

Zusammenfassung der Dissertation

ANISOTROPY EFFECTS DURING UNSTABLE STEP FLOW GROWTH

vorgelegt von Dipl.-Phys. Gerrit Danker

Die Molekularstrahlepitaxie (MBE) ist ein verbreitetes Verfahren zur Herstellung von Nanostrukturen auf Kristalloberflächen. Hierbei wird eine Probe im Hochvakuum einem Atom- bzw. Molekülstrahl ausgesetzt, der durch Verdampfung des abzuscheidenden Materials in einer Effusionszelle erzeugt wird. Da das Wachstum des Kristalls vergleichsweise langsam erfolgt, hat man eine sehr gute Kontrolle über die Menge des abgeschiedenen Materials, die man bis auf den Bruchteil einer Monolage genau einstellen kann. Auf diese Weise lassen sich komplexe epitaktische Strukturen erzeugen.

MBE-Wachstum wird häufig an vizinalen Kristalloberflächen durchgeführt. Das sind Oberflächen, die man erhält, wenn man einen Kristall unter einem kleinen Winkel gegenüber einer seiner Netzebenen aufschneidet. Vizinale Oberflächen bestehen daher aus einer Folge etwa gleich großer Terrassen, die durch monoatomare Stufen voneinander getrennt sind.

Eine besondere Wachstumsform an vizinalen Oberflächen ist das Stufenwachstum (*step flow growth*). Durch geeignete Wahl der Wachstumsbedingungen wird erreicht, daß alle an der Oberfläche auftreffenden Atome durch Diffusion an die Stufen gelangen, wo sie sich in den Kristall einbauen. Das heißt, es findet keine Nukleation auf den Terrassen statt; der Kristall wächst geordnet Atomlage für Atomlage durch die Bewegung dieser Stufen.

Für viele Zwecke wäre es günstig, wenn die Oberfläche während des Wachstums ihre perfekte vizinale Geometrie behalten würde. In der Praxis beobachtet man jedoch oft ein Aufrauhern der Oberfläche, das mit der Depositionszeit zunimmt. Mittlerweile sind viele physikalische Mechanismen identifiziert, die zum Aufrauhern der Oberfläche beitragen. Eine herausragende Rolle dabei spielen deterministische Instabilitäten wie die Mäanderinstabilität.

Als Mäandern bezeichnet man die Exkursion der Stufen um ihre mittlere Lage, was zur Bildung von Rippeln in Richtung des Stufenzugs führt. Eine physikalische Ursache der Mäanderinstabilität ist der sogenannte Ehrlich-Schwoebel-Effekt. Dabei handelt es sich um eine Energiebarriere an den Stufen, die den Einbau eines Atoms in den Kristall erschwert, wenn sich das Atom der Stufe von der oberen Terrasse nähert.

Der Mäanderinstabilität wurden in der Vergangenheit eine Reihe von theoretischen Arbeiten gewidmet. Insbesondere wurde aus einer Kontinuums- theorie für das Stufenwachstum, dem Burton-Cabrera-Frank-Modell (BCF),

eine Amplitudengleichung abgeleitet, mit deren Hilfe sich die zeitliche Entwicklung des Mäanders beschreiben läßt.

Der Einfluß von Kristallanisotropie auf die Dynamik der mäandernden Stufen wurde in diesem Rahmen bislang nicht untersucht. Das ist Gegenstand der vorliegenden Dissertation.

In den ersten Kapiteln dieser Arbeit wird das BCF-Modell eingeführt, die Stabilität der Stufen beim Wachstum in Hinblick auf das Mäandern untersucht und die Ableitung der Amplitudengleichung nachgezeichnet. Eine numerische Integration des vollen BCF-Modells wird mit den Aussagen der Amplitudengleichung verglichen, wobei sich eine sehr gute quantitative Übereinstimmung ergibt.

Der sich daran anschließende Hauptteil im Kapitel 4 ist der Untersuchung der Mäanderinstabilität unter Berücksichtigung von Anisotropie gewidmet. Aufgrund ihrer Fernordnung weisen Kristalle einen hohen Grad an Anisotropie auf. Alle Größen, die in die Kontinuumstheorie eingehen, sind mehr oder weniger anisotrop: die Linienspannung Γ der Stufen, der Liniendiffusionskoeffizient D_L , die kinetischen Koeffizienten ν_+ und ν_- sowie der Terrassendiffusionskoeffizient D . In drei Unterabschnitten werden nun die Folgen dieser Anisotropien untersucht.

Dabei zeigt sich zunächst im einseitigen Modell (unendlich starker Ehrlich-Schwoebel-Effekt), daß eine Anisotropie von Γ oder D_L ein neues Vergrößerungsszenario zur Folge hat: die unterbrochene Vergrößerung (*interrupted coarsening*). In Abhängigkeit von der Gestalt und Orientierung der Anisotropie kommt es zu einer Vergrößerung der Rippelstruktur, die jedoch endet, sobald eine kritische Wellenlänge erreicht ist. Die experimentell beobachtete Wellenlänge ist also nicht allein durch die lineare Instabilität bestimmt und daher nicht mit der Wellenlänge der instabilsten Mode identisch. Dieser Effekt muß berücksichtigt werden, wenn man ein Modell für Stufenwachstum mit experimentellen Ergebnissen vergleichen möchte.

In der Arbeit wird gezeigt, daß diese Vergrößerung im wesentlichen dann auftritt, wenn Γ oder D_L für die Orientierung der ungestörten Stufe (oder in einer gewissen Umgebung) ein Minimum annimmt. Darüber hinaus werden Formeln abgeleitet, die die Berechnung der zu erwartenden Wellenlänge erlauben. Dazu wird ein Zusammenhang zwischen der Vergrößerungsdynamik und den möglichen Wellenlängen stationärer Lösungen der Amplitudengleichung hergestellt. In diesem Kontext gehen wir auch auf das Zusammenspiel von Kristallanisotropie und elastischer Stufenwechselwirkung ein. Es ist bekannt, daß elastische Wechselwirkungen zwischen den Stufen zu endloser Vergrößerung führen. In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, daß eine vorhandene elastische Stufenwechselwirkung die asymptotische Entwicklung dominiert und damit das Vergrößerungsverhalten bestimmt.

Der folgende Abschnitt ist dem zweiseitigen Modell gewidmet, mit dem die Auswirkungen einer Anisotropie des Ehrlich-Schwoebel-Effektes untersucht werden können. Hier ist zunächst hervorzuheben, daß sich die Anisotropie der kinetischen Koeffizienten bereits in der linearen Dispersionsrelation widerspiegelt. Für Anisotropien, die nicht die Rechts-links-Spiegelsymmetrie aufweisen, ergeben sich nach der linearen Theorie Lösungen, die driften. Des weiteren stellt sich zwischen den Mäandern benachbarter Stufen ein Phasenunterschied ein.

Die nichtlinearen Untersuchungen beschränken sich auf den Fall mit besagter Spiegelsymmetrie. Hier kann gezeigt werden, daß das Szenario der unterbrochenen Vergrößerung auch als Folge einer Anisotropie des Ehrlich-Schwoebel-Effektes auftritt, und zwar dann, wenn der Ehrlich-Schwoebel-Effekt in Richtung der ungestörten Stufe maximal ist. Darüber hinaus gibt es ein weiteres Szenario in Fällen, wo der Ehrlich-Schwoebel-Effekt für bestimmte Stufenorientierungen das Vorzeichen wechselt. Dann findet eine endlose Vergrößerung statt, allerdings auf einer sehr langsamen Zeitskala (logarithmische Vergrößerung in Analogie zur Cahn-Hilliard-Dynamik).

Der letzte Abschnitt des Hauptteils beschäftigt sich mit den Folgen anisotroper Diffusion auf den Terrassen. Hierzu wird zunächst eine geometrische Abbildung vorgestellt, die es gestattet, das Problem mit anisotropen Terrassen auf ein Problem mit isotropen Terrassen zurückzuführen. Dabei bleibt die Struktur der Grundgleichungen erhalten. Die Anisotropie der Terrassendiffusion erscheint jetzt als Modifikation der Anisotropien der Stufeneigenschaften. Der wesentliche Vorteil dieses Ansatzes besteht darin, daß die zuvor benutzten Techniken auch in diesem Fall anwendbar sind. Mit Hilfe der geometrischen Abbildung ist es darüber hinaus möglich, anisotrope Terrassendiffusion in andere Modelle einzubauen, in denen bislang nur die Anisotropie der Stufeneigenschaften berücksichtigt wurde.

Auch Terrassenanisotropie kann zu unterbrochener Vergrößerung führen. Dazu muß die Diffusion senkrecht zu den ungestörten Stufen langsamer sein als in Richtung dieser Stufen. Eine mögliche Besonderheit, die im Gegensatz zu Γ - und D_L -Anisotropie auftreten kann, sind Rippel, die gegenüber der Wachstumsrichtung geneigt sind. Das ist dann der Fall, wenn die Eigenrichtungen des Diffusionstensors nicht mit der Richtung des Stufenzuges bzw. mit der Richtung der ungestörten Stufen zusammenfallen.