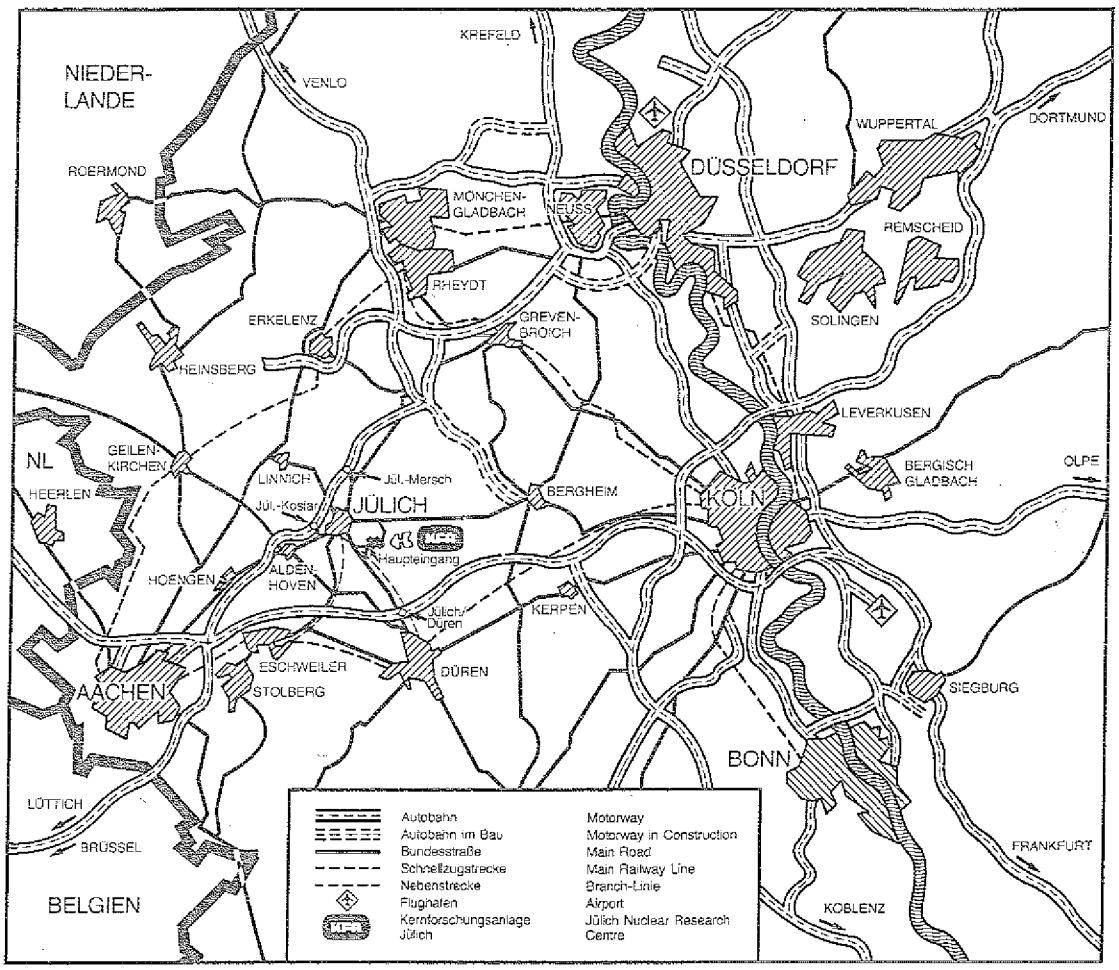
KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH
Institut für Grenzflächenforschung
und Vakuumphysik

Dielektrische Eigenschaften von Siliziumoberflächen und dünnen Silberfilmen

von

U. Backes

Jül - 1968
Januar 1985
ISSN 0366-0885



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1968

Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik Jül - 1968

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d

Dielektrische Eigenschaften von Siliziumoberflächen und dünnen Silberfilmen

von

U. Backes

*D 82 (Diss. T. H. Aachen)

Abstract

High Resolution Electron Energy Loss Spectroscopy (HREELS) has been applied to study clean silicon (111) 7x7 surfaces of different misorientations and thin silver films prepared by evaporation on silicon (111) surfaces at room temperature.

The angle of misorientation controlled by Laue-backscattering was varied between 0° and 10°. Two different step orientations with the step edge in [110] direction have been examined: One pointing downstairs in the $[11\bar{2}]$ direction, the other pointing opposite. The latter step type has been found to originate from cleaving silicon crystals in high vacuum. It is called "dd" (double density) because each unreconstructed step atom exhibits two dangling bonds. Multiple step edges of this type equal (100)-surfaces. The first step type is called "sd" (single density) because of one dangling bond per step atom. Multiple step edges of this type equal (110) surfaces.

HREELS-spectra taken from clean surfaces of both step types behave quite similar. Starting with an (misorientation-) angle of 0° the spectrum shows a high background of inelastically scattered electrons (tailing off with higher loss energies) and a strong broadening of the quasielastic peak. (Both effects disappear upon adsorbing a monolayer of atomic hydrogen.) The effects become stronger for bigger misorientations reaching a maximum at about 5°. Above 5° they decrease and vanish totally at about 7.5^o (dd) and 10° (sd). A much smaller and more or less constant background is now observed. In addition for both surface types a new loss peak is found at 530 cm^{-1} (dd) and 800 cm^{-1} (sd), respectively. These losses are interpreted as being due to surface phonons, localized at multiple steps equaling (100) surfaces (dd) or (110) surfaces (sd).

All surfaces exhibited 7x7 LEED patterns, although spot-splitting appeared at bigger misorientations. The dd 10° surface also showed a strange adsorption behaviour. Neither 100 L atomic hydrogen nor 1000 L molecular oxygen

gave rise to the well-known vibrational losses which are observed by EELS on well oriented surfaces.

HREELS-spectra taken from silver films of thicknesses from 2.6 to 7000 Å also exhibit broadening of the quasielastic peak and an inelastic background tailing off with higher loss energies. The effects decrease rapidly with increasing thickness.

It is shown that background and broadening effects in HREELS-spectra from the clean silicon surfaces and the silver films result from multiple plasmon excitation, localized within a thin layer at the surface. From a simple Drude model, combined with ELS-theory and multiple-scattering theory, it is possible to derive the surface-layers's conductivity. The "intrinsic" surface resistivity of the silicon (111) 7x7 surface is found to be 4000 Ω. Resistivity increases monotonically with increasing misorientation. Matthiesens rule is applied to fit this dependence. From this the existence of an unreconstructed strip at the base of each step is established. Its width is found to be 23.8 Å (for the dd) and 16.5 Å (for the sd). An "intrinsic" free mean path for electrons in the 7x7 cell of 20.7 Å is derived.

Surface resistivity calculated from HREELS-spectra taken from clean silicon (111) 7x7 surfaces at different temperatures (100 K - 300 K) shows no evidence for temperature-induced electron-hole pair excitation over a small bandgap.

Seite

Inhalt

1. Einleitung

In den letzten Jahren haben Oberflächeneffekte in der Halbleiterphysik ein stetig zunehmendes Interesse gefunden. Hierfür gibt es mehrere Gründe. Zum einen dringen die durch Oberflächenladungen erzeugten Felder unter Umständen sehr tief in das Volumen ein. Das Studium der dadurch erzeugten Raumladungsrandschicht hat für viele Systeme bereits zu einem vertieften Verständnis der damit verknüpften Vorgänge geführt. Zum anderen entspricht es dem Wunsch des Physikers nach Vereinfachung, statt des experimentell schwierig definierbaren Kontaktes zweier verschiedener Materialien, z.B. Metall + Halbleiter, ein "isoliertes" System wie Halbleiter + Vakuum zu untersuchen. Die hier gewonnenen Ergebnisse gehören zur Grundlagenforschung, versprechen aber bei Erweiterung auf Systeme wie Halbleiter + Dünnschicht weitreichende technologische Anwendungen (Solarzellen, Galliumarsenidtechnologie etc.). Entsprechend dem heute verfügbaren hohen technischen Standard bei Silizium (Reinheit!) und der nahezu unbeschränkten Verfügbarkeit dieses Elements hat das Interesse an der Physik von Siliziumoberflächen ebenfalls zugenommen.

Beim Spalten von Siliziumeinkristallen entsteht immer eine vorzugsweise kristallographisch (111)-orientierte, wenn auch mehr oder weniger stark gestufte Oberfläche, während polierte Flächen in jeder Orientierung hergestellt werden können. Spaltet man den Kristall im Ultrahochvakuum, so gibt es zunächst eine große Anzahl freier Valenzen, die das Bestreben haben, sich abzusättigen. Die Kräfte, die auf die Atome an der Oberfläche wirken, haben nicht mehr die ursprüngliche Gittersymmetrie. Dieser Zustand ist für die Oberfläche energetisch unbefriedigend, und daher stellt sich eine Verformung der obersten Atomlage(n) ein. In einem Elektronenbeugungsexperiment haben Lander, Gobeli und Morrison /1/ bereits 1963 die 2x1-Rekonstruktion der reinen Siliziumspaltfläche entdeckt.

2. Siliziumoberflächen

2.1. Silizium (111) 2x1-Oberfläche

Die Bindungen in einem Siliziumeinkristall sind sp^3-Hybridorbitale mit Tetraedersymmetrie. Bei einer idealen (111)-Oberfläche wären diese Orbitale an der Oberfläche mit je einem Elektron nur halb besetzt. Aus dieser Tatsache folgt unmittelbar die Existenz eines metallischen Bandes, wie es im gerechneten Bänderschema /2/ von Bild 1 auch zu sehen ist. Hervorstechendes Merkmal der Bandstruktur ist die Existenz von Oberflächenzuständen, die eindeutig den verschiedenen Bindungsorbitalen, wie freie Orbitale (Dangling Bonds) und rückwärtige Orbitale (Backbonds), zuzuordnen sind.

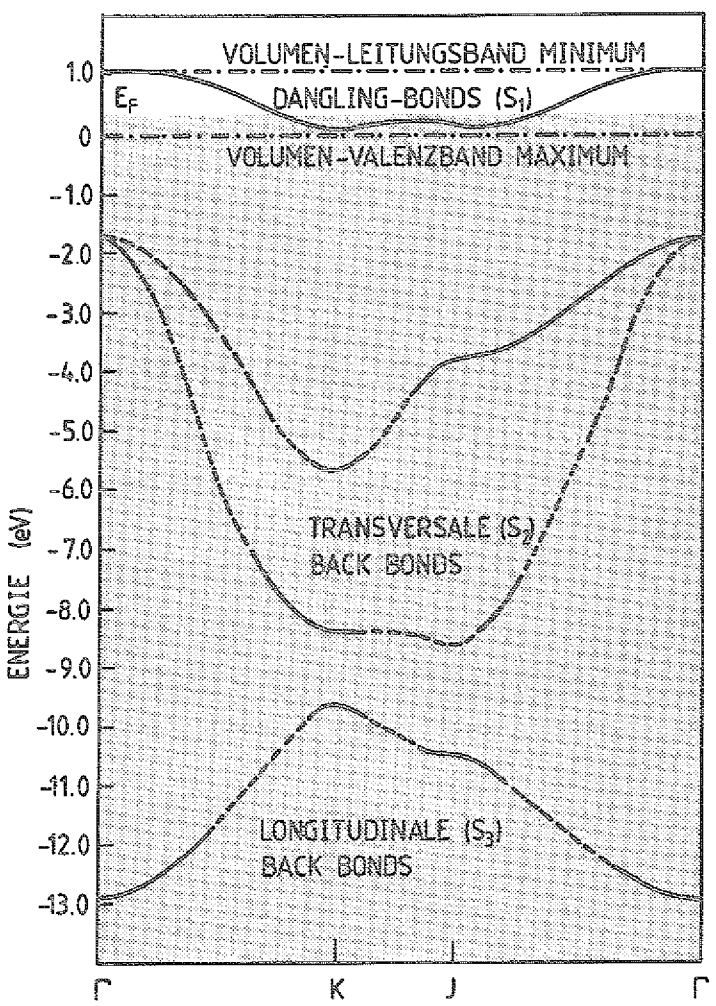


Bild 1
Bänderschema
einer idealen
Silizium (111)-
Oberfläche /2/

Nach dem Spalten eines Siliziumeinkristalls im Ultrahochvakuum beobachtet man aber keine ideale Oberfläche, sondern eine 2x1-Rekonstruktion. Eine Monolage atomaren Wasserstoffs hebt die Rekonstruktion allerdings wieder auf. Dieser Effekt favorisierte lange Zeit das Haneman-Modell /3/ für die Rekonstruktion (Bild 2). Es beruht auf einem Ladungstransfer zwischen benachbarten freien sp^3-Orbitalen, d.h. ein sp^3-Hybrid gewinnt Ladung und bekommt

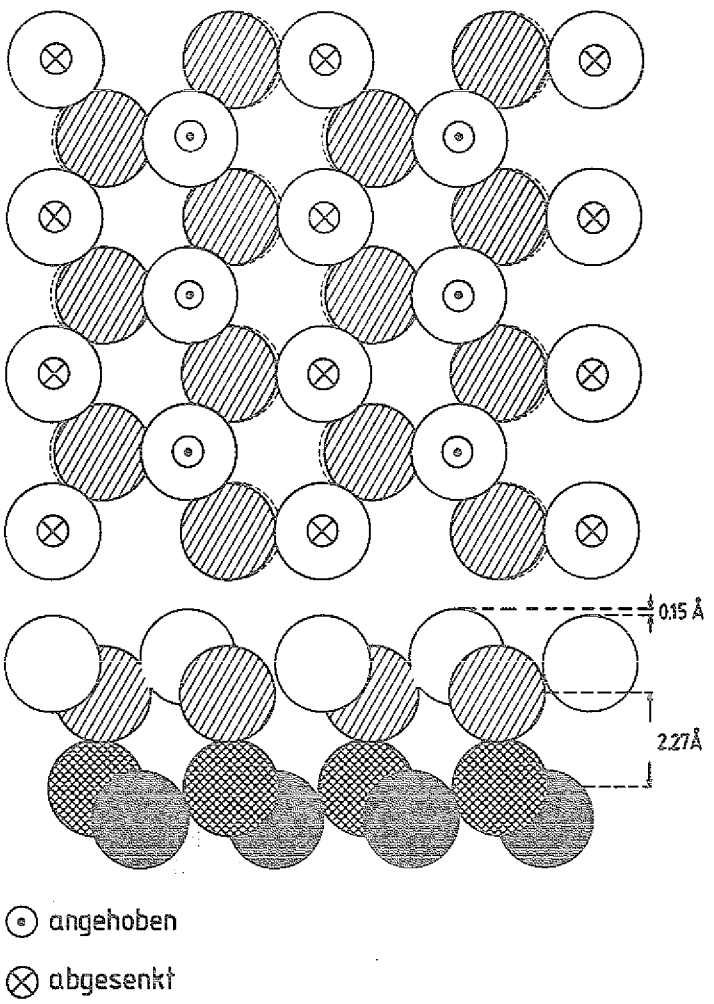


Bild 2
Silizium (111) 2x1 Haneman-Modell /3/ in der Aufsicht (oben) und Seitenansicht (unten). In der Aufsicht ist die vierte Lage weggelassen.

eher s-Charakter, das Atom wird also etwas angehoben, während das andere sp^3-Hybrid Ladung abgibt, p-Charakter bekommt und daher das Atom abgesenkt wird. So bilden sich abwechselnde Ketten von angehobenen und abgesenkten Atomen aus. Die Ankopplung für den Ladungstransfer geschieht über die nächsten Nachbarn, also die zweite Atomlage, in der entsprechende seitliche Verschiebungen stattfinden. Daß die Rekonstruktion durch Adsorption einer Monolage Wasserstoff aufgehoben wird, ist leicht verständlich, da die Verschiebungen und Störungen nur klein und ihrer Natur nach reversibel sind.

Elektronisch kann man sich die Wirkung der Rekonstruktion etwa wie in Bild 3 vorstellen. Das Band der halbbesetzten sp^3-Hybride spaltet bei vollständigem Ladungstransfer auf in ein vollständig besetztes Band unterhalb und ein vollständig leeres Band oberhalb der Fermikante, was zu einer Absenkung der Gesamtenergie führt. So öffnet sich an der Oberfläche, ausgehend von der idealen (111)-Fläche, wieder eine Bandlücke, die Oberfläche verhält sich halbleitend. Experimentell wurde die Existenz einer solchen Bandlücke bei

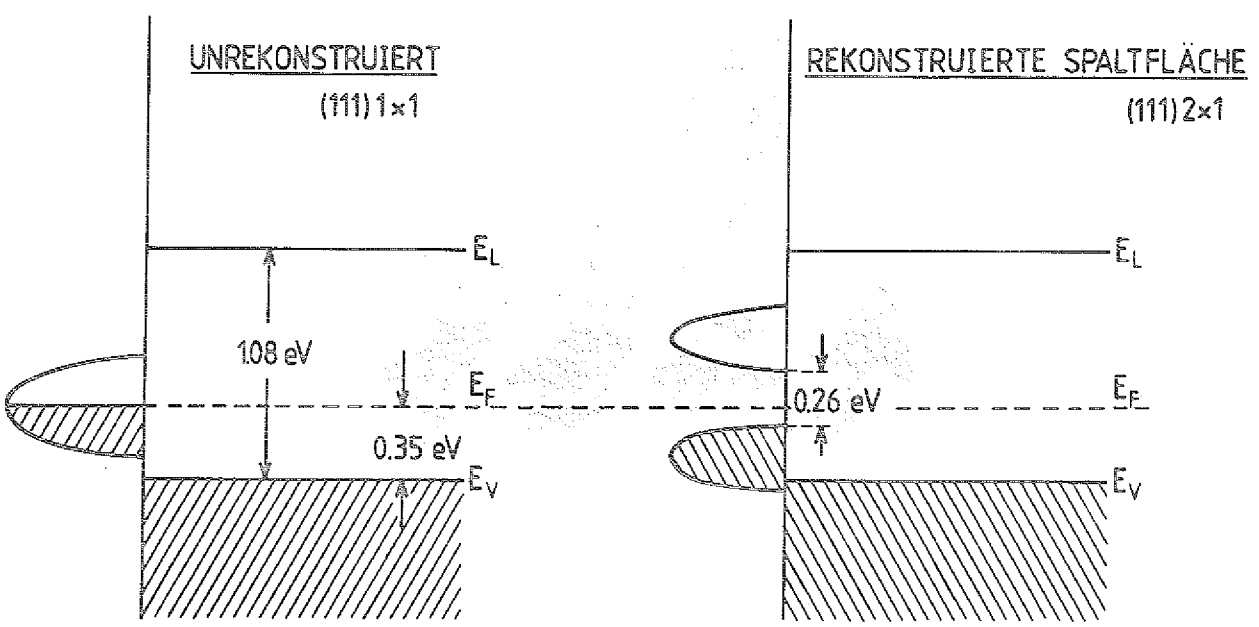


Bild 3
Elektronische Energieabsenkung beim Übergang von der idealen Silizium (111) 1x1-Fläche zur 2x1-Fläche

der 2x1-Fläche unabhängig von G. Chiarotti et al. /4/ durch Infrarotadsorptionsmessungen und von Froitzheim et al. /5/ durch hochauflösende Elektronenspektroskopie nachgewiesen. Beide Gruppen finden einen Einsatzpunkt von 0.26 eV für Übergänge zwischen den aufgespaltenen Bändern, und ein Adsorptionsmaximum bei einer Energie von 0.5 eV, was einem Sattelpunkt in der Energiedifferenz zwischen den Bändern, also einer besonders hohen kombinierten Zustandsdichte zuzuordnen ist. Das Haneman-Modell liefert den obigen Überlegungen zufolge eine Bandlücke nur für starke atomare Verschiebungen, da der Ladungstransfer sonst nicht vollständig ist. Winkelaufgelöste Photoemissionsstudien an der (111) 2x1-Oberfläche /6/ lassen sich im Rahmen des Haneman-Modells aber nur für schwache Verschiebungen verstehen. Diese und andere Diskrepanzen führten zu weiteren Strukturvorschlägen wie z.B. dem erst kürzlich präsentierten π-gebundenen Ketten-Modell von Pandey /7/. Der Wert des Haneman-Modells für diese Arbeit liegt in der Illustration der elektronischen Auswirkungen einer einfachen Rekonstruktion.

2.2. Silizium (111) 7x7-Oberfläche

Die 2x1-Rekonstruktion ist nur metastabil, denn nach Anlassen der Spaltfläche auf ca. 300°C stellt sich eine 7x7-Rekonstruktion ein, die durch Elektronenbeugung unmittelbar beobachtbar ist /1/. Diese Struktur stellt offenbar den energetisch günstigsten Zustand für die (111)-Oberfläche dar, denn die Rekonstruktion bleibt nach dem Abkühlen erhalten. Dieselbe Struktur findet man auch, wenn man polierte, (111)-orientierte Siliziumkristalle auf ca. 500°C erhitzt. In jedem Fall hängt die Übergangstemperatur von der mittleren Stufendichte bzw. Defektdichte ab /8/. Die Übergangstemperatur steigt mit der Defektdichte. Im Gegensatz zur 2x1-Rekonstruktion hebt die Adsorption einer Monolage atomaren Wasserstoffs nicht die 7x7-Rekonstruktion auf /9/. Erst höhere Dosen Wasserstoff erzeugen ein "1x1"-Beugungsbild mit hohem Untergrund. Wagner et al. /10/ fand bei vibrationsspektroskopischen Studien an diesem System, daß die Wirkung des Wasserstoffs, zumindest bei höheren Dosen, nicht allein darin besteht, freie Orbitale abzusättigen, sondern sogar Si-Si-Bindungen aufzubrechen und so neue Adsorptionsplätze zu schaffen. In diesem Sinne kann man den hohen Untergrund im Beugungsbild als Resultat der

unsystematischen Ätzwirkung des Wasserstoffs verstehen.

Weil die 7x7-Struktur so beständig gegen kleine Mengen atomaren Wasserstoffs ist, wurden von vornherein "harte" Rekonstruktionsmodelle gegenüber den "weichen" Rekonstruktionsmodellen, wie es z.B. das Haneman-Modell darstellt, bevorzugt. Ein klassisches Beispiel für ein "hartes" Rekonstruktionsmodell bietet das Lander-Fehlstellenmodell /11/ (Bild 4). Dort fehlen 13 von den insgesamt 49 Atomen in der Elementarmasche. Beim Adatommodell /12/ ist eine entsprechende Anzahl hinzugefügt. Entsprechend der Vielzahl der besetzbaren Plätze in der Elementarmasche sind seitdem eine Vielzahl von Strukturvorschlägen gemacht worden /13a ... 13n/, die hier nicht alle beschrieben werden können.

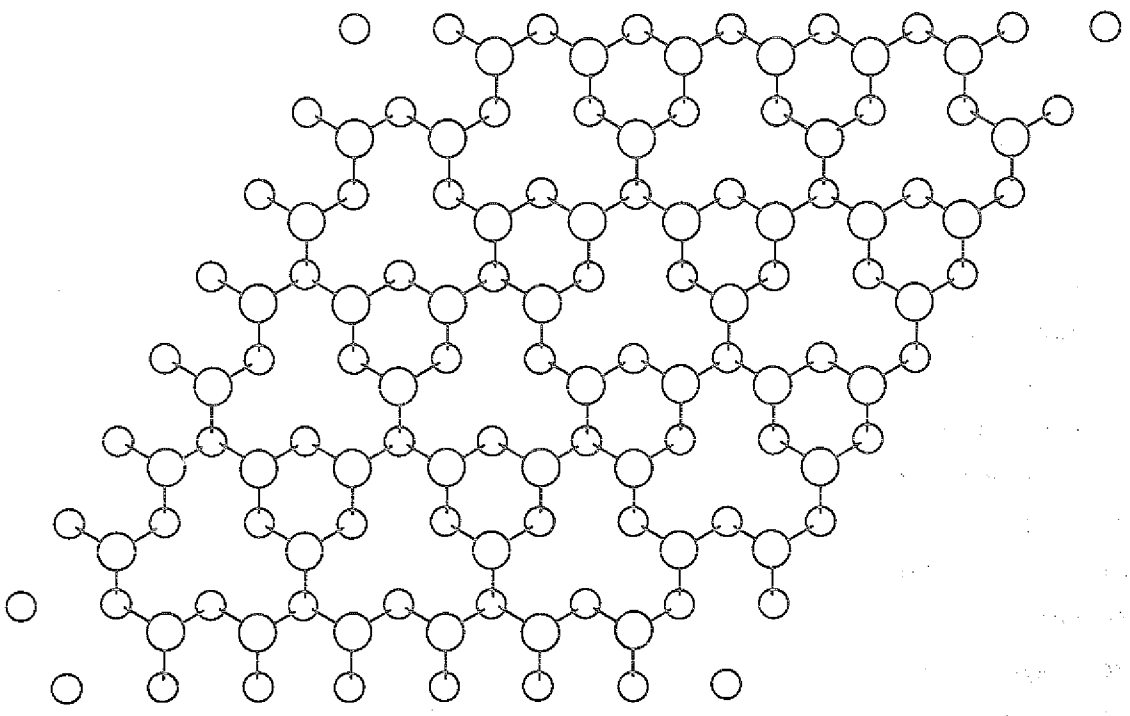


Bild 4
Lander-Fehlstellenmodell für die Silizium (111) 7x7-Oberfläche. In der ersten Atomlage fehlen 13 Atome.

Wie bei der 2x1-Struktur ist die Frage interessant, ob sich bei der Rekonstruktion gegenüber der idealen Fläche eine Bandlücke öffnet oder nicht. Da die potentielle Bandlücke wegen der großen Elementarmasche und den entsprechend aufgespaltenen Oberflächenbändern unter Umständen sehr klein sein kann, scheiden Untersuchungsmethoden mit vergleichsweise schlechter Auflösung wie z.B. Photoemission ($\Delta E \approx 0.1$ eV) zur Detektion aus. Optische Adsorptionsexperimente im Infrarotbereich /4/ sind wahrscheinlich nicht empfindlich genug. Hier bietet sich die Elektronenspektroskopie mit langsamen Elektronen wegen der hohen Auflösung ($\Delta E \approx 10$ meV) und der großen Oberflächenempfindlichkeit an. Falls keine Bandlücke vorhanden ist, existieren an der Oberfläche quasifreie Ladungsträger, die sich dann auch zu kollektiven Schwingungen ("Plasmonen") anregen lassen müßten.

3. Problemstellung

Diese Arbeit soll zur Klärung der Frage beitragen, ob ein metallisches Verhalten der Silizium (111) 7x7-Oberfläche vorliegt und ob dieses Verhalten die Ursache für die bereits früher gefundene Verbreiterung der quasielastischen Linie und die Erhöhung des inelastischen Untergrundes gestreuter Elektronen darstellt /14/. Dazu wurden zwei Versuchsreihen durchgeführt.

Die erste Versuchsreihe untersucht die inelastische Streuung von langsamen Elektronen an Silizium (111) 7x7-Flächen, die durch Aufheizen aus definiert fehlorientierten, polierten (111)-Flächen entstehen. Damit führt man eine von außen einstellbare Dämpfung für das potentielle Plasmon ein. Diese Dämpfung ist maßgeblich bestimmt durch die freie Weglänge des Plasmons auf der Terrasse zwischen zwei Stufen. Die Fehlorientierungswinkel, gemessen als Neigung gegen die (111)-Fläche (Bild 5), lagen zwischen 0° und 10°. Als Kippachse bei der Präparation wurde die $[\bar{1}10]$-Richtung verwendet, die aus Spaltexperimenten als Richtung längs der Stufenkanten bekannt ist /15/. Aus diesen Experimenten weiß man auch, daß Siliziumkristalle fast ausschließlich so spalten, daß die Stufen "abwärts" in die $[\bar{1}\bar{1}2]$-Richtung weisen. Jedes Kantenatom einer idealen Stufe besitzt dann zwei freie Valenzen. Dieser Stufentyp sei im folgenden in Anlehnung an Schlüter et al. /27/ mit "dd-Typ" (double dangling bond) bezeichnet. Eine Fehlorientierung von $\approx 55^{o}$ ergäbe die bekannte (100)-Fläche mit zwei freien Valenzen je Oberflächenatom. Untersucht wurden sowohl fehlorientierte Oberflächen des "dd"-Typs als auch des "sd"-Typs (single dangling bond), bei dem die Stufen in die $[11\bar{2}]$-Richtung "abwärts" laufen. Die Kantenatome der idealen Stufe haben hier nur je eine freie Valenz. Hier entsteht bei einem Fehlorientierungswinkel von $\approx 35^{o}$ die (110)-Fläche, die ebenfalls nur eine freie Valenz pro Oberflächenatom aufweist.

Die zweite Versuchsreihe wurde mit dem Ziel durchgeführt, ein Modellsystem für das potentielle metallische Verhalten der Silizium (111) 7x7-Fläche zu präparieren und an diesem Energieverluste zu messen, um so schließlich die theoretischen Vorhersagen für solche Systeme /16,17/ überprüfen zu können. Hierzu wurde bei Raumtemperatur ein reiner Silberfilm auf eine, vorher ge-

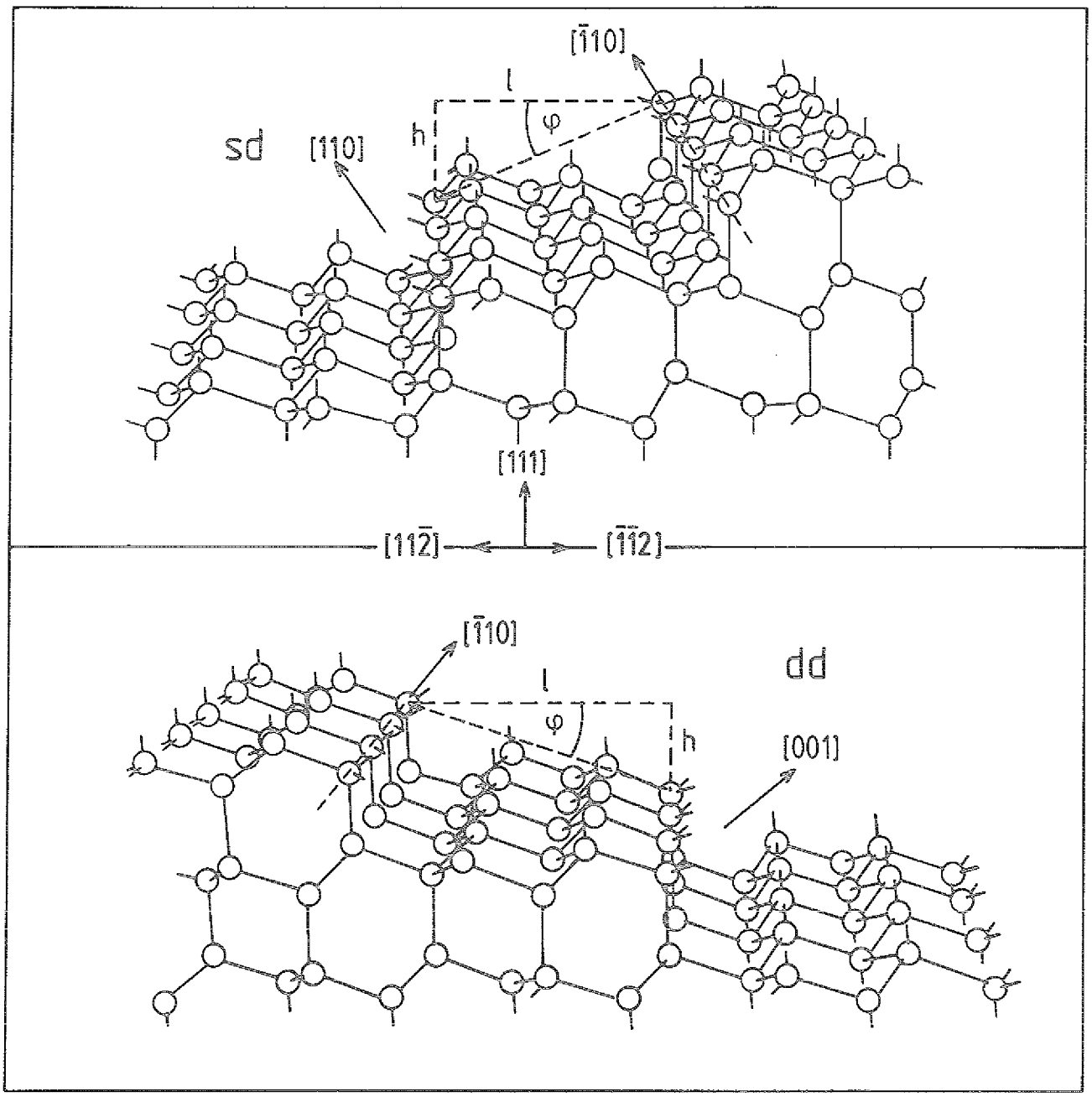


Bild 5

Stark geneigte "(111)"-Fläche mit zwei möglichen Stufenrichtungen bei einer [$\bar{1}$10]-Orientierung der Stufenkanten. Wegen der besseren Übersichtlichkeit ist der "Unterbau" der Stufen und Terrassen weggelassen.

reinigte und angelassene, Silizium (111) 7x7-Oberfläche aufgedampft. Für dieses Experiment wurde als Filmmaterial Silber ausgewählt, weil es die charakteristischen Eigenschaften eines freien Elektronengases relativ gut annähert /29/. Die Dicke der untersuchten Filme wurde zwischen 2.6 Å und 7000 Å variiert.

4. Experimentelles

4.1. Elektronenspektrometer

Das Spektrometer (Bild 6) ermöglicht, Elektronen mit einer schmalen Energieverteilung um eine (bekannte) Primärenergie zu erzeugen und die Energie der Elektronen nach Reflexion an einer Oberfläche zu messen. Zu diesem Zweck werden Elektronen aus einer LaB_6-Kathode thermisch emittiert und durch eine Saugspannung auf den Eintrittspalt des Monochromators (M) beschleunigt. Die elektrostatische Linse (A_1, A_2, A_3) bildet die Kathodenspitze auf den Eintrittsspalt ab. Der Repeller (R) weist gegenüber der Kathode ein negatives Potential auf. Die eigentliche Energieselektion findet in einem 127^0-Zylindersektorfeld statt. Auf der durch Ein- und Austrittsspalt festgelegten Bahn mit dem Radius r_0 im Monochromator bewegen sich nur Elektronen der Sollenergie E_0

$$E_0 = \frac{e\Delta U}{2\ln r_a/r_i}$$

falls ΔU die Potentialdifferenz zwischen den Zylinderkondensatorplatten mit dem Radienverhältnis r_a/r_i ist /18/. Der Winkel des Sektors (127^0) wurde so

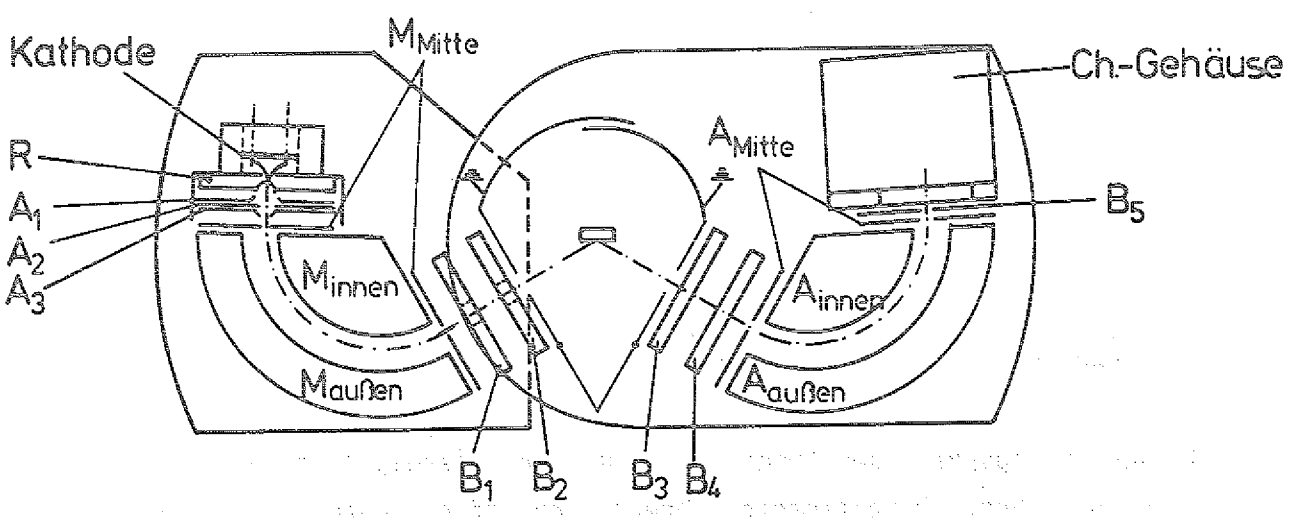


Bild 6
Elektronenspektrometer

gewählt, daß auch die unter einem Winkel zur Soll-Bahn in den Eintrittsspalt gelangenden Elektronen wieder auf den Austrittsspalt fokussiert werden. Mit Hilfe der Beschleunigungslinse (B_1, B_2) werden die den Austrittsspalt verlassenden Elektronen auf die gewünschte Primärenergie beschleunigt und auf die Probenoberfläche gebündelt. Nach der Reflexion (z.B. ohne Energieverlust) werden die Elektronen durch die Verzögerungslinse (B_3, B_4) auf den Eintrittsspalt des Analysators (A) fokussiert und auf die Sollenergie abgebremst. Der Analysator wird mit der gleichen Potentialdifferenz betrieben wie der Monochromator. Nach Durchlaufen des Analysators und des Austrittsspaltes werden die Elektronen durch einen Sekundärelektronenvervielfacher (Channeltron) einzeln nachgewiesen. Falls Elektronen mit einem gewissen Energieverlust nachgewiesen werden sollen, muß die abbremsende Spannung um einen entsprechenden Betrag vermindert werden. Dies wird realisiert, indem alle Potentiale auf der Analysatorseite gleichzeitig um die entsprechende Spannung gegen die Potentiale auf der Monochromatorseite abgesenkt werden. Durch diese Technik wird es ermöglicht, mit einem Netzgerät in weiten Grenzen die Verlustenergie einzustellen, ohne daß sich Abbildungseigenschaften oder Auflösung ändern. Monochromator und Analysator sind um die Probenposition schwenkbar angeordnet und erlauben so, die Auflösung und die Intensität ohne Probe im "direkten Strahl" zu messen. Außerdem werden dadurch Messungen bei verschiedenen Einfallswinkeln möglich. Der Strom im direkten Strahl betrug bei diesen Experimenten typisch 6×10^{-11} A bei einer Auflösung von ca. 70 cm^{-1}.

Das Channeltron-Signal wird über zwei Röhrenstufen vorverstärkt. Über einen Transistorverstärker/Diskriminator werden dann alle Impulse oberhalb einer einstellbaren Schwelle zu Rechteckpulsen umgewandelt. Die Zählfrequenz wird dann in einem Integrator in eine proportionale Gleichspannung umgewandelt.

Zum Steuern des Spektrometers wurden zwei verschiedene Verfahren benutzt:

In der Anfangsphase der Arbeit wurde die Beschleunigungsspannung von einem motorgetriebenen Potentiometer abgegriffen und gleichzeitig auf den X-Eingang eines x-y-Schreibers gelegt. Die oben erwähnte Integratorspannung proportional zur Zählrate wurde an den y-Eingang angeschlossen. Im weiteren Fortschreiten der Arbeit wurde; auch im Hinblick auf die einfachere Weiter-

verarbeitung experimenteller Daten, parallel zu obiger Anordnung, ein IEEE-488-Bus-Frequenzzähler für die Zählrate und ein IEEE-488-Bus-Gleichspannungsnetzgerät in Reihe zum Motorpotentiometer angeschlossen. Die beiden Geräte werden von einem Mikrocomputer mit compiliertem BASIC-Programm gesteuert. Das Programm erlaubt, vollautomatisch ELS-Spektren aufzunehmen, auf dem Bildschirm graphisch darzustellen, kurzzeitige elektrische Störungen während der Messung zu erkennen, Daten zu glätten und Verlustenergien zu bestimmen. Die Spektren werden auf einer Diskette abgespeichert und sind jederzeit abrufbar, wobei eine wählbare Skalierung sofortige Vergleiche z.B. zwischen zwei Spektren ermöglicht.

4.2. Aufdampfofen und Quarzwaage

Da an der zur Verfügung stehenden Apparatur keine Vorrichtung zum Aufdampfen von Metallfilmen verfügbar und kein kommerzielles Produkt die erforderlichen Eigenschaften aufwies, wurde eine Eigenkonstruktion bevorzugt. Die beim Aufdampfen erzielbare Schichtdicke sollte in ca. 10 s bis 15 min zwischen 2 Å und 0.1 µm liegen. Dabei mußte die Schichtdicke längs der gesamten Probenoberfläche möglichst konstant sein. Daher kam ein Emitter mit kleiner Oberfläche und geringem Abstand zum Substrat nicht in Frage. Außerdem mußte die Schichtdickenrate über den maximalen Aufdampfzeitraum möglichst stabil sein, da sonst eine Eichung der Rate per Schwingquarzwaage am Ort des Substrats sinnlos gewesen wäre. Somit schied z.B. ein mit Dampfgut beladenes Filament als Quelle aus. Eine weitere Schwierigkeit ergab sich, weil die Emissionsrichtung horizontal verlaufen mußte. Die Wahl fiel schließlich auf eine geschlossene Zelle mit frei hängendem, elektronenbeschußgeheiztem und temperaturstabilisiertem Dampfgut. Die Detailkonstruktion soll im folgenden kurz beschrieben werden (Bild 7):

Das Dampfgut ist ein kreisförmig ausgeschnittenes Blech (b), das an dünnen Drähten (d) in der zylindrischen Zelle (z) axial aufgehängt ist. Ein Thermoelement (th) ist direkt auf den Rand des Bleches (b) aufgeschweißt und über kleine Löcher in der Zellenwand nach außen geführt. Nach vorn ist die Zelle durch einen Verschluß (v) geschlossen, der durch zwei Litzen (l) betätigt

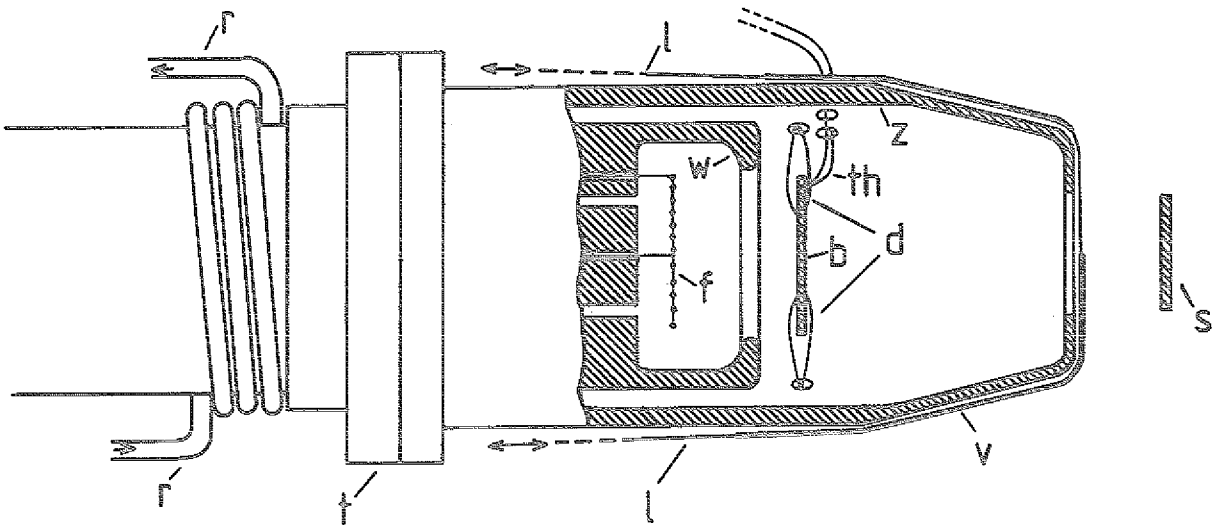


Bild 7
Aufdampfofen

werden kann, um den Dampfweg zum ebenfalls axial orientierten Substrat (s) (am Manipulator) freizugeben. Die Heizung des Bleches erfolgt durch Elektronenbeschuß aus dem spiralförmigen Filament (f) im Wehneltzylinder (w). Das Filament wird mit Strom geheizt und auf negatives Potential (0 - 2 kV) gegen Erde gelegt. Bei genügender Filamenttemperatur werden somit Elektronen auf die (geerdete) Probe beschleunigt. Der Wehneltzylinder befindet sich auf Filamentpotential und verhindert somit, daß Teile der Zellenwand ebenfalls mitgeheizt werden. Die Zelle wird, gemeinsam mit dem über eine Keramikscheibe elektrisch isolierten Wehneltzylinder, auf der Trägerplatte (t) befestigt. Die Trägerplatte wird über eine Rohrleitung (r) wassergekühlt.

Die Thermospannung wird verstärkt und als Ist-Größe in einem PID-Regler gegeben. Im PID-Regler wird diese mit einer als Sollwert extern einstellbaren Spannung verglichen. Die Ausgangsspannung des PID-Reglers ist ein Maß für die Regelabweichung und steuert ein Hochspannungsnetzgerät, welches die Beschleunigungsspannung für das Filament erzeugt. Das Filament wird hierbei mit konstantem Heizstrom betrieben.

Im folgenden wird die Zellenemission aus den geometrischen Datan abgeschätzt und mit den experimentell gemessenen Werten verglichen. Nach Langmuir /21/ beträgt die Massenverlustrate eines Festkörpers der Temperatur T pro Flächen- und Zeiteinheit

$$\Gamma = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} p$$

falls m die Masse eines Gasteilchens und p der sich an der Oberfläche einstellende Gleichgewichtsdruck ist. Die Schichtdickenrate $\dot{d}$ in Vorwärtsrichtung (axial) im Abstand h ist dann durch ein geeignetes Integral über die vom Empfängerelement "sichtbaren" Quellenflächenelemente auf der Kreisscheibe berechenbar /22/:

$$\dot{d} = \frac{\Gamma}{\rho} \frac{1}{(h/s)^2 + 1}$$

s: Radius des Emitters

ρ: Dichte des Kondensats

Wegen der Zellenöffnung muß jedoch mit einer Strahlverdichtung gerechnet werden, die etwa dem Verhältnis der Öffnungsfläche F zur Emitterfläche entspricht:

$$\dot{d} \cong \frac{\pi s^2}{F} \frac{\Gamma}{\rho} \frac{1}{(h/s)^2 + 1}$$

Mit den Werten für unsere Anordnung ($F = 1\ cm^2$, $s = 6.5$ mm, $h = 30$ mm) erhält man für Silber der Temperatur 750°C (= $p \cong 1 \times 10^{-5}$ Torr)

$$\dot{d} = 0.11\ \text{Å/s}\ ,$$

was mit der Quarzwaage auch tatsächlich gemessen wurde. Einen Überblick über berechnete und reale Dickenraten bei verschiedenen Temperaturen gibt Bild 8.

Die Auftragung von log $\dot{d}$ über (-1/T) ergibt eine Gerade, weil in kleinen Temperaturintervallen gilt /22/

$$\log p \cong -\frac{H_v}{RT} + \text{const}$$

mit H_v: Verdampfungswärme pro Mol
R: universelle Gaskonstante

Die Schichtdickenverteilung auf dem Substrat fiel innerhalb eines Radius von 3 mm um weniger als 10 % gegen den Maximalwert ab. Dies wurde aus den gemessenen Schwankungen des inelastischen Untergrundes in den Spektren auf verschiedenen Punkten des Substrats (Ortsauflösung 0.3 mm) abgeschätzt. Eine theoretische Abschätzung der Schichtdickenverteilung unter Berücksichtigung der Zellenöffnung kann hier nicht gegeben werden. Es sei hier nur vermerkt, daß ein entsprechendes Integral für nicht-axiale Empfängerpunkte in der hier verwendeten Anordnung, aber mit großer Öffnung, bei einem Radius von 3 mm einen Schichtdickenabfall von 2 % ergibt /22/.

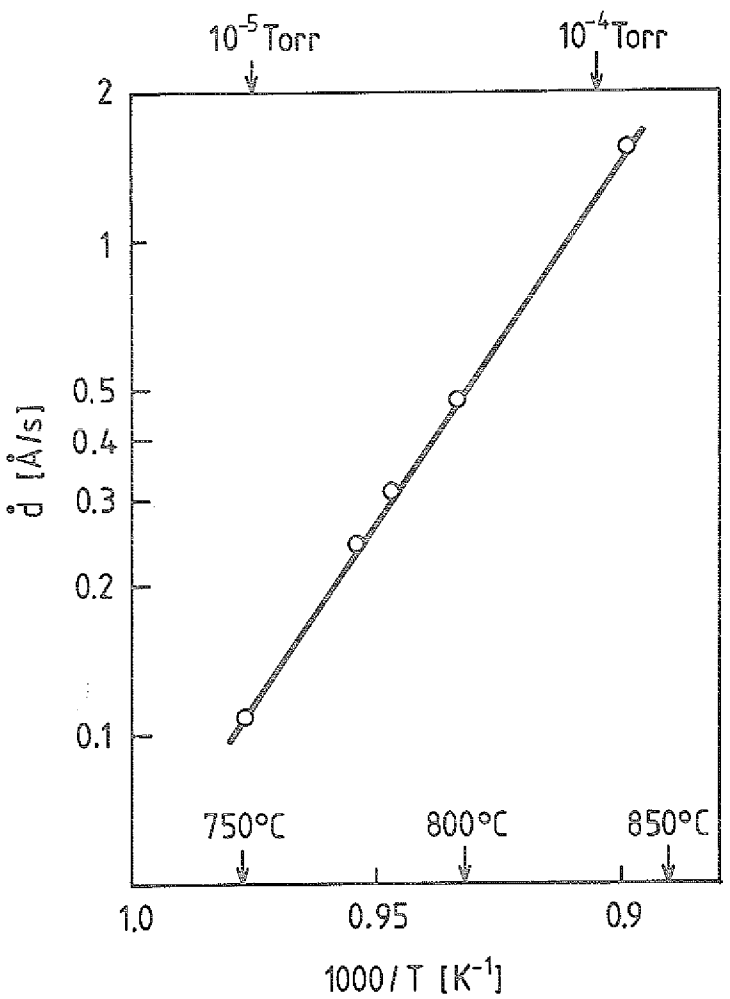


Bild 8
Schichtdickenrate des Aufdampfofens für Silber in Abhängigkeit von der Temperatur

Zur Eichung des Aufdampfofens wurde eine Quarzwaage benutzt. Die mechanische Konstruktion wurde an anderer Stelle schon ausführlich diskutiert /23/, deshalb werden nur kurz die physikalischen Gesichtspunkte angesprochen.

Die Resonanzfrequenz eines AT-geschnittenen Schwingquarzes beträgt

$$f = \frac{N}{d_q}$$

$N = 1.67 \times 10^6$ mm/s

d_q = Quarzdichte

Bedampft man den Quarz auf einer Fläche F mit der Fremdmasse m, so entspricht die Frequenzänderung einer Dickenvergrößerung im Verhältnis der Dichten des Fremdmediums und des Quarzes. Bezeichnet man mit f_1, f_2 die Frequenz vor und nach dem Aufdampfen, so gilt

$$\Delta d_q = N \left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1}\right)$$

also für die Dicke des Fremdmediums

$$d = N \frac{\rho_q \cdot F_q}{\rho \cdot F} \left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1}\right)$$

Für Silber ergibt sich in der gewählten Geometrie

$$d = 4.21 \times 10^{12} \text{ Å s} \left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1}\right)$$

4.3. Probenpräparation

Die fehlorientierten Silizium-Proben wurden aus einem sehr schwach dotierten ($n_D \cong 3.7 \times 10^{12}$ cm^{-3} Phosphor) Einkristall geschnitten, auf den gewünschen Fehlwinkel von der (111)-Richtung bis auf +/- 0.2^o Laue-orientiert, bis zur gewünschten Größe abgeschliffen und nach mechanischem und chemischem Polieren in den Probenhalter eingebaut. Nach dem Einschleusen in die Vakuumapparatur wurden die Proben einmal auf ca. 800^oC geheizt, etwa 2 Stunden bei

eingeschalteter Kühlfalle mit Neon ionengeätzt (1.5 kV, 8 µA) und 3 min bis etwa 900°C geheizt. Nach langsamem Abkühlen ($\dot{T}$ < 5 K/s) erfolgte eine Reinheitskontrolle mit Augerspektroskopie. Die so präparierten Flächen enthielten keine im Augerspektrum nachweisbaren Fremdstoffe (d.h. Verunreinigungen ≈ < 0,5 %). Auch in den Elektronenenergieverlustspektren, die diverse Adsorbate wie C, O, H etc. sehr oberflächenempfindlich als Vibrationsverluste nachweisen können, waren keine der wohlbekannten Energieverluste /10,19,20/ zu sehen. Im Elektronenbeugungsexperiment konnte nach obiger Präparation immer eine gut ausgeprägte (7x7)-Überstruktur beobachtet werden.

Als Substrate für die Aufdampf-Experimente wurden Abschnitte aus (111)-Siliziumwafers (400-800 Ω cm, n-dotiert) in der Vakuumkammer genauso wie die fehlorientierten Proben bis zum Beobachten der 7x7-Überstruktur behandelt. Das Aufdampfen erfolgte unmittelbar nach dem Abkühlen des Substrats auf Raumtemperatur. Die so präparierten Filme wiesen keine im Augerspektrum sichtbaren Verunreinigungen auf.

4.4. Allgemeines

Die beschriebenen Analysengeräte befinden sich in einem Edelstahl-Rezipienten (140 l). Zum Erzeugen des notwendigen Arbeitsdruckes ($p < 1 \times 10^{-10}$ Torr) diente eine Ionengetterpumpe und eine stickstoffgekühlte Titansublimationspumpe mit einer durch ein Eckventil abtrennbaren Vorpumpeneinheit, bestehend aus Turbomolekular- und Drehschieberpumpe. Eine Schleuse erlaubt in Verbindung mit einem entsprechend konstruierten Probenhalter, den Probenwechsel ohne Belüften und Ausheizen der Hauptkammer durchzuführen.

In der Kammer kann die Probe durch einen Manipulator in alle Analysenpositionen gefahren werden.

5. Ergebnisse

5.1. Siliziumoberflächen

Bild 9 zeigt ein typisches Spektrum einer reinen Silizium (111) 7x7-Fläche, aufgenommen bei Raumtemperatur mit einem Einfallswinkel von 65° und einer Primärenergie von 6.5 eV. Die Überstruktur wurde auf einer polierten, in

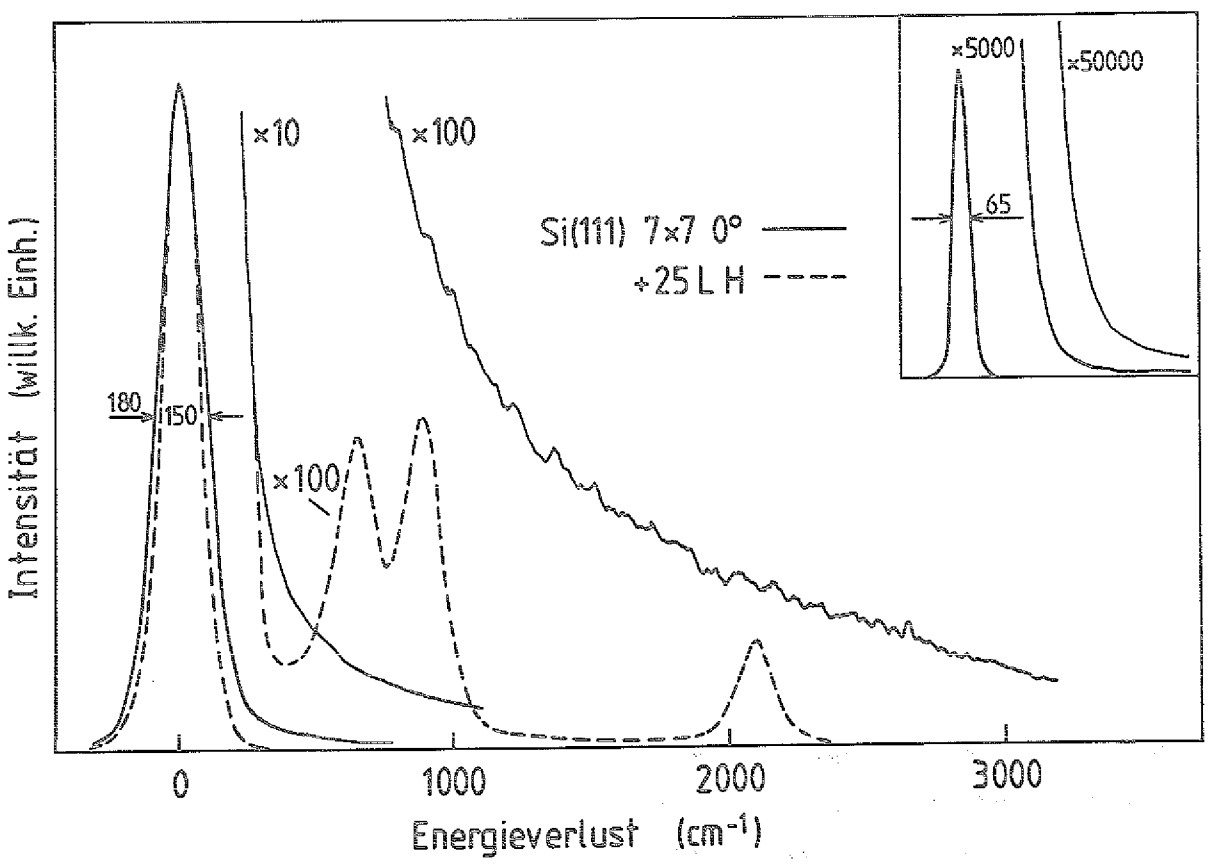


Bild 9
Spektrum der reinen, gut orientierten Silizium (111) 7x7-Fläche bei einem Einfallswinkel von 65° und einer Primärenergie von 6.5 eV (durchgezogene Linie) und Spektrum nach Begasung mit 25 L atomarem Wasserstoff (gestrichelt). Die kleine Zeichnung zeigt zum Vergleich die Auflösung und den Untergrund im direkten Strahl.

(111) Richtung maximal 0.2^{o} fehlorientierten Probe niedriger Dotierung ($n \cong 3.7 \times 10^{-12}$ cm^{-3}) durch Ionenätzen und Anlassen auf $900^{o}C$ präpariert. Zum Vergleich zeigt das kleine Bild den Intensitätsverlauf im direkten Strahl. Das Spektrum der Siliziumoberfläche zeigt zwei wesentliche Merkmale, auf die schon früher hingewiesen wurde /14/: Zum einen enthält die quasielastische Linie (um Verlustenergie 0) offensichtlich einen Anteil (oder Anteile!), der für die Verschlechterung der Auflösung von 70 cm^{-1} im direkten Strahl auf 180 cm^{-1} verantwortlich ist. Zum anderen gibt es eine hohe Intensität inelastisch reflektierter Elektronen, die zu hohen Verlustenergien hin kontinuierlich abnimmt, aber im skizzierten Bereich immer noch mehr als 100-fach größer ist als im direkten Strahl. Auch Spektren bis hin zu höheren Verlustenergien (im Bereich der Volumenbandlücke) ergeben keinen Hinweis auf eine Bandlücke /20/.

Mehrere Möglichkeiten führen gleichzeitig zu einer Verringerung der Halbwertsbreite und des inelastischen Untergrunds unter Beibehaltung der Überstruktur: So verringert z.B. Abkühlen des Kristalls von 300 K auf 100 K den inelastischen Untergrund auf die Hälfte, bei entsprechender Reduzierung der Halbwertsbreite /20/. Dasselbe geschieht bei einer Erhöhung der Primärenergie auf 12.3 eV /20/. Gleichzeitig mit der Erhöhung der Primärenergie beobachtet man eine Verringerung des Winkels, in den die elastisch und inelastisch reflektierten Elektronen gestreut werden, von $\approx 4^{o}$ auf $\approx 0{,}5^{o}$. Der drastischste Effekt tritt nach Adsorption einer Monolage atomaren Wasserstoffs auf (gestrichelte Linie in Bild 9). Der inelastische Untergrund ist nahezu verschwunden, und die Verbreiterung der quasielastischen Linie ist von 180 cm^{-1} auf 150 cm^{-1} zurückgegangen. Dies beweist eindeutig den Oberflächencharakter des inelastischen Untergrunds. Gleichzeitig werden die Silizium-Wasserstoff-Vibrationsverluste beobachtet /10/. Daß der Untergrund verschwindet und die Halbwertsbreite nicht gleichzeitig auf den Wert im direkten Strahl zurückgeht, läßt auf eine zweite, womöglich unabhängige Ursache der Verbreiterung schließen. Eine Möglichkeit hierfür ist die Verschlechterung der Auflösung des Spektrometers durch den von der Probe her vergrößerten Akzeptanzwinkel /18/. Ein Indiz für diese Annahme ist, daß bei einer höheren Primärenergie von 12.3 eV der Akzeptanzwinkel und die Halbwertsbreite deutlich kleiner sind. Bei dieser Primärenergie geht die Halbwertsbreite mit der Adsorption von Wasserstoff bis auf 90 cm^{-1} zurück /20/,

was schon fast der Auflösung im direkten Strahl entspricht. Auch bislang unbekannte Energieverluste, die nahe bei Null liegen, könnten eine Verschlechterung der Auflösung vortäuschen. Diese potentiellen Verluste müßten dann stark von der Primärenergie abhängen. Eine weitergehende Interpretation dieses Problems ist nur mit einer quantitativen Auswertung der Spektren möglich und wird daher auf Kapitel 7 verschoben.

Bild 10 und Bild 11/11a zeigen jeweils einen Satz Spektren, die mit verschieden stark fehlorientiertem Silizium (111) Proben des sd-Typs (Bild 10)

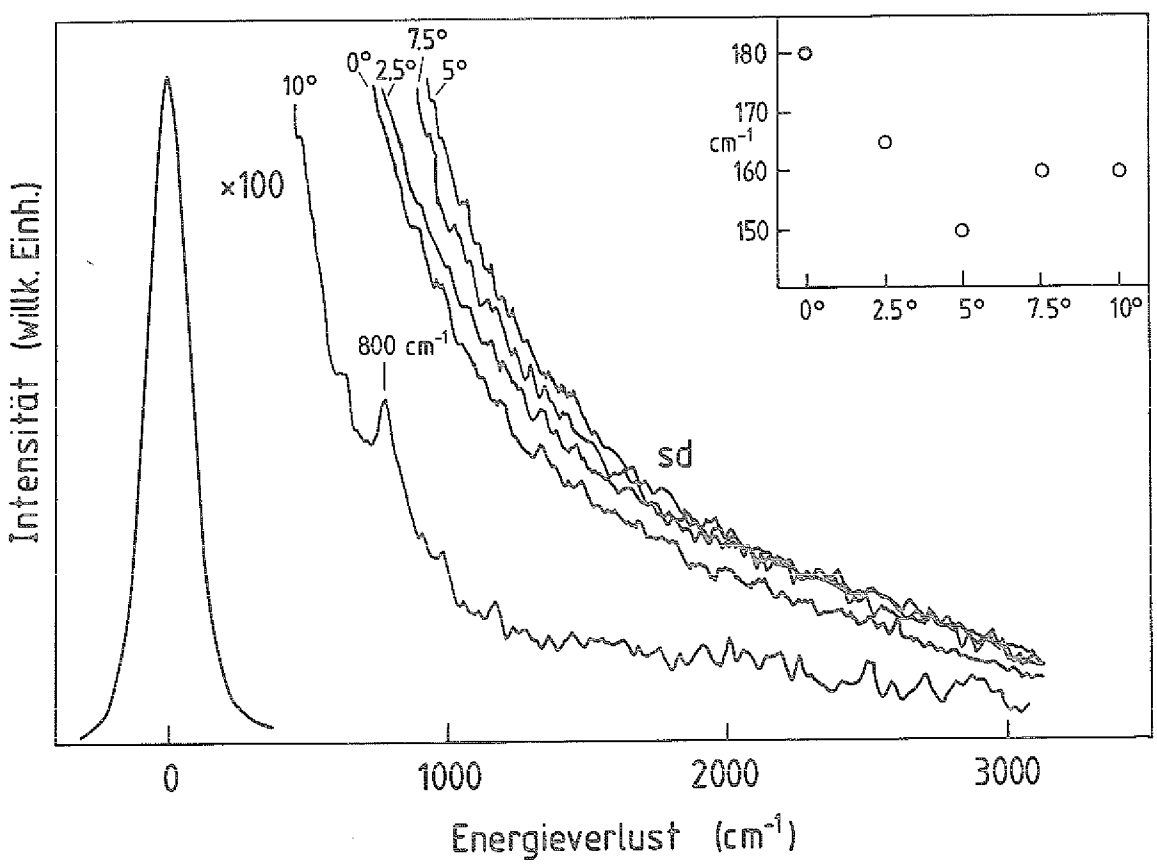
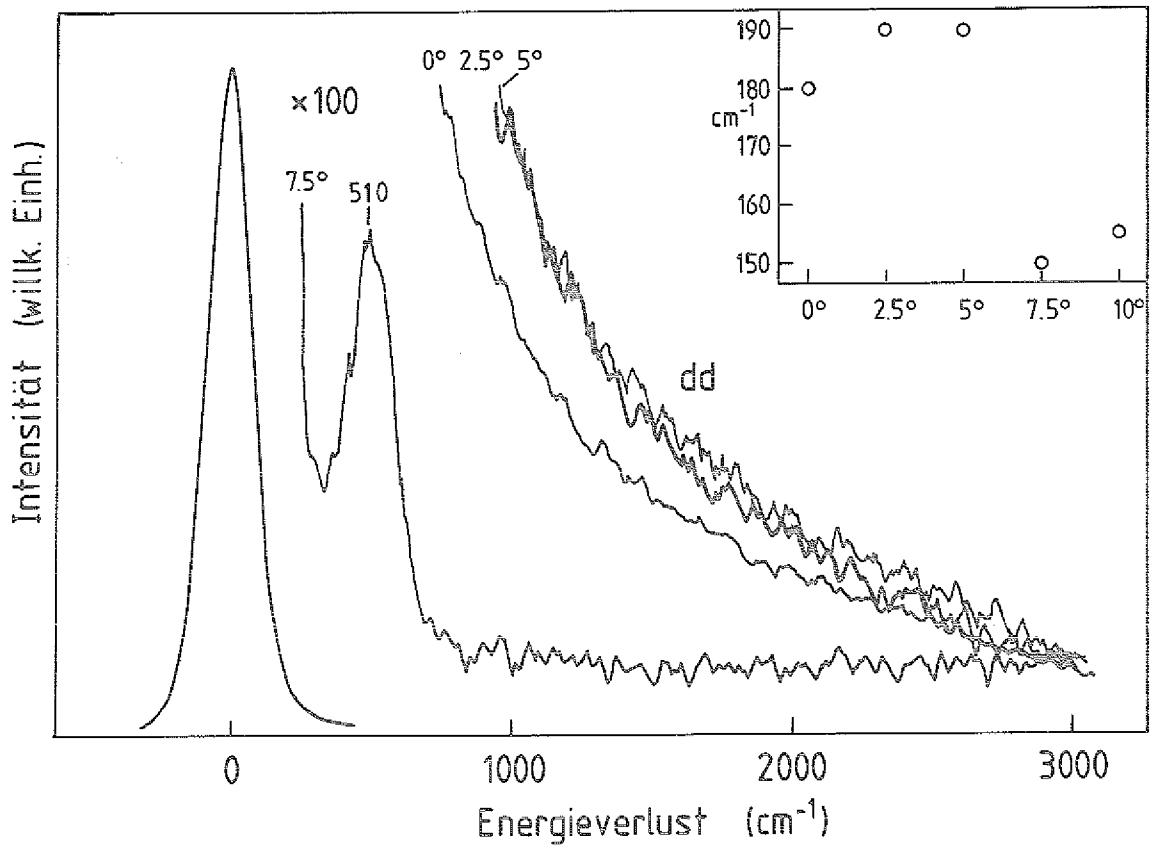


Bild 10

Spektren für verschieden stark gestufte Silizium (111) 7x7-Flächen des sd-Typs; die quasielastischen Linien sind durch einen mittleren Verlauf ersetzt worden. Die kleine Zeichnung enthält die dazugehörigen Halbwertsbreiten.



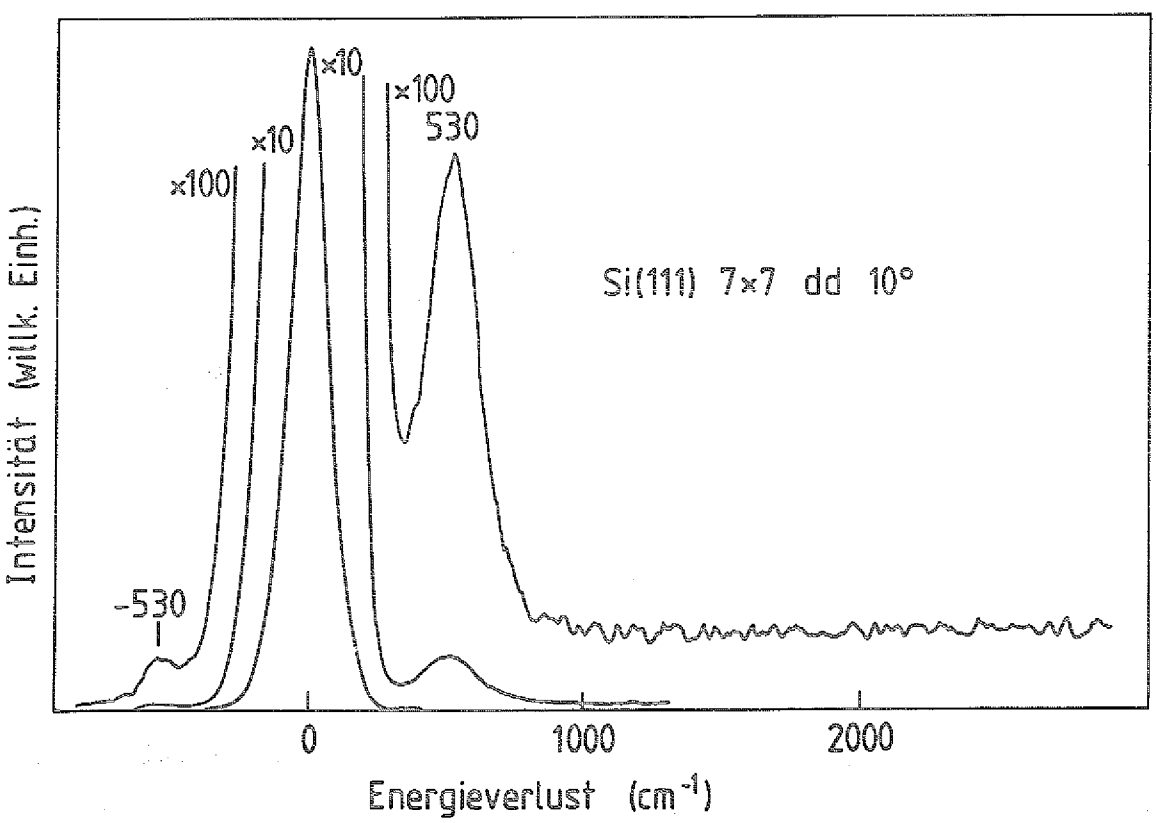


Bild 11/11a

Spektren verschieden stark gestufter Silizium (111) 7x7-Flächen vom dd-Typ; die quasielastischen Linien sind durch einen mittleren Verlauf ersetzt worden.

bzw. des dd-Typs (Bild 11) bei Raumtemperatur aufgezeichnet wurden. Die inelastischen Intensitäten sind auf die elastische Intensität normiert. Die Primärenergie und der Einfallswinkel wurden wie bei der 0^0-Probe eingestellt. Die Proben wurden wie die 0^0-Probe gereinigt und zeigten nach dem Anlassen ohne Ausnahme das charakteristische 7x7-Beugungsbild, wenn auch bei den stark fehlorientierten Proben mit teilweise aufgespaltenen Reflexen (Bild 12) und hohem Untergrund. Die kleine Zeichnung jeweils rechts oben in Bild 10 und 11 zeigen die jeweiligen Halbwertsbreiten; da die quasielastischen Linien kaum voneinander zu unterscheiden gewesen wären, wurden sie durch einen "mittleren" Verlauf ersetzt. Während bei den sd-Proben die Halbwertsbreiten bei Variation des Winkels der Fehlorientierung keinen eindeutigen Verlauf haben, steigt der inelastische Untergrund, beginnend von 0^0, zu höheren Winkeln an, um bei ca. 5^0 ein Maximum zu erreichen und ab 10^0 schließlich steil abzufallen. Dabei ist dann gleichzeitig ein Verlust bei 800 cm^{-1} beobachtbar.

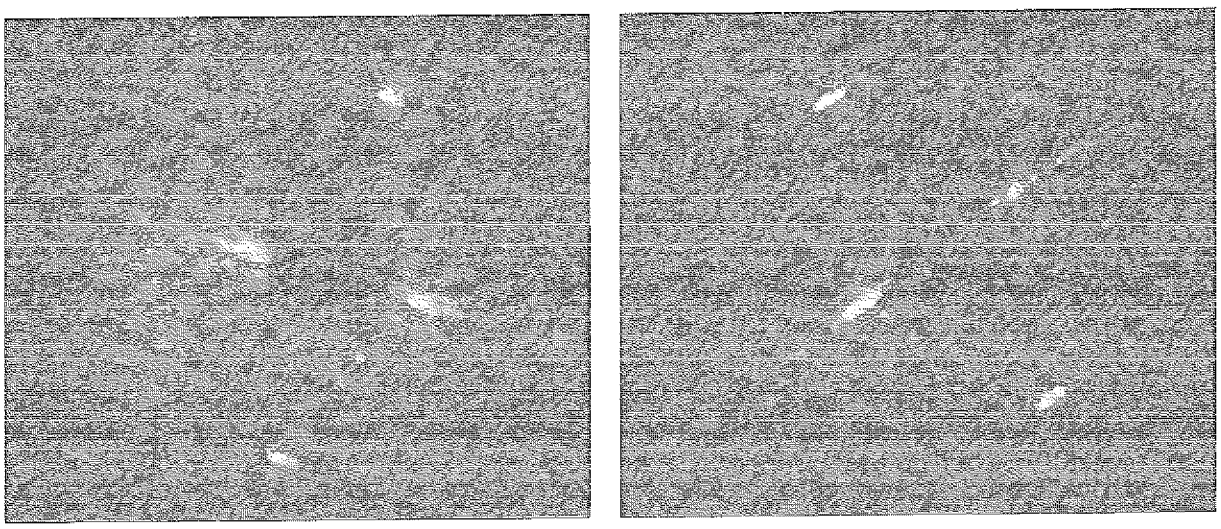


Bild 12
Elektronenbeugungsbilder der reinen Silizium (111) 7x7 7.5^0- (links) und 10^0 (rechts) dd-Probe bei einer Primärenergie von 47 eV

Die dd-Proben zeigen qualitativ denselben Verlauf. Der inelastische Untergrund erreicht ein Maximum zwischen 2,5° und 5°, um bereits bei 7,5° steil abzufallen und zu höheren Verlustenergien in eine niedrige, aber konstante Intensität auszulaufen. Ein neuer Verlust erscheint bei 510 cm^{-1}. Bis auf den leicht verschobenen Verlust bei 530 cm^{-1} unterscheidet sich das 10°-dd-Spektrum kaum von dem 7,5°-dd-Spektrum. Im Gegensatz zu den sd-Spektren entspricht hier der Verlauf der Halbwertsbreite weitgehend dem des inelastischen Untergrundes. Zu höheren Verlustenergien hin scheinen die Unterschiede zwischen den verschiedenen Winkeln kleiner zu werden.

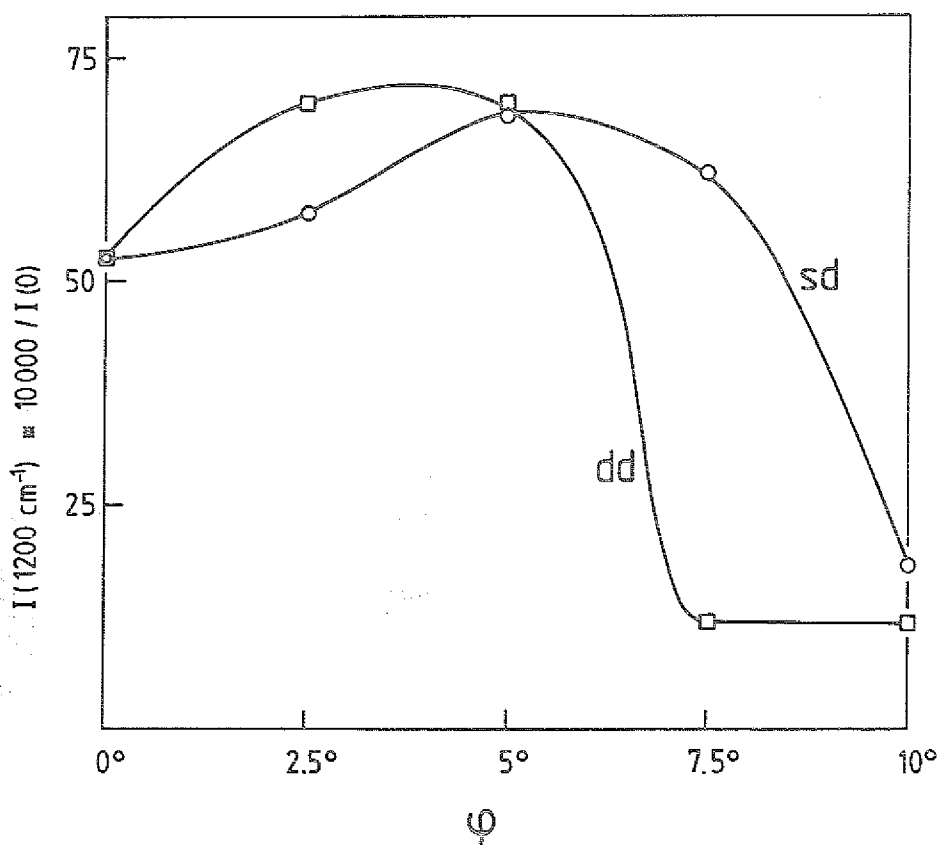


Bild 13
Relative inelastische Intensität bei $\hbar\omega$ = 1200 cm^{-1}, jeweils normiert auf die elastische Intensität und aufgetragen über dem Fehlorientierungswinkel

Zur besseren Übersicht sind in Bild 13 die relativen Intensitäten für die Verlustenergie 1200 cm^{-1} über dem Fehlorientierungswinkel aufgetragen. Dort erkennt man, daß sich die Intensitäten der sd- und dd-Proben bis auf eine Verschiebung von ca. 2° ähneln. Bei den $7,5^o$ und 10°-dd-Proben wurde das Verschwinden der Aufspaltung des (00)-Reflexes im Beugungsexperiment bei bestimmten Primärenergien ausgewertet, um die mittlere Stufenhöhe zu ermitteln /24/. In beiden Fällen ergab sich ein Wert von 3,00 Å. Der im Vergleich zu einer idealen Stufe (h = 3,13 Å) niedrigere Wert kann einer Relaxation der jeweils obersten Lagen oder der Kantenatome zugeschrieben werden. Henzler /15/ ermittelte für Silizium-Spaltflächen ebenfalls einen Wert von 3.00 Å. Aus dem Abstand der aufgespaltenen Reflexe könnte man im Prinzip die mittlere Terrassenlänge bestimmen. Die Aufspaltung ist aber zu klein, um verläßliche Aussagen treffen zu können. Die mittlere Terrassenlänge l ergibt sich von selbst aus dem bekannten Winkel der Fehlorientierung, φ, und der oben bestimmten mittleren Terrassenhöhe h (Bild 5) zu

$$l = h \cdot \cot \varphi$$

Für die 10°-Proben ergibt sich so eine Terrassenlänge von l = 18 Å. Dieser Wert ist zu klein, um den Aufbau einer 7x7-Zelle (l = 23 Å) auf der Terrasse zuzulassen. Da man trotzdem eine 7x7-Überstruktur, wenn auch mit hohem Untergrund und schwachen Reflexen beobachtet, muß es in der statistischen Verteilung eine große Anzahl von erheblich größeren Terrassen geben. Diese sind dann wahrscheinlich durch Mehrfachstufen begrenzt.

Eine andere Möglichkeit, atomare Stufen zu erzeugen, besteht in einem sehr kurzen, chemischen Ätzprozeß. Bild 14 zeigt das Spektrum einer gut orientierten (111)-Probe, die für ca. 2 s in die Siliziumbeize CP6 (45 ml HNO_3, 27 ml Eisessig, 27 ml HF) getaucht, in destilliertem Wasser gespült und dann in die Vakuum-Kammer eingeschleust wurde. Anschließend wurde sie wie alle anderen Proben ionengeätzt und geheizt. Die Probe wies scharfe 7x7-Reflexe auf. Das Spektrum enthält alle charakteristischen Merkmale des dd-10° Spektrums. Proben, die längere Zeit in der Polierbeize verblieben, zeigen statt dessen den inelastischen Untergrund des 0°-Spektrums. Die unmittelbar nach Ätzbeginn gebildeten Ätzgrübchen werden bei längerem Ätzen offenbar wieder geglättet. Wahrscheinlich haben die Wände bzw. Stufen in den Ätzgrübchen dd-Charakter.

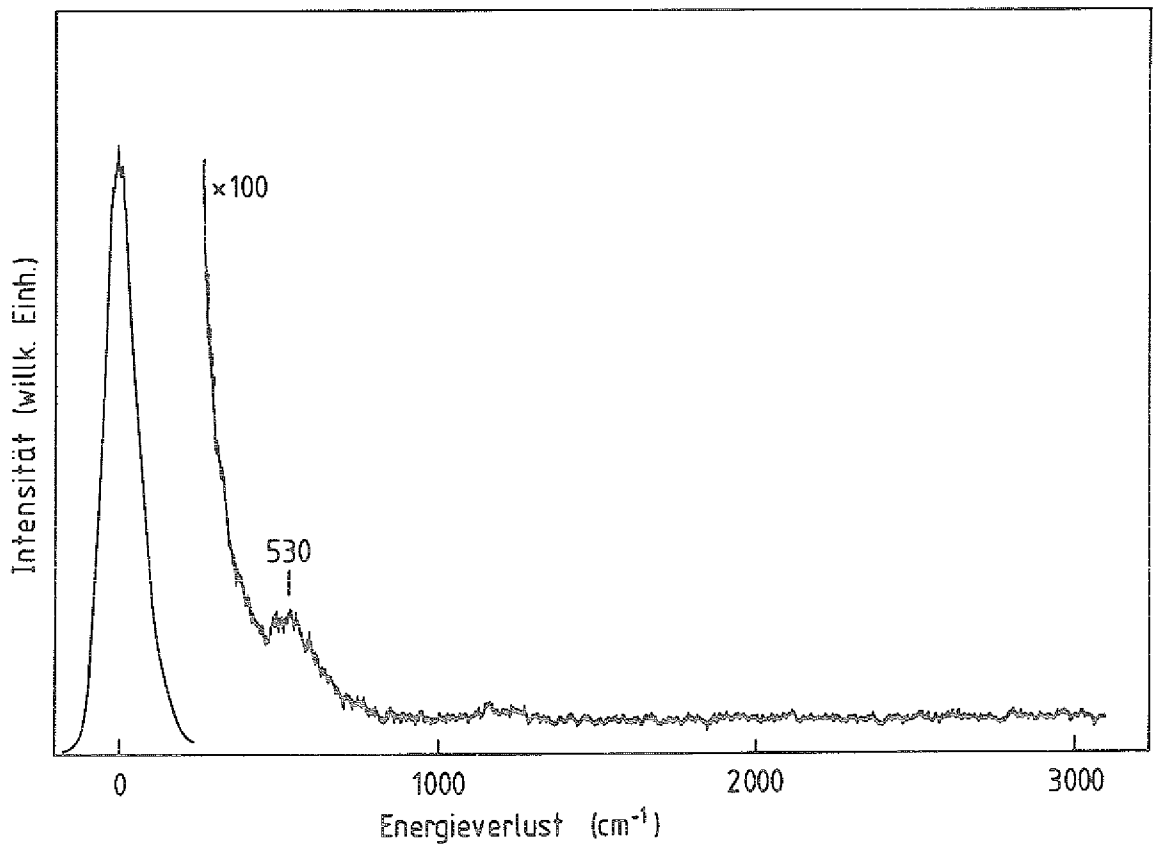


Bild 14
Spektrum der kurzzeitig in CP6 chemisch angeätzten, gut orientierten Probe nach Einbau, Ionenätzen und Heizen bis zum Beobachten der 7x7 Struktur

Die 7,5°- und 10°-dd-Proben verhalten sich auch in chemischer Hinsicht völlig anders als die schwächer gestuften (111)-Proben. Eine Begasung mit 10 L atomarem Wasserstoff führt zum Verschwinden der 7x7-Reflexe im Beugungsbild (Bild 15), ohne daß die Wasserstoff-Vibrationsverluste im Spektrum sichtbar werden. Sogar 100 L atomarer Wasserstoff sind nicht im Spektrum (Bild 16) detektierbar. Dafür verdoppelt sich allerdings die Intensität des 530 cm^{-1}-Verlustes. Auch ein Angebot von 1000 L molekularem Sauerstoff erbringt nicht die für eine gut orientierte Fläche gewohnten Resultate /19/. Statt der symmetrischen und der antisymmetrischen Sauerstoff-Streckschwingung bei 720 cm^{-1} bzw. bei 1000 cm^{-1} sieht man nur einen, sehr breiten und intensiven

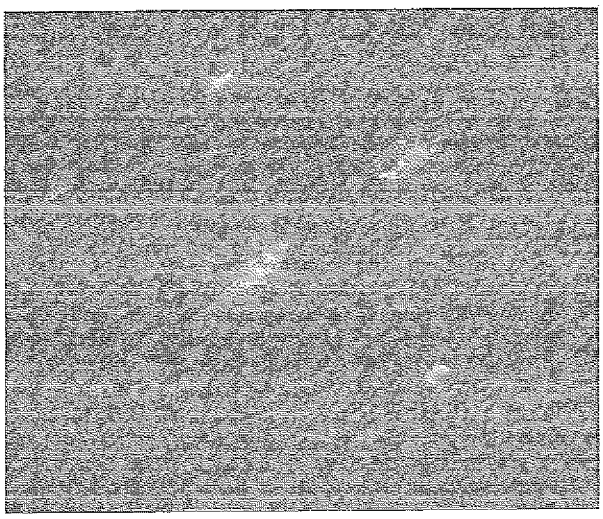


Bild 15
Beugungsbild der Silizium (111) 7x7 10^{0} dd-Probe nach Begasung mit 25 L atomarem Wasserstoff

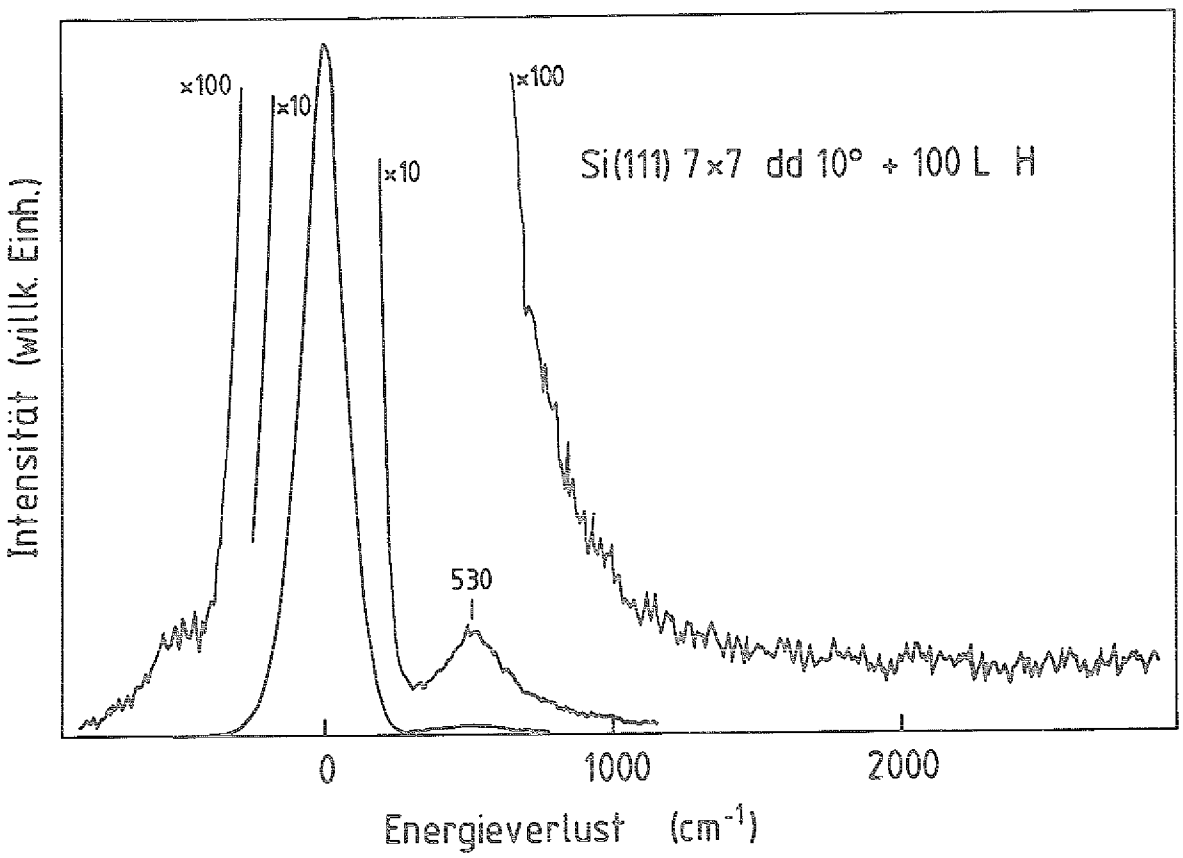


Bild 16
Spektrum der Silizium (111) 7x7 10^{0} dd-Probe nach Begasung mit 100 L atomarem Wasserstoff

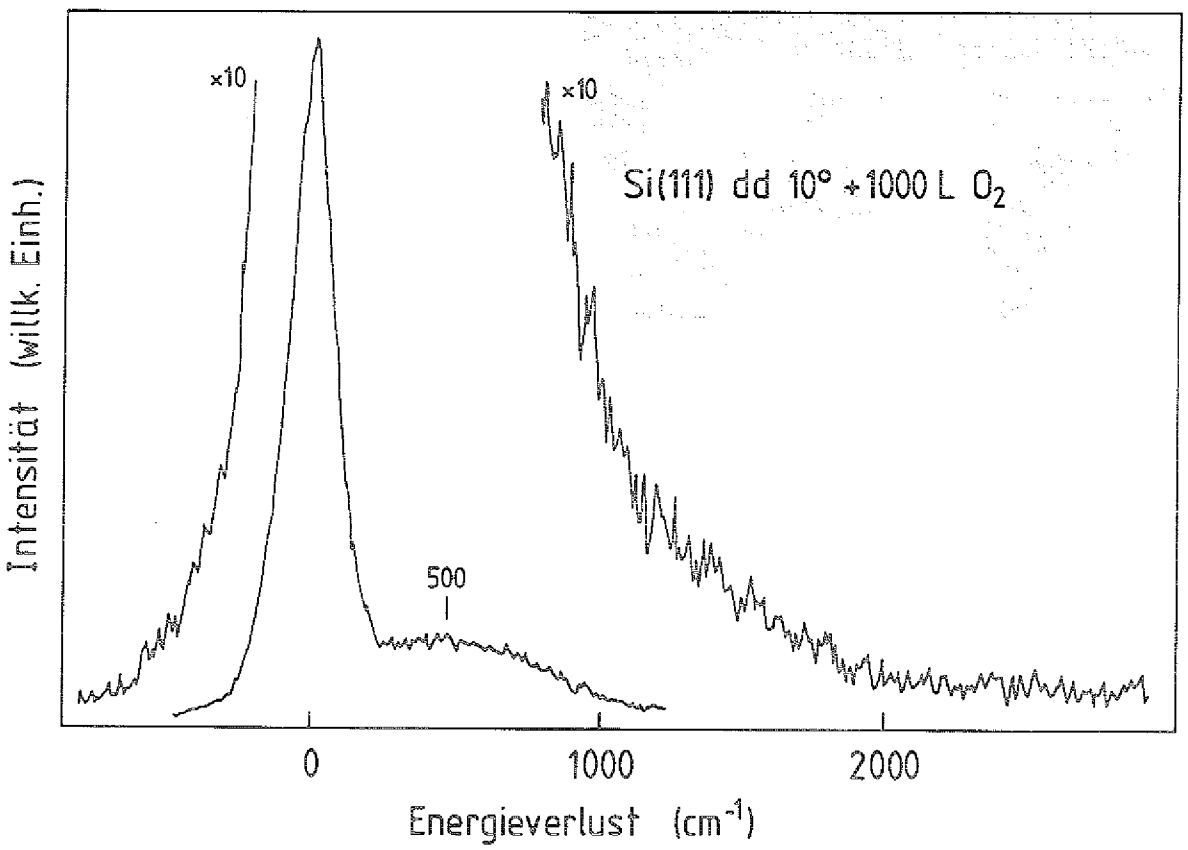


Bild 17
Spektrum der Silizium (111) 7x7 10° dd-Probe nach Begasung mit 1000 L molekularem Sauerstoff

Verlust mit einem Zentrum bei 500 cm^{-1} (Bild 17). Ein Auger-Spektrum ergibt ein Konzentrationsverhältnis Sauerstoff/Silizium von 1/9. Bei dem hohen inelastischen, konstanten Untergrund und dem intensiven Verlust in Bild 17 ist die Sauerstoffkonzentration an der Oberfläche zu klein, um sich deutlich abhebende Vibrationsverluste zu produzieren. Dasselbe gilt wahrscheinlich auch für das Wasserstoff-Spektrum (Bild 16).

Allan et al. haben für eine dimerisierte Silizium (100) 2x1-Oberfläche ein Oberflächenphononspektrum ausgerechnet und erhalten u.a. als Ergebnis, daß

für eine beliebige, asymmetrische Dimerstruktur ein hochfrequenter "Sub-Oberflächenmodus" oberhalb der höchsten Volumenphononfrequenz ($\approx$ 520 cm^{-1}) existiert, dessen Schwingungsamplituden hauptsächlich in der zweiten und dritten Lage lokalisiert sind /25/. Im Γ-Punkt berechnen sie eine Frequenz von 525 cm^{-1}. Falls bei den stark gestuften Flächen mit dd-Stufen die Mehrfachstufen dimerisiert rekonstruieren, wäre dies eine Erklärung für den auf diesen Oberflächen gefundenen Verlust von $\approx$ 530 cm^{-1}. Mehrfachstufen des dd-Typs gleichen (100)-Flächen, und es ist anschaulich evident, wenn sie auch so rekonstruieren. Adsorbate sollten den Sub-Oberflächenmodus nur wenig beeinflussen, es sei denn, sie zerstören die Dimerstruktur.

Ein experimenteller Nachweis dieses Phonons auf der Silizium (100)-Oberfläche steht allerdings noch aus.

Der 800 cm^{-1}-Verlust auf der 10°-sd-Probe könnte eine ähnliche Interpretation in Zusammenhang mit der Silizium (110)-Oberfläche erfahren. Die Mehrfachstufen des sd-Typs gleichen nämlich (110)-Flächen. Leider gibt es jedoch keine theoretische Unterstützung für die Annahme eines 800 cm^{-1}-Phonons auf der Silizium (110)-Fläche. Auch die experimentelle Überprüfung steht noch aus.

Der kontinuierliche, konstante inelastische Untergrund in den Spektren der stark gestuften Flächen läßt sich durch Adsorbate nicht zerstören und ist deshalb wahrscheinlich auf ein Kontinuum von Interbandübergängen zwischen den durch die Stufen erzeugten elektronischen Zuständen (oder einem solchen Zustand und einem Volumenband) zurückzuführen. Rowe et al. /26/ haben die Existenz der Stufenzustände auf der Silizium (111) 2x1-Spaltfläche durch Photoemission experimentell nachgewiesen, während Schlüter et al. /27/ den theoretischen Nachweis erbrachten.

Das Hauptergebnis dieses Teils der Arbeit ist, daß stark gestufte Silizium (111) 7x7-Flächen einen deutlich kleineren inelastischen Untergrund als die gut orientierte (111) 7x7-Fläche aufweisen. Die nichtmonotone Abhängigkeit des inelastischen Untergrunds von Fehlorientierungswinkel läßt sich nicht qualitativ interpretieren. Nach Bereitstellen der theoretischen Grundlagen (Kapitel 6) wird auch dieser Effekt erklärbar.

5.2. Silberfilme

Bild 18 zeigt das Spektrum eines 7,7 Å dicken Silberfilms, der mit einer Geschwindigkeit von ≈ 0,1 Å/s auf eine reine, gut orientierte Silizium (111) 7x7-Oberfläche bei Raumtemperatur aufgedampft wurde. Das Spektrum wurde bei Raumtemperatur mit einer Primärenergie von 17,6 eV und einem Einfallswinkel von 57,2° aufgezeichnet. Deutlich sichtbar ist wiederum eine Verbreiterung der quasielastischen Linie von 70 cm^{-1} im direkten Strahl auf 245 cm^{-1} und der hohe inelastische Untergrund. Im Beugungsexperiment (Bild 19) sind verbreiterte Silber (111)-Reflexe zu sehen.

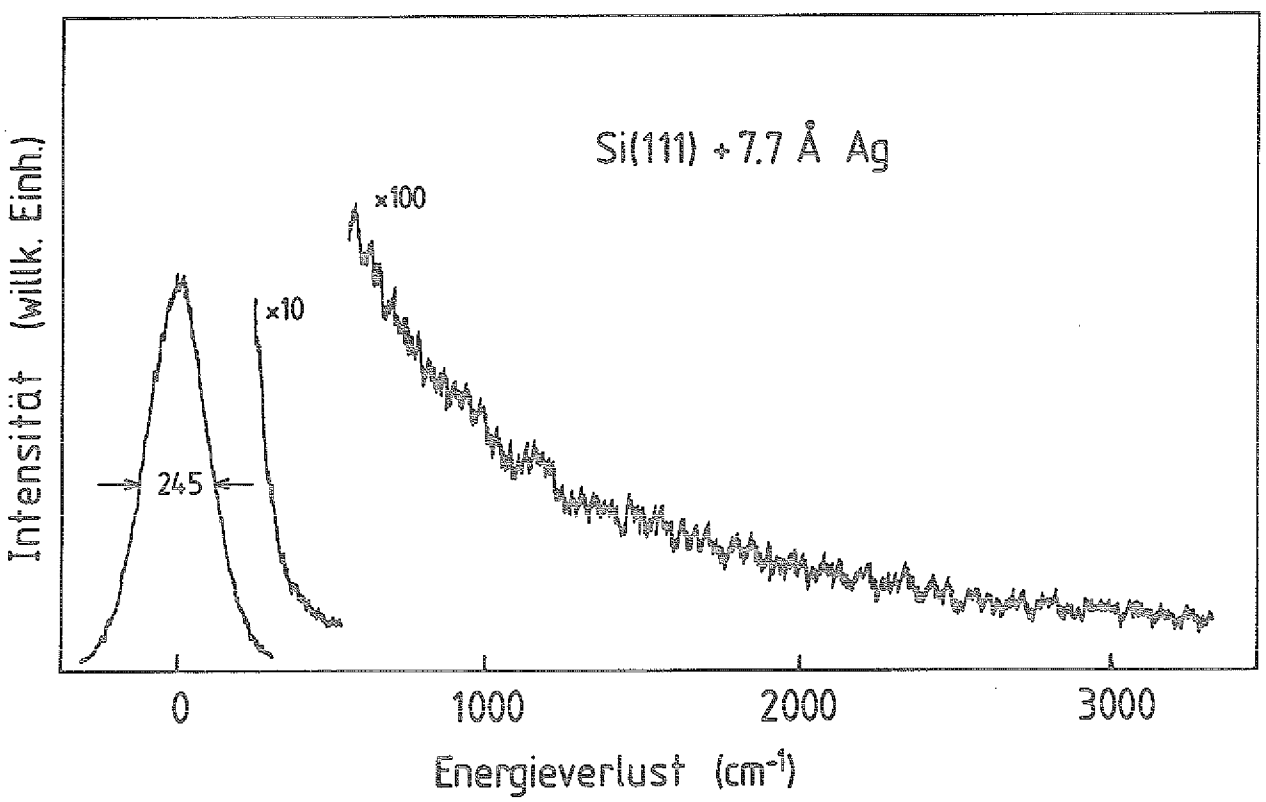


Bild 18
Spektrum eines 7.7 Å dicken Silberfilms, präpariert durch Aufdampfen auf eine reine, gut orientierte Silizium (111) 7x7-Oberfläche bei Raumtemperatur (Primärenergie 17.65 eV, Einfallswinkel 57.2°)

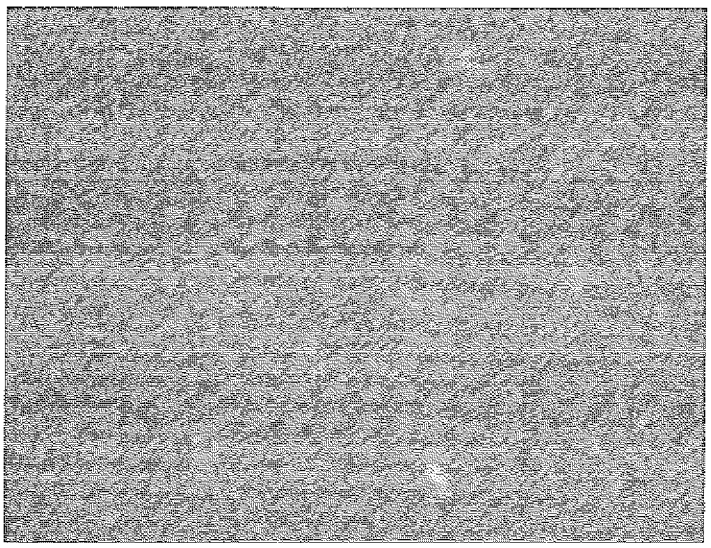


Bild 19
Beugungsbild des 7.7 Å-Silberfilms (Primärenergie 76.2 eV)

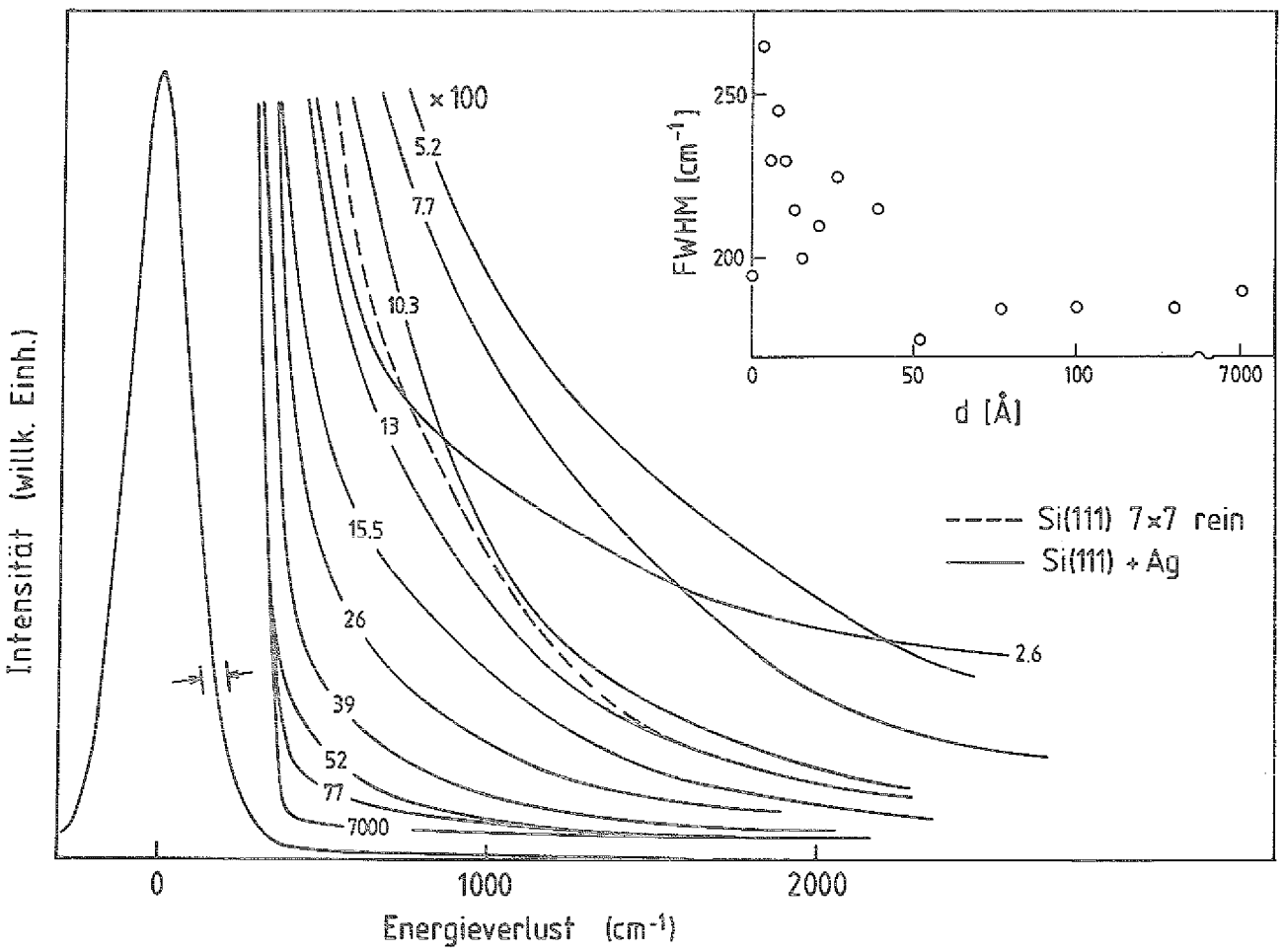


Bild 20
Spektren verschieden dicker Silberfilme. Die Halbwertsbreiten der quasielastischen Linien sind in der kleinen Zeichnung angegeben.

Das Spektrum ist Teil einer Meßreihe, bei der, beginnend mit der reinen Siliziumoberfläche, additiv die Silberfilmdicke erhöht und jeweils ein Spektrum aufgezeichnet wurde. In Bild 20 sind die inelastischen Intensitäten für alle Schichtdicken, normiert auf die elastische Intensität, aufgetragen. Alle Spektren wurden im "Winkelintegralmodus" aufgenommen, d.h. mit einer zwischen Probe und Streukammer angelegten Sägezahnspannung wurde der Ausfallswinkel moduliert und das zeitlich integrierte Spektrum gemessen /28/. Die so gewonnenen Spektren sind besser reproduzierbar und auch leichter auswertbar (siehe Kapitel 6). Zugunsten der besseren Übersicht sind in Bild 20 die quasielastischen Linien wieder pauschal durch einen mittleren Verlauf ersetzt worden. Die Intensität am höherenergetischen "Fuß" ist durch die Pfeile angedeutet, und die Halbwertsbreiten der quasielastischen Linien sind in der kleineren Zeichnung oben zu finden. Die Halbwertsbreiten streuen stark um einen insgesamt zu höheren Schichtdicken hin abfallenden Wert. Der inelastische Untergrund fällt ebenfalls über der Schichtdicke ab. Bei sehr hohen Schichtdicken geht der bis dahin über der Verlustenergie kontinuierlich abfallende Untergrund in einen konstanten Wert über. Dieser Untergrund ist wahrscheinlich auf Silber-Interbandübergänge zurückzuführen. Das 2,6 Å-Spektrum weist einen völlig anderen Verlauf auf. Da 2,6 Å etwa einer Monolage kristallinen Silbers entsprechen, ist bei dieser Dicke unter Umständen die Bedeckung noch nicht vollständig, und man kann noch nicht metallisches Verhalten voraussetzen.

Prinzipiell ähneln die Spektren bei niedriger Schichtdicke im Verlauf sehr dem Spektrum der reinen Silizium (111) 7x7-Fläche. Um eine gemeinsame Ursache für die Form der Spektren bei beiden Systemen begründen zu können, sollen im folgenden die theoretischen Grundlagen für eine quantitative Auswertung der Spektren vorgestellt werden.

6. Theoretische Grundlagen

6.1. Dielektrische Theorie

Wenn ein Elektron sich einer Festkörperoberfläche nähert, läßt sich seine Wechselwirkung mit der Oberfläche im wesentlichen durch langreichweitige Coulombkräfte zwischen dem Elektron einerseits und den Ladungsdichtefluktuationen im Inneren des Kristalls andererseits verstehen. Das Coulombfeld des Elektrons erzeugt im Kristall eine orts- und zeitabhängige Polarisation, welche ihrerseits ein die Bewegung des Elektrons hemmendes Feld erzeugt. Das Elektron erfährt einen Energieverlust. Umgekehrt kann bei vorhergehender Anregung des Kristalls das Elektron auch beschleunigt werden. Für eine Verlustenergie, die wesentlich kleiner als die Primärenergie ist, beginnt die Wechselwirkung in einem großen Abstand von der Oberfläche. Beschränkt man sich also auf die Interpretation kleiner Verlustenergien, so erscheint eine makroskopische Beschreibung des Kristallfeldes angemessen. Beschreibt man die elektronischen Eigenschaften des Kristalls durch eine komplexe, frequenzabhängige Dielektrizitätskonstante ε,

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\ \sigma(\omega)/\varepsilon_0\omega\ ,$$

die neben der "normalen" Dielektrizitätskonstante ε' noch Information über die Leitfähigkeit σ enthält, so wird das Feld des Elektrons im Kristallinneren um einen Faktor $1/\varepsilon$ abgeschirmt. Daher ist der Energieverlust pro Volumeneinheit für das Elektron

$$\int_{+\infty}^{-\infty} E(t)\ \mathring{D}(t)\ dt = 2\pi\ i \int_{-\infty}^{+\infty} E(\omega)\ \omega\ D^*(\omega)\ d\omega$$

$$\sim \int_0^\infty D(\omega)^2\ \frac{\omega \mathrm{Im}\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0^2\ \varepsilon(\omega)^2}\ d\omega = \int_0^\infty \frac{D(\omega)^2}{\varepsilon_0^2}\ \omega\ \mathrm{Im}\ \frac{-1}{\varepsilon(\omega)}$$

Die "Volumenverlustfunktion" $\omega \cdot \mathrm{Im}\ \frac{-1}{\varepsilon(\omega)}$ beschreibt die Verteilung der Energieverluste, die ein Elektron durch Ladungsfluktuationen im Festkörper er-

fährt. Für Grenzflächen wird der Abschirmfaktor: $1/1+\varepsilon(\omega)$ und daher die "Oberflächenverlustfunktion"

$$f_V \sim \omega \, \mathrm{Im} \frac{-1}{\varepsilon(\omega)+1}$$

Dies bedeutet, daß man im Fall $\varepsilon(\omega) = -1$ ein Maximum im Energieverlustspektrum erwarten kann.

Falls die Ladungsfluktuationen nur mikroskopisch beschrieben werden können, sich also die E- bzw. D-Felder von einer Elementarzelle zur nächsten ändern, wird die Dielektrizitätskonstante ε auch vom Ort (im reziproken Raum) abhängen:

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega, \underline{k})$$

6.2. Streuquerschnitt für elektronische Einfachstreuung

Die im vorhergehenden Abschnitt erläuterte Verlustfunktion enthält alle Materialeigenschaften. Bei einem Elektronenstreuungsexperiment kommt der Ankopplung der Verlustfunktion an die Streukinematik eine besondere Bedeutung zu, um Materialdaten aus Spektren zu extrahieren. Zur Lösung dieses Problems gehen Ibach und Mills /16/ von einer Schrödingergleichung für das Elektron aus:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_0(\underline{r}) - e\phi(\underline{r},t)\right]\psi(\underline{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t)$$

V_0 ist dabei das Potential im Kristallinneren, das außerhalb des Kristalls verschwindet. Es enthält u.a. die Gitterperiodizität und ermöglicht so z.B. die Beschreibung der Bragg-Reflexe. ϕ beschreibt dagegen das außerhalb des Kristalls wirksame Potential, welches durch Ladungsdichtefluktuationen innerhalb des Kristalls erzeugt wird. Für Streuung in der Nähe des Spiegelreflexes bei der Temperatur 0 K führt die Lösung obiger Gleichung mit Störungsrechnung erster Ordnung zu einem Ausdruck für die differentielle Streuwahrscheinlichkeit, d.h. die Wahrscheinlichkeit für ein Elektron, unter Än-

derung des Impulses von $\hbar\underline{k}$ auf $\hbar\underline{k}'$ in das Verlustenergieintervall zwischen $\hbar\omega$ und $\hbar\omega + d\hbar\omega$ und das Raumwinkelintervall zwischen $\Omega(\underline{k}')$ und $\Omega(\underline{k}')+d\Omega(\underline{k}')$ gestreut zu werden:

$$\frac{d^2S}{d\Omega(\underline{k}')d\hbar\omega} = \frac{2m}{\pi^2\hbar^2 a_0}\,\frac{1}{\cos\Theta}\,\frac{k'}{k}\,\frac{q_\parallel}{(q_\parallel^2+q_\perp^2)^2}\,\mathrm{Im}\,\frac{-1}{1+\varepsilon(q_\parallel,\omega)} \qquad (1)$$

Θ ist der Einfallswinkel (siehe Bild 21), $q_\parallel$ bzw. $q_\perp$ der parallele bzw. senkrechte Impulsübertrag und a_0 der Bohrsche Radius. $\varepsilon(q_\parallel,\omega)$ enthält alle Materialdaten des halbunendlichen Kristalls, während die Kinematik des

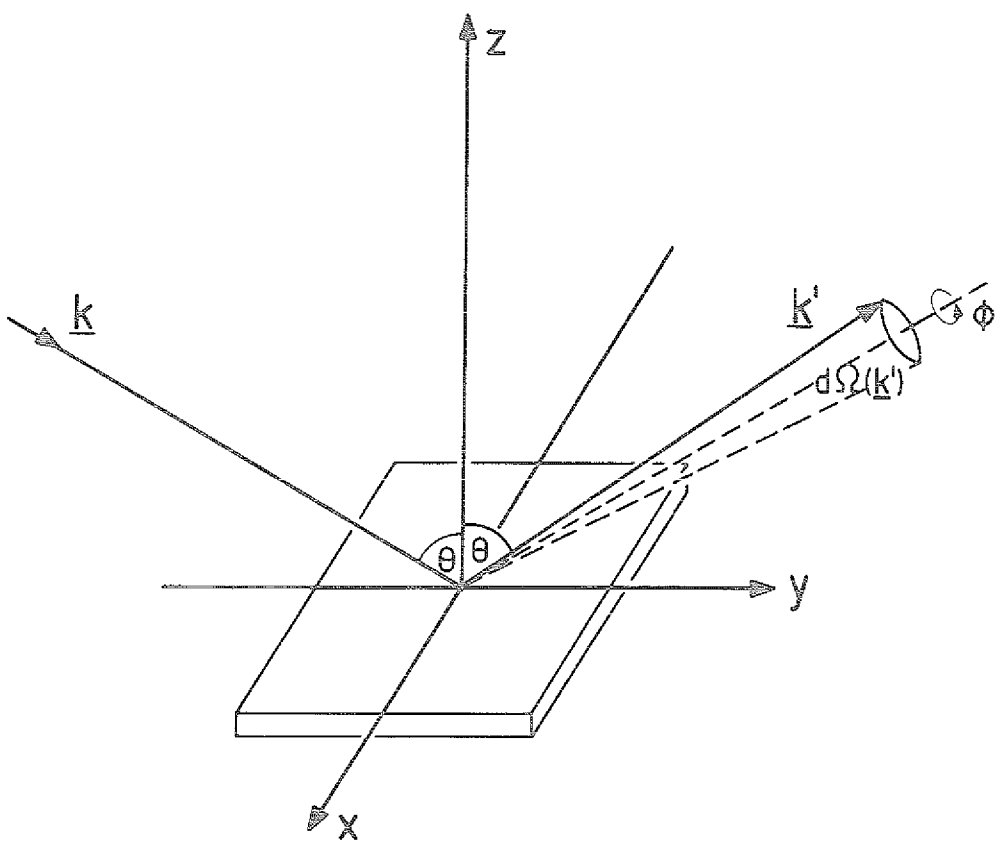


Bild 21
Geometrie der Elektronenstreuung

Streuprozesses offensichtlich im Vorfaktor zur Verlustfunktion enthalten ist. Die Gleichung (1) läßt sich durch Multiplizieren der rechten Seite mit dem Bose-Einstein Faktor $(n(\omega)+1)$,

$$n(\omega) = (\exp(\hbar\omega/kT)-1)^{-1} ,$$

auf endliche Temperaturen erweitern. Mit dem Spektrometer sammelt man nun alle Elektronen, die in einen begrenzten "Akzeptanzwinkel" Ω_A gestreut werden. Daher wird der Streuquerschnitt für einfache Streuung an einer Oberfläche

$$P_s(\omega) = \frac{2m}{\pi^2\hbar^2 a_0} \frac{1}{\cos\Theta} \int_{\Omega_A} d\Omega(\underline{k}') \frac{k'}{k} \frac{q_\parallel}{(q_\parallel^2 + q_\perp^2)^2} \operatorname{Im} \frac{-1}{\varepsilon(q_\parallel,\omega)+1} \qquad (2)$$

Für kleine Verlustenergien (<< Primärenergie E_0) kann man (2) wesentlich vereinfachen. Energie und Impulserhaltung ergeben dann

$$k' \approx k - \omega/v$$

und

$$k' \approx k - \underline{q}\,\underline{k}/k$$

Zusammen mit einer Substitution des Raumwinkelelements durch die Integrationsvariablen ϕ (Azimuth, s. Bild 21) und $q_\parallel$ erhält man /17/:

$$P_s(\omega) \approx \frac{2}{\pi^2 a_0\, k \cos^2\Theta} \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{q_{\parallel A}} dq_\parallel \frac{1}{q_\parallel} f\left(\frac{vq_\parallel}{\omega},\Theta\right) \operatorname{Im} \frac{-1}{\varepsilon(q_\parallel,\omega)+1}$$

mit

$$f(x,\Theta) = \frac{1}{x} \int_0^{2\pi} d\phi \left(1+\left(\frac{1}{x\cdot\cos\Theta} - \tan\Theta \cos\phi\right)^2\right)^{-2} \qquad (3)$$

Im "Winkelintegralmodus" gilt $q_{\parallel A} \to \infty$.

Das Azimuthintegral $f(x,\Theta)$ ist für verschiedene Einfallswinkel Θ in Bild 22 aufgetragen. Es beinhaltet die "Wellenreiterbedingung", d.h. die voraus-

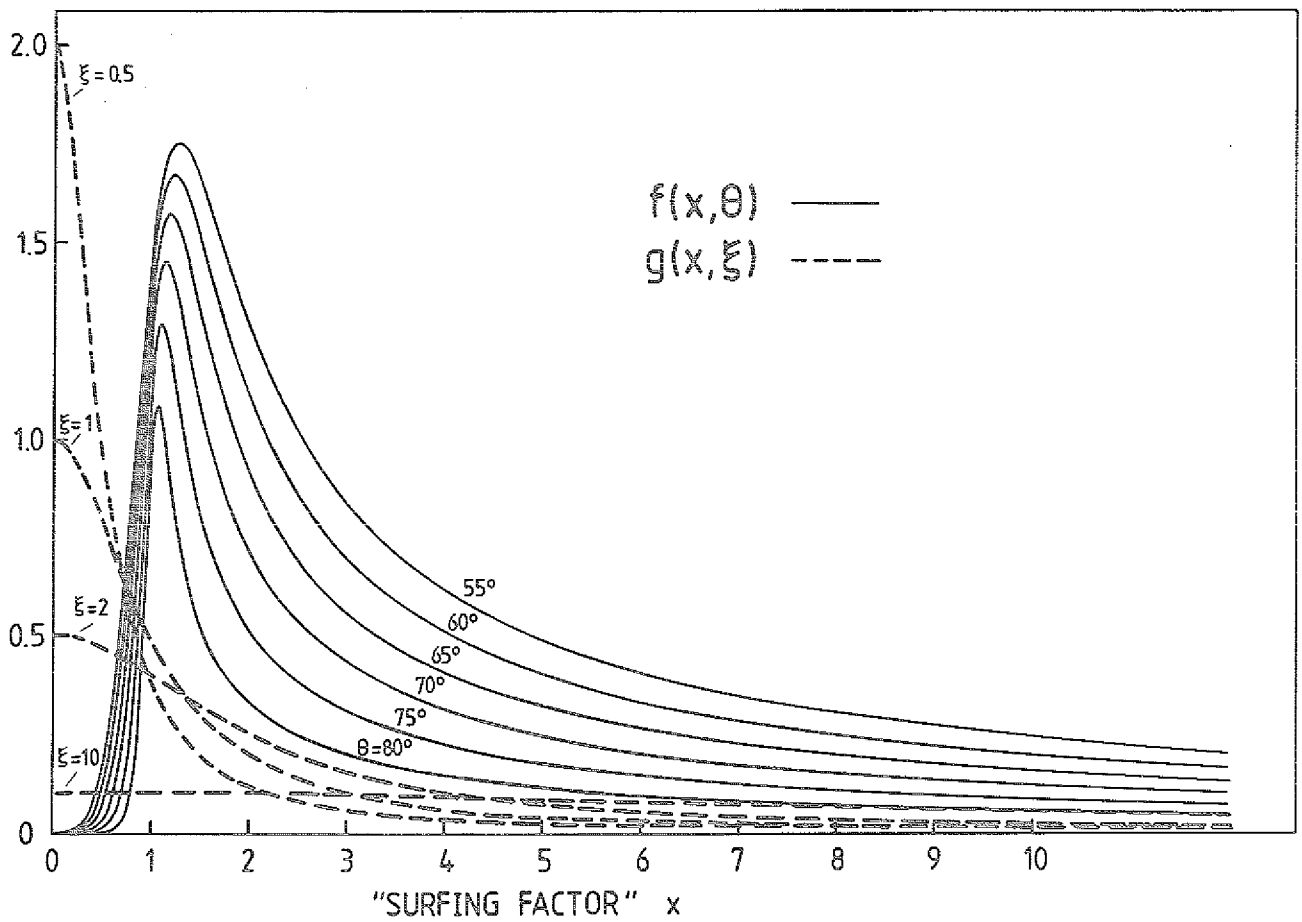


Bild 22

sichtlich größten Beiträge zum Streuquerschnitt kommen aus dem Bereich, wo das anregende Coulombfeld des Elektrons mit der Ladungsfluktuation im Kristall in Phase ist. Es sei aber darauf hingewiesen, daß wegen der Integration über den Azimuth das Maximum nicht genau "in Phase", also nicht für x = 1 erreicht wird.

6.3. Leitfähigkeit und Plasmonen

Elektronen im parabolischen Bereich eines teilgefüllten Bandes lassen sich für kleine Störungen im Rahmen der effektiven Massen-Näherung wie freie Elektronen behandeln. Flächen konstanter Energie für diese Elektronen sind im Volumen Kugeloberflächen, deren Besetzung durch eine Fermiverteilung bestimmt wird. Diese Verteilung wird durch ein elektrisches Feld gestört und relaxiert nach Abschalten des Feldes in der Zeit τ. Diese Zeit entspricht der Zeit zwischen zwei Energieabgaben, z.B. durch Stöße. Durch Integration über alle Beiträge auf der Kugeloberfläche kann man ein Ohmsches Gesetz für das metallische Band aufstellen /29/. Ergebnis dieser Bemühungen ist ein Ausdruck für die Leitfähigkeit im Volumen

$$\sigma = \frac{e^2 \tau(E_F)}{m^*} n \quad , \tag{4}$$

der völlig analog auch für eine Oberfläche mit der Oberflächenleitfähigkeit σ_s ,

$$\sigma_s = \frac{e^2 \tau(E_F)}{m^*} n_s \quad , \tag{4a}$$

hergeleitet werden kann. n bwz. n_s sind die entsprechenden Volumen- bzw. Flächendichten der Elektronen im Leitungsband.

Andererseits kann man für ein solches "Gas" quasifreier Elektronen, die untereinander wechselwirkungsfrei angenommen seien, bei Störung durch ein elektrisches Feld eine einfache Bewegungsgleichung aufstellen. Die stoßweise Energieabgabe wird darin in einem Reibungsterm berücksichtigt:

$$n\, m^* \ddot{x} + \frac{n^2 e^2}{\sigma} \dot{x} = -n\, e\, E_x$$

Nach Spektralzerlegung ergibt sich eine Beziehung zwischen dem anregenden Feld und der Polarisation. Daraus läßt sich die dielektrische Funktion des Systems bestimmen zu /29/

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\,\frac{\omega_p^2 \varepsilon_0}{\sigma(\omega)}\,\omega}\,, \qquad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{m^* \varepsilon_0}$$

Setzt man in $\varepsilon(\omega)$ die Beziehung (4) ein, erhält man

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\,\omega/\tau(\omega)} \qquad (5)$$

Bei verschwindender Dämpfung ist $\omega = \omega_p$ die Frequenz einer kollektiven longitudinalen Eigenschwingung des Elektronengases ("Plasmon").

6.4. Dünne Schichten

Im Prinzip könnte man den Streuquerschnitt für die Streuung von langsamen Elektronen an leitfähigen Oberflächen jetzt durch Einsetzen von (5) in (3) berechnen. Allerdings ist die Beschreibung der experimentell untersuchten Systeme als homogene, halbunendliche Systeme nicht adäquat. Eine Schichtstruktur, bei der eine dünne Schicht der Dicke d mit der dielektrischen Funktion $\varepsilon_s(\omega)$ auf einem halbunendlichen "Substrat" mit der dielektrischen Funktion $\varepsilon_b(\omega)$ sitzt, erscheint hier angemessener. Ibach und Mills /16/ haben für diesen Fall berechnet, daß man in der Verlustfunktion des halbunendlichen Kristalls zur Berücksichtigung der Zusatzlage lediglich das $\varepsilon(\omega)$ durch ein "effektives" $\tilde{\varepsilon}(q_\parallel,\omega)$ ersetzen muß:

$$\varepsilon(\omega) \rightarrow \tilde{\varepsilon}(q_\parallel,\omega) = \varepsilon_s(\omega)\,\frac{1+\Delta(\omega)\,\exp\,(-2q_\parallel d)}{1-\Delta(\omega)\,\exp\,(-2q_\parallel d)} \qquad (6)$$

mit

$$\Delta(\omega) = (\varepsilon_b(\omega)-\varepsilon_s(\omega))/(\varepsilon_b(\omega) + \varepsilon_s(\omega))$$

Für das ε_b kann man hier die dielektrische Funktion des Siliziums einsetzen, die bei niedrigen Energien gut durch den konstanten Wert $\varepsilon_b = 11{,}66$ genähert werden kann /30/. Wenn man die leitfähige Schicht durch (5) beschreiben will, muß man die 1 in (5) durch das tatsächliche ε im Unendlichen, ε_∞, ersetzen.

Die Eigenfrequenzen in der dünnen Schicht erhält man für den Fall $\tilde{\varepsilon} = -1$ (Abschnitt 6.2.) Bild 23 zeigt die Kopplungsdispersion für das System "reine Siliziumoberfläche" ($\varepsilon_\infty = 11{,}66$) bei verschwindender Dämpfung. Die untere

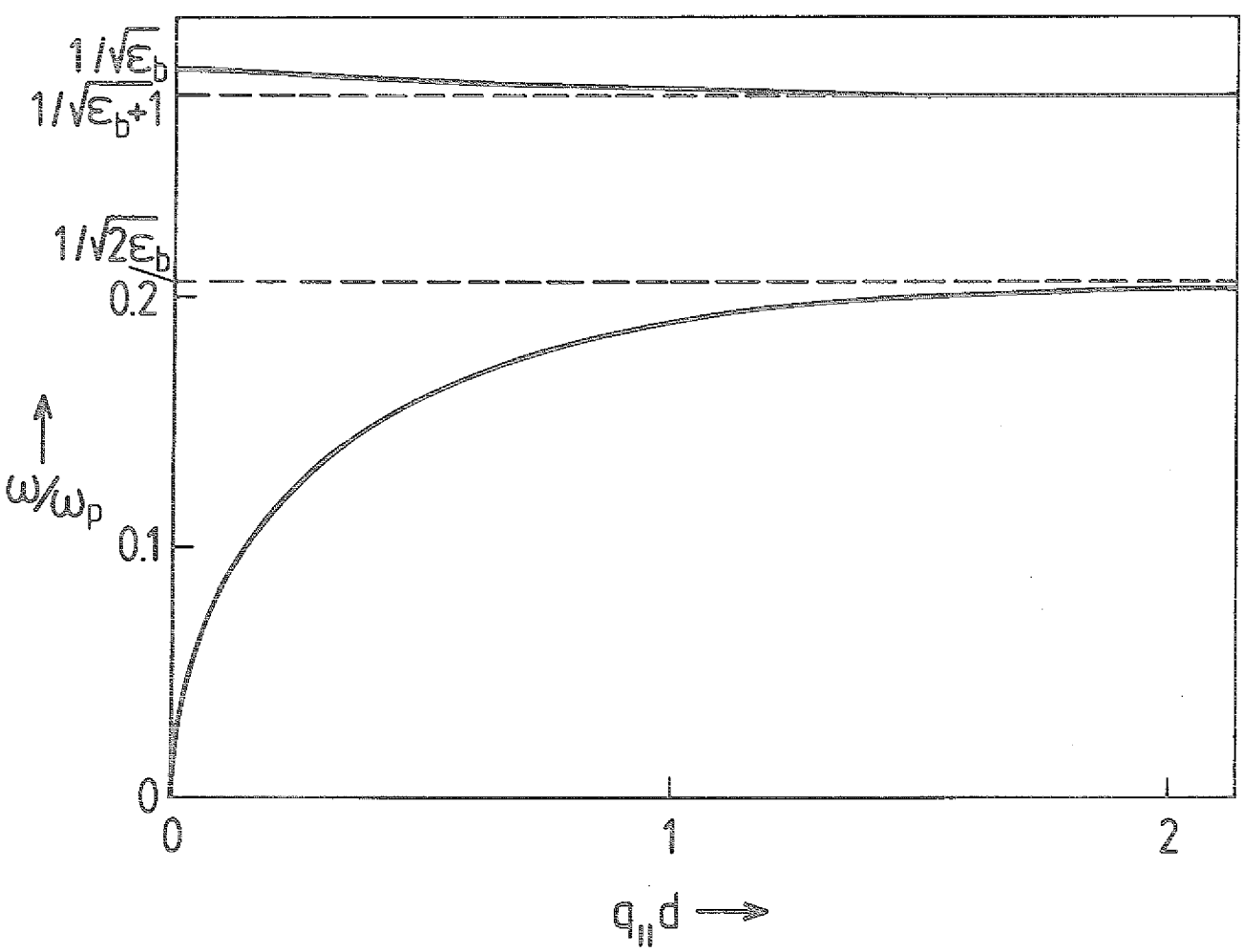


Bild 23
Kopplungsdispersion des Plasmons in einer dünnen Schicht der Dicke d; die angegebenen Grenzwerte sind Näherungen für $\varepsilon_b \gg 1$

Kurve gehört zu einer longitudinalen Schwingung parallel zur Oberfläche. Wegen der verschwindenden Rückstellkräfte geht die Eigenfrequenz für beliebig kleine Impulse gegen 0. Die obere Kurve beschreibt eine senkrecht zur Oberfläche polarisierte Schwingung mit einer endlichen Frequenz. Für eine endliche Dämpfung werden beide Kurven breiter, und die parallele Schwingung kann unter Umständen die quasielastische Linie verbreitern. Dieser Beitrag zum Streuquerschnitt soll im folgenden berechnet werden. Dazu sei zunächst eine Vorbemerkung zum sinnvollen $q_\parallel d$-Bereich vorangestellt. Die Verlustfunktion $\mathrm{Im} - 1/(\tilde{\varepsilon}+1)$ wird im $q_\parallel$-Integral (3) durch die "Wellenreiterfunktion" $f(vq_\parallel/\omega,\Theta)$ bewertet. Die größten Beiträge zum $q_\parallel$-Integral erwartet man aus dem Bereich $vq_\parallel/\omega \approx 1{,}4$ ($\Theta = 65^0$), während $f\,(vq_\parallel/\omega,\Theta)/q_\parallel$ für größere $q_\parallel$ sogar wie $1/q_\parallel^2$ abfällt. Falls die Verlustfunktion diesen Abfall nicht kompensiert, kann man für realistische Grenzwerte das größte relevante $q_\parallel$ bestimmen. Für $E_0 \geq 6$ eV, $\hbar\omega \leq 3000\ \mathrm{cm}^{-1}$ ergibt sich das $q_\parallel$, bei dem f maximal wird, zu

$$q_{\parallel max} \leq 0{,}05\ \text{Å}^{-1}$$

Mit diesen Voraussetzungen und genügend kleinen Schichtdicken kann man die Verlustfunktion in der Näherung $q_\parallel d \ll 1$ berechnen. Mit einer zusätzlichen Einschränkung für den Verlustenergiebereich

$$\omega^2 \ll 1/\tau^2$$

wird die dielektrische Funktion innerhalb der dünnen Schicht, ε_s

$$\varepsilon_s(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau} \approx \varepsilon_\infty + \tau\omega_p^2(-\tau + i/\omega)$$

und die dielektrische Funktion für das System, $\tilde{\varepsilon}$

$$\tilde{\varepsilon}(q_\parallel,\omega) \approx \varepsilon_b + q_\parallel d\ \tau\omega_p^2\ (-\tau + i/\omega) \quad ,$$

also

$$\mathrm{Im}\,\frac{-1}{\tilde{\varepsilon}(q_\parallel,\omega)} \approx \frac{\dfrac{q_\parallel \omega}{\tau^3 \omega_p^2\, d}}{\left(\dfrac{1+\varepsilon_b}{d\tau^2\omega_p^2} - q_\parallel\right)^2 \omega^2 + q_\parallel^2/\tau^2}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_b+1}\;\frac{\xi x}{(\xi-\omega\tau x)^2 + x^2}$$

mit

$$\xi = \frac{(1+\varepsilon_b)v}{d\tau\omega_p^2}, \qquad x = vq_\parallel/\omega$$

Mit der Substitution $x = vq_\parallel/\omega$ wird der Streuquerschnitt

$$P_s(\omega) \approx \frac{1}{\hbar\omega}\,\frac{C}{\pi}\int_0^\infty dx\; f(x,\Theta)\;\frac{\xi}{(\xi-\omega\tau x)^2 + x^2}$$

$$C = \frac{2}{\pi\, a_0 k \cos^2\Theta\,(\varepsilon_b+1)} \tag{7}$$

ξ läßt sich als Funktion der zweidimensionalen Leitfähigkeit σ_s in der Schicht schreiben

$$\xi = (1+\varepsilon_b)\;\varepsilon_0\; v/\sigma_s \tag{7a}$$

Führt man in (7) eine weitere Einschränkung für die Verlustenergie ein

$$\omega \ll \xi/(x\tau)\ ,$$

was wiederum nur sinnvoll durch die Wellenreiterfunktion f ist, da diese die Beiträge zu großer x verschwinden läßt, so kann man (7) vereinfachen und erhält in Übereinstimmung mit Persson et al /17/

$$P_s \approx \frac{C\,H\,(\xi,\Theta)}{\pi}\;\frac{1}{\hbar\omega} \tag{8}$$

mit

$$H(\xi,\Theta) = \int_0^\infty dx\; f(x,\Theta)\; g(x,\xi)\;, \qquad g(x,\xi) = \frac{\xi}{\xi^2 + x^2}$$

Die Funktion $g(x,\xi)$ ist für verschiedene ξ im Bild 22 aufgetragen. Integration des Produktes $f \cdot g$ über x ergibt die Funktion $H(\xi,\Theta)$ in Bild 24. Ist die Leitfähigkeit bzw. die Dämpfung energieunabhängig, so ist der Vorfaktor CH/π verlustenergieunabhängig. Damit ist der Streuquerschnitt für nicht zu große Verlustenergien bestimmt. Für sehr kleine Verlustenergien reicht die Betrachtung der Einfachstreuung nicht mehr aus, was bereits an dem bei kleinen Verlustenergien divergierendem Streuquerschnitt erkennbar ist.

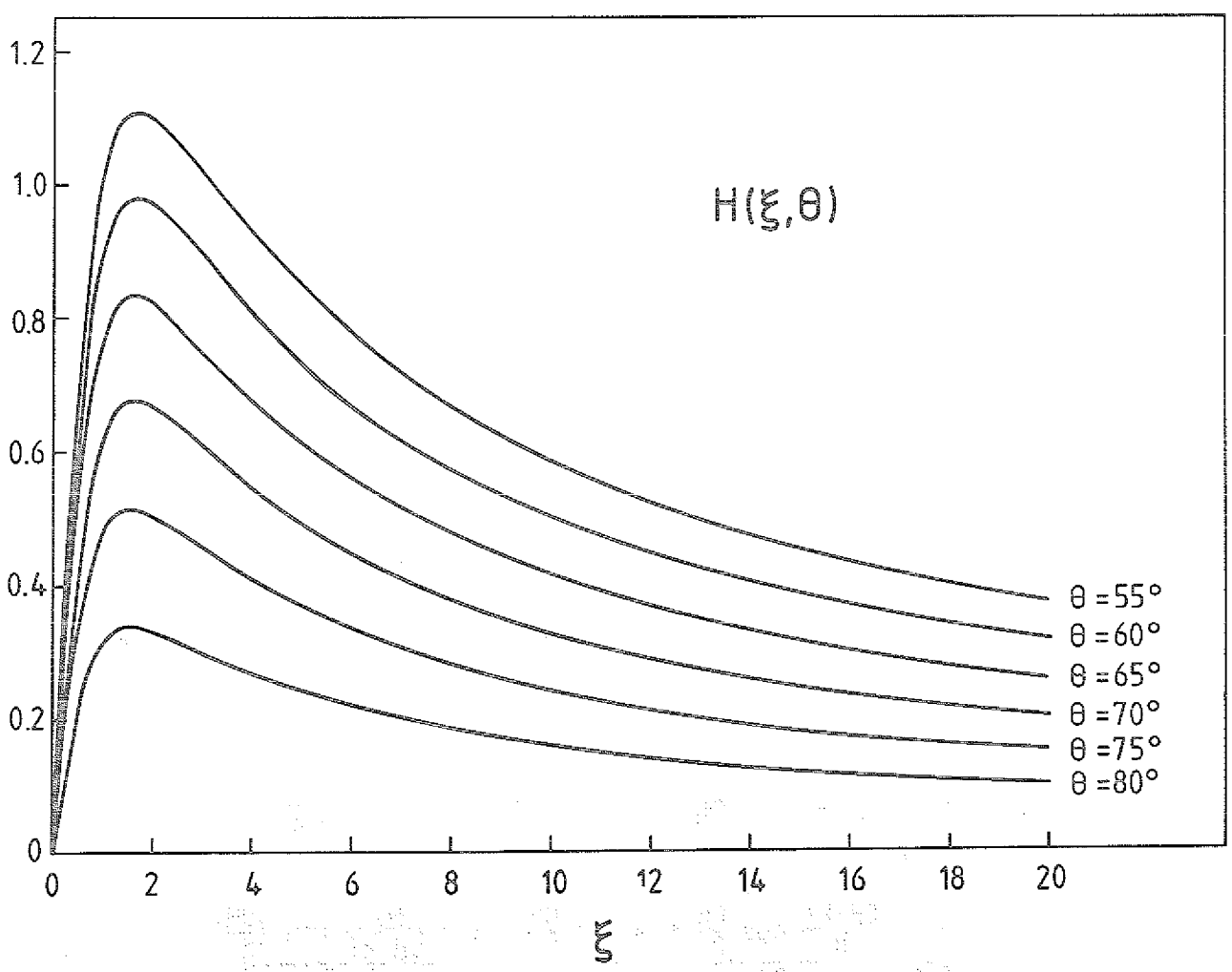


Bild 24

6.5. Mehrfachstreuung

Nach Lucas und Sunjic /31/ erhält man den Mehrfachstreuquerschnitt bei endlichen Temperaturen aus dem Einfachstreuquerschnitt (bei T = 0) durch eine zweifache Transformation

$$P(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dt \, \exp \left\{-\hbar \int_0^\infty d\omega' \, P_s(\omega') \coth \frac{\hbar\omega'}{2kT} (1-\cos\omega' t)\right\} \cdot$$

$$\cdot \cos \left\{(\hbar \int_0^\infty d\omega' \, P_s(\omega') \sin\omega' t) - \omega t\right\}$$

Setzt man den Einfachstreuquerschnitt (8) ein, so ergibt sich

$$P(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dt \, \exp \left\{-2 \frac{CH}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \, \frac{\sin^2(\omega' t)}{\omega' \tanh (\hbar\omega'/kT)}\right\} \cos \left(\frac{CH}{2} - \omega t\right)$$

Eine Reihenentwicklung für das Temperaturglied mit Abbruch nach dem ersten Glied

$$\tanh (\hbar\omega'/kT) \approx \hbar\omega'/kT$$

wirkt sich wegen der Exponentialfunktion im ersten Integral für kleine CH ($2CH/\pi \ll 1$) und $\hbar\omega \gg -2\,kT$ nicht nachteilig aus. Hiermit werden aber alle Integrale analytisch lösbar, und man erhält in Übereinstimmung mit Persson et al. /17/:

$$P(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dt \, \exp \left(-\frac{CH\,kT}{\hbar} t\right)\left(\cos \frac{CH}{2} \cos\omega t + \sin \frac{CH}{2} \sin\omega t\right)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \, \frac{\frac{CH\,kT}{\hbar} \cos \frac{CH}{2} + \omega \sin \frac{CH}{2}}{\left(\frac{CH\,kT}{\hbar}\right)^2 + \omega^2} \sim \frac{1 + \frac{\hbar\omega}{CH\,kT} \tan \left(\frac{CH}{2}\right)}{1 + \left(\frac{\hbar\omega}{CH\,kT}\right)^2} \qquad (9)$$

6.6. Berücksichtigung der Spektrometerauflösung

Die tatsächlich gemessene Intensität entsteht durch eine Faltung der Filtercharakteristik des Spektrometers mit der von der Probe gestreuten Intensität. Nimmt man eine gaußförmige Filtercharakteristik mit einer Auflösung $\omega_{1/2}$ an, so wird die Intensität

$$I(\omega) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \exp - \left(\frac{\omega - \omega'}{\omega_{1/2} \sqrt{\ln 16}}\right)^2 P(\omega) \qquad (10)$$

Die relative Intensität $I(\omega)/I(o)$ ist damit durch die Angabe eines Oberflächenwiderstandes, des Substrat-ε, der Systemtemperatur, der Spektrometerauflösung und der kinematischen Daten vollständig bestimmt. Da sich zur Bestimmung der Konstante CH aus den experimentellen Spektren die Entfaltung, also die Rücktransformation zu (10), wegen des unvermeidlichen Zählrauschens als undurchführbar erwies, wurde wegen der kleinen Anzahl der anzupassenden Parameter (CH und "Auflösung") ein "Spektrenkatalog" durch numerische Ausführung des Faltungsintegrals erstellt. Damit wurden dann die Parameter für die beste Übereinstimmung zwischen der Theorie und dem jeweiligen Experiment ermittelt. Ein Satz "theoretischer" Spektren für eine Auflösung von 150 cm^{-1}, Raumtemperatur und verschiedene CH ist in Bild 25 zu sehen.

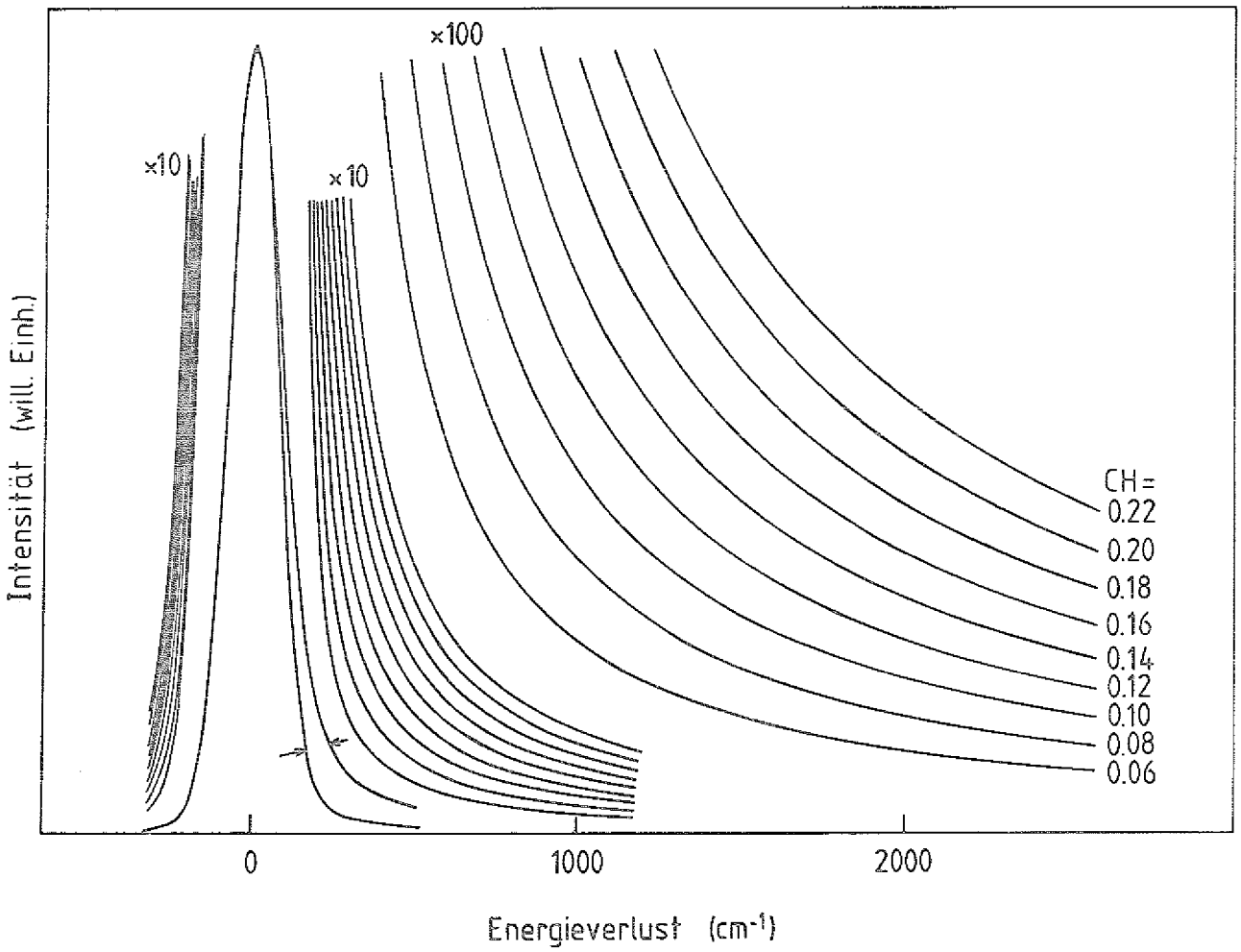


Bild 25

Theoretische Spektren, berechnet für eine Primärauflösung von 150 cm^{-1}

7. Auswertung der Spektren

7.1. Siliziumoberflächen

Bild 26 zeigt das Spektrum der gut orientierten Silizium (111) 7x7-Probe zusammen mit zwei theoretischen Spektren. Da die Spektrometerauflösung im direkten Strahl ca. 70 cm^{-1} beträgt, sollte man die beste Übereinstimmung für den Faltungsparameter $\hbar\omega_{1/2}$ = 70 cm^{-1} erwarten können. Dann ergibt sich die gestrichelt gezeichnete Kurve mit CH = 0.18. Sie reproduziert den inelastischen Untergrund (abgesehen von größeren $\hbar\omega$), nicht aber die Breite der quasielastischen Linie. Die zweite Anpassung mit einer angenommenen Auflösung von 150 cm^{-1} ist die bestmögliche Anpassung bei Variation beider Para-

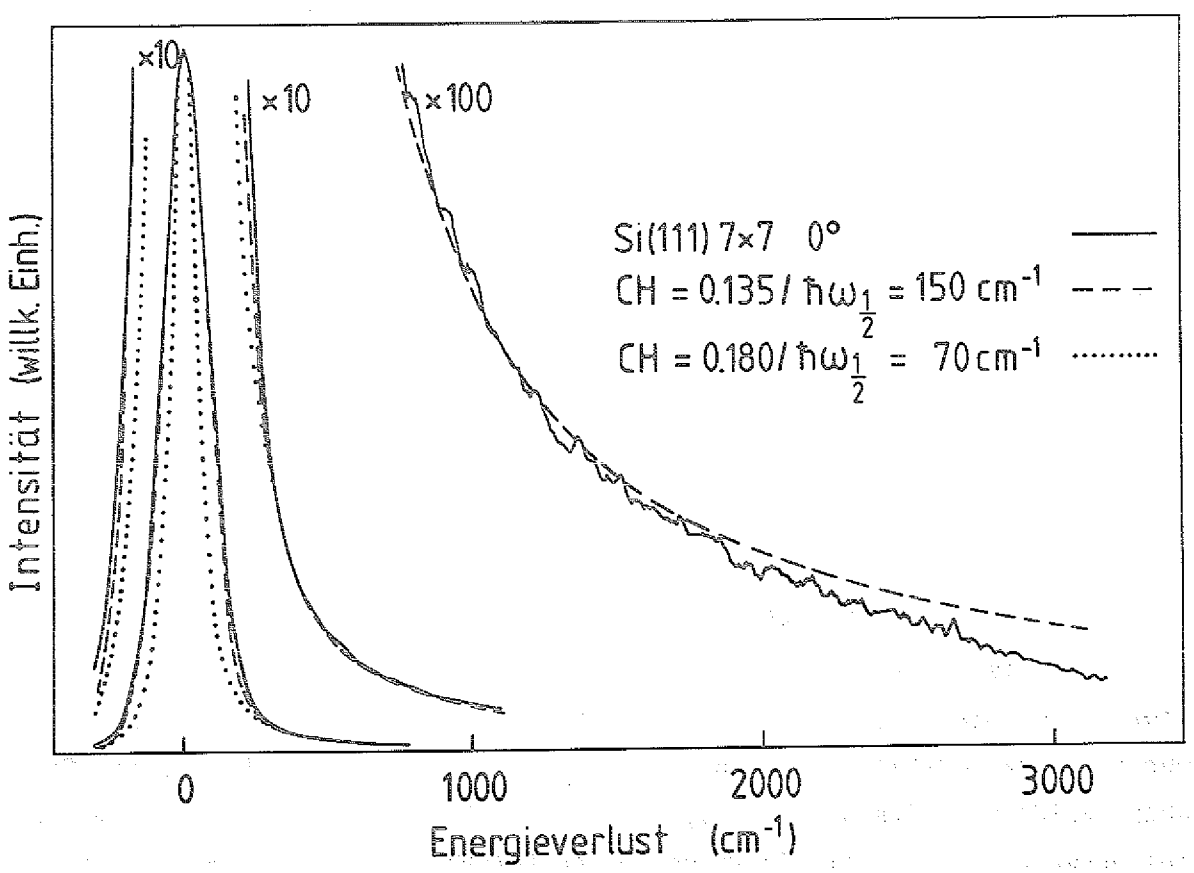


Bild 26
Zwei Anpassungsversuche für die Silizium (111) 7x7 0°-Probe

meter, $\hbar\omega_{1/2}$ und CH. Dann hat CH den Wert 0.135. In diesem Zusammenhang sei daran erinnert, daß die Auflösung nach Begasung mit einer Monolage Wasserstoff gleichfalls 150 cm^{-1} beträgt. Der inelastische Untergrund ist dann auch verschwunden. Offenbar tragen also die quasifreien Ladungsträger an der Oberfläche zur Verbreiterung der quasielastischen Linie bei und sind allein für den inelastischen Untergrund verantwortlich. Eine Monolage Wasserstoff fixiert die vorher quasi-freien Elektronen in die chemische Bindung, zerstört die Oberflächenleitfähigkeit ($\sigma_s \to 0$, $\xi \to \infty$, $CH \to 0$) und damit auch den verbreiternden Beitrag zum Spektrum.

Ein weiterer Beitrag in Form eines Energieverlustes, der die "direkte" Auflösung von 70 cm^{-1} auf 150 cm^{-1} verbreitert, kann ausgeschlossen werden. Es läßt sich nämlich zeigen, daß der Einfachstreuquerschnitt einer solchen Anregung wesentlich schneller als $1/\hbar\omega$ über der Verlustenergie abfallen müßte, um den beobachteten Effekt zu erklären. Für eine gedämpfte, kollektive Anregung (z.B. Phonon) fällt der Streuquerschnitt für $\hbar\omega \approx 0$ nie schneller als $1/\hbar\omega$.

Somit bleibt als Erklärung für diese Primärverbreiterung nur der für die Spektrometeroptik zu große Akzeptanzwinkel, in den die Elektronen von der Probe reflektiert werden. Der große Beitrag nichttangential in den Analysator eintretender Elektronen bewirkt die Auflösungsverschlechterung /18/. Ein starkes Indiz für diese Behauptung ist die Tatsache, daß ein bei einer Primärenergie von 12,3 eV aufgenommenes Spektrum derselben Probe diese Primärverbreiterung nicht aufweist, sondern sich vollständig durch das Plasmon erklären läßt (siehe Bild 33).

Aus dem Wert von CH läßt sich, da C sich sofort aus dem Einfallswinkel, der Primärenergie und $\varepsilon_b(Si)$ ergibt (7), H errechnen. Damit ließe sich aus einer Tabelle für $H(\xi,\Theta)$ (Anhang) ξ bestimmen, welches nach (7a) den spezifischen Oberflächenwiderstand σ_s ergibt. Leider ist die Funktion $\xi(H,\Theta)$ (Bild 24) aber zweideutig! Die nun benötigten zusätzlichen Informationen kann man aus den Auswertungen für die Spektren der gestuften Proben erhalten, die in den Bildern 27 und 28 zu sehen sind. Die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ist bis auf hohe Verlustenergien, $\hbar\omega > 2000$ cm^{-1}, und die stark gestuften Proben gut. In allen Fällen wurde der Faltungsparameter 150 cm^{-1} beibehalten.

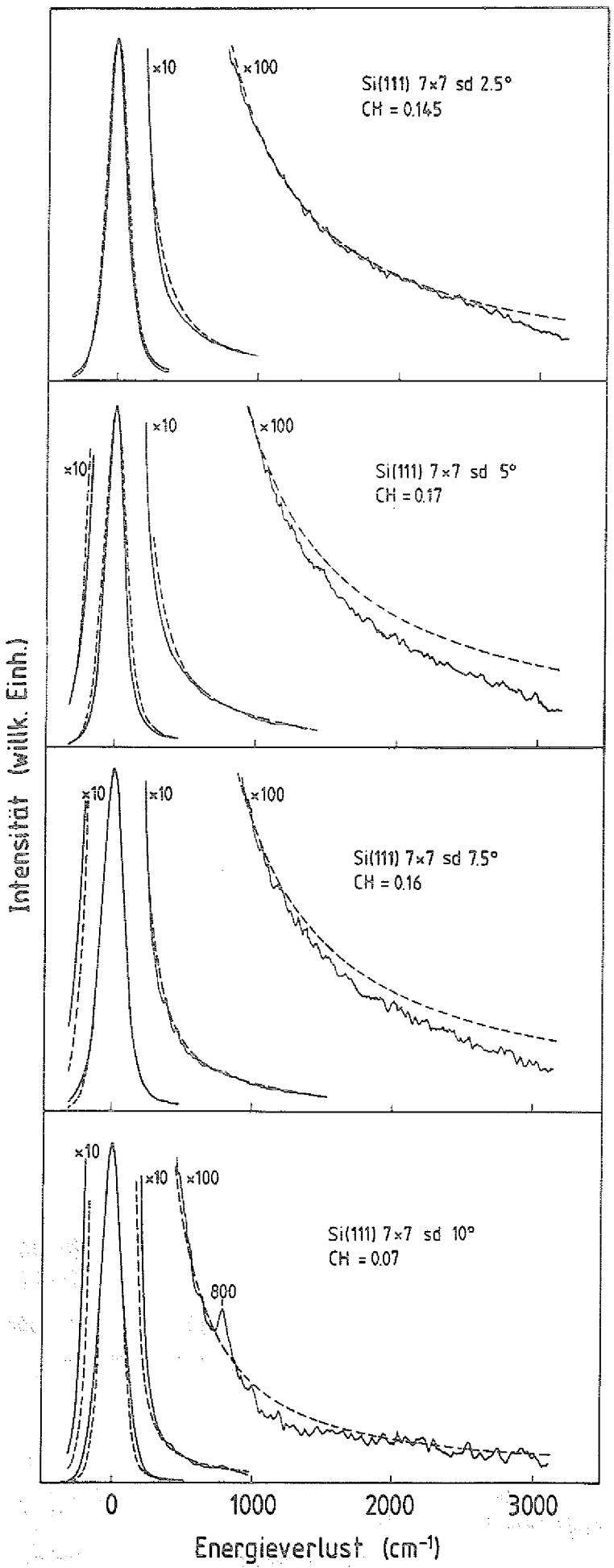


Bild 27
Theoretische Anpassungen für die Silizium (111) 7x7 sd-Proben (Primärauflösung 150 cm^{-1})

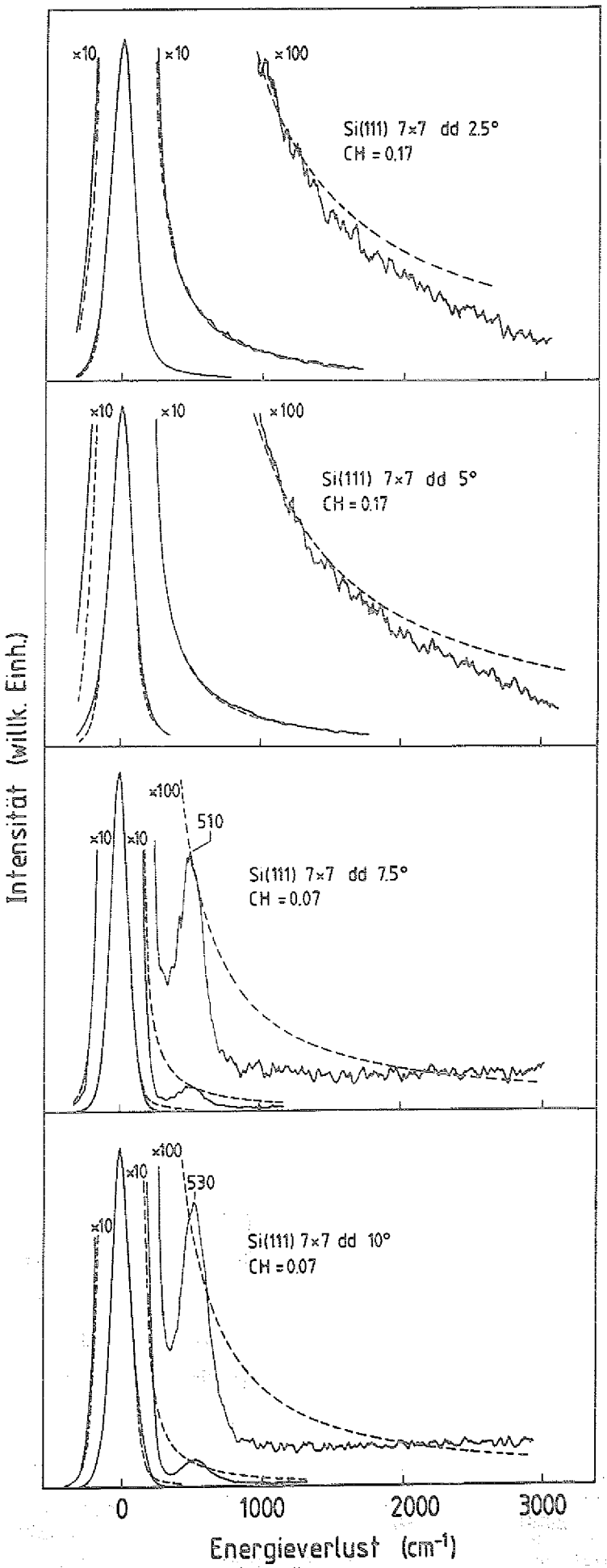


Bild 28
Theoretische Anpassungen für die Silizium (111) 7x7 dd-Proben (Primärauflösung 150 cm^{-1})

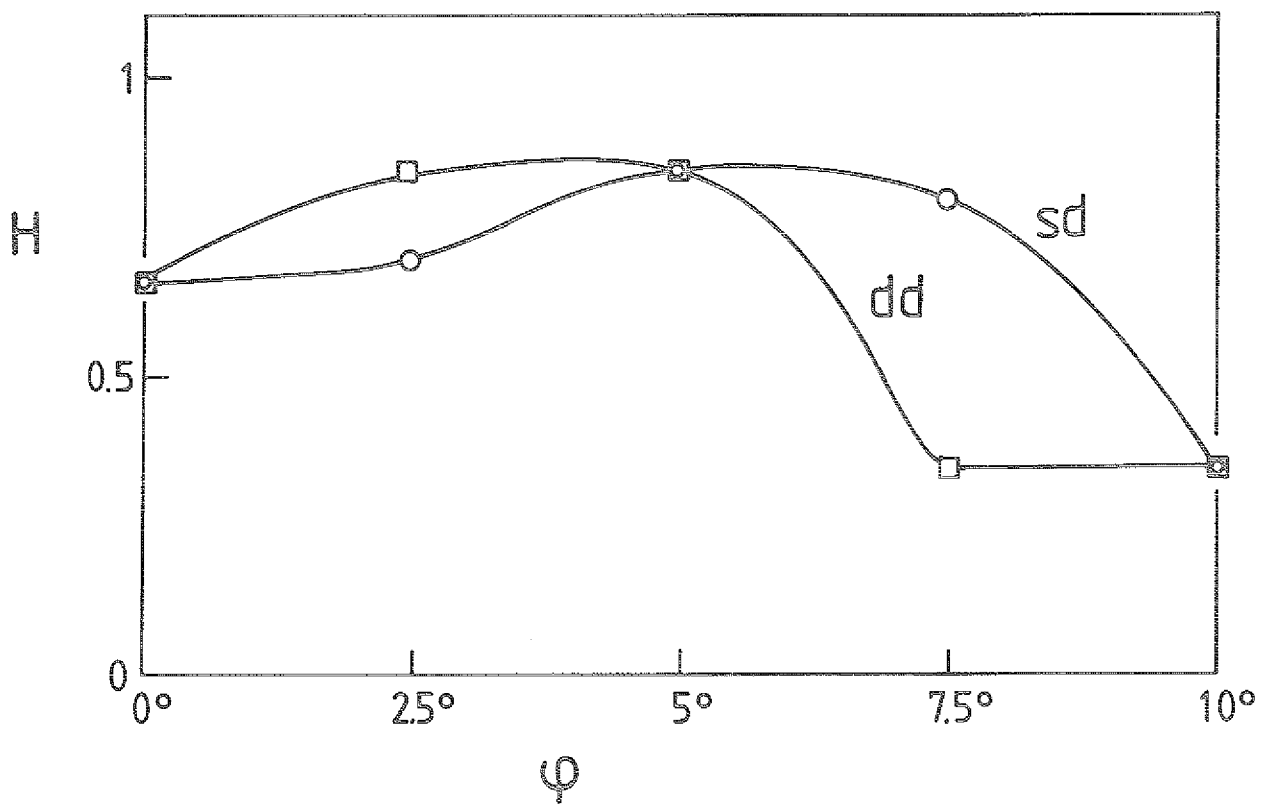


Bild 29
H-Werte für alle gestuften Silizium (111) 7x7-Proben

Die errechneten H-Werte für alle Spektren sind in Bild 29 über dem Fehlorientierungswinkel aufgetragen. Der theoretische Maximalwert von $H(\xi,65^{o})$ beträgt 0,837 und wird sowohl von der sd-Kurve als auch von der dd-Kurve erreicht. Dort besitzt ξ eindeutig den Wert 1,65 und der Oberflächenwiderstand ρ_s beträgt 9750 Ω. Geht man von einem monotonen steigenden Verlauf des Oberflächenwiderstandes (~ ξ) über dem Winkel der Fehlorientierung aus, weil die mittlere freie Weglänge für das Plasmon abnimmt, kann man nunmehr für jeden H-Wert den dazugehörigen Oberflächenwiderstand bestimmen. Das Ergebnis ist im Bild 30 festgehalten. Beginnend bei einem Wert von 4050 Ω für die gut orientierte Probe steigt der Oberflächenwiderstand nichtlinear und unterschiedlich für die dd- und sd-Proben an. Zum Verständnis dieses Effektes be-

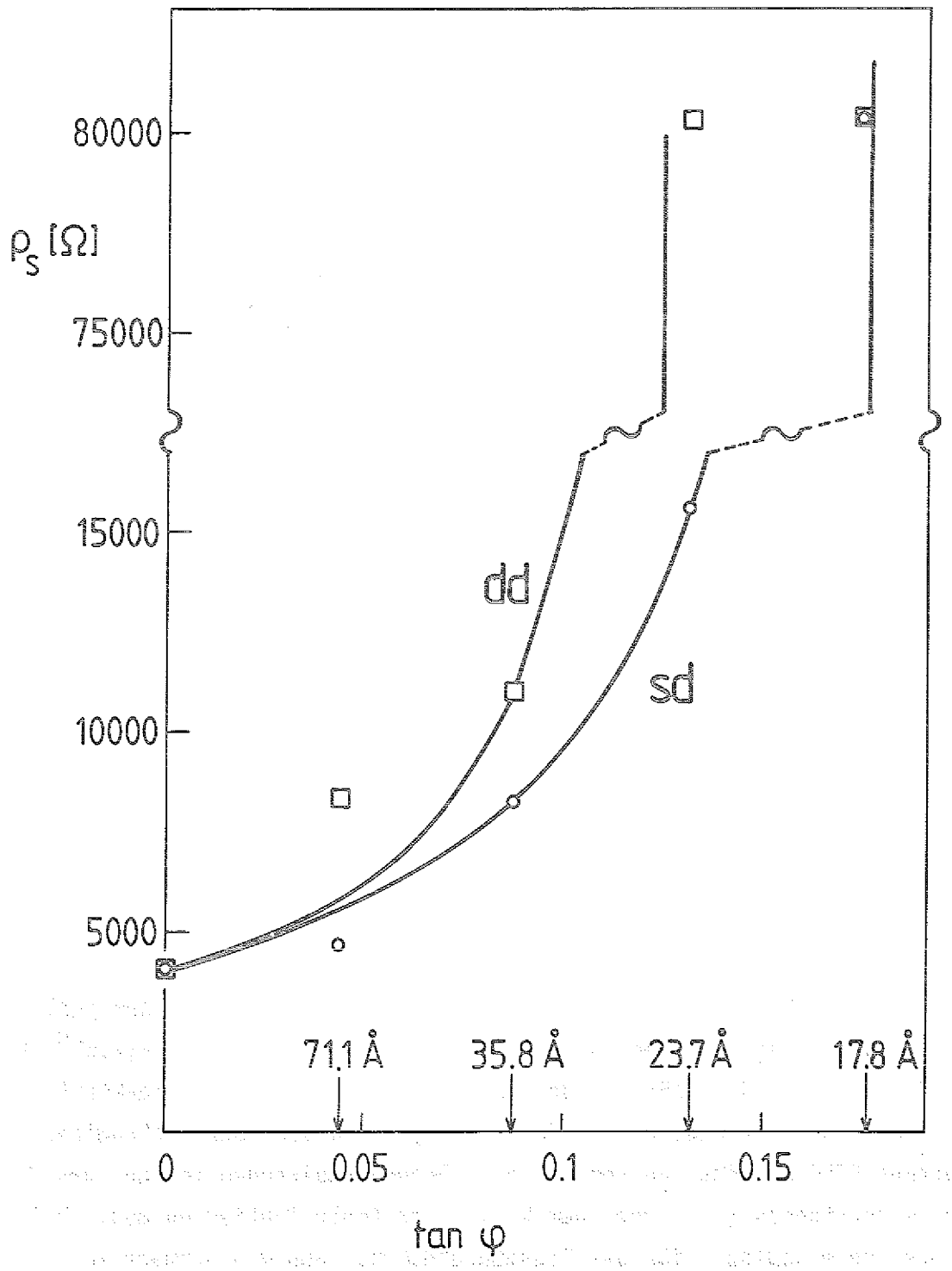


Bild 30

Oberflächenwiderstände für die gestuften Silizium (111) 7x7-Proben; die Längenangaben beziehen sich auf die mittlere Terrassenlänge

nötigt man ein einfaches Modell für den Zusammenhang zwischen Fehlorientierung und Oberflächenwiderstand, das im folgenden gegeben werden soll.

Nach (4a) hängt die Oberflächenleitfähigkeit von der mittleren Zeit zwischen zwei Stößen ab:

$$\rho_s = \frac{m^*}{e^2 n_s} \frac{1}{\tau}$$

Ein Leitungselektron legt in der Zeit τ im Mittel eine Strecke l mit der Fermigeschwindigkeit v_F, $v_F = l/\tau$, zurück. Daraus erhält man für den Oberflächenwiderstand

$$\rho_s = \frac{m^* v_F}{e^2 n_s} \frac{1}{l} = \frac{\alpha}{l} .$$

Die freie Weglänge auf den Terrassen ist gegeben durch die Stufenlänge l_{st}:

$$l_{st} = h \cdot \cot \varphi \quad ,$$

wenn h die Höhe einer Stufe ist. Die tatsächliche freie Weglänge ist eventuell noch durch einen unrekonstruierten Streifen der Breite l_0 auf jeder Terrasse verkleinert:

$$l_{st} = h \cdot \cot \varphi - l_0 .$$

Ein solcher unrekonstruierter Streifen wurde von Osakabe et al. /32/ im Elektronenmikroskop für den Übergang 1x1 → 7x7 bei 850°C beobachtet. Oberhalb von 850°C sind die Terrassen 1x1-Flächen. Bei fortschreitender Abkühlung "kondensiert" die 7x7-Struktur an den Stufenunterkanten und drängt den 1x1-Streifen mehr und mehr zurück. Ob nach vollständiger Abkühlung ein schmaler, unrekonstruierter Streifen verbleibt, konnte von Osakabe aus Auflösungsgründen nicht beobachtet werden. Haneman /33/ postuliert für Silizium-Spaltflächen einen durch die Stufe "gestreßten", unrekonstruierten Streifen unterhalb jeder Stufenkante. Er wertet die Abhängigkeit der Umwandlungstemperatur des Phasenübergangs 2x1 → 7x7 von der Stufendichte aus und erhält eine Streifenbreite von 24 Å.

Unter Anwendung der Matthiesenschen Regel addieren sich der intrinsische Widerstand der 7x7-Struktur, ρ_{7x7}, und der Stufenwiderstand, ρ_{st}, zum gemessenen Gesamtwiderstand

$$\rho_s = \rho_{7x7} + \rho_{st}$$

mit

$$\rho_{st} = \frac{\alpha}{h \cdot \cot\varphi - l_0} \qquad (11)$$

Mit dem schon bekannten Widerstand für die 0^0-Probe, $\rho_{7x7} = 4050\ \Omega$, kann man die Parameter α, l_0 an die Daten anpassen und erhält die durchgezogenen Kurven in Bild 30 für die sd-Proben mit $l_0 = 16{,}5$ Å, und die dd-Proben mit $l_0 = 23{,}8$ Å. Der letzte Wert stimmt gut mit dem von Haneman /33/ für Spaltflächen ermittelten Wert (24 Å) überein. Bei beiden Kurven besitzt α den Wert $\alpha = 83800\ \Omega$Å. Mit α kann man die effektive Masse der Elektronen im Oberflächenband abschätzen. Die intrinsische mittlere freie Weglänge der Elektronen in der 7x7-Struktur ist

$$l_{7x7} = \frac{\alpha}{\rho_{7x7}} = 20{,}7\ \text{Å} \quad ,$$

also gilt

$$\frac{1}{\tau_{7x7}} = \frac{v_F}{l_{7x7}} = \frac{1}{l_{7x7}} \sqrt{\frac{2E_F}{m^*}}$$

Da für Verlustenergien $\hbar\omega > \hbar/\tau_{7x7}$ die einfache Plasmontheorie (Abschnitt 6.3.) versagt, das theoretische Spektrum aber bis $\hbar\omega \approx 1500\ \text{cm}^{-1}$ gut mit der Theorie übereinstimmt, kann man einen oberen Grenzwert für die effektive Masse angeben. Aus

$$\hbar\omega = 1500\ \text{cm}^{-1} \leq \frac{\hbar}{\tau_{7x7}} = \frac{\hbar}{l_{7x7}} \sqrt{\frac{2E_F}{m^*}}$$

erhält man mit $E_F \approx 0.4$ eV (siehe Bild 1)

$$m^* < 0.4 \cdot m \quad .$$

Die unterschiedlichen plasmoninaktiven Längen sind wahrscheinlich durch die verschiedenen Stufenrekonstruktionen der sd- und dd-Proben bedingt.

Oberhalb eines Fehlorientierungswinkels von $4{,}8^{0}$ für die sd-Proben bzw. $4{,}0^{0}$ für die dd-Proben paßt die 7x7-Zelle gerade nicht mehr in eine mittlere "ungestreßte" Terrassenzone. Spätestens dann müssen die Terassenlängen statistisch verteilt sein, um die 7x7-Rekonstruktion zu ermöglichen. Für große Fehlorientierungswinkel φ mit

$$\varphi > \arctan h/l_0$$

also 10.7^{0} für die sd-Proben und 7.6^{0} für die dd-Proben, versagt die Formel (11). Dann paßt nicht einmal mehr die Breite der unrekonstruierten Streifen, l_0, in die mittlere Terrassenlänge, und der Oberflächenwiderstand erreicht sein Maximum, was mit den dd-Meßpunkten verträglich ist. Die 7x7-Rekonstruktion ist nur noch bei gleichzeitiger Bildung von Mehrfachstufen möglich. Für eine 11^{0}-sd-Probe, die hier nicht untersucht wurde, sollte der inelastische Untergrund also verschwunden sein.

Die größere Abweichung des Widerstands der schwach gestuften 2,5 dd-Probe vom theoretischen Wert läßt sich wahrscheinlich auf eine für kleine φ vergrößerte Streuung der tatsächlichen Stufenlängen um den mittleren Wert zurückführen. Eine solche Streuung wurde bereits von Freudenhammer et al. /8/ nachgewiesen. Die Streuprozesse, die an den kürzesten Terrassen geschehen, erzeugen eine höhere relative Intensität, tragen, im Gegensatz zur statistischen Verteilung, überproportional zum Gesamtstreuquerschnitt bei und täuschen so einen höheren Gesamtwiderstand vor.

Zur Überprüfung der Auswertemethodik für die Spektren wurde die Silizium (111) 7x7-0^{0}-Probe auch unter anderen Einfallswinkeln, bei ansonsten unveränderter Einstellung, untersucht. Das Ergebnis ist in Bild 31 zusammen mit den angepaßten theoretischen Kurven zu sehen. Die CH-Werte lassen sich, wie bereits beschrieben, in die entsprechenden Oberflächenwiderstände umrechnen und man erhält Bild 32. Die gesamte Schwankungsbreite des Oberflächenwiderstandes beträgt ± 17 %. Bild 33 zeigt zur Ergänzung zwei weitere ausgewerte-

te 0°-Spektren bei 100 K und 300 K. Diese Spektren sind bei einem Einfallswinkel von 60° und bei einer höheren Primärenergie (12,3 eV) aufgenommen. Im Gegensatz zu den Anpassungen für die bisher vorgestellten Spektren, die bei einer kleinen Primärenergie (6,5 eV) aufgenommen wurden, konnte hier die ursprüngliche Auflösung des direkten Strahls (70 cm^{-1}) als Anpassungsparameter eingesetzt werden.

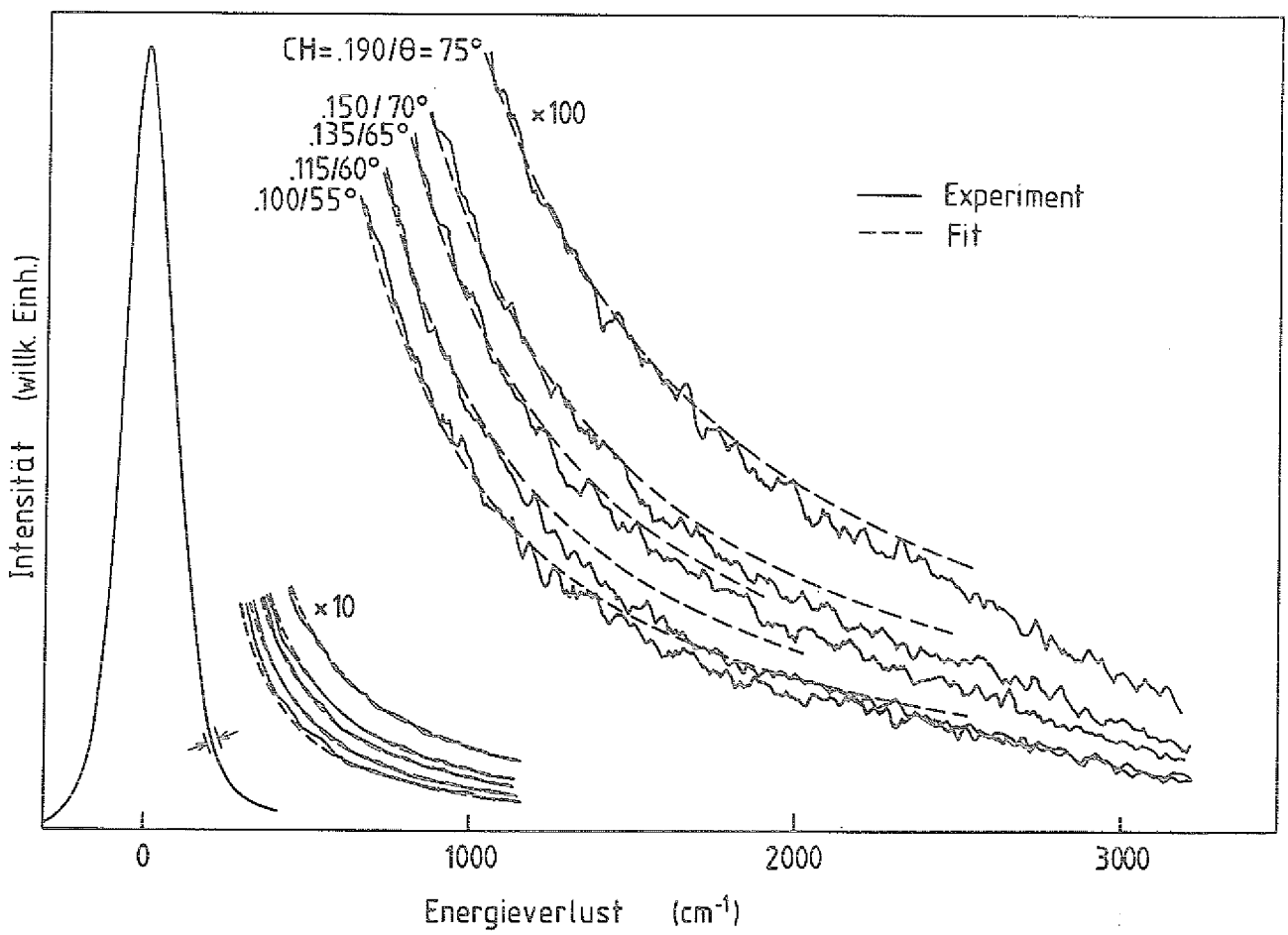


Bild 31
Spektren und theoretische Anpassungen für die Silizium (111) 7x7 0°-Probe, gemessen bei verschiedenen Einfallswinkeln

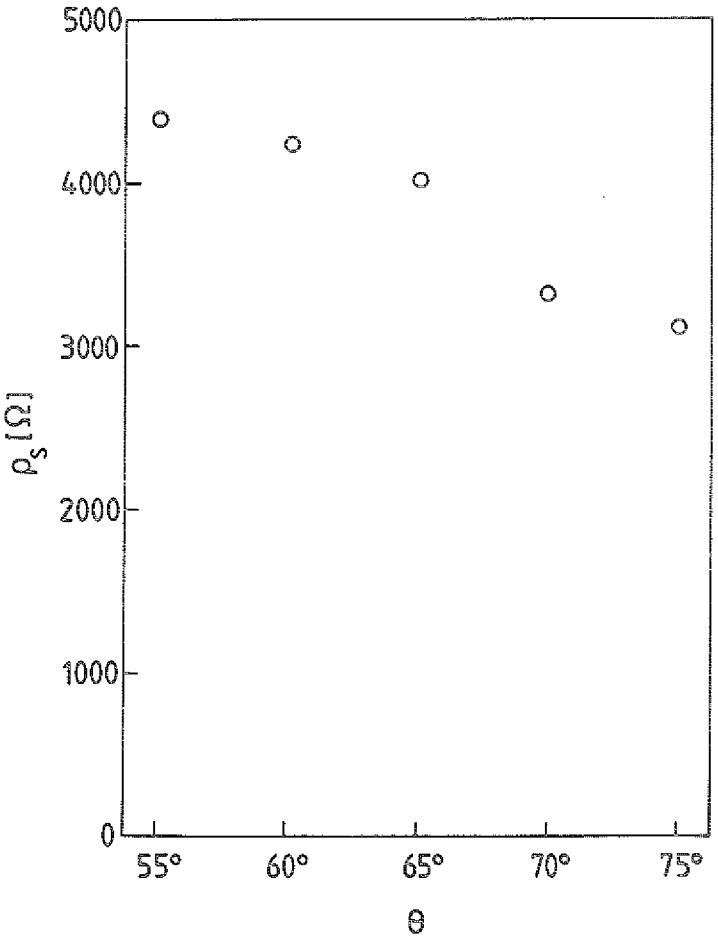


Bild 32
Oberflächenwiderstand der Silizium (111) 7x7 0^0-Probe in "Abhängigkeit" vom Einfallswinkel

Das Spektrum bei tiefer Temperatur weist einen deutlich kleineren inelastischen Untergrund auf als das Raumtemperatur-Spektrum. Die breite Energieverlustschulter ist bereits von Demuth et al. /34/ beobachtet worden. Sie zerfällt bei weiterer Abkühlung in einen schmalen Verlust bei 510 cm^{-1} und einen breiten Verlust bei 730 cm^{-1} /34/, die dort als Oberflächenphonon (510 cm^{-1}) bzw. als Interbandübergang (730 cm^{-1}) zwischen Oberflächenzuständen interpretiert werden.

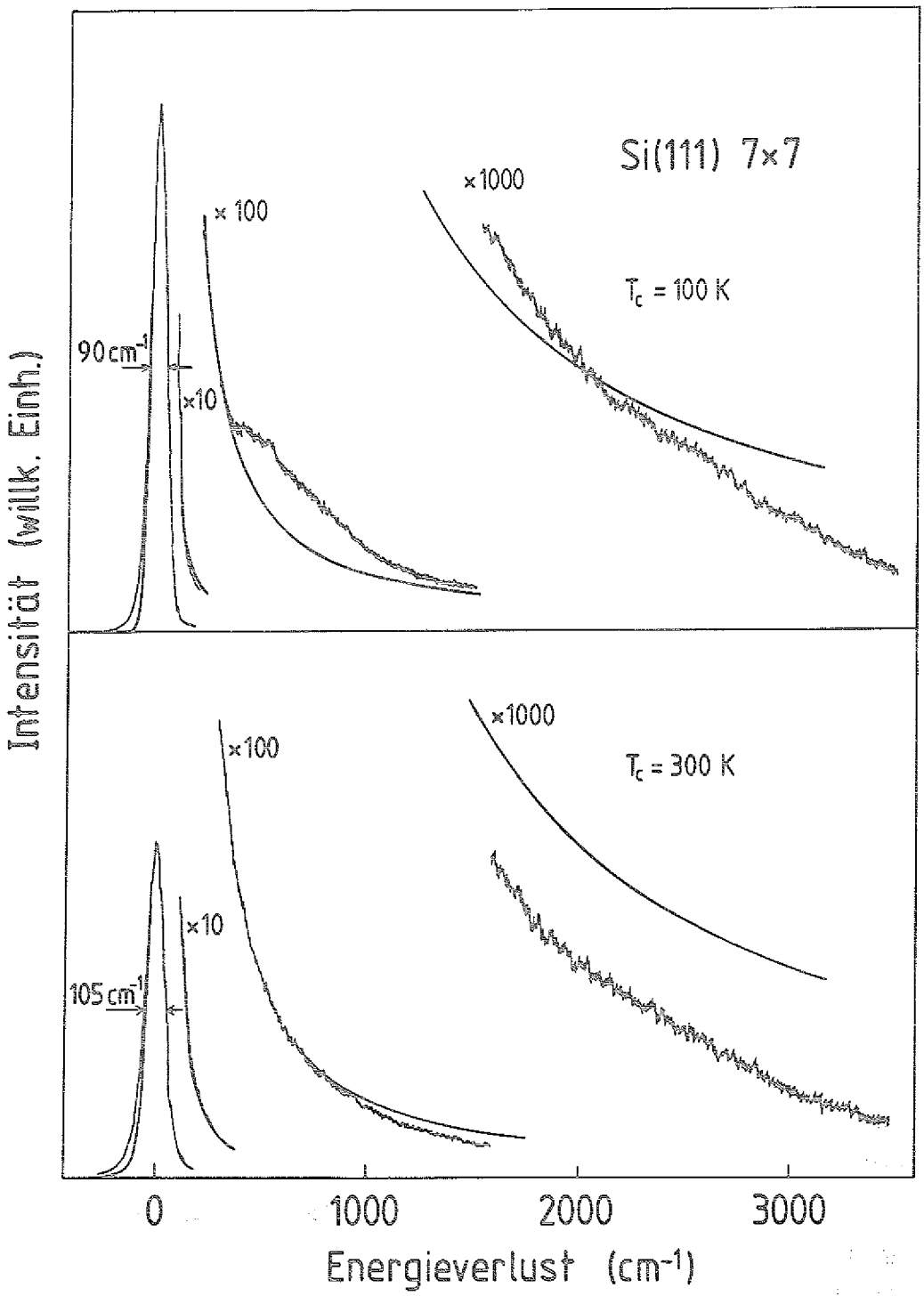


Bild 33

Spektren und theoretische Anpassungen (durchgezogene Kurven) für die Silizium (111) 7x7 0°-Probe bei höherer Primärenergie (12.3 eV) und bei verschiedenen Temperaturen (Einfallswinkel 60°)

Eine ganze Serie von Spektren, die während des Abkühlens der Probe in einem begrenzten Verlustenergiebereich ($\hbar\omega < 300\ cm^{-1}$) aufgenommen wurden, führt nach Auswertung für die jeweilige Temperatur zu den H-Werten in Bild 34. Für den Einfallswinkel ($\Theta = 59{,}2^{o}$) wird das theoretische H-Maximum von 1,00 erreicht. Daher erscheint es wieder plausibel, von einem monotonen Widerstandsverlauf $\rho_s(T)$ auszugehen und man erhält die Punkte in Bild 35. Der gestrichelt gezeichnete Verlauf kann zwar nicht ausgeschlossen werden, es gibt aber keine vernünftige Interpretation für einen solchen Verlauf. Die durchgezogene Linie entspricht einer Abhängigkeit

$$\rho_s \sim T^{-1,7}$$

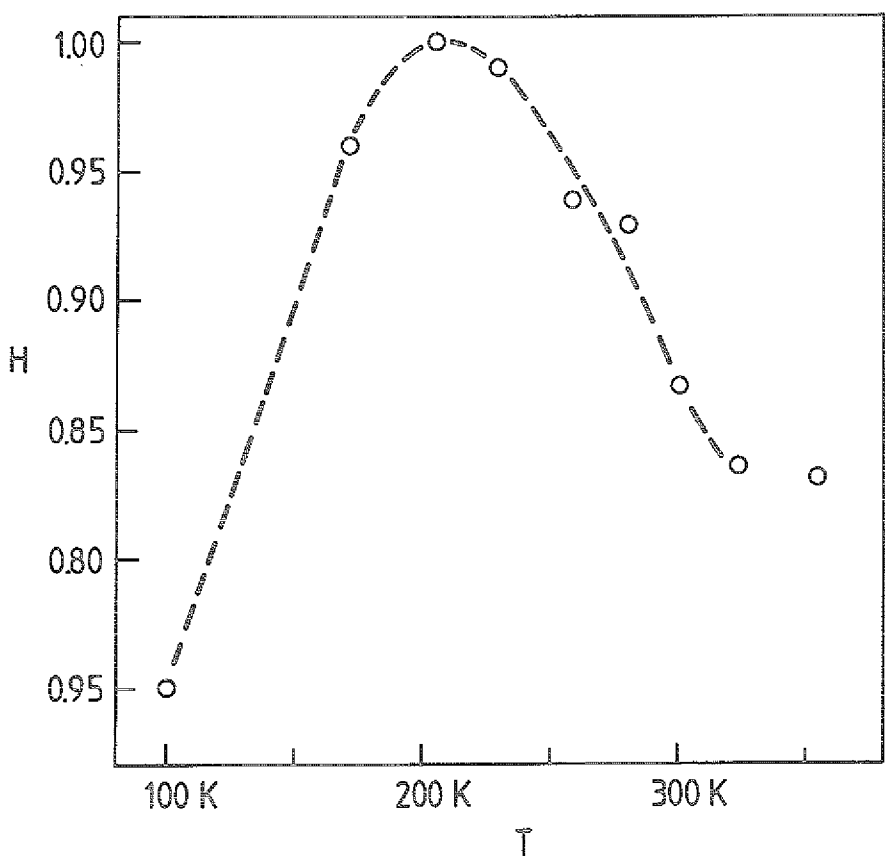


Bild 34
H-Werte für die Spektren in Bild 33 und für eine Reihe von weiteren Spektren bei verschiedener Temperatur

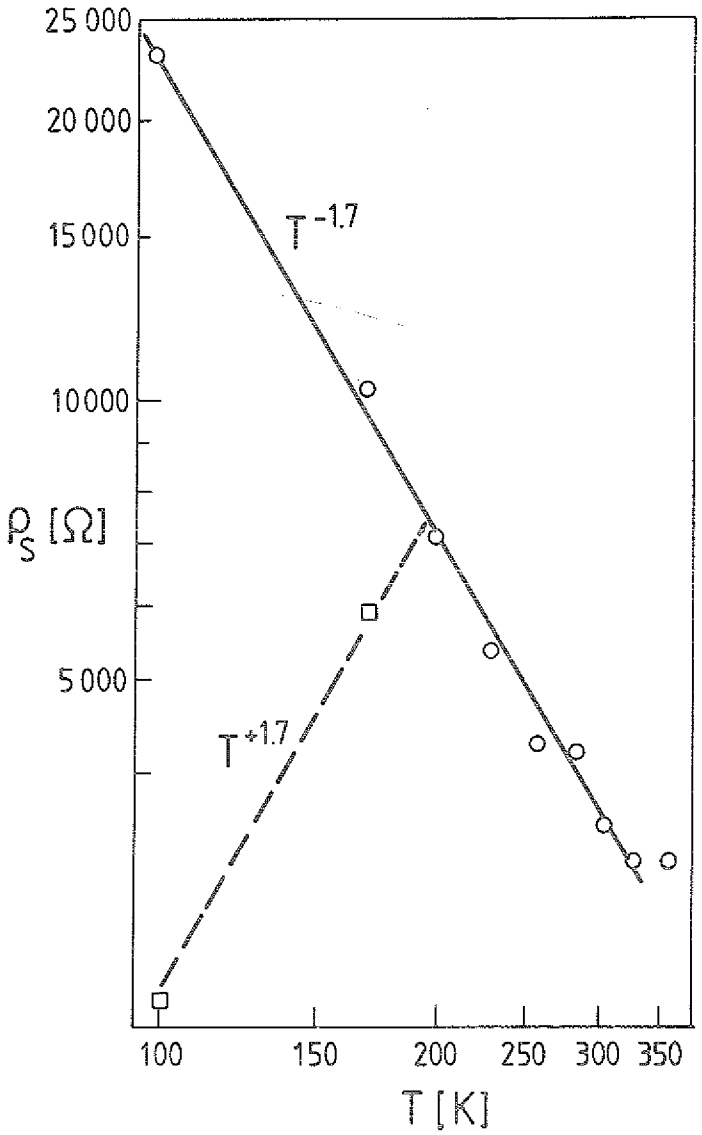


Bild 35
Abhängigkeit des Oberflächenwiderstandes von der Temperatur bei der Silizium (111) 7x7-Fläche

Eine derartige Abhängigkeit läßt sich näherungsweise durch Streuung an geladenen Störstellen /29/ ($\rho_s \sim T^{-1,5}$) bei konstanter Ladungsträgerkonzentration verstehen. Eine "thermische" Bandlücke kann also auch ausgeschlossen werden, da die Konzentration von Elektron-Loch-Paaren, die auch zu Plasmaschwingungen anregbar wären, exponentiell von der reziproken Temperatur abhängen müßte.

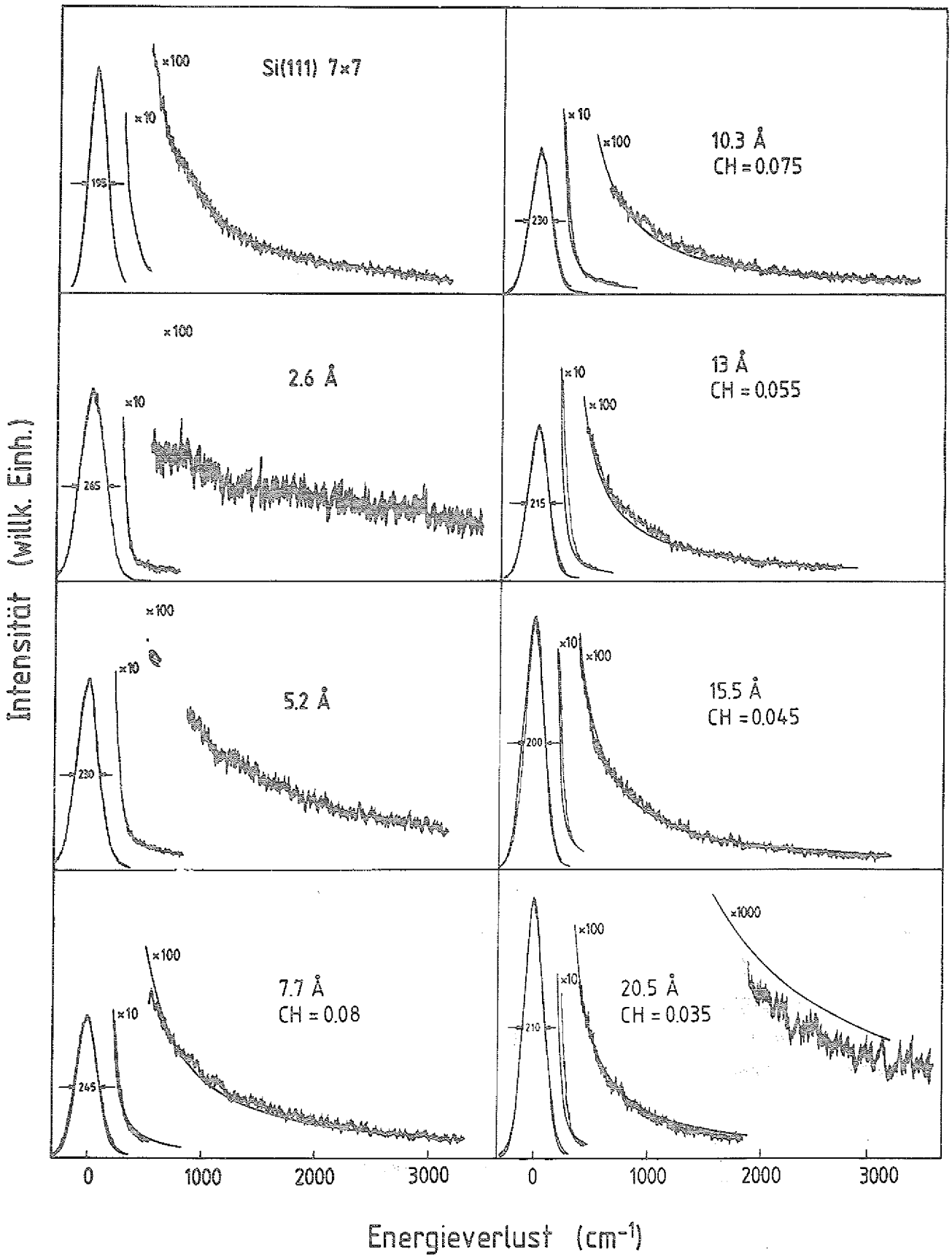
7.2. Silberfilme

In den Bildern 36 und 37 sind die Spektren der Silberfilme im einzelnen zu sehen. Soweit die jeweils bestmögliche Anpassung nach der Plasmontheorie eine gute Übereinstimmung zeigte, wurde sie als durchgezogene Linie miteingezeichnet. Die angepaßte Spektrometerauflösung beträgt 200 cm^{-1}. Oberhalb von 40 Å ist die Bedingung $q_{\parallel}d < 1$ wahrscheinlich nicht mehr erfüllt. Unterhalb von 7 Å spielen vermutlich noch Grenzflächenzustände Si-Ag eine Rolle. Aus den CH-Werten bei bekannter Kinematik wurden wieder die H-Werte berechnet. Der H-Wert ist bei 7,7 Å maximal. Dort ist ξ eindeutig 1,7 und daher die spezifische Leitfähigkeit $\sigma = 2220\ (\Omega cm)^{-1}$ (nach (7a), $\sigma = \sigma_s/d$). Für die anderen H-Werte gibt es wieder je zwei ξ-Werte. Besonders bei diesen kleinen Schichtdicken erscheint jedoch die Annahme sinnvoll, daß die Leitfähigkeit mit der Dicke zunehmen sollte. Ein vorübergehender gegenläufiger Trend, wie er z.B. für Rauhigkeitsoszillationen nach der Fuchs-Sondheimer-Theorie erwartet würde /35/, erklärt nicht den über den gesamten Dickenbereich vorhandenen Verlauf mit nur fallender oder nur steigender Charakteristik. Damit ergibt sich der Leitfähigkeitsverlauf in Bild 38. Man erkennt einen näherungsweise linearen Anstieg der Leitfähigkeit über der Dicke bis etwa 15 Å. Oberhalb dieser Dicke bleibt die Leitfähigkeit scheinbar konstant. Ob etwa ein Wiederanstieg erfolgt, konnte aus den oben erwähnten Gründen nicht ermittelt werden.

Oberhalb des hier erfaßten Bereichs sind am gleichen System Ag/Si(7x7) bereits Widerstandsmessungen von Dayal et al. /36/ durchgeführt worden. Bild 39 zeigt eine Kombination der Leitfähigkeiten dieser Messung mit den hier gewonnenen Daten. Bei einer Dicke von 1000 Å wird die Leitfähigkeit eines Silberkristalls ($\sigma = 6x10^5\ (\Omega cm)^{-1}$) erreicht. Oberhalb einer Dicke von 300 Å kann die Abhängigkeit von der Dicke befriedigend im Rahmen der Fuchs-Sondheimer-Theorie beschrieben werden /36/. Fuchs /37/ löste eine Boltzmann-Transportgleichung für die im Film lokalisierten Ladungsträger und erhält für die Leitfähigkeit

$$\sigma(d) = \sigma_\infty\left(1- \frac{3}{2}\frac{1}{k}\,(1-p)\int_1^\infty (t^{-3}- t^{-5})\,\frac{1-\exp(-kt)}{1-p\,\exp(-kt)}\,dt\right)$$

$$k = d/\lambda_\infty\ . \qquad (12)$$


Si(111) 7×7
×100
×10
195
10.3 Å
CH = 0.075
×10
×100
230
2.6 Å
×100
×10
265
13 Å
CH = 0.055
×10
×100
215
5.2 Å
×100
×10
230
15.5 Å
CH = 0.045
×10
×100
200
7.7 Å
CH = 0.08
×100
×10
245
20.5 Å
CH = 0.035
×1000
×100
×10
210
0
1000
2000
3000
0
1000
2000
3000
Intensität (willk. Einh.)
Energieverlust (cm⁻¹)

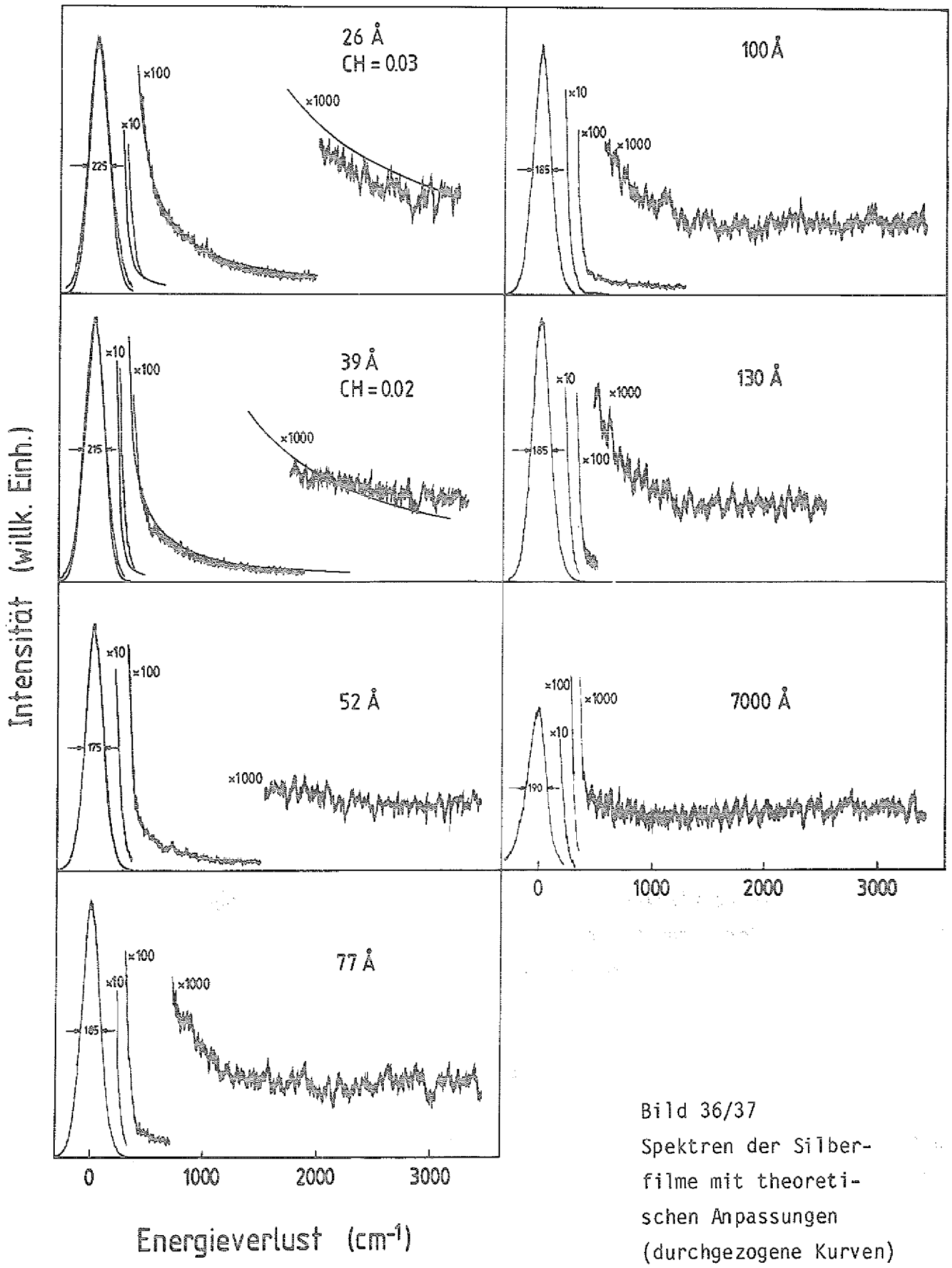


Bild 36/37
Spektren der Silberfilme mit theoretischen Anpassungen (durchgezogene Kurven)

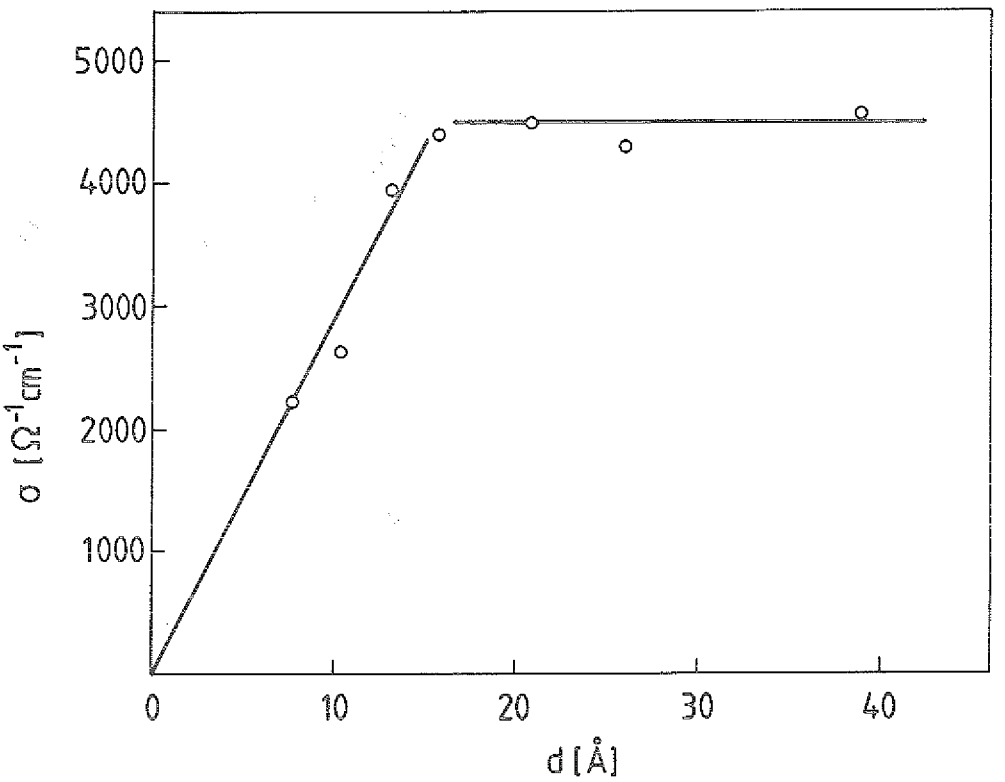


Bild 38
Leitfähigkeit der Silberfilme in Abhängigkeit von der Schichtdicke

σ_∞ und λ_∞ ist die Leitfähigkeit bzw. die mittlere freie Weglänge in einem Silberkristall. Der Parameter p gibt an, welcher Anteil der Leitungselektronen an den Filmgrenzflächen spiegelnd reflektiert wird. Dayal verwendet zur Anpassung seiner Messung die Näherungsbeziehung für (12) mit $d \gg \lambda_\infty$

$$\sigma(d) \approx \sigma_\infty \left(1+ \frac{3}{8k} (1-p)\right)^{-1} \qquad (12a)$$

und erhält die gestrichelte Linie in Bild 39 oberhalb d = 300 Å mit λ_∞ = 486 Å und p = 0,78.

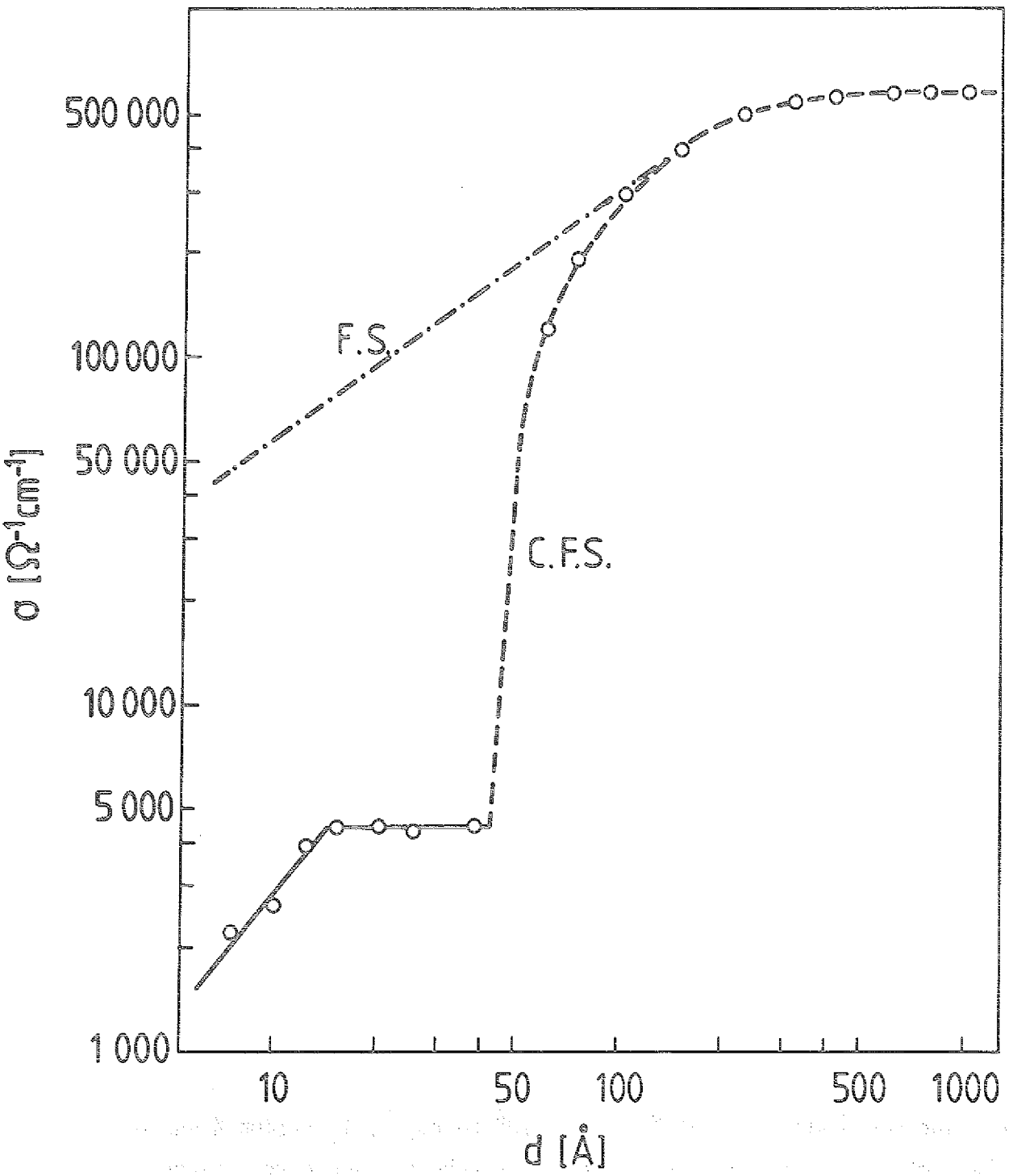


Bild 39

Leitfähigkeit der Silberfilme, ergänzt durch Daten von Dayal (obere Punkte) /36/, mit Anpassungsversuchen durch die Fuchs-Sondheimer Theorie (F.S.) bzw. durch die korrugierte Fuchs-Sondheimer Theorie (C.F.S.)

Um den Verlauf der Leitfähigkeit für kleine Schichtdicken abzuschätzen, wurde eine andere Näherungsbeziehung für (12) mit $d \ll \lambda_\infty$,

$$\sigma(d) \approx \sigma_\infty \frac{3}{4} (1+2p)\ k(\ln 1/k + 0{,}423)\ , \qquad (12b)$$

verwendet. Nach Einsetzen von λ_∞ und p erhält man den linken Teil der strichpunktierten Linie in Bild 39. Die untersten Meßpunkte von Dayal einschließlich der hier gewonnenen Punkte liegen deutlich unter dieser Kurve, lassen sich also im einfachen Fuchs-Sondheimer-Modell nicht verstehen.

Fischer et al. /38/ haben die Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Dicke für einen sehr dünnen Platinfilm (3 ... 20 Å) auf Glas gemessen. Sie ermitteln die Filmrauhigkeit aus dem Einsatzpunkt ohmscher Leitfähigkeit (Strommessung) bei wachsender Schichtdicke und finden für glatte Filme eine gute Übereinstimmung des Leitfähigkeitsverlaufs mit dem Fuchs-Sondheimer-Modell bis zu kleinen Schichtdicken, während die Leitfähigkeit bei einem rauhen Film unterhalb einer gewissen Schichtdicke zusammenbricht. Die Filmrauhigkeit läßt sich theoretisch durch die Annahme einer sinusartigen Korrugation der Filmdicke, z.B. in x-Richtung, berücksichtigen:

$$d(x) = \bar{d} + h \sin (2\pi x/\Delta)\ .$$

Den gemessenen Gesamtwiderstand kann man als Summation über alle Einzelwiderstände auffassen, die dann jeweils durch (12) gegeben sind /38/:

$$\frac{1}{\sigma(\bar{d})} = \frac{\bar{d}}{L} \int_0^L \frac{dx}{\sigma(d(x))\ d(x)}$$

Dabei ist L die Filmlänge in x-Richtung.

Für eine Korrugation h = 36 Å, $\sigma_\infty = 6\times10^5\ (\Omega\ \mathrm{cm})^{-1}$, l_∞ = 1400 Å und p = 0,13 erhält man aus einer Extrapolation der berechneten Kurve von Fischer /38/ die gestrichelte Kurve in Bild 39. Diese Anpassung ergibt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Daten von Dayal, ist wegen der zu großen freien Weglänge (für einen Silberkristall gilt: λ_∞ = 575 Å) aber nicht befriedigend. Der Ansatz illustriert aber den Einfluß der Rauhigkeit: Wenn bei konstanter Korrugation die mittlere Schichtdicke kleiner wird als die Korrugation

selbst, reißt der Film auf, und die Leitfähigkeit bricht zusammen. Die Leitfähigkeit bricht unterhalb dieses kritischen Punktes nicht vollständig zusammen, sondern bleibt hinunter bis zu 15 Å konstant. Das ist wahrscheinlich auf Inselwachstum auf einer Unterlage konstanter Dicke zurückzuführen. Die dünnsten Stellen bestimmen dabei die Leitfähigkeit überproportional. Bis zu 15 Å ist der etwa lineare Anstieg der Leitfähigkeit mit einem lagenweisen Aufbau des Films verträglich (Frank-van der Merwe-Wachstum; die Formel (12b) wird linear im Limit $\ln \lambda >> \ln d$). Oberhalb von 15 Å wachsen Kristallite bis zum Erreichen einer kritischen Größe. Danach findet wieder Dickenwachstum statt, wobei die Kristallite ihre Größe wahrscheinlich beibehalten.

Der Verlauf der Leitfähigkeit bis 40 Å läßt sich aber auch durch reines Inselwachstum auf dem isolierenden Substrat erklären. Die durch die Auswertung der Spektren ermittelte Leitfähigkeit ist proportional zur mittleren freien Weglänge der Elektronen in den Inseln, also näherungsweise proportional zum Inseldurchmesser. In diesem Bild wachsen bis zu einer mittleren Dicke von 15 Å große Inseln aus kleinen zusammen, der Inseldurchmesser wird also immer größer. Oberhalb von 15 Å findet dann hauptsächlich Dickenwachstum auf den bereits gebildeten Inselflächen statt. Beim Überschreiten einer mittleren Dicke von 40 Å berühren sich die Inseln, worauf die Leitfähigkeit stark ansteigt. Eine direkte Leitfähigkeitsmessung unterhalb von 40 Å ergäbe im Gegensatz zur ersten Interpretation den Wert 0, könnte also eine der beiden Interpretationen verifizieren.

Das interessanteste Ergebnis ist aber, daß auch das "Modellsystem" Silberfilm-Siliziumsubstrat ein Spektrum liefert, wie man es aufgrund der einfachen Plasmontheorie erwartet.

8. Zusammenfassung

Einmal mehr hat sich die hochauflösende Elektronenspektroskopie als fähig erwiesen, Informationen über Oberflächenstrukturen und -effekte zu liefern. Durch die Weiterentwicklung der Elektronenstreutheorie /16,17/ ist es unter günstigen Umständen möglich geworden, Materialdaten aus Spektren zu extrahieren. Im vorliegenden Fall gelingt es, durch die Annahme einer leitfähigen Oberflächenschicht (auf einem nichtleitenden, infrarot-inaktiven Substrat) die sowohl auf der reinen Silizium (111) 7x7-Fläche als auch bei dünnen Silberfilmen auf der Silizium (111)-Fläche gefundene Verbreiterung der quasielastischen Linie und den hohen inelastischen Untergrund gestreuter Elektronen quantitativ zu erklären. Dazu wurde der Streuquerschnitt für Mehrfachanregung von in einer dünnen Schicht lokalisierten Plasmonen durch Elektronen berechnet. Auch die endliche Auflösung des Spektrometers wurde berücksichtigt. Ergebnis der Anwendung der Theorie ist die Gleichstromleitfähigkeit in der Oberflächenschicht. Die am "Modellsystem" Silberfilm-Siliziumsubstrat aufgenommenen Spektren lassen sich im Rahmen der einfachen Plasmontheorie interpretieren und bestätigen so die Richtigkeit der theoretischen Annahmen.

Bei der reinen Silizium (111) 7x7-Fläche ergibt der Verlauf der inelastischen Intensität keinen Anhaltspunkt für eine Bandlücke. Vielmehr entspricht das Spektrum einer metallischen Oberfläche. Die Auswertung ergibt einen Oberflächenwiderstand von 4000 Ω. Das Verhalten der Spektren bei tiefen Temperaturen ist mit einer von der Temperatur unabhängigen Ladungsträgerkonzentration verträglich. Damit kann auch die Anregung von Elektron-Lochpaaren (die bei höherer Temperatur über eine kleine Bandlücke gebildet werden) ausgeschlossen werden. Eine Untersuchung der Oberflächenwiderstände von verschieden stark gestuften Silizium (111) 7x7-Oberflächen mit einer Stufenorientierung wie bei Spaltflächen (und mit der entgegengesetzten Orientierung) ergibt eine Abhängigkeit der Plasmondämpfung vom Winkel der Fehlorientierung, die nur mit der Existenz einer unrekonstruierten Zone auf jeder Terrasse erklärt werden kann. Die Breite der unrekonstruierten Zone ergibt sich zu 23,8 Å für die spaltflächenähnliche Proben und 16,5 Å für

die entgegengesetzte Orientierung. Die intrinsische mittlere freie Weglänge des Plasmons in der 7x7-Zelle beträgt 20,7 Å.

Die reine Silizium (111) 7x7-Struktur ist also metallisch. Rekonstruktionsmodelle, die die Öffnung einer Bandlücke verlangen, müssen daher ausgeschlossen werden.

Literaturverzeichnis

/1/ J.J. Lander, G.W. Gobeli, J. Morrison, J. Appl. Phys. 34 (1963) 2298
/2/ K.C. Pandey, J.C. Phillips, Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 1433
/3/ D. Hanemann, Phys. Rev. 121 (1961) 1093
/4/ G. Chiarotti, P. Chiaradia, S. Nannarone, Surf. Sci. 49 (1975) 315
/5/ H. Froitzheim, H. Ibach, D.L. Mills, Phys. Rev. B11 (1975) 4980
/6/ F.J. Himpsel, P. Heimann, D.E. Eastman, Phys. Rev. B24 (1981) 2003
/7/ K.C. Pandey, Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1913
/8/ A. Freudenhammer, W. Mönch, P.P. Auer, J. Phys. C 13 (1980) 4407
/9/ R.J. Culbertson, L.C. Feldman, P.J. Silverman, R. Haight, J. Vac. Sci. Tech. 20 (1982) 868
/10/ H. Wagner, R. Butz, U. Backes, D. Bruchmann, Sol. St. Com. 38 (1981) 1155
/11/ J.J. Lander, J. Morrison, J. Appl. Phys. 34 (1963) 1403
/12/ W.A. Harrison, Surf. Sci. 55 (1976) 1
/13a/ K.A.R. Mitchell, Surf. Sci. 64 (1977) 797
/13b/ J.D. Levine, S.H. McFarlane, P. Mark, Phys. Rev. B 16 (1977) 5415
/13c/ J.C. Phillips, Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 905
/13d/ D.J. Chadi et al., Phys. Rev. Lett. 44 (1980) 799
/13e/ M.J. Cardillo, Phys. Rev. B 23 (1981) 4279
/13f/ F. Yndurain, Sol. St. Com. 39 (1981) 925
/13g/ G. Le Lay, Surf. Sci. 108 (1981) L429
/13h/ J. Pollmann, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 1649
/13i/ K.C. Pandey, wird noch veröffentlicht
/13j/ G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, E. Weibel, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 120
/13k/ P.M. Petroff, R.J. Wilson, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 199
/13l/ L.C. Snyder, Surf. Sci. 140 (1984) 101
/13m/ K. Higashiyama, S. Kono, H. Sakurai, T. Sagawa, Sol. St. Com. 49 (1984) 253
/13n/ W. Goldammer, W. Ludwig, W. Zierau, C. Falter, Surf. Sci. 141 (1984) 139
/14/ U. Backes, H. Ibach, Sol. St. Com. 40 (1981) 575
/15/ M. Henzler, Surf. Sci. 36 (1973) 109

/16/ H. Ibach, D.L. Mills, Electron Energy Loss Spectroscopy and Surface Vibrations, Academic Press 1982

/17/ B.N.J. Persson, J.E. Demuth, wird noch veröffentlicht

/18/ z.B.: H. Froitzheim, H. Ibach, S. Lehwald: Rev. Sci. Instr. 46 (1975) 1325

/19/ H. Ibach, H.D. Bruchmann, H. Wagner, Appl. Phys. A 29 (1982) 113

/20/ U. Backes, Diplomarbeit, TH Aachen 1981

/21/ I. Langmuir, Phys. Z. 14 (1913) 1273

/22/ Maissel & Glang, Handbook of Thin Film Technology, McGraw-Hill 1970

/23/ W. Lackes, Studienarbeit, FH Aachen 1974

/24/ M. Henzler, Surf. Sci. 19 (1970) 159

/25/ D.C. Allan, E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 826

/26/ J.E. Rowe, S.B. Christman, H. Ibach, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 874

/27/ M. Schlüter, K.M. Ho, M.L. Cohen, Phys. Rev. B 14 (1976) 550

/28/ H. Ibach, S. Lehwald, Sol. St. Com. 45 (1983) 633

/29/ H. Ibach, H. Lüth, Festkörperphysik, Springer 1981

/30/ SEL-Report, SEL-67-038

/31/ A.A. Lucas, M. Sunjic, Progr. Surf. Sci. 2 (1972) 75

/32/ N. Osakabe, Y. Tanishiro, K. Yagi, G. Honjo, Surf. Sci. 109 (1981) 353

/33/ D. Haneman, Phys. Rev. B 25 (1982) 1370

/34/ J.E. Demuth, B.N.J. Persson, A.J. Schell-Sorokin, wird noch veröffentlicht

/35/ D. Schumacher, D. Stark, Surf. Sci. 123 (1982) 384

/36/ D. Dayal, P. Rudolf, P. Wißmann, Thin Sol. Films 79 (1981) 193

/37/ K. Fuchs, Proc. Cambridge Philos. Soc. 34 (1938) 100

/38/ G. Fischer, H. Hoffmann, J. Vancea, Phys. Rev. B 22 (1980) 6065

10. Tabelle der Funktion $H(\xi,\Theta)$

XI=	H(55)=	H(60)=	H(65)=	H(70)=	H(75)=	H(80)=
0	0	0	0	0	0	0
.01	.018	.0157	.0133	.0107	7.9E-03	5E-03
.02	.0361	.0314	.0265	.0213	.0158	.0101
.03	.0541	.0471	.0398	.032	.0238	.0151
.04	.072	.0627	.053	.0426	.0317	.0202
.05	.0898	.0783	.0662	.0533	.0395	.0252
.06	.1076	.0938	.0793	.0638	.0474	.0302
.07	.1253	.1093	.0923	.0744	.0553	.0352
.08	.1428	.1246	.1054	.0849	.0631	.0402
.09	.1602	.1399	.1183	.0953	.0709	.0452
.1	.1775	.1551	.1312	.1058	.0786	.0501
.11	.1947	.1701	.144	.1161	.0863	.0551
.12	.2117	.1851	.1567	.1264	.094	.06
.13	.2285	.1999	.1693	.1366	.1016	.0649
.14	.2452	.2146	.1818	.1468	.1092	.0697
.15	.2618	.2292	.1942	.1568	.1168	.0746
.16	.2782	.2436	.2066	.1669	.1242	.0794
.17	.2944	.2579	.2188	.1768	.1317	.0841
.18	.3104	.2721	.2309	.1866	.1391	.0889
.19	.3263	.2861	.2429	.1964	.1464	.0936
.2	.342	.3	.2547	.2061	.1536	.0983
.21	.3575	.3137	.2665	.2156	.1608	.1029
.22	.3728	.3273	.2781	.2251	.1679	.1075
.23	.3879	.3407	.2896	.2345	.175	.112
.24	.4028	.3539	.301	.2438	.182	.1166
.25	.4176	.367	.3122	.253	.1889	.121
.26	.4321	.3799	.3233	.2621	.1958	.1255
.27	.4465	.3927	.3343	.2711	.2025	.1299
.28	.4606	.4053	.3451	.2799	.2092	.1342
.29	.4745	.4177	.3558	.2887	.2158	.1385
.3	.4883	.4299	.3664	.2973	.2224	.1428
.31	.5018	.442	.3768	.3059	.2288	.147
.32	.5152	.4539	.387	.3143	.2352	.1511
.33	.5283	.4656	.3971	.3226	.2415	.1552
.34	.5412	.4771	.4071	.3308	.2477	.1593
.35	.554	.4885	.4169	.3389	.2539	.1633
.36	.5665	.4997	.4266	.3469	.2599	.1672
.37	.5788	.5107	.4361	.3547	.2659	.1712
.38	.5909	.5216	.4455	.3624	.2718	.175
.39	.6028	.5322	.4548	.3701	.2775	.1788
.4	.6146	.5427	.4639	.3776	.2833	.1826
.41	.6261	.553	.4728	.3849	.2889	.1863
.42	.6374	.5632	.4816	.3922	.2944	.1899
.43	.6485	.5732	.4902	.3993	.2999	.1935
.44	.6595	.583	.4987	.4064	.3052	.197
.45	.6702	.5926	.5071	.4133	.3105	.2005
.46	.6808	.602	.5153	.4201	.3157	.2039
.47	.6911	.6113	.5234	.4267	.3208	.2073
.48	.7013	.6205	.5313	.4333	.3258	.2106
.49	.7113	.6294	.5391	.4397	.3307	.2139
.5	.7211	.6382	.5467	.4461	.3356	.2171
.51	.7307	.6469	.5542	.4523	.3403	.2203
.52	.7401	.6553	.5616	.4584	.345	.2234
.53	.7494	.6636	.5688	.4644	.3496	.2265
.54	.7585	.6718	.5759	.4702	.3541	.2295
.55	.7674	.6798	.5829	.476	.3585	.2324
.56	.7761	.6877	.5897	.4817	.3629	.2353
.57	.7847	.6953	.5964	.4872	.3671	.2382
.58	.7931	.7029	.603	.4927	.3713	.241
.59	.8013	.7103	.6094	.498	.3754	.2437

XI=	H(55)=	H(60)=	H(65)=	H(70)=	H(75)=	H(80)=
.6	.8094	.7175	.6157	.5032	.3794	.2464
.61	.8173	.7246	.6219	.5083	.3834	.2491
.62	.8251	.7316	.6279	.5134	.3872	.2516
.63	.8327	.7384	.6338	.5183	.391	.2542
.64	.8401	.7451	.6397	.5231	.3947	.2567
.65	.8474	.7516	.6453	.5278	.3983	.2591
.66	.8545	.758	.6509	.5324	.4019	.2615
.67	.8615	.7643	.6564	.537	.4054	.2639
.68	.8684	.7705	.6617	.5414	.4088	.2662
.69	.8751	.7765	.6669	.5457	.4121	.2684
.7	.8816	.7824	.672	.5499	.4154	.2706
.71	.8881	.7881	.677	.5541	.4186	.2728
.72	.8943	.7937	.6819	.5581	.4217	.2749
.73	.9005	.7993	.6867	.5621	.4248	.277
.74	.9065	.8047	.6914	.566	.4278	.279
.75	.9124	.8099	.6959	.5698	.4307	.281
.76	.9182	.8151	.7004	.5735	.4335	.283
.77	.9238	.8201	.7048	.5771	.4363	.2849
.78	.9293	.8251	.7091	.5806	.4391	.2867
.79	.9347	.8299	.7132	.5841	.4417	.2885
.8	.94	.8346	.7173	.5874	.4443	.2903
.81	.9451	.8392	.7213	.5907	.4469	.292
.82	.9502	.8437	.7252	.594	.4493	.2937
.83	.9551	.8481	.729	.5971	.4518	.2954
.84	.9599	.8524	.7327	.6002	.4541	.297
.85	.9646	.8566	.7363	.6031	.4564	.2986
.86	.9692	.8606	.7398	.6061	.4587	.3001
.87	.9737	.8646	.7433	.6089	.4609	.3016
.88	.9781	.8685	.7466	.6117	.463	.3031
.89	.9824	.8724	.7499	.6144	.4651	.3045
.9	.9866	.8761	.7531	.617	.4671	.3059
.91	.9907	.8797	.7562	.6196	.4691	.3073
.92	.9946	.8832	.7593	.6221	.471	.3086
.93	.9985	.8867	.7622	.6245	.4729	.3099
.94	1.0023	.89	.7651	.6269	.4747	.3111
.95	1.006	.8933	.7679	.6292	.4765	.3124
.96	1.0097	.8965	.7707	.6314	.4782	.3135
.97	1.0132	.8996	.7733	.6336	.4799	.3147
.98	1.0166	.9027	.7759	.6357	.4815	.3158
.99	1.02	.9056	.7785	.6378	.4831	.3169
1	1.0233	.9085	.7809	.6398	.4847	.318
1.01	1.0265	.9113	.7833	.6418	.4862	.3191
1.02	1.0296	.914	.7856	.6437	.4876	.3201
1.03	1.0326	.9167	.7879	.6455	.4891	.321
1.04	1.0355	.9193	.7901	.6473	.4904	.322
1.05	1.0384	.9218	.7922	.6491	.4918	.3229
1.06	1.0412	.9243	.7943	.6507	.4931	.3238
1.07	1.0439	.9266	.7963	.6524	.4943	.3247
1.08	1.0466	.929	.7983	.654	.4955	.3256
1.09	1.0492	.9312	.8002	.6555	.4967	.3264
1.1	1.0517	.9334	.802	.657	.4979	.3272
1.11	1.0541	.9355	.8038	.6585	.499	.3279
1.12	1.0565	.9376	.8056	.6599	.5	.3287
1.13	1.0588	.9396	.8072	.6612	.5011	.3294
1.14	1.0611	.9415	.8089	.6625	.5021	.3301
1.15	1.0633	.9434	.8105	.6638	.503	.3308
1.16	1.0654	.9453	.812	.665	.504	.3315
1.17	1.0674	.947	.8135	.6662	.5049	.3321
1.18	1.0694	.9488	.8149	.6674	.5057	.3327
1.19	1.0714	.9504	.8163	.6685	.5066	.3333

XI=	H(55)=	H(60)=	H(65)=	H(70)=	H(75)=	H(80)=
1.2	1.0733	.952	.8176	.6695	.5074	.3339
1.21	1.0751	.9536	.8189	.6706	.5082	.3344
1.22	1.0769	.9551	.8202	.6716	.5089	.3349
1.23	1.0786	.9566	.8214	.6725	.5096	.3355
1.24	1.0803	.958	.8225	.6734	.5103	.3359
1.25	1.0819	.9594	.8237	.6743	.511	.3364
1.26	1.0834	.9607	.8247	.6752	.5116	.3369
1.27	1.0849	.9619	.8258	.676	.5123	.3373
1.28	1.0864	.9632	.8268	.6768	.5128	.3377
1.29	1.0878	.9644	.8277	.6775	.5134	.3381
1.3	1.0892	.9655	.8287	.6782	.5139	.3385
1.31	1.0905	.9666	.8295	.6789	.5144	.3389
1.32	1.0918	.9677	.8304	.6796	.5149	.3392
1.33	1.093	.9687	.8312	.6802	.5154	.3396
1.34	1.0942	.9696	.832	.6808	.5158	.3399
1.35	1.0953	.9706	.8327	.6813	.5163	.3402
1.36	1.0964	.9715	.8334	.6819	.5167	.3405
1.37	1.0974	.9723	.8341	.6824	.517	.3407
1.38	1.0985	.9732	.8347	.6829	.5174	.341
1.39	1.0994	.9739	.8354	.6833	.5177	.3412
1.4	1.1004	.9747	.8359	.6838	.518	.3415
1.41	1.1013	.9754	.8365	.6842	.5183	.3417
1.42	1.1021	.9761	.837	.6845	.5186	.3419
1.43	1.1029	.9767	.8375	.6849	.5188	.3421
1.44	1.1037	.9774	.8379	.6852	.5191	.3423
1.45	1.1045	.9779	.8384	.6855	.5193	.3424
1.46	1.1052	.9785	.8388	.6858	.5195	.3426
1.47	1.1059	.979	.8392	.6861	.5197	.3427
1.48	1.1065	.9795	.8395	.6863	.5198	.3428
1.49	1.1071	.98	.8398	.6865	.52	.343
1.5	1.1077	.9804	.8401	.6867	.5201	.3431
1.6	1.1118	.9832	.8418	.6876	.5206	.3435
1.7	1.1133	.9836	.8415	.6868	.5198	.3431
1.8	1.1126	.9822	.8395	.6847	.5179	.342
1.9	1.1101	.9791	.8362	.6814	.5152	.3403
2	1.1062	.9748	.8317	.6773	.5118	.3381
2.1	1.1011	.9694	.8264	.6724	.5079	.3355
2.2	1.095	.9632	.8205	.6671	.5036	.3327
2.3	1.0881	.9564	.8139	.6613	.4989	.3297
2.4	1.0805	.949	.807	.6551	.4941	.3265
2.5	1.0725	.9411	.7997	.6488	.489	.3232
2.6	1.064	.933	.7922	.6422	.4839	.3198
2.7	1.0553	.9246	.7845	.6355	.4786	.3163
2.8	1.0463	.9161	.7767	.6288	.4733	.3128
2.9	1.0371	.9074	.7688	.622	.468	.3093
3	1.0278	.8986	.7609	.6152	.4627	.3058
3.1	1.0185	.8899	.7529	.6085	.4574	.3024
3.2	1.0091	.8811	.745	.6017	.4522	.2989
3.3	.9996	.8723	.7372	.5951	.447	.2955
3.4	.9903	.8636	.7294	.5885	.4419	.2921
3.5	.9809	.8549	.7216	.5819	.4368	.2888
3.6	.9716	.8463	.714	.5755	.4319	.2855
3.7	.9624	.8379	.7064	.5691	.427	.2823
3.8	.9533	.8295	.699	.5629	.4221	.2791
3.9	.9442	.8212	.6917	.5567	.4174	.276
4	.9353	.813	.6844	.5506	.4127	.2729
4.1	.9265	.8049	.6773	.5447	.4081	.2699
4.2	.9178	.797	.6703	.5389	.4037	.267
4.3	.9092	.7891	.6634	.5331	.3993	.2641
4.4	.9007	.7814	.6567	.5275	.3949	.2612

XI=	H(55)=	H(60)=	H(65)=	H(70)=	H(75)=	H(80)=
4.5	.8924	.7739	.65	.522	.3907	.2585
4.6	.8842	.7664	.6435	.5165	.3866	.2557
4.7	.8761	.7591	.6371	.5112	.3825	.2531
4.8	.8681	.7519	.6308	.506	.3785	.2504
4.9	.8603	.7448	.6246	.5009	.3746	.2479
5	.8526	.7378	.6186	.4958	.3708	.2454
5.1	.845	.731	.6126	.4909	.367	.2429
5.2	.8375	.7243	.6068	.4861	.3633	.2405
5.3	.8302	.7177	.601	.4814	.3597	.2381
5.4	.8229	.7112	.5954	.4767	.3562	.2358
5.5	.8158	.7048	.5899	.4722	.3527	.2335
5.6	.8089	.6985	.5845	.4677	.3493	.2313
5.7	.802	.6924	.5791	.4633	.346	.2291
5.8	.7952	.6863	.5739	.459	.3427	.2269
5.9	.7886	.6804	.5688	.4548	.3395	.2248
6	.7821	.6746	.5637	.4507	.3364	.2227
6.1	.7756	.6688	.5588	.4466	.3333	.2207
6.2	.7693	.6632	.5539	.4426	.3303	.2187
6.3	.7631	.6576	.5492	.4387	.3273	.2168
6.4	.757	.6522	.5445	.4349	.3244	.2149
6.5	.751	.6468	.5399	.4311	.3215	.213
6.6	.7451	.6416	.5353	.4274	.3187	.2111
6.7	.7392	.6364	.5309	.4237	.316	.2093
6.8	.7335	.6313	.5265	.4202	.3133	.2075
6.9	.7279	.6263	.5222	.4167	.3106	.2058
7	.7223	.6214	.518	.4132	.308	.2041
7.1	.7169	.6166	.5139	.4098	.3055	.2024
7.2	.7115	.6118	.5098	.4065	.3029	.2007
7.3	.7062	.6071	.5058	.4032	.3005	.1991
7.4	.701	.6025	.5018	.4	.298	.1975
7.5	.6959	.598	.498	.3969	.2957	.1959
7.6	.6908	.5935	.4941	.3938	.2933	.1943
7.7	.6859	.5891	.4904	.3907	.291	.1928
7.8	.681	.5848	.4867	.3877	.2887	.1913
7.9	.6762	.5805	.4831	.3847	.2865	.1898
8	.6714	.5763	.4795	.3818	.2843	.1884
8.1	.6667	.5722	.476	.379	.2821	.1869
8.2	.6621	.5682	.4725	.3762	.28	.1855
8.3	.6576	.5642	.4691	.3734	.2779	.1842
8.4	.6531	.5602	.4657	.3707	.2759	.1828
8.5	.6487	.5563	.4624	.368	.2739	.1814
8.6	.6444	.5525	.4592	.3653	.2719	.1801
8.7	.6401	.5487	.456	.3627	.2699	.1788
8.8	.6359	.545	.4528	.3602	.268	.1775
8.9	.6317	.5414	.4497	.3577	.2661	.1763
9	.6276	.5378	.4467	.3552	.2642	.175
9.1	.6235	.5342	.4436	.3527	.2624	.1738
9.2	.6195	.5307	.4407	.3503	.2605	.1726
9.3	.6156	.5273	.4377	.3479	.2588	.1714
9.4	.6117	.5239	.4348	.3456	.257	.1702
9.5	.6079	.5205	.432	.3433	.2553	.1691
9.6	.6041	.5172	.4292	.341	.2535	.1679
9.7	.6004	.5139	.4264	.3388	.2519	.1668
9.8	.5967	.5107	.4237	.3366	.2502	.1657
9.9	.5931	.5075	.421	.3344	.2486	.1646
10	.5895	.5044	.4183	.3323	.2469	.1635
11	.5593	.4778	.3958	.3139	.233	.1541
12	.5301	.4523	.3742	.2966	.22	.1454
13	.504	.4297	.3551	.2812	.2084	.1376
14	.4807	.4094	.3381	.2675	.1982	.1307

XI=	H(55)=	H(60)=	H(65)=	H(70)=	H(75)=	H(80)=
15	.4596	.3912	.3228	.2552	.1889	.1245
16	.4405	.3746	.3089	.2441	.1806	.1189
17	.4231	.3596	.2964	.234	.173	.1138
18	.4072	.3458	.2849	.2248	.1661	.1091
19	.3925	.3332	.2743	.2164	.1598	.1048
20	.379	.3215	.2646	.2087	.154	.1009
21	.3665	.3108	.2556	.2015	.1486	.0973
22	.3548	.3008	.2473	.1948	.1437	.0939
23	.344	.2914	.2395	.1887	.1391	.0908
24	.3339	.2827	.2323	.1829	.1347	.0879
25	.3244	.2746	.2255	.1775	.1307	.0852
26	.3154	.267	.2192	.1725	.127	.0826
27	.3071	.2598	.2132	.1677	.1234	.0803
28	.2991	.253	.2076	.1633	.1201	.078
29	.2917	.2466	.2023	.1591	.1169	.0759
30	.2846	.2406	.1973	.1551	.114	.0739
31	.2779	.2349	.1926	.1513	.1112	.072
32	.2715	.2294	.1881	.1477	.1085	.0702
33	.2655	.2243	.1838	.1444	.106	.0685
34	.2597	.2193	.1797	.1411	.1036	.0669
35	.2542	.2147	.1758	.1381	.1013	.0654
36	.249	.2102	.1721	.1351	.0991	.0639
37	.244	.2059	.1686	.1323	.097	.0626
38	.2392	.2018	.1652	.1297	.0951	.0612
39	.2346	.1979	.162	.1271	.0932	.06
40	.2302	.1942	.1589	.1247	.0913	.0587
41	.226	.1906	.1559	.1223	.0896	.0576
42	.2219	.1871	.1531	.12	.0879	.0565
43	.218	.1838	.1504	.1179	.0863	.0554
44	.2142	.1806	.1477	.1158	.0848	.0544
45	.2106	.1775	.1452	.1138	.0833	.0534
46	.2071	.1746	.1427	.1119	.0818	.0524
47	.2038	.1717	.1404	.11	.0805	.0515
48	.2005	.1689	.1381	.1082	.0791	.0506
49	.1974	.1663	.1359	.1065	.0779	.0498
50	.1943	.1637	.1338	.1048	.0766	.0489
51	.1914	.1612	.1317	.1032	.0754	.0482
52	.1886	.1588	.1297	.1016	.0743	.0474
53	.1858	.1565	.1278	.1001	.0731	.0466
54	.1831	.1542	.126	.0986	.072	.0459
55	.1806	.152	.1242	.0972	.071	.0452
56	.178	.1499	.1224	.0958	.07	.0446
57	.1756	.1478	.1207	.0945	.069	.0439
58	.1733	.1458	.1191	.0932	.068	.0433
59	.171	.1439	.1175	.0919	.0671	.0427
60	.1687	.142	.1159	.0907	.0662	.0421
62	.1657	.1394	.1138	.089	.0649	.0412
64	.1617	.136	.111	.0868	.0633	.0401
66	.1579	.1328	.1083	.0847	.0617	.0391
68	.1543	.1297	.1058	.0827	.0603	.0381
70	.1508	.1268	.1034	.0808	.0589	.0372
72	.1476	.124	.1011	.079	.0576	.0363
74	.1444	.1214	.099	.0773	.0563	.0355
76	.1414	.1188	.0969	.0757	.0551	.0347
78	.1386	.1164	.0949	.0741	.0539	.034
80	.1359	.1141	.093	.0726	.0528	.0333
82	.1332	.1119	.0912	.0712	.0518	.0326
84	.1307	.1098	.0895	.0698	.0508	.0319
86	.1283	.1077	.0878	.0685	.0498	.0313
88	.126	.1058	.0862	.0673	.0489	.0307

XI=	H(55)=	H(60)=	H(65)=	H(70)=	H(75)=	H(80)=
90	.1238	.1039	.0846	.0661	.048	.0301
92	.1216	.1021	.0831	.0649	.0472	.0296
94	.1195	.1003	.0817	.0638	.0463	.029
96	.1176	.0987	.0803	.0627	.0455	.0285
98	.1156	.097	.079	.0616	.0448	.028
100	.1138	.0955	.0777	.0606	.044	.0275

Danksagung

Herrn Prof. Dr. H. Ibach danke ich verbindlich für die Betreuung sowie für die Möglichkeit, die Arbeit im Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik durchführen zu können.

Besonderer Dank gebührt auch den Mitarbeitern des Labors für hochauflösende Elektronenspektroskopie, Herrn Dr. S. Lehwald und Herrn D. Bruchmann, für ihre unermüdliche Hilfs- und Diskussionsbereitschaft, und Frau U. Marx für die tatkräftige Unterstützung und die Anfertigung der Zeichnungen.

Herrn U. Linke danke ich für die hervorragende Präparation der gestuften Proben.

Den Mitarbeitern der mechanischen Werkstatt sei für die Anfertigung der Teile des Aufdampfofens und für ihre Hilfsbereitschaft bei Reparaturen gedankt.

Für die ausgeführten Photoarbeiten danke ich Frau R. Hoven.

Schließlich danke ich Frau D. Krüger für die sorgfältige Reinschrift der Arbeit.