich an zweiatomar hohen Stufen, die entlang der $[21\bar{1}]$ verliefen, da diese kristallographische Richtung die Schnittgerade zwischen Primärgleitebene und Spaltebene ist. Hatte man eine solche Stufenrichtung gefunden, verschob man die Probe durch Anlegen von Offsetspannungen an die äußeren Piezoröhrchen in beiden Richtungen der Stufe, bis man den Kern der Versetzung gefunden hatte. Die Suche fand meistens mit Rasterweiten von $0.1\mu\text{m}^2$ ohne atomare Auflösung statt. Hatte man den Kern gefunden, waren in der Regel mehrere Versu-

che notwendig, um atomare Auflösung zu erreichen. Hierzu variierte man die Tunnelvorspannung und den Tunnelstrom so lange, bis sich eine stabile Spitzenkonfiguration einstellte, die erst die atomare Abbildung der Kernstruktur ermöglicht.

Dies gelang nur bei negativer Probenvorspannung. Alle in diesem Kapitel vorgestellten RTM-Bilder zeigen aus diesem Grunde das As-Untergitter. Versuche mit positiver Vorspannung ergaben keine stabile atomare Auflösung des Ga-Untergitters über den ganzen Rasterbereich. Die Ursache dafür sind Spitzeninstabilitäten, die wahrscheinlich wieder durch einen an der Spitze adsorbierten GaAs-Cluster hervorgerufen wurden (s. Kap. 6.1.1).

6.3.1 Vollständige Versetzungen

Abb. 6-16 zeigt eine vollständige Versetzung. Der Kern der Versetzung ist am Punkt C zu sehen. Vom Kern ausgehend erstreckt sich nach rechts, entlang der $[21\bar{1}]$ Richtung eine Stufe, die nach 12 nm eine Spaltstufe A-B kreuzt.

Die Stufenhöhe der durch die Versetzung induzierten Stufe läßt sich wiederum durch geometrischen Phasenvergleich der As-Atomreihen auf der oberen und der unteren Terrasse entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung ermitteln. Verfolgt man die As-Reihen entlang der in Abb. 6-16 eingezeichneten Linie, so sieht man, daß auf den durch die Versetzungsstufe getrennten Terrassen die As-Reihen in Phase sind, während bei der Spaltstufe ein Phasensprung auftritt, d.h. die As-Reihen der unteren Terrasse enden hier genau zwischen den As-Reihen der durch die Spaltstufe terminierten oberen Terrasse. Folglich handelt es sich bei der Spaltstufe um eine monoatomar hohe Stufe (vergl. Abb. 6-9b), während die durch die Versetzung induzierte Stufe zwei Atomlagen hoch ist. Dies wurde durch Messung der Auslenkung des kalibrierten z-Piezos während des Experiments bestätigt.

Führt man ausgehend von der mit der Linie markierten As-Reihe auf der unteren Terrasse einen Umlauf um die Versetzung durch (Pos. 1-2-3-4 in Abb. 6-16), so endet man wieder auf der durch die Linie markierten As-Reihe der oberen Terrasse. Aus diesem Umstand sowie aus der gemessenen Stufenhöhe und der "In-Phasenlage" der As-Reihen auf der oberen und unteren Terrasse der Versetzungsstufe kann auf eine vollständige Versetzung mit Burgersvektor $a/2[0\bar{1}1]$ senkrecht zur Oberfläche ge-

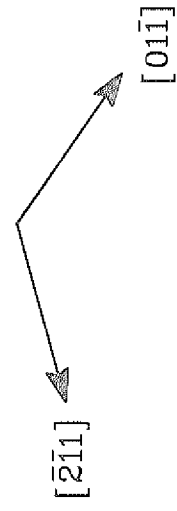
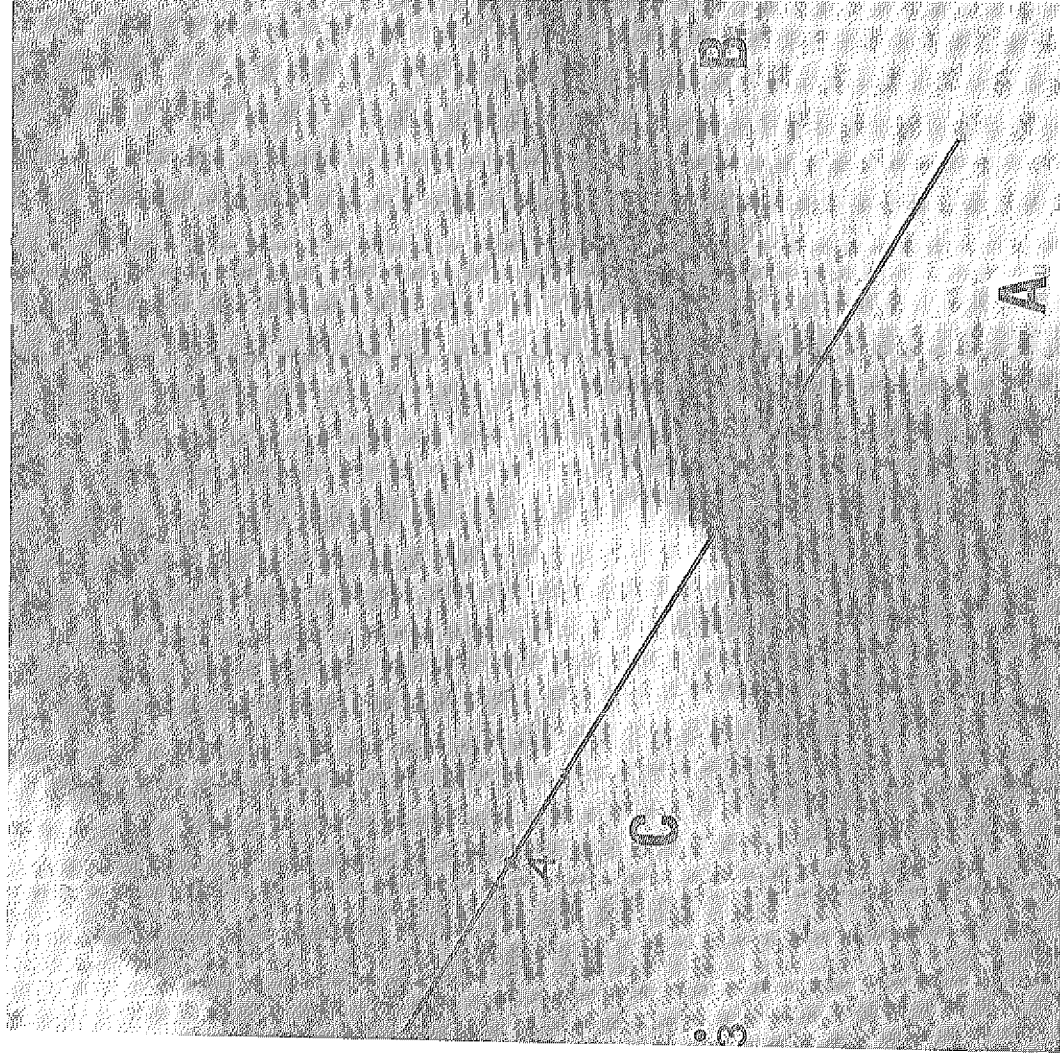


Abb. 6-16: Vollständige Versetzung mit Burgersvektor senkrecht zur Oberfläche. Der Kern der Versetzung ist am Ort C zu sehen.

geschlossen werden. Die durch die Versetzung hervorgerufene Stufe verläuft entlang der $[21\bar{1}]$ -Richtung. Da diese Richtung die Schnittgerade zwischen Spaltoberfläche und Primärgleitebene ist, liegt die Versetzung in der Primärgleitebene und ist durch das Gleitsystem $((\bar{1}1\bar{1}), [0\bar{1}\bar{1}])$ charakterisiert.

Bei der hier gezeigten Versetzung kann es sich um eine reine Schraubenversetzung mit Linienrichtung parallel zum Burgersvektor oder um eine 60° -Versetzung mit Linienrichtung parallel zu $[\bar{1}\bar{1}0]$ oder $[10\bar{1}]$ handeln. Da man mit dem RTM nur die Oberfläche abbildet und somit keine Informationen über die Linienrichtung der Versetzung gewinnt, kann man zwischen den beiden Möglichkeiten Schrauben- oder 60° -Versetzung anhand eines RTM-Bildes nicht direkt unterscheiden.

Die unterschiedliche Stufenhöhe zwischen Spalt- und Versetzungsstufe macht sich in der Struktur des Stufenrandes bemerkbar. Bei der einatomar hohen Spaltstufe verlaufen die As-Reihen bis zum Stufenrand hin geradlinig und enden dort an einem As-Atom. Bei der zweiatomar hohen Versetzungsstufe verbiegen sich auf der oberen Terrasse in der Nähe des Versetzungskerns die As-Reihen an der Stufe nach oben in $[100]$ -Richtung, wobei die Verbiegung mit zunehmender Entfernung vom Versetzungskern abnimmt.

Die Stufenkante selbst wird von zwei As-Dangling-Bonds gebildet, was am rechten Bildrand gut zu erkennen ist. Bei den Dangling-Bonds könnte es sich zum einen um die freien As-Bindungen am oberen Rand der Stufe und zum anderen um die As-Bindungen auf halber Höhe handeln, die jeweils zwischen den Stufenatomen der oberen Lage sitzen. Jedoch sind Spitzeneffekte bei der atomaren Abbildung höherer Stufen nicht auszuschließen. Wenn die Struktur der Stufe steiler ist als die der Spitze, kann beim Rastern über die Stufe der Tunnelstrom auf ein seitlich sitzendes Spitzenatom übergehen und eine Stufenstruktur vortäuschen. Da diese Stufenstruktur jedoch bei mehreren Spitzen auftrat, können Spitzeneffekte weitgehend ausgeschlossen werden.

Verfolgt man die As-Reihen unterhalb des Versetzungskerns entlang der $[01\bar{1}]$ -Richtung, so stellt man fest, daß diese im Gegensatz zu den Reihen oberhalb des Kerns leicht nach unten in $[\bar{1}00]$ -Richtung verbogen sind. Bei der Verbiegung handelt es sich nicht um einen Piezoeffekt oder sonstigen Artefakt, da nur die As-Reihen um den Versetzungskern davon betroffen sind. Offensichtlich handelt es sich hierbei um eine langreichweitige Verzerrung des As-Gitters an der Oberfläche aufgrund des mit der Versetzung verbun-

denen elastischen Spannungsfeldes. Der Kern der Versetzung ist stark lokalisiert, da sich die zweiatomare hohe Stufe am Versetzungskern innerhalb von zwei bis drei Gitterkonstanten entlang der $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung vollständig ausbildet. Die rasche Ausbildung der durch die Versetzung hervorgerufenen Stufe führt zu einer starken Verzerrung der Gitters an der Oberfläche, die sich in der oben beschriebenen Verbiegung der As-Reihen bemerkbar macht.

Besonders auf der Terrasse in der oberen Bildhälfte ist wiederum die hohe Anzahl von As-Punktdefekten auffallend, die auch in stufenreichen Regionen unverformter Proben beobachtet wurde. Ihre Dichte betrug ungefähr 10^{12} cm^{-2} , was einer Volumenkonzentration von 10^{18} cm^{-3} entsprechen würde.

Ein interessantes Phänomen, das während der Abbildung von Versetzungen häufig zu beobachten war, ist das Gleiten und Quergleiten von Versetzungen. In Abb. 6-17 ist zu sehen, wie die in Abb. 6-16 gezeigte Versetzung über die dort mit A-B gekennzeichnete Spaltstufe gleitet. Während sich in Abb. 6-17a der Kern der Versetzung kurz vor der Spaltstufe befindet (s. Pfeil), ist er im darauffolgenden Bild über die Stufe hinweggeglitten und befindet sich nun kurz dahinter. Interessant ist, daß sich in der Versetzungstufe beim Gleiten über die Spaltstufe eine Kinke ausgebildet hat, woraus auf ein gleichzeitiges lokales Klettern der Versetzung geschlossen werden kann. In Abb. 6-17c hat sich die Versetzung nochmals um 4 nm nach links bewegt.

Das Gleiten von Versetzungen während des RTM-Experiments über Distanzen von bis zu 100 nm wurde sehr oft beobachtet. Der Gleitprozeß erfolgte dabei in Schritten von 5-10 nm, wobei sich die Versetzung auf der Gleitebene in beiden Richtungen entlang der $\langle 211 \rangle$ -Geraden bewegen und sogar die Gleitebene wechseln konnte. Ein Beispiel für den letzteren Gleitprozeß ist in Abb. 6-18 gezeigt. Man erkennt in Abb. 6-18a eine vollständige Versetzung (s. Pfeil), deren zweiatomare hohe Stufe entlang $[2\bar{1}\bar{1}]$ nach 17 nm in eine normale Spaltstufe übergeht. In Abb. 6-18b ist die Versetzung 15 nm nach rechts in der Primärgleitebene geglitten und hat dann ihre Gleitrichtung in die $(1\bar{1}\bar{1})$ -Quergleitebene gewechselt, deren Schnittgerade mit der Spaltoberfläche eine $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung ist. In Abb. 6-18c hat sich die Versetzung nach weiterem Gleiten in der Quergleitebene mit einer darüberliegenden Versetzung in der Primärgleitebene annihiliert, die, wie an der Terrassenfolge leicht zu erkennen ist, einen entgegengesetzten Burgers-

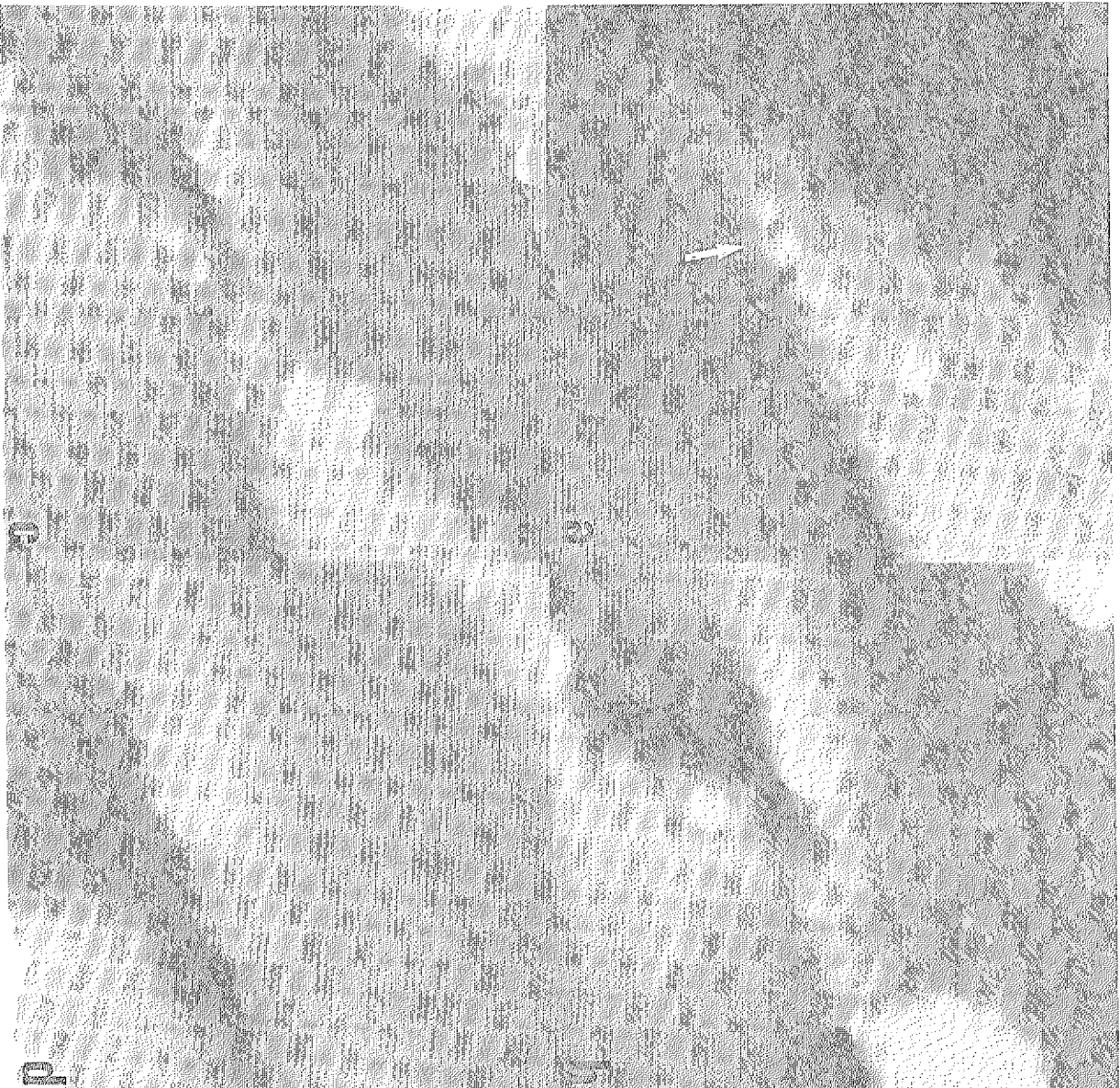


Abb. 6-17: Gleiten der in Abb. 6-16 gezeigten Versetzung über die im Abb. 6-16 mit A-B gekennzeichnete Spaltstufe.

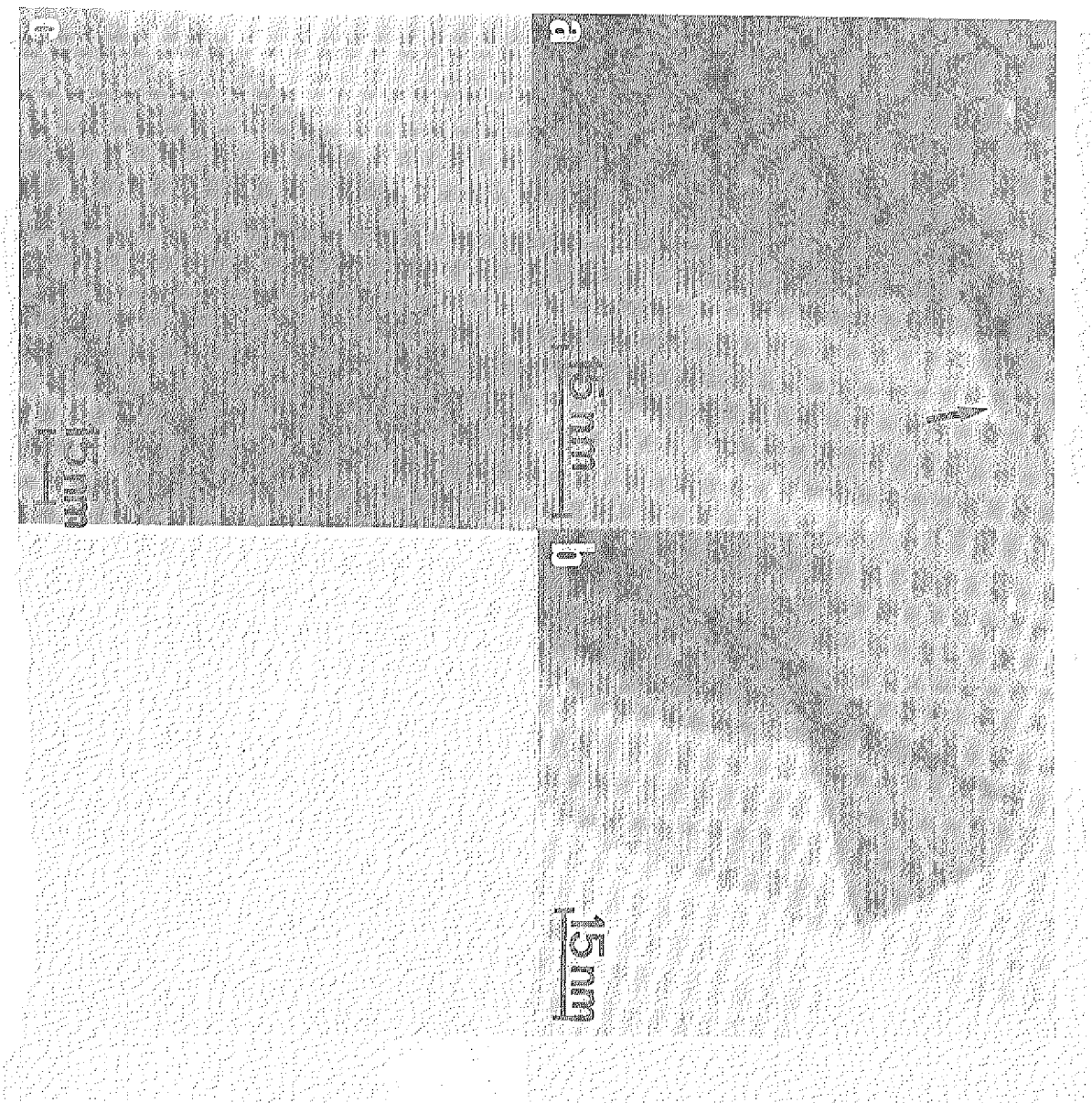


Abb. 6-18: Quergleiten einer Versetzung mit anschließender Annihilation.

vektor hatte. Nach der Annihilation beider Versetzungen bleiben zwei Terrassen zurück, die durch eine zweiatomare hohe Stufe voneinander getrennt sind.

Das Quergleiten von Versetzungen ermöglicht eine eindeutige Bestimmung des Versetzungstyps. Da 60° -Versetzungen, bei denen der Burgersvektor unter 60° zur Versetzungslinie steht, nicht quergleiten können, muß es sich bei der hier gezeigten Versetzung um eine Schraubenversetzung mit Burgersvektor parallel zur Versetzungslinie gehandelt haben.

Wie man in Abb. 6-18c erkennt, lagen beide Versetzungen vor dem Gleiten in der Primärgleitebene und waren 75 nm voneinander getrennt. Die vom Gleitprozeß stammenden Stufen der beiden Versetzungen mit Stufenrichtung entlang $[21\bar{1}]$ gehen, wie in der unteren und oberen Bildhälfte von Abb. 6-20c zu erkennen ist, in normale Spaltstufen in $[100]$ -Richtung über. Da diese durch die Spaltung entstanden sind, müssen sich die Versetzungen zum Zeitpunkt der Trennung der beiden $(0\bar{1}\bar{1})$ -Ebenen am Schnittpunkt der zu den Versetzungen gehörenden $[21\bar{1}]$ -Stufen mit den $[100]$ -Spaltstufen befunden haben. Die in Abb. 6-18a sichtbare $[21\bar{1}]$ -Stufe der Versetzung hat sich dann während der Spaltung ausgebildet. Solch spaltungsinduziertes Gleiten von Versetzungen kann durch die Wechselwirkung zwischen dem Spannungsfeld um die Versetzung und dem Spannungsfeld um den bei der Spaltung sich durch den Kristall ausbreitenden Spaltriß hervorgerufen werden. Hinter dem Spaltriß, also dort, wo die Spaltfläche schon existierte, bildeten sich durch das Versetzungsgleiten Stufen in $[21\bar{1}]$ -Richtung aus, deren Länge oft mehrere Mikrometer betrug. Im Gegensatz zu Spaltstufen zeichnen sich die Versetzungsstufen durch ihre Geradlinigkeit und ihre Richtung aus, sowie dadurch, daß sie Spaltstufen über große Distanzen hinweg kreuzen können.

6.2.1 Aufgespaltene Versetzungen

Wie in Kap. 4.1 beschrieben, können vollständige Versetzungen im Volumen in Partialversetzungen aufspalten, was in TEM-Untersuchungen an hochlastverformten GaAs-Kristallen auch experimentell nachgewiesen wurde [109]. Daß aufgespaltene Versetzungen auch an der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Spaltoberfläche existieren, zeigt Abb. 6-19. In der oberen Bildhälfte erkennt man an der Spaltstufe den Kern der ersten Partialversetzung (A), von der sich in der Oberfläche ein Stapelfehler in $[\bar{2}1\bar{1}]$ -Richtung bis zum Kern der zwei-

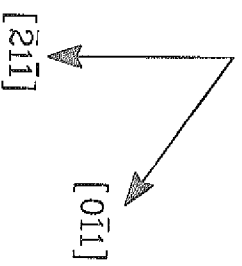
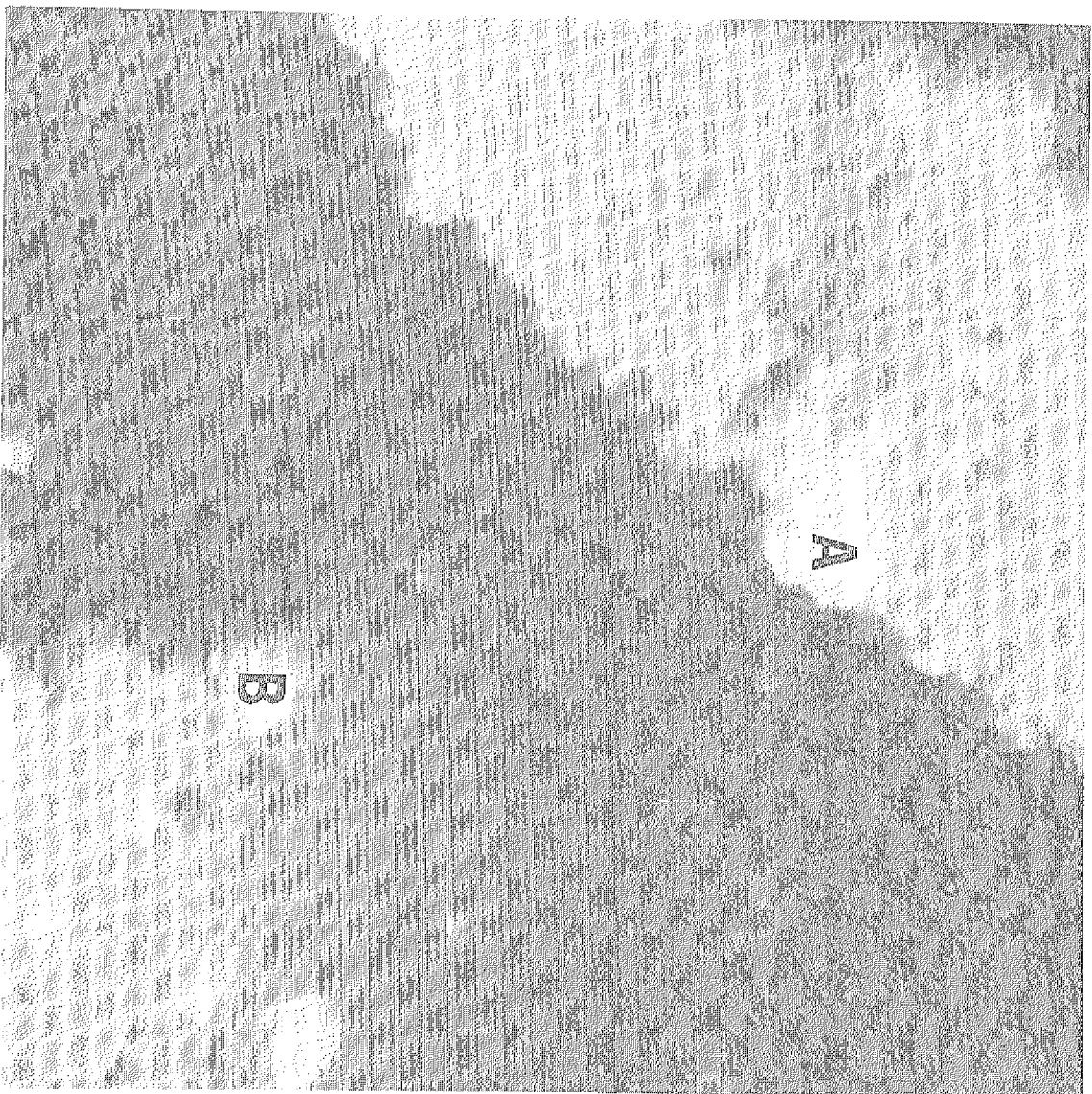


Abb. 6-19: Aufgespaltene Versetzung mit eingeschlossenem Stapelfehler: Die Kerne der Partialversetzungen befinden sich an den mit A und B markierten Orten.

ten Partialversetzung erstreckt. Der Stapelfehler macht sich im RTM-Bild als Reihenversatz der in $[01\bar{1}]$ -Richtung laufenden As-Reihen bemerkbar. Vom Kern der zweiten Partialversetzung (B) erstreckt sich eine monoatomar hohe Stufe entlang $[\bar{2}1\bar{1}]$. Die gemessene Aufspaltungsweite zwischen den Partialversetzungen beträgt 12 nm. Da der Stapelfehler und die mit der zweiten Partialversetzung assoziierte Stufe in $[\bar{2}1\bar{1}]$ -Richtung verlaufen, liegt die aufgespaltene Versetzung in der Quergleitebene. Wiederum deutlich zu erkennen ist die hohe Anzahl von As-Punktdefekten auf der Oberfläche.

Die mit A gekennzeichnete Partialversetzung ist in Abb. 6-20 nochmals hochaufgelöst abgebildet. Der Kern der Versetzung erscheint als 0.08 nm tiefe Vertiefung mit der lokalen Ausdehnung eines As-Atomgitterplatzes. Während die As-Reihe entlang $[01\bar{1}]$ oberhalb des Versetzungskerns am Kern leicht verbogen ist, erkennt man für die As-Reihen unterhalb des Kerns deutlich den Reihenversatz, der sich entlang der Diagonalen der Oberflächeneinheitszelle in $[\bar{2}1\bar{1}]$ -Richtung fortsetzt. Daß dieser Reihenversatz die Folge eines vom Kern ausgehenden intrinsischen Stapelfehlers ist, läßt sich im Bild direkt an der Stapelfolge der As-Reihen in $[11\bar{1}]$ -Richtung ablesen (Abb. 6-21a). Da vom Kern der ersten Partialversetzung keine Stufe ausgeht, liegt ihr Burgersvektor in der Oberfläche und ist gegeben durch $a/6[\bar{2}1\bar{1}]$.

Die Richtung des Burgersvektors läßt sich durch einen Burgersumlauf um die Partialversetzung festlegen. Dabei muß man, da es sich um eine Partialversetzung handelt, mit dem Burgersumlauf auf dem Stapelfehler beginnen [76] (Pos. 1 in Abb. 6-21a). Definiert man die Versetzungslinie $\vec{l}$ als in den Kristall hineingehend, so erfolgt der Burgersumlauf nach der "Rechten-Hand-Regel" im Uhrzeigersinn um die Partialversetzung (Pos. 1-2-3-4-1 in Abb. 6-21a). Wie die Linie entlang der Positionen 4 bis 1 in $[\bar{1}00]$ -Richtung zeigt, liegt das As-Atom auf dem Stapelfehler nicht auf dieser Linie, so daß der Schließungsfehler und damit der Burgersvektor nach der FS/RH (Final-Start/Right-Handed)-Konvention $[111]$ in $[\bar{2}1\bar{1}]$ -Richtung zeigt. Der durch den Stapelfehler hervorgerufene Reihenversatz der As-Reihen in $[\bar{1}00]$ -Richtung beträgt 0.16 nm und liegt damit unter dem theoretischen Wert von $a/6 \cos([\bar{2}1\bar{1}], [\bar{1}00]) = 0.187$ nm.

Die mit B gekennzeichnete Partialversetzung, dargestellt in Abb. 6-22, induziert, wie die Stufenhöhenmessung mit dem geeichten z-Piezo zeigt, eine monoatomar hohe Stufe auf der Oberfläche. Wiederum erscheint der Kern der Versetzung am Ende des

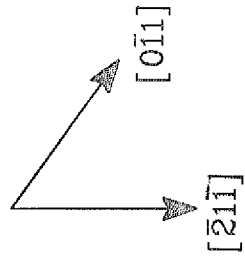
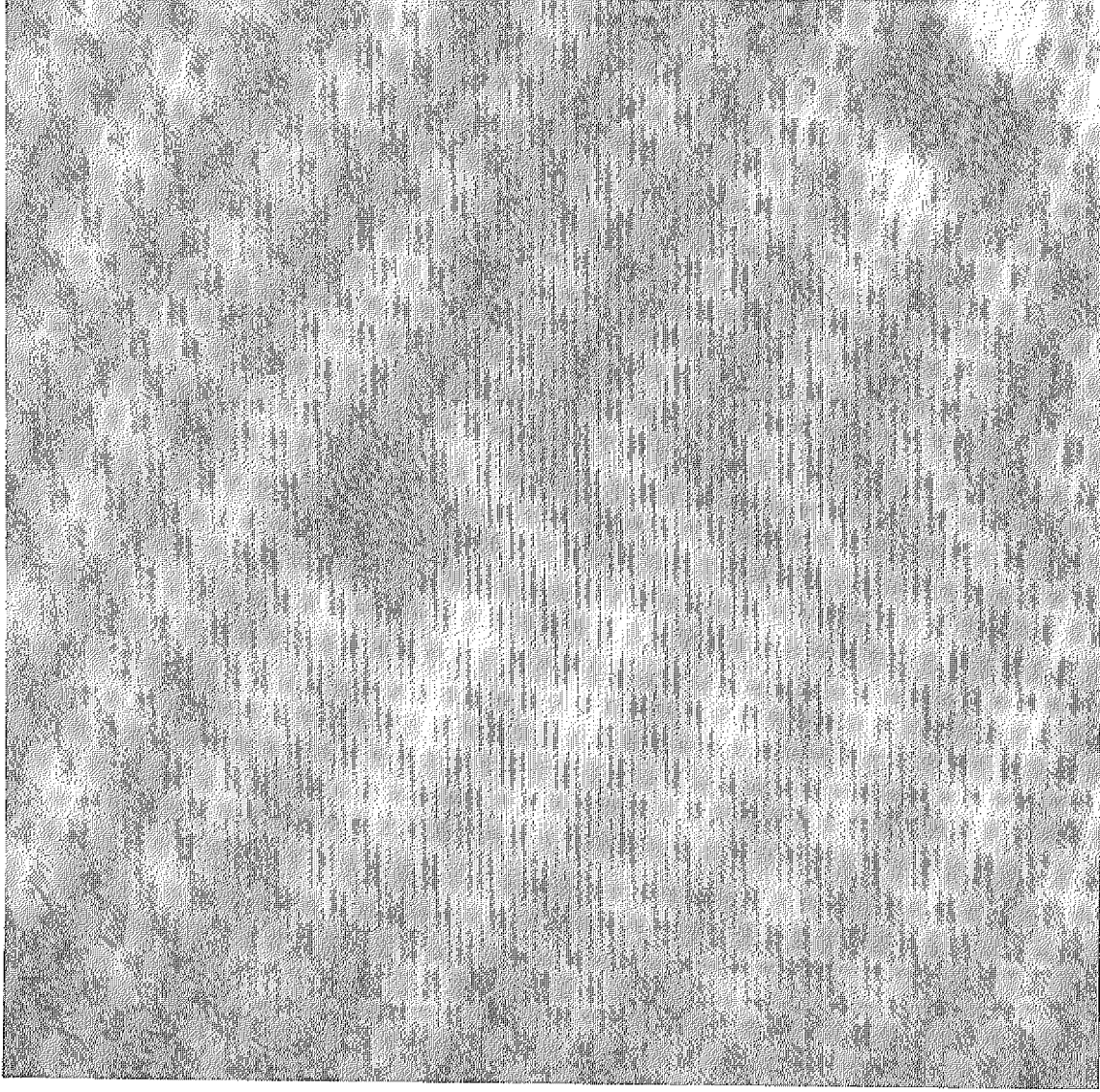


Abb. 6-20: Obere Partialversetzung aus Abb. 6-19.

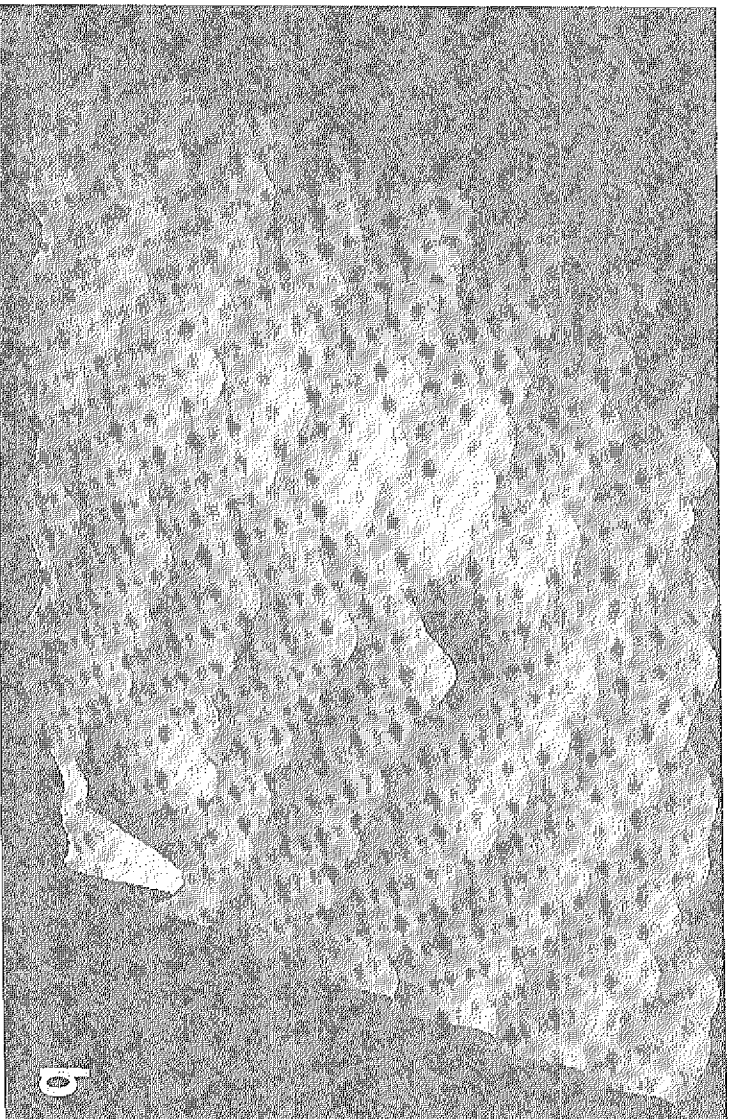
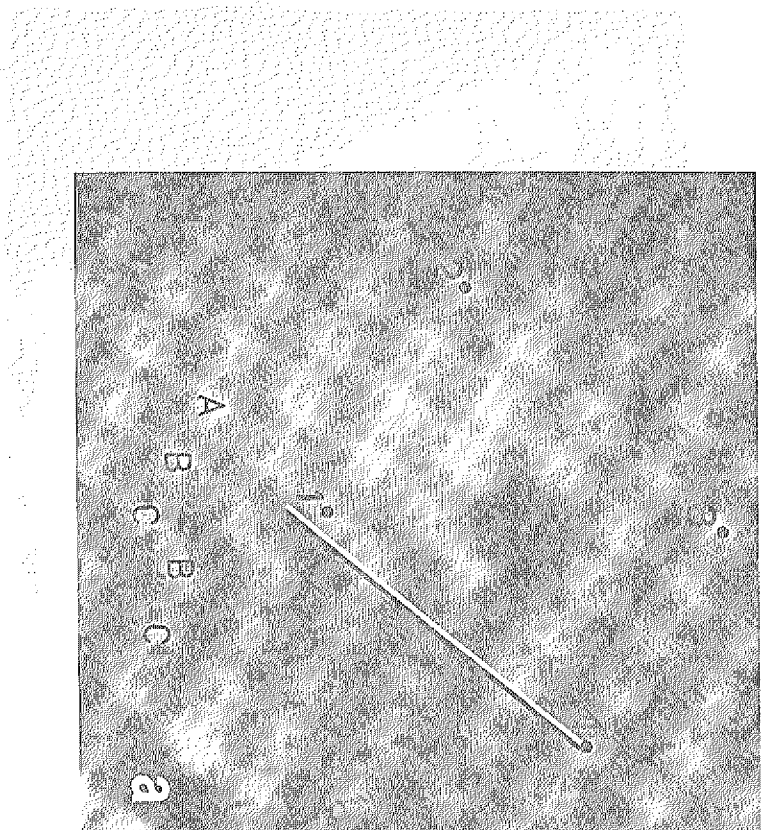


Abb. 6-21 : a) Partialversetzung aus Abb. 6-20 mit eingezeichnetem Burgersumlauf und Stapelfehler. b) zeigt eine Höhenliniendarstellung der Partialversetzung.

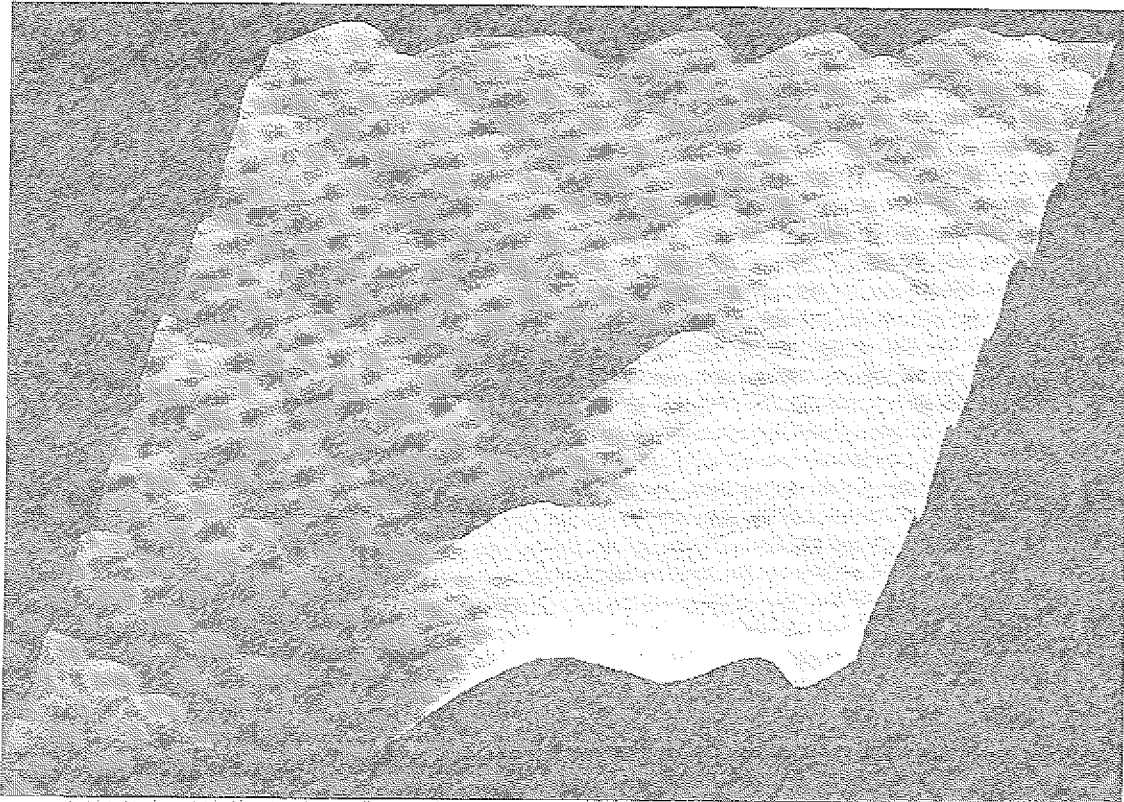


Abb. 6-22: Höhenliniendarstellung der unteren Partialversetzung B aus Abb. 6-19.

Stapelfehler als lokalisierte Vertiefung. Die vom Kern ausgehende Stufe hat entlang der Stufenkante keine durchgehende Linie, was auf eine abwechselnde Terminierung der Stufe mit As- und Ga-Atomen schließen läßt. In der Nähe des Versetzungskerns sind die As-Reihen auf der oberen Terasse an der Stufenkante leicht in $[\bar{2}1\bar{1}]$ -Richtung verbogen. Weiter weg vom Versetzungskern sind die As-Reihen auf der oberen Terasse nicht in Linie mit den As-Reihen auf der unteren Terasse. Dies zeigt, daß die zweite Partialversetzung den Stapelfehler aufhebt und die durch die Partialversetzung induzierte Stufe eine Atomlage hoch ist. Diese experimentellen Ergebnisse sind konsistent mit einem Burgersvektor vom Typ $a/6 \langle 112 \rangle$, der unter 60° zur Oberfläche steht und senkrecht zur Oberfläche die Komponente $a/\sqrt{6} \cdot \cos 60^\circ = a_0/2 \cdot \sqrt{2}$ hat.

Abb. 6-23 zeigt nochmals die möglichen Richtungen der Burgers- und Partialburgersvektoren in der Quergleitebene.

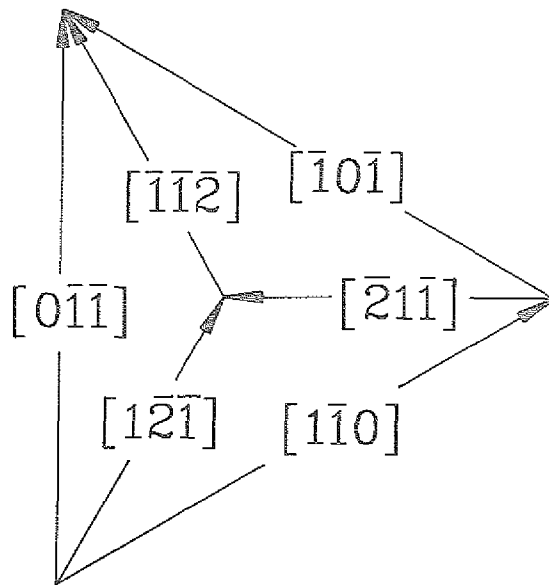


Abb. 6-23: Richtungen der Burgersvektoren in der Quergleitebene.

Bei der zweiten Partialversetzung bewegt man sich, um von der oberen zur unteren Terrasse zu gelangen, in einer linkshändigen Schraubenbewegung um den Versetzungskern. Da wie bei der ersten Partialversetzung die Versetzungslinie in die Oberfläche hineinzeigt, muß aufgrund der Linkshändigkeit der Stufe der Burgersvektor der zweiten Partialversetzung antiparallel zur Versetzungslinie sein und damit aus der Oberfläche herauszeigen. Da der Burgersvektor der ersten Partialversetzung $a/6 [\bar{2}1\bar{1}]$ war, muß, wie man Abb. 6-22 entnehmen kann, der zweite Partialburgersvektor $a/6 [\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ sein. Insgesamt addieren sich beide Burgersvektoren zum Gesamtburgersvektor:

$$\vec{b}_{total} = \frac{a}{2} [\bar{1}0\bar{1}] = \frac{a}{6} [\bar{2}1\bar{1}] + \frac{a}{6} [\bar{1}\bar{1}\bar{2}] \quad (30)$$

Definiert man die Versetzungslinie als aus dem Kristall herauszeigend, kehrt sich nur die Richtung des Burgersvektors um. Bei Festlegung der Versetzungslinie läßt sich also aufgrund des Umlaufsinnns um die durch die zweite Partialversetzung hervorgerufene Stufe eindeutig zwischen den Burgersvektoren $a/2 [\bar{1}0\bar{1}]$ und $a/2 [1\bar{1}0]$ entscheiden.

Da man mit dem RTM keine Information über die Versetzungslinie $\vec{l}$ erhält, gibt es für die Versetzungslinie bei einem Gesamtburgersvektor $a/2 [\bar{1}0\bar{1}]$ vier Möglichkeiten:

a) 60° -Versetzung mit $\vec{l}$ parallel zur Oberflächennormalen, b) 60° -Versetzung mit $\vec{l}$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung, c) Stufenversetzung mit $\vec{l}$ in $[1\bar{2}\bar{1}]$ -Richtung und d) Schraubenversetzung mit $\vec{l}$ parallel zur Burgersvektorrichtung. In den ersten beiden Fällen bestünden die Partialversetzungen aus einer 30° - und einer 90° -Versetzung, im Fall c) aus zwei 60° -Partialversetzungen und im Fall d) aus zwei 30° -Partialversetzungen.

Die aufgespaltene Versetzung liegt in der Quergleitebene. Es ist sehr unwahrscheinlich, daß während der Verformung ein Gleitsystem in der Quergleitebene angeregt wurde, da die Schmidfaktoren für alle Gleitsysteme in der Quergleitebene null waren (die $[213]$ -Verformungsrichtung liegt in der Quergleitebene). Die beobachtete Versetzung läßt sich durch eine aufgespaltene Schraubenversetzung erklären, die in der konjugierten Gleitebene $(1\bar{1}\bar{1})$ mit Schmidfaktor 0.29 entstand und anschließend von $(1\bar{1}\bar{1})$ nach $(\bar{1}\bar{1}1)$ quergeglichen und in eine $30^\circ \alpha$ - und eine $30^\circ \beta$ -Partialversetzung aufgespalten ist.

Bei der Beobachtung der Partialversetzungen ergab sich als weiteres Indiz für die Schraubenversetzung die unterschiedliche Beweglichkeit der Partialversetzungen. Während die erste Partialversetzung über Distanzen von mehreren Nanometern entlang $[\bar{2}1\bar{1}]$ beweglich war, zeigte die zweite Partialversetzung keine Beweglichkeit. Dies ist konsistent mit TEM-Untersuchungen, die in n-GaAs für α -Versetzen eine hundertfach höhere Beweglichkeit gegenüber den β -Versetzen ergaben [112].

Neben der Bewegung über größere Distanzen zeigte der Kern der ersten Partialversetzung während des Rasterns sprunghafte Bewegungen über kurze Atomabstände. Ein Beispiel dafür ist in den drei RTM-Aufnahmen der Abb. 6-24 zu sehen, die innerhalb weniger Minuten nacheinander aufgenommen wurden. Je nach Aufnahme erkennt man den Kern einzeln, doppelt oder nur halb abgebildet, da der Kern sich während der Abrasterung durch die Nadel entweder um eine Gitterkonstante nach oben oder nach unten bewegte. Daß dies kein Doppelspitzeneffekt ist, wo zwei Minispitzen gleichzeitig zu einem RTM-Bild beitragen, erkennt man am As-Punktdefekt in der rechten unteren Bildhälfte, der ohne eine Störung in allen Bildern vollständig abgebildet ist. Das Hin- und Herspringen wurde oft beobachtet, ohne daß sich die Position der Partialversetzung im Mittel änderte.

Die Bewegung der ersten Partialversetzung über mehrere Gitterkonstanten führte zu einer Änderung der Stapelfehlerweite von 9 nm auf 12 nm. Dabei ist zu beachten,

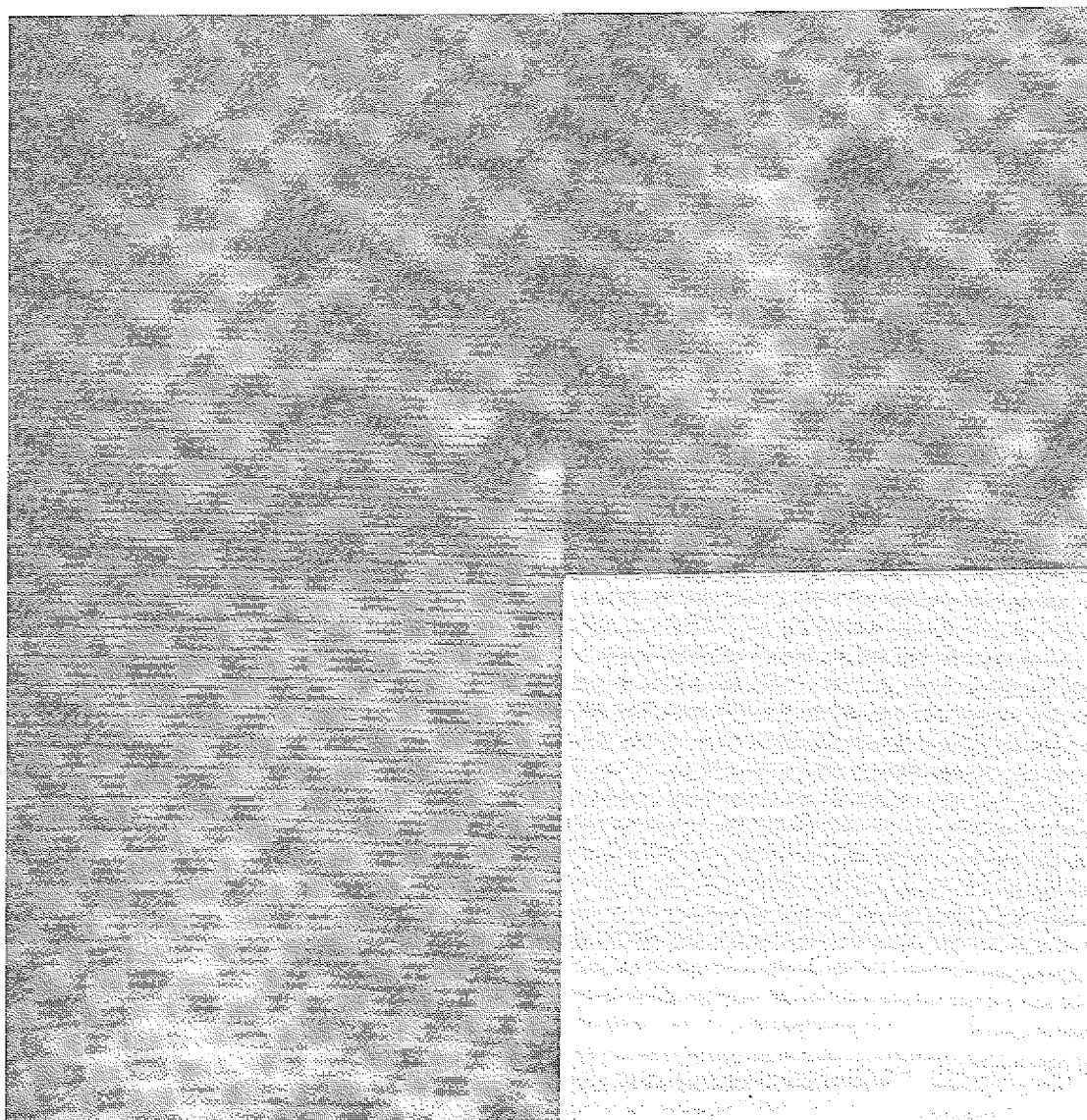


Abb. 6-24: Bewegung der Partialversetzung aus Abb. 6-20.

daß der tatsächliche Abstand der beiden Partialversetzungen im Volumen um die Hälfte geringer ist, da die Versetzungslinie unter 30° zur Oberfläche steht.

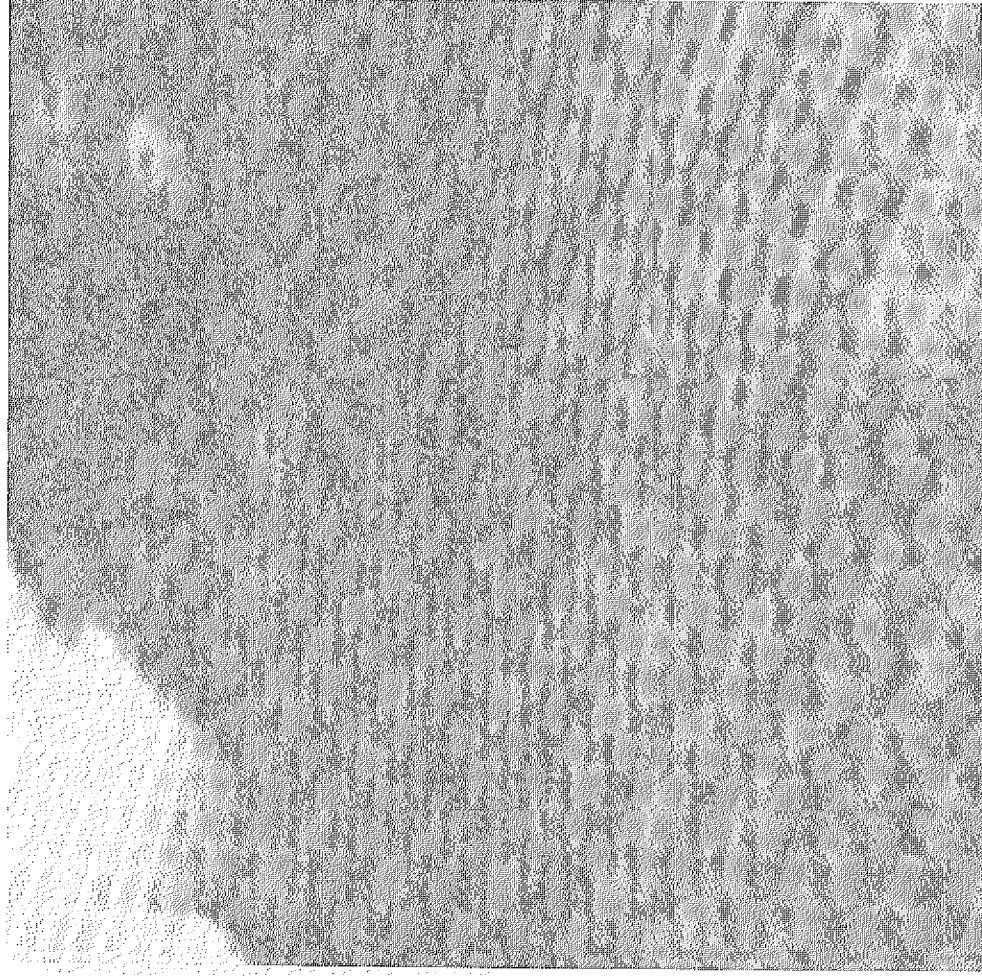


Abb. 6-25: Obere Partialversetzung aus Abb. 6-19: Statt der Vertiefung (Abb. 6-20) befindet sich ein As-Atom am Ort des Kerns (Pfeil). Der helle Fleck in der linken oberen Bildhälfte ist ein Adsorbat an der Spaltstufenkante (s. Abb. 6-19).

Abb. 6-25 zeigt den Kern der ersten Partialversetzung, nachdem dieser in die Nähe einer darüberverlaufenden Spaltstufe geglitten ist. Diese RTM-Aufnahme ist eine vergrößerte Aufnahme von Abb. 6-19.

sserte RTM-Aufnahme des Kerns der ersten Partialversetzung aus Abb. 6-19. Im Gegensatz zu Abb. 6-20 erkennt man statt der Vertiefung ein As-Atom am Versetzungskern (s. Pfeil), was die Vermutung nahelegt, daß es sich bei der Vertiefung um eine As-Leerstelle am Kern handelt. Nach dem Gleitprozeß könnte diese Leerstelle als Kinke an die darüberliegende Spaltstufe abgegeben worden sein. Dies konnte im RTM-Bild allerdings nicht direkt beobachtet werden, da sich auf der oberen Terrasse an der Stufenkante ein 2 nm breiter Adsorbatkomplex befand.

Aufgrund ihrer wesentlich höheren Beweglichkeit sollte die erste Partialversetzung eine $30^\circ\alpha$ -Versetzung sein, die im Glide-Set As-terminiert ist. Obwohl der Kern der ersten Partialversetzung in Abb. 6-20 als Leerstelle zu sehen ist, d.h. die Versetzung lokal auf der Oberfläche im Shuffle-Set terminiert ist, ergab sich für die As-Terminierung ein weiterer Hinweis. Betrachtet man die As-Atompositionen rechts vom Stapelfehler entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung, so erkennt man, daß die Dangling-Bonds der As-Atome entlang der Stapelfehlerlinie um 0.07 nm in Richtung der zweiten Partialversetzung verschoben sind.

Dies läßt sich anhand eines Dangling-Bond-Modells einer unter 30° auf die Oberfläche auftreffenden As-terminierten Partialversetzung verstehen (Abb. 6-26). Dieses Dangling-Bond Modell wurde unter Zuhilfenahme eines geometrischen Modells einer unter 30° auf die Oberfläche auftreffenden $30^\circ\alpha$ -Partialversetzung angefertigt. Man erkennt, daß das As-Atom am Kern nur zweifach nach unten gebunden ist und zwei freie Dangling-Bonds nach oben hat. Dieses Atom könnte aufgrund der schwächeren Bindung an die Oberfläche während des Spaltprozesses herausgerissen worden sein. Des weiteren zeigen bei einer As-Terminierung der Partialversetzung die Dangling-Bonds der As-Atome am Stapelfehler aufgrund der Rotation der Bindungswinkel um 120° auf der Spaltoberfläche in Richtung der zweiten Partialversetzung. Da man mit dem RTM bei negativer Probenvorspannung die besetzten Dangling-Bonds der As-Atome abbildet, macht sich die Rotation des Bindungswinkels als Verschiebung der As-Atompositionen am Stapelfehler bemerkbar. Im Ga-Bild sollte diese Verschiebung am Stapelfehler in umgekehrter Richtung zur ersten Partialversetzung hin erfolgen. Die Verschiebung der As-Atome am Stapelfehler entspricht also nicht einer geometrischen Verrückung der Atome, sondern kommt durch die Rotation der Bindungen am Stapelfehler zustande. Die Richtung der Verschiebung liefert dabei einen direkten Hinweis auf die Terminierung des Kerns der

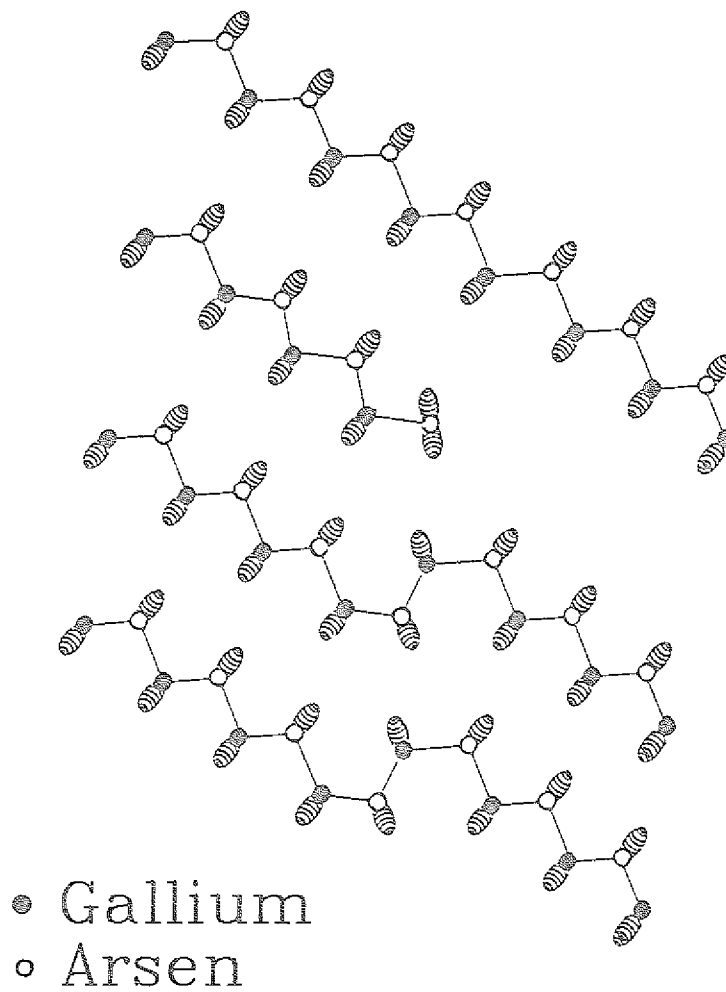


Abb. 6-26: Dangling-Bond-Modell einer $30^\circ \alpha$ -Versetzung, die unter 30° auf die Oberfläche auftritt. Die Dangling-Bonds an den Atompositionen sind durch mit Halbkreisen ausgefüllte Ellipsen dargestellt.

Partialversetzung.

Abb. 6-27 zeigt zwei Partialversetzungen einer in der Primärgleitebene aufgespaltenen Versetzung. Führt man wie bei der oben diskutierten Versetzung eine Burgersvektoranalyse durch, so ergibt sich folgende Burgersvektorgleichung:

$$\vec{b}_{\text{total}} = \frac{a}{2}[110] = \frac{a}{6}[21\bar{1}] + \frac{a}{6}[121] \quad (31)$$

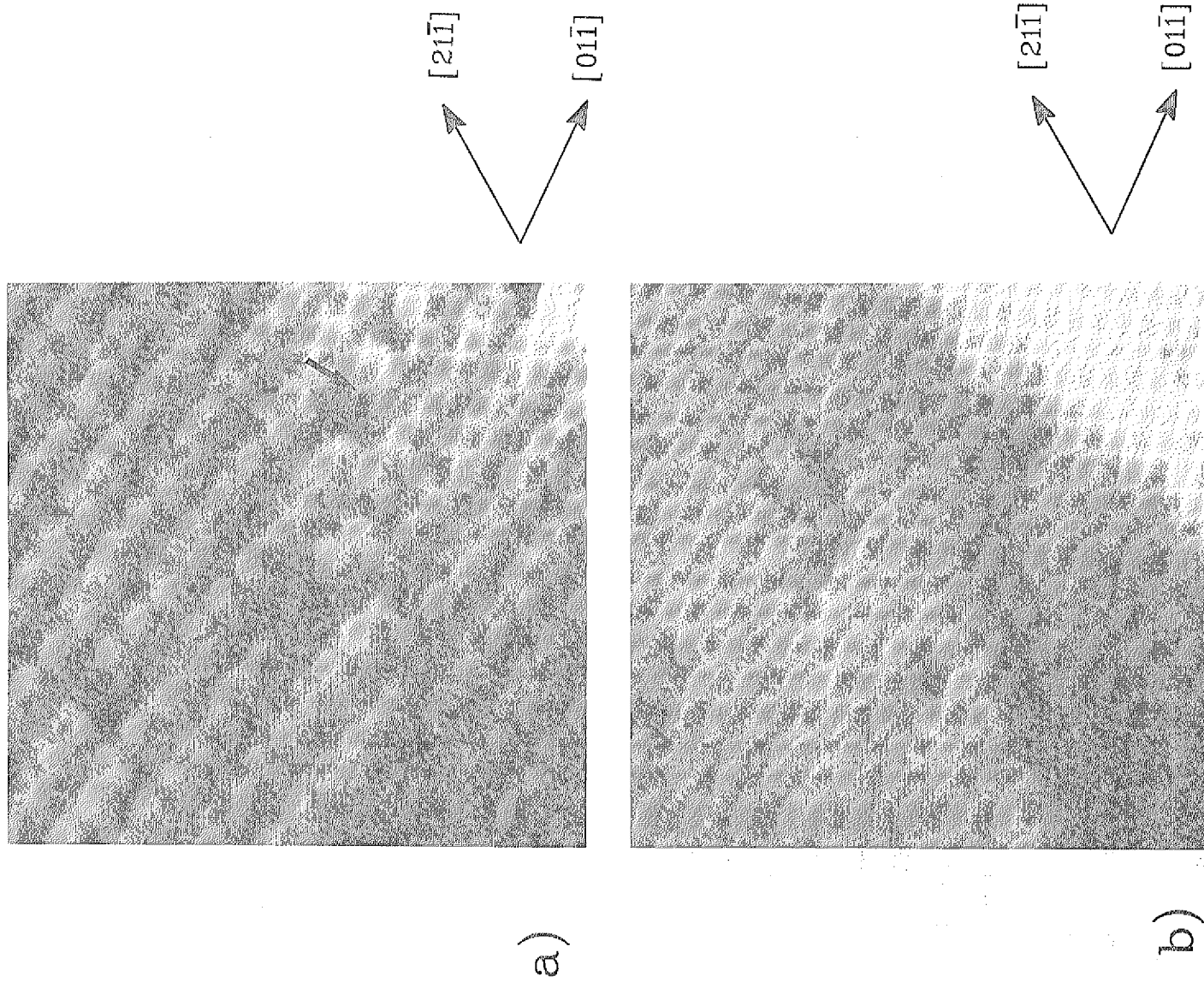


Abb. 6-27: Partialversetzungen einer in der Primärgelebene aufgespaltenen Versetzung; In Abb. 6-27a ist die erste Partialversetzung mit Burgersvektor in der Spaltoberfläche gezeigt. Die zweite Partialversetzung in Abb. 6-27b hat einen Burgersvektor unter 60° zur Oberfläche und ruft eine monoatomare hohe Stufe hervor.

Der Gesamtburgersvektor steht wiederum unter 30° zur Oberfläche und gehört zum Primärgleitsystem $((1\bar{1}1), [110])$ mit dem zweithöchsten Schmidfaktor 0.35. Die Aufspaltungsweite der beiden Partialversetzungen betrug 14 nm. Im Gegensatz zur aufgespaltenen Versetzung von Abb. 6-19 waren beide Partialversetzungen von Abb. 6-27 sehr leicht beweglich. Während der Rasterns wurden Gleitprozesse von bis zu 10 nm sowohl in $[21\bar{1}]$ - als auch in $[2\bar{1}1]$ -Richtung beobachtet, wobei die Aufspaltungsweite konstant blieb.

Die hohe Beweglichkeit beider Partialversetzungen kann durch die Annahme einer 60° -Versetzung erklärt werden, die in eine $30^\circ \alpha$ - und eine $90^\circ \alpha$ -Versetzung dissoziiert ist. Die relativ hohe Aufspaltungsweite von 14 nm läßt den Schluß zu, daß die Versetzungslinie ebenfalls unter 30° zur Oberfläche in $[\bar{1}01]$ -Richtung verläuft, so daß die tatsächliche Aufspaltungsweite nur 7 nm beträgt.

Die Kernstruktur der ersten Partialversetzung mit Partialburgersvektor in der Spaltebene ist ähnlich der in Abb. 6-20. Das As-Atom im Kern (s. Pfeil) ist vom Kontrast her etwas schwächer als die es umgebenden Atome und scheint etwas tiefer zu liegen. Unterhalb des Kernatoms entlang der $[01\bar{1}]$ -Richtung befindet sich ein As-Punktdefekt, wobei das dem Kern zugewandte Atom heller erscheint. Entlang der Stapelfehlerebene sind die As-Atome wiederum leicht in Richtung der zweiten Partialversetzung verschoben, was durch die bereits erwähnte As-Terminierung der Versetzung erklärt werden kann. Der schwächere Kontrast des As-Atoms im Kern deutet darauf hin, daß das Kernatom etwas in die Oberfläche hineinrelaxiert. Dies kann durch eine Rekonstruktion der freien As-Bindung entlang der Versetzungslinie erklärt werden, wobei das nach unten gerichtete Dangling-Bond des Kernatoms mit der freien As-Bindung des darunterliegenden As-Atoms rehybridisiert und dadurch etwas in die Oberfläche hineinrelaxiert. Die Struktur der As-Atome in Kernnähe ist konsistent mit dem in Abb. 6-26 gezeigten Dangling-Bond-Modell einer $30^\circ \alpha$ -Partialversetzung mit einer unter 30° zur Oberfläche verlaufenden Versetzungslinie. Der Reihenversatz verläuft hier in umgekehrter Richtung als in Abb. 6-20, da die Versetzung in der Primärgleitebene liegt und die den Versetzungskern terminierende As-Reihe in entgegengesetzter Richtung eingeschoben ist.

Auffallend an der zweiten Partialversetzung ist das langsame Herauswachsen der Stufe am Versetzungskern. Wie an der leichten Verbiegung der von oben kommenden

As-Reihen am Stapelfehler zu erkennen ist, bildet sich vom Stapelfehler aus gesehen die Stufenhöhe schon vor dem Kern aus. Die von der zweiten Partialversetzung ausgehende, monoatomar hohe Stufe hat im Gegensatz zur Partialversetzung in Abb. 6-22 eine geradlinig verlaufende Stufenkante, wobei die As-Atome an der Stufe eine leicht ovale Form haben.

Wie bereits in Kap. 6.1.3 besprochen, verbindet die monoatomar hohe $\langle 211 \rangle$ -Stufe benachbarte Ketten von Ga- und As-Atomen. Die leicht ovale Form der As-Atome an der Stufenkante deutet auf eine As-Terminierung der Stufe hin, da dann das As-Atom an der Stufenkante zwei freie Dangling-Bonds hat, wobei ein Dangling-Bond in Richtung des As-Atoms der darunterliegenden Terrasse zeigt. Die ovale Form der As-Atome kommt dabei durch die gleichzeitige Abbildung beider Dangling-Bonds zustande. Die Richtung der Kantenatome stimmt mit dem Knick in den As-Atomreihen am Stapelfehler überein. Der Kern der Versetzung erscheint hier nicht als lokalisierte Vertiefung wie in Abb. 6-22, wo der Stapelfehler am Kern abrupt terminiert wird; vielmehr fällt auf, daß im Gegensatz zu Abb. 6-22 die obere Terrasse an der Versetzungstufe auf gleicher Höhe wie der Stapelfehler ist, d.h. die Stufe geht sozusagen um eine Monolage in den Kristall hinein. Bei der in Abb. 6-21 gezeigten Partialversetzung befindet sich der Stapelfehler hingegen auf der Höhe der unteren Terrasse, und die durch die Versetzung hervorgerufene Stufe kommt aus der Oberfläche heraus.

Alle experimentellen Ergebnisse sind, wie ein geometrisches Modell zeigte, konsistent mit einer $90^\circ \alpha$ -Versetzung, die im Kern As-terminiert ist. Nur bei einer gleichzeitigen As-Terminierung des Kerns und der Atome an der Stufenkante haben deren Dangling-Bonds dieselbe Orientierung wie der Knick der As-Reihen am Stapelfehler. Im Falle einer Ga-Terminierung des Kerns müßten die Dangling-Bonds der As-Atome an der Stufe in Richtung des Kerns der ersten Partialversetzung, also in entgegengesetzter Richtung zum Reihenversatz der As-Atome zeigen.

Neben der atomaren Direktabbildung von Versetzungen ermöglicht das RTM Aussagen über den Ladungszustand von Versetzungen. Die Variation der Tunnelvorspannung von -4 V bis -1.5 V hatte keine nennenswerten Auswirkungen auf die RTM-Bilder der Versetzungskerne. Dies läßt den Schluß zu, daß die beobachteten Versetzungen für n-GaAs an der Oberfläche im wesentlichen elektrisch neutral sind.

Wie im Falle negativ geladener Punktdefekte [113] oder negativ geladener Sauerstoffatome auf GaAs [32] gezeigt wurde, führt eine zusätzliche negative Ladung an der Oberfläche zu einer Erhöhung der Zustandsdichte im Valenzband und zu einer Verminderung der Zustandsdichte im Leitungsband. Ein negativ geladener Defekt erscheint im Konstantstrom-Bild entweder als ein ungefähr 10 nm breiter, heller Fleck bei Tunneln aus dem Valenzband oder aber als 10 nm breite Vertiefung bei Tunneln ins Leitungsband. Für einen positiv geladenen Defekt tritt der umgekehrte Fall ein.

Bei negativer Tunnelvorspannung, d.h. bei Tunneln aus dem Valenzband, würde eine negative Ladung am Versetzungskern zu einer lokalen Erhöhung der Zustandsdichte führen, die sich im RTM-Bild in einer Erhöhung der Korrugationsamplitude in Form eines hellen Flecks am Versetzungskern bemerkbar macht. Eine positive Ladung führt bei negativer Vorspannung zu einer Verminderung der Zustandsdichte und damit zu einer Vertiefung im RTM-Bild. Das Fehlen solcher Bandverbiegungseffekte aufgrund des Coulombpotentials einer zusätzlichen Ladung am Versetzungskern zeigt, daß die Versetzungen entlang der Versetzungslinie keine starke Ladung tragen.

6.4 Diskussion der Ergebnisse für verformte Proben

Im Rahmen dieser Arbeit ist es erstmalig gelungen, mit einer selbstkonstruierten UHV-RTM-Anlage Versetzungen mit atomarer Auflösung abzubilden. Die Spaltung verformter GaAs-Einkristalle erwies sich als geeignete Präparationsmethode zur Untersuchung der Durchstoßpunkte der Versetzungen auf der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Spaltoberfläche. Trotz der plastischen Verformung von 3 % und der hohen Versetzungsdichte von 10^8 cm^{-2} konnten die Kristalle im UHV mit einer eigens konstruierten Spaltzange gespalten werden. Die Spaltqualität variierte wie bei den unverformten Proben von Spaltkristall zu Spaltkristall. Sie verschlechterte sich allerdings mit zunehmender plastischer Verformung, was auf eine Schädigung der Kristallstruktur durch bei der Verformung entstandene Mikrorisse zurückzuführen ist. Die einfache (1×1) -Rekonstruktion der Oberfläche ermöglicht den Vergleich der gefundenen Versetzungsstrukturen mit geometrischen Modellen. Bei einer quantitativen Bildinterpretation muß allerdings die Orientierung der Dangling-Bonds der Atome am Versetzungskern mitberücksichtigt werden.

Bei der in Kap.6.3.1 diskutierten vollständigen Versetzung konnte der Burgersvek-

tor durch Messung der Stufenhöhe der mit der Versetzung verbundenen Stufe bestimmt werden. Der Verlauf der As-Reihen über die Versetzungsstufe zeigte, daß kein Stapelfehler an der Stufenkante vorlag. Der Kern der Versetzung war stark lokalisiert, da die Stufenhöhe am Versetzungskern innerhalb weniger Gitterkonstanten vollständig ausgebildet war. Um den Versetzungskern herum ergab sich ein ungefähr 3 nm weit reichendes elastisches Spannungsfeld, das sich in einer Verbiegung der As-Reihen am Versetzungskern bemerkbar machte. Dieses Spannungsfeld ist auf die starke Lokalisierung des Kerns zurückzuführen, wobei die Verbiegung der As-Reihen um den Kern als Relaxation der Oberfläche auf das Spannungsfeld verstanden werden kann.

Bis auf eine Ausnahme waren alle gefundenen Versetzungen mit Burgersvektor $a/2[0\bar{1}\bar{1}]$ vollständige Versetzungen. Dies steht in gewissem Widerspruch zu TEM-Untersuchungen, bei denen die Mehrzahl der Versetzungen in GaAs aufgespalten gefunden wurde [109]. Die Partialburgersvektoren einer aufgespaltenen Versetzung mit Gesamtburgersvektor $a/2[0\bar{1}\bar{1}]$ stehen unter 60° zur Oberfläche (Abb. 6-22). Ihre Schraubenkomponenten senkrecht zur Oberfläche sind parallel zueinander und ergeben eine abstoßende Kraft. Die Komponenten der Partialburgersvektoren in der Oberfläche sind jedoch antiparallel zueinander und ziehen sich an [114]. Sie können an der Oberfläche aufgrund einer Änderung der Gesamtenergie des Versetzungssegmentes in Oberflächennähe zu einer Verringerung der Aufspaltungsweite und damit zu einem Zusammenlaufen der Partialversetzungen führen. Dies wurde für dissoziierte Schraubenversetzungen in dünnen GaAs-Folien experimentell beobachtet und mit Hilfe der elastischen Kontinuums-theorie rechnerisch bestätigt [114]. Die bei den vollständigen Versetzungen mit Burgersvektor senkrecht zur Oberfläche häufig beobachteten Quergleitprozeße lassen den Schluß zu, daß die Mehrzahl von ihnen Schraubenversetzungen sind.

Die beschriebenen Gleit- und Quergleitvorgänge sind sehr wahrscheinlich durch van-der-Waals-Kräfte zwischen Nadel und Probenoberfläche induziert. Von Untersuchungen auf Metalloberflächen ist bekannt, daß diese Kräfte bei Abständen von weniger als 10 nm zwischen Probe und Nadel Werte von bis zu 10^{-7} N erreichen können [115]. Geht man von einer durchschnittlichen Kraft von 10^{-9} N aus, die bei den hier verwendeten Abständen von 0.5 - 1 nm zwischen Nadel und Oberfläche über eine Fläche von ungefähr 10 nm^2 wirkt, so entstehen Spannungen von 10^7 Pa in der Oberfläche, die in der Größenordnung der bei der plastischen Verformung verwendeten Spannungen liegen.

Das durch die van-der-Waals-Kraft hervorgerufene Spannungsfeld in der Oberfläche wird beim Rastern der Nadel entlang der Oberfläche bewegt, so daß während des Abbildens im Umkreis des Versetzungskerns eine sich ändernde Spannung erzeugt wird. Das Versetzungsgleiten trat bevorzugt bei größeren Rasterweiten ($\geq 0.1 \mu\text{m}$) auf. Bei atomarer Auflösung war anscheinend aufgrund der geringen Rasterweite die Änderung im Spannungsfeld am Versetzungskern zu gering, um einen Gleitprozeß auslösen zu können.

Eine andere Ursache für das Versetzungsgleiten könnte die Verringerung der Aktivierungsenergie durch tunnelnde Elektronen sein. Maeda et. al. beobachteten im Rasterelektronenmikroskop eine stark erhöhte Beweglichkeit der Versetzung, sobald ein 30 keV Elektronenstrahl auf die Probe traf [78]. Die auftreffenden Elektronen erzeugen Elektron-Loch Paare am Versetzungskern, deren Energie beim Rekombinieren zu einer Verringerung der Aktivierungsenergie führt. Man spricht hier vom sogenannten rekombinationsverstärkten Versetzungsgleiten. Vergleichbare Rekombinationsprozesse könnten beim Tunneln am Versetzungskern auftreten, falls Elektronen aus dem Leitungsband in unbesetzte Akzeptorzustände am Versetzungskern übergehen. Da die Proben jedoch hoch n-dotiert waren, sollten solche Akzeptorzustände, falls sie existieren, alle besetzt sein. Da im n-GaAs Lochzustände weder im Valenzband noch am Versetzungskern existieren, ist eine Verringerung der Aktivierungsenergie durch Rekombinationsprozesse tunnelnder Elektronen als Ursache für das Versetzungsgleiten sehr unwahrscheinlich.

Neben vollständigen Versetzungen konnten auch Partialversetzungen mit atomarer Auflösung abgebildet werden. Der Gesamtburgersvektor der dissoziierten Versetzungen lag unter 30° zur Oberfläche. Bei der Burgersvektoranalyse konnte durch Bestimmung des Schraubenanteils des Burgersvektors der zweiten Partialversetzung der Gesamtburgersvektor eindeutig festgelegt werden. Durch Bestimmung der Gleitebene wurde die Versetzung in Abb. 6-19 als dissoziierte Schraubenversetzung interpretiert. Für diese Interpretation sprach auch die unterschiedliche Beweglichkeit der beiden Partialversetzungen, wobei durch Hinzuziehung vorhandener TEM-Untersuchungen [112] die Partialversetzung in Abb. 6-20 als $30^\circ \alpha$ - und die Partialversetzung in Abb. 6-22 als $30^\circ \beta$ -Versetzung interpretiert werden konnten.

Das oft beobachtete Hin- und Herspringen der ersten Partialversetzung über eine Gitterkonstante, das nur bei dieser Partialversetzung gefunden wurde, läßt darauf schließen,

daß ihre Aktivierungsenergie sehr niedrig ist. Dies erklärt auch die hohe Beweglichkeit dieser Versetzung in n-dotiertem GaAs. Unter der Annahme einer As-Terminierung der ersten Partialversetzung in Abb. 6-20 erklärte sich die Verschiebung der Atome am Stapelfehler durch eine Rotation der As Dangling-Bonds. Solche Effekte erschweren zwar auf der einen Seite die Bildinterpretation anhand einer rein geometrischen Verschiebung der Atome, doch können sie andererseits bei sorgfältiger Interpretation unter Zuhilfenahme geometrischer Modelle Hinweise auf die Terminierung des Versetzungskerns liefern.

Die gemessene Aufspaltungsweite von 4.5 bis 6 nm für die Schraubenversetzung korreliert mit einem Wert von 6.5 nm für eine hier nicht gezeigte, dissoziierte Versetzung mit Burgersvektor $a/2[0\bar{1}\bar{1}]$, die anhand eines vorangegangenen Quergleitprozesses als Schraubenversetzung identifiziert werden konnte. Die dort gefundenen Werte für die Aufspaltung waren größer als jene, die sich aus TEM-Untersuchungen ergaben (im Durchschnitt 3.8 nm für eine Schraubenversetzung [3]). Dies könnte auf eine Verringerung der Stapelfehlerenergie an der Oberfläche hindeuten.

Eine weitere aufgespaltene Versetzung in der Primärgleitebene wurde wegen der leichten Beweglichkeit beider Partialversetzungen als dissoziierte 60° -Versetzung interpretiert. Die Identifizierung der zweiten Partialversetzung in Abb. 6-27b erfolgte durch den Vergleich der Dangling-Bond Richtungen der As-Atome am Versetzungskern mit einem geometrischen Modell. Die Form der durch die Versetzung induzierten Stufe sowie die Höhe der Terrassen in Bezug auf den Stapelfehler lieferten weitere Hinweise für eine $90^\circ \alpha$ -Versetzung.

Für eine genauere Analyse der Kernstruktur von Partialversetzungen wäre sicherlich eine gleichzeitige Abbildung beider Atomspezies in einem RTM-Bild durch z.B. zeilenweise Umschaltung der Vorspannung nötig. Die scheiterte bisher an Spitzeninstabilitäten, die wahrscheinlich auf GaAs-Cluster an der Spitze zurückzuführen sind, welche während der Suche nach Versetzungen durch unbeabsichtigten Kontakt an der Nadel haften blieben. Deshalb ist eine in-situ Präparation der Tunnelspitze geplant, die es ermöglichen soll, die Nadel durch Feldverdampfung (Hochheizen der Spitze bei gleichzeitigem Anlegen einer Spannung) wieder neu zu formieren.

Die neu gewonnene Möglichkeit, die Atompositionen am Versetzungskern unmittel-

bar zu bestimmen, erlaubt eine kritische Überprüfung von theoretischen Kernmodellen. In einer Arbeit von Myung [117] wurden Kernmodelle für Partialversetzungen durch Minimalisierung der totalen Energie berechnet. Die Modelle ergeben keine nennenswerte Verzerrung des Gitters um den Versetzungskern. Abb. 6-20 zeigt jedoch, daß dies beispielsweise für die $30^\circ\text{-}\alpha$ Versetzung nicht zutrifft, da die As-Atomreihe oberhalb des Kerns im ungestörten Gitter leicht vom Kern weggebogen ist.

Detaillierte Untersuchungen der Versetzungskerne mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie sind schwierig, da sich die Versetzungen unter dem Einfluß des Elektronenstrahls durch die oben beschriebene Erzeugung und Annihilation von Elektron-Loch Paaren sehr leicht bewegen. Darüberhinaus erlaubt die TEM aufgrund der begrenzten Auflösung keine direkte Trennung der Ga- und As-Untergitter. In den bisher veröffentlichten TEM-Untersuchungen [3,4] konnten keine detaillierten Kern-Modelle gewonnen werden. Die Untersuchungen konzentrierten sich hauptsächlich auf die Frage der Shuffle- oder Glide-Set-Terminierung der Partialversetzungen.

Im Vergleich zur TEM ermöglicht die RTM neben geometrischen Strukturuntersuchungen auch lokale Aussagen über die elektronische Struktur von Versetzungen. Die Abwesenheit einer Bandverbiegung um alle beobachteten Versetzungskerne in einem Vorspannungsbereich von -4 V bis -1.5 V zeigt, daß die Versetzungen in hoch n-dotiertem GaAs im wesentlichen elektrisch neutral sind.

Theoretische Berechnungen der Defektniveaus von Versetzungen führen auf eindimensionale Bänder, die im neutralen Zustand halbgefüllt sind [117]. Dabei ist eine Rekombination der freien Bindungen am Versetzungskern nicht berücksichtigt. In diesem Fall verhalten sich die Versetzungen amphoter, d.h. bei hoher n-Dotierung des Kristalls, wo das Fermi-niveau oberhalb des Defektniveaus liegt, sind die Versetzungen negativ geladen. Aufgrund der hohen Anzahl freier Bindungen entlang der Versetzungslinie (ein freies Dangling-Bond pro Atom am Versetzungskern) wird der Betrag der zusätzlichen Ladung durch die Bedingung kontrolliert, daß das Fermi-niveau lokal mit der Oberkante des Versetzungsniveaus übereinstimmen muß.

Jones et. al. führten Supercell-Rechnungen für die $30^\circ\text{-}\alpha$ - und $90^\circ\text{-}\alpha$ -Partialversetzung im Glide-Set unter Berücksichtigung einer Rekombination der freien Bindungen am Versetzungskern entlang der Versetzungslinie durch [118]. Geometrische Modelle für die

Rekonstruktion von freien Bindungen am Versetzungskern in Halbleitern wurden von Hirsch vorgestellt [77]. Die Rekonstruktion führt zu einer paarweise Absättigung der freien Bindungen, verbunden mit einer Vorwärts- und Rückwärtsbewegung der Atome senkrecht zur Versetzungslinie. Dies ist eine Art Peierlsinstabilität, die zu einer Aufspaltung des halbgefüllten Versetzungsbandes in ein leeres und ein volles Versetzungsband führt. Nach den Berechnungen von Jones liegen beide Bänder der $\alpha(\text{As})$ -Versetzung in der Nähe des Valenzbandes, während das leere Halbband der $\beta(\text{Ga})$ -Versetzung an der Leitungsbandkante liegt [118]. Bei hoher n-Dotierung des Kristalls sollten die α -Versetzungen in jedem Fall negativ geladen sein, während die Ladung der β -Versetzung von der genauen Lage des leeren Halbbandes in Bezug auf das Fermi-niveau abhängt. Der Betrag der zusätzlichen Ladung am Versetzungskern wird durch eine Sättigung der Anzahl der verfügbaren, freien Bindungen entlang der Versetzungslinie kontrolliert, die eine zusätzliche Ladung aufnehmen können. Da die Zahl der freien Bindungen aufgrund der paarweisen Absättigung der freien Bindungen am Kern gering ist, dürfte der Betrag der zusätzlichen Ladung am Kern gering sein.

Die unabhängig vom Versetzungstyp gefundene Abwesenheit einer elektrischen Ladung am Versetzungskern spricht für eine Rekonstruktion der freien Bindungen am Versetzungskern. Neuere EBIC-Untersuchungen (Electron-Beam-Induced-Current), die aufgrund der Rekombinationsrate von Elektron-Loch Paaren am Versetzungskern eine geringe zusätzliche Ladungsdichte von weniger als 1% am Kern angeben [119], stimmen mit unseren Ergebnissen überein. Nakada und Imura kommen in ihrer Untersuchung der Abhängigkeit der Stapelfehlerenergie von der Dotierung in GaAs ebenfalls zu dem Schluß, daß die Partialversetzungen keine starke elektrische Ladung tragen [120].

Über die mit den Versetzungen verbundenen Zustände und ihre Lage können anhand der RTM-Aufnahmen noch keine Aussagen gemacht werden. Die Anwendung der lokalen Tunnelspektroskopie, die als nächstes geplant ist, dürfte hier sicherlich zu interessanten Ergebnissen führen. Falls die Versetzungen Zustände in der Bandlücke haben, sollten diese in den $\overline{\text{dlnI/dlnU}}$ Spektren (Kap.6.1) zu beobachten sein. Des weiteren müßte sich eine eventuelle eindimensionale metallische Leitfähigkeit entlang der Versetzungslinie in den $I(U)$ -Kennlinien durch eine Verringerung der Bandlücke bemerkbar machen. Da diese Tunnelspektroskopiemessungen bei atomarer Auflösung gemacht werden können, ist eine eindeutige Zuordnung der untersuchten elektronischen Eigenschaften zum beob-

achteten Versetzungstyp möglich. Die bislang verwendeten Methoden zur Untersuchung der elektronischen Eigenschaften wie Hall-Effekt [7], DLTS [6] oder Lumineszenzmessungen [5] erlauben keine eindeutige Zuordnung der Signale zu bestimmten Versetzungen. Die Tunnelmikroskopie ist bisher die einzige Meßmethode, die bei atomarer Auflösung sowohl Informationen über die geometrische als auch über die elektronische Struktur von Volumendefekten liefern kann.

7 Zusammenfassung

Ziel dieser Doktorarbeit war die Untersuchung von Gitterbaufehlern in GaAs mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie. Zu diesem Zweck wurde eine Zweikammer-UHV-Anlage mit Probenschleuse konzipiert und aufgebaut. Zur Abkopplung niederfrequenter Schwingungen wurde die Anlage in einem Stahlrahmen montiert, der an vier pneumatischen Schwingungsdämpfern aufgehängt ist. In der Präparationskammer können Halbleitereinkristalle mit einer selbstkonstruierten Spaltzange gespalten und mittels LEED und AES untersucht werden. Das Tunnelmikroskop, das in der zweiten Kammer untergebracht ist, wurde nach einem von Besocke entwickelten Funktionsprinzip aufgebaut. Die Separierung der (x,y)-Rasterbewegung der Nadel von der z-Bewegung durch zusätzlichen Einbau eines Piezostapels ermöglicht die Ausführung der Rasterbewegung mit Hilfe des inneren Piezoröhrchens. Dies hat den Vorteil, daß die Probe mit dem Probenhalter während des Experiments in Ruhe ist, wodurch Verzerrungen im RTM-Bild und die Erzeugung von Schwingungen minimiert werden. Das aufgebaute RTM erwies sich zusammen mit der Elektronik als zuverlässiges Instrument, mit dem im Verlaufe dieser Arbeit über 500 RTM-Bilder mit atomarer Auflösung aufgenommen wurden.

Zur Untersuchung von Gitterbaufehlern wurde als Ausgangsmaterial GaAs gewählt, da die einfache (1x1)-Rekonstruktion der $(0\bar{1}\bar{1})$ -Spaltoberfläche zusätzliche Komplikationen in der Bildinterpretation aufgrund von geometrischen Rekonstruktionseffekten ausschließt. Die Spaltung ist eine geeignete Probenpräparation im UHV zum Studium von Versetzungsdurchstoßpunkten an der Oberfläche. Die Verformung kann dabei so durchgeführt werden, daß der Burgersvektor des Primärgleitsystems parallel zur Oberflächennormalen der Spaltoberfläche liegt. Der Elektronentransfer vom Ga- zum As Dangling-Bond an der Oberfläche ermöglicht ein separates Abbilden der beiden Untergitter mit dem RTM.

Auf den Oberflächen unverformter Kristalle konnten das As- und das Ga-Untergitter mit atomarer Auflösung abgebildet werden. Die Abbildung des Ga-Untergitters erwies sich jedoch aufgrund von Spitzeninstabilitäten, die wahrscheinlich durch einen kleinen GaAs-Cluster an der Spitze hervorgerufen wurden, als schwierig. Mit einer nachträglich implementierten Baueinheit zur Tunnelspektroskopie wurde die Austrittsarbeit der Spaltoberfläche bestimmt. Die aufgenommenen $I(U)$ -Kennlinien zeigten ein

für Halbleiter typisches Verhalten. Eine logarithmische Auftragung der Kennlinien ergab eine Größe, die proportional zur Zustandsdichte der Oberfläche ist.

Auf den Oberflächen unverformter Kristalle wurde bei schlechter Spaltung eine hohe Dichte von etwa 20 nm langen und 3 nm breiten, dreieckförmigen Terrassen beobachtet, die durch monoatomar hohe Stufen voneinander getrennt waren. Die Stufenrichtungen wiesen eine langreichweitige Ordnung auf; lokal aber waren die Stufen von vielen Kinken durchsetzt und konnten über kurze Distanzen andere Stufenrichtungen ausbilden. Gut gespaltene Oberflächen zeichneten sich durch Quadratmikrometer große, atomar flache Terrassen aus, die manchmal von monoatomar hohen Stufen entlang den $\langle 211 \rangle$ -Richtungen durchzogen waren. Einmal wurde eine kompliziertere Dreifachstufe beobachtet, die mit Hilfe eines einfachen, geometrischen Modells beschrieben werden konnte.

Auf beiden Untergittern wurden an den Atompositionen Punktdefekte beobachtet, deren Dichte mit schlechterer Spaltung zunahm. Im Gegensatz zu den elektrisch neutralen As-Punktdefekten variierte die laterale Ausdehnung der Ga-Punktdefekte im RTM-Bild stark in Abhängigkeit von der Tunnelvorspannung. Dies kann durch eine negative Ladung der Ga-Punktdefekte erklärt werden. Aufgrund ihrer lateralen Ausdehnung auf einem Atomgitterplatz und durch Vergleich mit den zu erwartenden Ladungszuständen anderer Punktdefekte werden die beobachteten Punktdefekte als As- und Ga-Oberflächenleerstellen interpretiert. Bei den Ga-Punktdefekten könnte sich es aber im Falle einer negativen Ladung der Si-Dotieratome an der Oberfläche auch um Si-Atome handeln.

Auf den Spaltoberflächen der verformten Proben konnten mit dem RTM zum erstenmal vollständige und aufgespaltene Versetzungen mit atomarer Auflösung auf dem As-Untergitter abgebildet werden. Anhand der atomaren Auflösung und der Bestimmung der Höhe und Orientierung der Versetzungsstufen konnten der zugehörige Burgersvektor und die Gleitebene der Versetzungen bestimmt werden. Des öfteren wurden die Versetzungen - wahrscheinlich durch van-der-Waals-Wechselwirkung der Nadel mit der Probe - während der Beobachtung zum Gleiten angeregt. Manchmal konnten das Quergleiten und die gegenseitige Annihilation von Schraubenversetzungen beobachtet werden. Die Versetzungsbewegung erfolgte im allgemeinen (von wenigen interessanten

Ausnahmen abgesehen (vergl. Abb. 6-24)) nicht während der hochaufgelösten atomaren Abbildung der Versetzungen, sondern trat bevorzugt bei größeren Rasterweiten ($\geq 0.1 \mu\text{m}$) auf. Dies ist der große und für das RTM günstige Unterschied zur TEM, wo die Bewegung unkontrolliert während des Belichtens der Aufnahme erfolgt.

Bei den untersuchten Partialversetzungen lag in einem Fall die Aufspaltung in der Quergleitebene, was eine Interpretation als dissoziierte Schraubenversetzung nahelegt. Diese Interpretation ist konsistent mit der beobachteten unterschiedlichen Beweglichkeit der beiden Partialversetzungen. Eine leichte Verschiebung der As-Atome am Stapelfehler in der Nähe des ersten Versetzungskerns konnte unter der Annahme einer As-Terminierung der Partialversetzung mit Hilfe eines Dangling-Bond-Modells erklärt werden. Eine in der Primärgleitebene dissoziierte Versetzung mit Burgersvektor unter 30° zur Oberfläche wurde anhand der leichten Beweglichkeit der beiden Partialversetzungen als dissoziierte 60° -Versetzung interpretiert. Die Atomanordnung an der durch die zweite Partialversetzung hervorgerufenen Stufe konnte unter der Annahme einer α -Terminierung erklärt werden. Bei den Partialversetzungen wurde die Interpretation durch den Nachbau eines geometrischen Modells der entsprechenden Versetzung unterstützt, welches das Verständnis der Bindungsverhältnisse um den Versetzungskern an der Oberfläche erleichtert.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Brodsky, Spektrum der Wissenschaft, April 1990
- [2] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel, Appl. Phys. Lett. 40 (2), 178, (1982)
- [3] D. Gerthsen, F.A. Ponce, G.B. Anderson, Inst. Phys. Conf. Ser. No. 76 Section 2, 55, (1985)
- [4] D. Gerthsen, F.A. Ponce, G.B. Anderson, Phil. Mag. A 59 (5), 1045, (1989)
- [5] M. Skowronski, J. Lagowski, M. Milstein, C.H. Kang, F.P. Dabkowski, A. Hennel, H.C. Gatos, J. Appl. Phys. 62 (9), 3791, (1987)
- [6] M. Suezawa, K. Sumino, Jap. J. Appl. Phys. 25 (4), 533, (1986)
- [7] D. Gerthsen, Phys. Stat. Sol. A 97, 527, (1986)
- [8] P.H. Hansma, J. Tersoff, J. Appl. Phys. 61 (2), R1, (1987)
- [9] C.F. Quate, Physics Today 26, August 1985
- [10] R.J. Behm, W. Hössler, Physics and Chemistry of Solid Surfaces Vol. VI, Springer, Berlin 1986
- [11] J.E. Demuth, U. Köhler, R.J. Hamers, J. Microsc. 152 (2), 299, (1988)
- [12] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel, Phys. Rev. Lett. 50, 120, (1983)
- [13] R.M. Feenstra, A.P. Fein, Phys. Rev. B32, 1394, (1985)
- [14] R.J. Wilson, S. Chiang, Phys. Rev. Lett. 58, 369, (1987), und Phys. Rev. Lett. 59, 2329, (1987)
- [15] V.M. Hallmark, S. Chiang, J.F. Rabolt, J.D. Swalen, R.J. Wilson, Phys. Rev. Lett. 59, 2879, (1987)
- [16] E. Ritter, R.J. Behm, G. Pötschke, J. Winterlin, Surf. Sci. 181, 403, (1987)
- [17] M. Amrein, A. Stasiak, H. Gross, E. Stoll, G. Travaglini, Science 240, 514, (1988)

-
- [18] B. Drake, R. Sonnenfeld, J. Schneir, P.K. Hansma, Surf. Sci. 181, 92, (1987)
 - [19] J.G. Simmons, J. Appl. Phys. 34, 1793, (1963)
 - [20] N. Garcia, IBM J. Res. Dev. 30 (5), 533, (1986)
 - [21] N. Garcia, C. Ocal, F. Flores, Phys. Rev. Lett. 50, 2002, (1983)
 - [22] N. Garcia, F. Flores, Physica 127 B, 137, (1984)
 - [23] N.D. Lang, Phys. Rev. Lett. 56 (11), 1164, (1986)
 - [24] N.D. Lang, Phys. Rev. B34 (8), 5947, (1986)
 - [25] N.D. Lang, Phys. Rev. Lett. 58 (1), 45, (1987)
 - [26] N.D. Lang, Phys. Rev. B36 (15), 8173, (1987)
 - [27] J. Tersoff, D.R. Hamann, Phys. Rev. Lett. 50, 1998, (1983)
 - [28] J. Tersoff, D.R. Hamann, Phys. Rev. B 31, 805, (1985)
 - [29] A. Baratoff, Physica 127 B, 143, (1984)
 - [30] J. Bardeen, Phys. Rev. Lett. 6, 57, (1961)
 - [31] S. Gauthier, Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Paris 7, (1988)
 - [32] J.A. Stroscio, R.M. Feenstra, D.M. Newns, A.P. Fein, J. Vac. Sci. Techn. A6 (2), 499, (1988)
 - [33] R.M. Feenstra, J.A. Stroscio, J. Tersoff, A.P. Fein, Phys. Rev. Lett. 58, 1192, (1987)
 - [34] A. Selloni, P. Carnevali, E. Tosatti, C.D. Chen, Phys. Rev. B31, 2602, (1985)
 - [35] R.H. Tromp, R.J. Hamers, J.E. Demuth, Phys. Rev. B15, 1388, (1986)
 - [36] G. Binnig, K.H. Frank, H. Fuchs, N. Garcia, B.Reihl, H. Rohrer, F. Salvan, A. Williams, Phys. Rev. Lett. 55, 987, (1985)
 - [37] W.J. Kaiser, R.C. Jaklevic, Surf. Sci. 181, 55, (1987)

-
- [38] R.J. Hamers, R.M. Tromp, J.E. Demuth, Phys. Rev. Lett. 56, 1972, (1986)
 - [39] A.P. Fein, J.R. Kirtley, R.M. Feenstra, Rev. Sci. Instr. 58, 1806, (1987)
 - [40] R.M. Feenstra, J.A. Stroscio, A.P. Fein, Surf. Sci. 181, 295, (1987)
 - [41] R.M. Feenstra, P. Martensson, Phys. Rev. Lett. 61, 447, (1988)
 - [42] D.W. Pohl, IBM J. Res. Dev. 30 (5), 417, (1986)
 - [43] Firmenzeitschriften: Vibrit, Piezokeramiken von Siemens, Siemens Zentralbereich Technik; Piezooxide PXE, Valvo Hamburg (1985); Modern Piezoelectric Ceramics, Vernitron, Bedford, Ohio, USA
 - [44] H. van Kampen, G. van de Walle, IBM J. Res. Dev. 30, 509, (1986)
 - [45] C. Gerber, G. Binnig, H. Fuchs, O. Marti, H. Rohrer, Rev. Sci. Instr. 57, 221, (1986)
 - [46] J.E. Demuth, R.J. Hamers, R.M. Tromp, M.E. Welland, IBM J. Res. Develop. 30, 397, (1986)
 - [47] U. Tietze, C. Schenk, Halbleiterschaltungstechnik, Springer, Berlin 1986
 - [48] H. Unbehagen, Regelungstechnik, Vieweg u. Sohn, Braunschweig (1982)
 - [49] Y. Kuk, P.J. Silverman, Rev. Sci. Instr. 60 (2), 165, (1989)
 - [50] T. Berghaus, Dissertation, Ruhr-Universität, Bochum, (1988)
 - [51] K. Besocke, Surf. Sci. 181, 145, (1987)
 - [52] R.M. Feenstra, A.P. Fein, IBM J. Res. Dev. 30, 466, (1986)
 - [53] Piezokeramikröhrchen von Siemens Unternehmensbereich Keramik- und Porzellanwerk, Redwitz
 - [54] Piezoplatten von Valvo GmbH Hamburg
 - [55] Leitsilberkleber PC 860005 von Heraeus, Hanau
 - [56] Viton ist ein Fluorelastomer (duPont), das als Dichtungsmaterial in der Hochvaku-

umtechnik verwendet wird. Wegen seiner zäh-elastischen Eigenschaften ist es gut zur Dissipation kinetischer Energie geeignet.

- [57] Operationsverstärker OPA 102 von Burr Brown, Düsseldorf
- [58] Signal-Mittler NIC 370 von der Firma Nicolet
- [59] Digitalsignalprozessorkarte TXP 32/60 von der Firma Distec, Göttingen
- [60] Graphikkarte Genoa 16 bit,
- [61] A. Schummers, Dissertation, RWTH Aachen
- [62] 3-Gitter LEED von der Firma Omikron, Wiesbaden
- [63] 10 keV CMA von der Firma Varian, Hamburg
- [64] M.A. van Howe, W.H. Weinberg, C.M Chan, Low Energy Electron Diffraction, Springer Series in Surface Science Vol.6, Springer, Berlin (1986)
- [65] G. Cubiotti, G. Mondio, Auger Spectroscopy and Electronic Structure, Springer Series in Surface Science Vol. 18, Springer, Berlin (1989)
- [66] 3 keV Sputterkanone Firma Varian, Hamburg
- [67] HPLT Manipulator Firma VG Instrumenents, Wiesbaden
- [68] Schwingungsdämpfer von der Firma Newport, Göttingen
- [69] M.A. van Howe, S.Y Tong, The Structure of Surfaces, Springer Series in Surface Science, Vol.2, Springer, Berlin (1984)
- [70] W. Mönch, Festkörperprobleme XXIV, 229, Vieweg u. Sohn, Wiesbaden (1984)
- [71] S.Y Tong, W.N. Mei, G. Xu, J. Vac. Sci. Techn. B2, 293, (1984)
- [72] C.B. Duke, Appl. Surf. Sci. 11/12, 1, (1982)
- [73] A. Kahn, Surf. Sci. Rep. 3, 193, (1983)
- [74] A. Huijser, J. van Laar, T.L. van Rooy, Phys. Rev. Lett. 65A, 337, (1978)

-
- [75] H. Alexander, in Dislocations in Solids Vol.5, Ed. F.R.N. Nabarro, North Holland, Amsterdam, (1989)
- [76] D. Hull, D.J. Bacon, Introduction to Dislocations, Pergamon, Oxford, (1984)
- [77] P.B. Hirsch, J. Microsc. 118 (1), 3, (1980)
- [78] C. Kisielowski-Kemmerich, H. Alexander, in Defects in Crystals, Ed. E. Mizera, World Scientific, (1988)
- [79] D. Szyuka, Diplomarbeit, RWTH Aachen, (1990)
- [80] S. Park, J. Nogami, H.A. Mizes, C.F. Quate, Phys. Rev. B38, 4269, (1988)
- [81] T. Michely, Diplomarbeit, Universität Bonn, (1989)
- [82] J. Geeurts, Dissertation, RWTH Aachen, (1986)
- [83] P. Haasen, Physikalische Metallkunde, Springer, Berlin (1984)
- [84] R.M. Feenstra, J.A. Stroscio, J. Vac. Sci. Techn. B5(4), 923, (1987)
- [85] J. Beyer, P. Krüger, A. Mazur, J. Pollmann, J. Vac. Sci. Techn. 21(2), 358, 1982
- [86] R.J. Hamers, U.K. Köhler, J. Vac. Sci. Techn. A7(4), 2854, (1989)
- [87] A. Huijser, J. van Laar, T.L. von Rooy, Surf. Sci. 62, 472, (1977)
- [88] H. Ibach, K. Horn, R. Dorn, H. Lüth, Surf. Sci. 38, 433, (1973)
- [89] M. Henzler, Appl. Phys. 9, 11, (1976)
- [90] R.J. Hamers, J. Vac. Sci. Techn. B6(4), 1462, (1988)
- [91] J.A. Stroscio, R.M. Feenstra, J. Vac. Sci. Techn. B6(4), 1472, (1988)
- [92] R.S. Becker, B.S. Swartzentruber, J.S. Vickers, T. Klitsner, Phys. Rev. B39, 1633, (1988)
- [93] R. Möller, R. Coenen, B. Koslowski, M. Rauscher, Surf. Sci. 217, 289, (1989)
- [94] H. Lüth, M. Büchel, R. Dorn, M. Liehr, R. Matz, Phys. Rev. B15, 865, (1977)

- [95] W. Ranke, Y.R. Xing, G.D. Shen, Surf. Sci. 120, 67, (1982)
- [96] S. Ciraci, A. Baratoff, I.P. Batra, Phys. Rev. B41, 2763, (1990)
- [97] M. Scheffler, in Festkörperprobleme XXII , Verlag Vieweg u. Sohn, Braunschweig (1982)
- [98] G.A. Baraff, M. Schlüter, Phys. Rev. Lett. 55, 1327, (1985)
- [99] R.E. Allen, O.F. Sankey, J.D. Dow, Surf. Sci. 168, 376, (1986)
- [100] J.C. Bourgoin, H.J. von Bardeleben, D. Stievenard, J. Appl. Phys. 64, R65, (1988)
- [101] M.S. Daw, D.L. Smith, J. Vac. Sci. Techn. 17(5), 1028, (1980)
- [102] M.S. Daw, D.L. Smith, Phys. Rev. B20, 5150, (1979)
- [103] H. Wenzl, K. Mika, K. Schroeder, IFF Bulletin 34, (1989)
- [104] Priv. Mitteilung Prof. Dr. H. Lüth, Insitut für Schicht und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich
- [105] W. Mönch, H.J. Clemens, J. Vac. Sci. Techn. 16(5), 1238, (1979)
- [106] C. Wöll, S. Chiang, R.J. Wilson, P.H. Lippel, Phys. Rev. B39, 7988, (1989)
- [107] N.J. Zheng, I.H. Wilson, U. Knipping, D.M. Burt, D.H. Kringley, I.S.T. Tsong, Phys. Rev. B38, 12780, (1988)
- [108] G. Cox, D. Szyuka, K.H. Graf, U. Poppe, K. Urban, Phys. Rev. Lett. 14, 2402, (1990)
- [109] K.H. Küsters, B.C. de Cooman, C.B. Carter, Phil Mag. A 53 (1), 141, (1986)
- [110] B.C. de Cooman, K.H. Küsters, C.B. Carter, Inst. Phys. Conf. Ser. No. 76 Section 2, 55, (1985)
- [111] J.P. Hirth, J. Lothe, Theory of Dislocations, John Wiley, New York (1982)
- [112] H. Alexander, H. Gottschalk, Inst. Conf. Ser. 104, 281, (1989)
- [113] G. Cox, K.H. Graf, D. Szyuka, U. Poppe, K. Urban, Proceedings of the 7th Inter-

national Congress on Surface Science (1989), wird erscheinen in Vacuum (1990)

- [114] S.K. Maksimov, A.P. Fillipov, G.N. Gaidukov, J. Heydenreich, I.I. Khodos, Phil. Mag. A(55), 339, (1987)
- [115] U. Dürig, J.K. Gimzewski, D.W. Pohl, Phys. Rev. Lett. 57, 2403, (1986)
- [116] J.H. Myung, Diplomarbeit, Universität Göttingen, (1987)
- [117] R. Labusch, W. Schröter, in Dislocations in Solids Vol.5, Ed. F.R.N. Nabarro, North Holland, Amsterdam, (1980)
- [118] R. Jones, S. Öberg, Phil. Mag. B49, 839, (1981)
- [119] H. Weber, Dissertation, Universität Köln, (1990)
- [120] Y. Nakada, T. Imura, Phys. Stat. Sol. A102, 625, (1987), und Phys. Stat. Sol. A103, 85, (1987)
- [121] H. Alexander, C. Kisielowski-Kemmerich, A.T. Swalski, Phys. Stat. Sol. A104, 183, (1987)
- [122] Priv. Mitteilung Dr. H. Rüfer, Wacker Chemitronic GmbH, Burghausen

