

# Inhaltsverzeichnis

|          |                                              |           |
|----------|----------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                            | <b>1</b>  |
| 1.1      | Wasser auf Si(001) . . . . .                 | 2         |
| 1.2      | Warum CVD ? . . . . .                        | 3         |
| <b>2</b> | <b>Experimenteller Aufbau</b>                | <b>6</b>  |
| 2.1      | Die UHV-Apparatur . . . . .                  | 6         |
| 2.2      | Das STM . . . . .                            | 8         |
| 2.2.1    | Funktionsprinzip . . . . .                   | 8         |
| 2.2.2    | Steuerung und Datenerfassung . . . . .       | 10        |
| 2.2.3    | Mechanischer Aufbau . . . . .                | 12        |
| 2.2.4    | Tunneln bei hoher Temperatur . . . . .       | 16        |
| 2.3      | Probenpräparation . . . . .                  | 18        |
| 2.3.1    | Präparation der Startflächen . . . . .       | 18        |
| 2.3.2    | Wassereinlaß . . . . .                       | 19        |
| 2.3.3    | Disilaneinlaß . . . . .                      | 21        |
| <b>I</b> | <b>Adsorption von Wasser auf Si(001)</b>     | <b>23</b> |
| <b>3</b> | <b>Die reine Si(001) Fläche</b>              | <b>24</b> |
| 3.1      | Rekonstruktion . . . . .                     | 24        |
| 3.2      | Elektronische Zustände . . . . .             | 26        |
| <b>4</b> | <b>Ergebnisse der Wasseradsorption</b>       | <b>29</b> |
| 4.1      | Die wohlorientierte Fläche . . . . .         | 29        |
| 4.1.1    | Übersicht . . . . .                          | 29        |
| 4.1.2    | missing dimers und buckling . . . . .        | 31        |
| 4.1.3    | Inselwachstum . . . . .                      | 34        |
| 4.1.4    | Die Fläche bei hohen Bedeckungen . . . . .   | 41        |
| 4.2      | Die fehlorientierte Si(001) Fläche . . . . . | 50        |

|                                                             |               |
|-------------------------------------------------------------|---------------|
| <b>5 Diskussion der Wasseradsorption</b>                    | <b>54</b>     |
| 5.1 Abschattung . . . . .                                   | 54            |
| 5.2 Intrinsische Punktdefekte auf Si(001) . . . . .         | 56            |
| 5.3 Molekulare Adsorption ? . . . . .                       | 57            |
| 5.4 Sättigungsbedeckung . . . . .                           | 58            |
| 5.5 Inselwachstum und mobiler Zustand . . . . .             | 58            |
| 5.5.1 Adsorptionskinetik . . . . .                          | 59            |
| 5.5.2 Attraktive Adsorbat-Adsorbat Wechselwirkung . . . . . | 63            |
| 5.5.3 Nukleation von Wasserinseln . . . . .                 | 64            |
| 5.6 Dynamik auf partiell gesättigten Dimeren . . . . .      | 64            |
| 5.7 Vicinalflächen . . . . .                                | 67            |
| 5.8 Ausblick . . . . .                                      | 67            |
| <br><b>II CVD-Wachstum auf Si(111)</b>                      | <br><b>69</b> |
| <b>6 Grundlagen zur CVD auf Si(111)</b>                     | <b>70</b>     |
| 6.1 Die reine Si(111) Fläche . . . . .                      | 70            |
| 6.2 CVD-Wachstum . . . . .                                  | 73            |
| 6.3 Wasserstoff auf Si(111) . . . . .                       | 75            |
| 6.4 Nukleationstheorie . . . . .                            | 76            |
| <br><b>7 Ergebnisse zum CVD-Wachstum</b>                    | <br><b>80</b> |
| 7.1 Nukleation bei MBE . . . . .                            | 80            |
| 7.2 Chemical Vapor Deposition: Nukleation . . . . .         | 83            |
| 7.2.1 Kritische Keimgröße . . . . .                         | 83            |
| 7.2.2 Effekte durch Wasserstoff . . . . .                   | 89            |
| 7.2.3 Wachstum im frühesten Stadium . . . . .               | 94            |
| 7.3 Anfangswachstum . . . . .                               | 96            |
| 7.3.1 Dynamische Phänomene auf atomarer Skala . . . . .     | 96            |
| 7.3.2 Wachstum und Lagenverteilung . . . . .                | 101           |
| 7.4 Wachstum im stationären Zustand . . . . .               | 108           |
| 7.4.1 Geringe Molekülflüsse . . . . .                       | 108           |
| 7.4.2 Hohe Molekülflüsse . . . . .                          | 113           |
| 7.4.3 Wasserstoffdesorption . . . . .                       | 118           |

|                                                                |            |
|----------------------------------------------------------------|------------|
| <b>8 Diskussion des CVD-Wachstums</b>                          | <b>123</b> |
| 8.1 Nukleation von Inseln . . . . .                            | 123        |
| 8.1.1 Analyse der Ergebnisse . . . . .                         | 123        |
| 8.1.2 Zusammenhang von Wachstumsrate und Molekülfluß . . . . . | 127        |
| 8.1.3 Exponenten der Inseldichte . . . . .                     | 133        |
| 8.2 Anfangswachstum . . . . .                                  | 139        |
| 8.2.1 Diffusion und Wasserstoff . . . . .                      | 139        |
| 8.2.2 Wachstumsmodus . . . . .                                 | 141        |
| 8.3 Stationäres Wachstum . . . . .                             | 148        |
| 8.3.1 Wachstumsrate . . . . .                                  | 148        |
| 8.3.2 Wachstumstetraeder . . . . .                             | 150        |
| 8.4 Fazit und Ausblick . . . . .                               | 154        |
| <b>A Berechnung der Einflüsse von Wasserstoff</b>              | <b>157</b> |
| A.1 Adsorption 1. Ordnung . . . . .                            | 157        |
| A.2 Adsorption 2. Ordnung . . . . .                            | 159        |
| <b>B Anmerkungen zur Bilddarstellung</b>                       | <b>160</b> |
| <b>Literaturverzeichnis</b>                                    | <b>161</b> |