

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	8
2 Die elektronische Bandstruktur von Festkörpern	11
2.1 Grundlagen der theoretischen Beschreibung: Das elektronische Vielteilchenproblem	11
2.1.1 Die Hartree- und die Hartree-Fock-Näherung .	17
2.1.2 Die lokale Dichtenäherung der Dichtefunktionaltheorie	18
2.1.3 Vielteilchenkorrelationseffekte und Lokalisation	23
Das Hubbardmodell	23
Lokalisierungseffekte	27
3 Experimentelle Methoden	31
3.1 Photoemissionsspektroskopie	31
3.1.1 Grundlagen der Photoemissionsspektroskopie .	31
3.1.2 Das Drei-Stufen-Modell der Photoemission .	34
3.1.3 Elektronische Oberflächenzustände	36
3.1.4 Elektronische Zustände der Rumpfniveaus .	38
3.2 Optische Eigenschaften und Reflexions-Anisotropie .	41
3.2.1 Die dielektrische Funktion	41
3.2.2 Reflexions-Anisotropie-Spektroskopie	43
Einführung	43
Das Drei-Phasen-Modell	45
3.3 Durchführung der Messungen	47

3.3.1	Probenpräparation	47
3.3.2	Apparatives	48
3.3.3	Numerische Analyse der Rumpfniveauspektren	50
4	Die indiumreiche (2×4)InP(001)-Oberfläche	53
4.1	Atomare und elektronische Struktur	54
4.1.1	Bekannte Messergebnisse und Vorhersagen der Theorie	54
4.1.2	Experimentelle Ergebnisse	60
Rumpfniveauspektroskopie	60	
Winkelauflgelöste Photoemissionsspektristik	64	
Diskussion und Vergleich mit der Theorie	67	
4.2	Reflexions-Anisotropie	73
4.2.1	Experimentelle Ergebnisse	73
4.2.2	Vergleich mit der Theorie	76
5	Die phosphorreiche (2×1)/(2×2)InP(001)-Oberfläche	85
5.1	MOVPE präparierte Oberflächen	87
5.1.1	Atomare Strukturmodelle	87
Die Wachstumsoberfläche	87	
Die <i>Zick-Zack</i> -Struktur	91	
5.1.2	Experimentelle Ergebnisse	94
Die (2×1)/(2×2)-Wachstumsoberfläche	94	
Die (2×1)/(2×2)- <i>Zick-Zack</i> -Struktur	105	
Die Übergangsphase von (2×1)/(2×2) zu (2×4)	108	
5.2	MBE präparierte Oberflächen	117
5.2.1	Reflexions-Anisotropie und Symmetrie reiner InP(001)-Oberflächen	117
5.2.2	Reflexions-Anisotropie und Symmetrie der Arsen-terminierten InP(001)-Oberfläche	123
5.3	Zusammenfassung der Ergebnisse und Diskussion	128
6	Die GaP(001)-Oberfläche	137
6.1	Atomare und elektronische Struktur: Überblick über bekannte Ergebnisse und Vorhersagen der Theorie	138
6.2	Experimentelle Ergebnisse	144

6.2.1	Die phosphorreiche $(2\times 1)/(2\times 2)$ GaP(001)-Oberfläche	144
	Symmetrie und Reflexions-Anisotropie	144
	Rumpfniveauspektroskopie	146
	Diskussion der Ergebnisse	146
6.2.2	Die phosphorreiche $(2\times 1)/(2\times 4)$ GaP(001)-Oberfläche	149
	Symmetrie und Reflexions-Anisotropie	149
	Rumpfniveauspektroskopie	151
6.2.3	Die galliumreiche (2×4) GaP(001)-Oberfläche	155
	Symmetrie und Reflexions-Anisotropie	155
	Reflexions-Anisotropie: Theorie und Experiment	158
	Rumpfniveauspektroskopie	159
6.3	Zusammenfassung der Ergebnisse	162
7	Zusammenfassung und Ausblick	167
A	Quantitative Auswertung der Augermessungen	173
	Abbildungsverzeichnis	176
	Tabellenverzeichnis	180
	Literaturverzeichnis	181