

Sc.

Oberflächenphysik des Festkörpers

Von Prof. Dr. rer. nat. Martin Henzler
Universität Hannover

und Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang Göpel
Universität Tübingen

unter Mitwirkung von
Dr. rer. nat. Christiane Ziegler, Tübingen

2., durchgesehene Auflage
Mit 374 Figuren



B. G. Teubner Stuttgart 1994

Inhalt

1	Einführung	17
1.1	Was ist Oberflächenphysik?	17
1.2	Entwicklung und Methodik der Oberflächenphysik . .	27
2	Experimentelle Voraussetzungen und Hilfsmittel	35
2.1	Teilchentransport im Ultrahochvakuum (UHV) . . .	35
2.2	Ultrahochvakuumtechnologie	41
2.2.1	Vakuum-Materialien	41
2.2.2	Einfache Bauteile	45
2.2.3	Pumpen	47
2.2.4	Druckmessung	52
2.2.5	Typischer Aufbau von UHV-Apparaturen	58
2.3	Herstellung definierter, einfacher Oberflächen	62
2.3.1	Präparation von Einkristallen	62
2.3.2	Herstellung von Aufdampfschichten	66
2.4	Häufig verwendete Spektrometerkomponenten	68
2.4.1	Übersicht	68
2.4.2	Elektronen- und Photonenquellen	69
2.4.3	Monochromatoren und Filter für Photonen und Elektronen	73
2.4.4	Detektoren	83
2.4.5	Neuterteilchen- und Ionenstrahl-Spektrometer . . .	84
3	Geometrische Struktur von Oberflächen	87
3.1	Übersicht über mögliche Anordnungen von Atomen an der Oberfläche	87
3.2	Mathematische Beschreibung von Kristall-Oberflächen	89
3.3	Experimentelle Verfahren und ihre prinzipiellen Grenzen	97
3.4	Direkte Abbildung der Oberfläche	103

3.5	Beugungsbilder von zweidimensionalen periodischen Strukturen	124
3.6	Beugung mit Elektronen-, Röntgen- und Atomstrahlen	131
3.7	Auswertung des Beugungsbildes: Periodizität und Intensität	147
3.8	Defektstrukturen	159
3.8.1	Kinematische Näherung	159
3.8.2	Regelmäßige Anordnungen	163
3.8.3	Unregelmäßige Anordnungen	167
3.8.4	Übersicht über Meßmöglichkeiten mit LEED	175
3.8.5	Defektanalyse mit Hilfe der Beugung von Atomstrahlen	177
3.9	Strukturuntersuchung mit Ionenstrahlen	179
4	Elektronische und vibronische Struktur von Oberflächen	191
4.1	Elektronische und vibronische Oberflächenzustände .	192
4.1.1	Allgemeine Beschreibung	192
4.1.2	Grundlagen und Beispiele für die Berechnung von Oberflächenzuständen	203
4.2	Oberflächen im elektronischen Gleichgewicht	216
4.2.1	Austrittsarbeit	216
4.2.2	Raumladungsrandschichten in Halbleitern	230
4.3	Transportvorgänge und Nichtgleichgewichte	239
4.3.1	Definitionen und Begriffe	239
4.3.2	Leitung in Bändern von Oberflächenzuständen	243
4.3.3	Leitung in der Raumladungsschicht	244
4.3.4	Feldeffekt	249
4.3.5	Nichtgleichgewichte durch elektrische Felder und Beleuchtung	252
4.4	Übersicht über spektroskopische Methoden	254
4.5	Spektroskopie im Bereich der Rumpfelektronen	264
4.5.1	Röntgenphotoemission (XPS)	264
4.5.2	Streuexperimente mit Photoelektronen	277
4.5.3	Augerelektronenspektroskopie (AES)	283
4.5.4	Geometrische Abbildungen mit Photonen und Augerelektronen	285
4.5.5	Tiefenprofilanalyse	286
4.6	Spektroskopie im Bereich der Valenzelektronen	287

8 Inhalt

4.6.1	Grundlagen der UV-Photoemission (UPS)	287
4.6.2	Photoemission an Atomen und Molekülen	293
4.6.3	Photoemission an freien Oberflächen	298
4.6.4	Photoemission an Oberflächen mit Adsorbaten	305
4.6.5	Elektronenenergieverlustspektroskopie	312
4.6.6	Inverse Photoemission und Zwei-Photonen-Photoemission	318
4.6.7	Optische Absorption, Photoleitung und Photospannung	326
4.7	Schwingungsspektroskopie	332
4.7.1	Schwingungsspektroskopie mit Elektronen	334
4.7.2	Inelastische Atomstreuung	345
4.7.3	Infrarotabsorption	348
5	Wechselwirkungen von Teilchen mit Oberflächen	354
5.1	Bestimmung der Bedeckung und Adsorptionsrate von Teilchen an Festkörperoberflächen	355
5.1.1	Chemische Analyse der Oberfläche über Massenbestimmung desorbierender Teilchen	355
5.1.2	Chemische Analyse der Oberfläche über elektronische und vibronische Zustände	356
5.1.3	Charakterisierung von Oberflächenbedeckungen über unspezifische phänomenologische Meßgrößen	357
5.1.4	Bestimmung der Adsorptionsrate von Teilchen an Oberflächen	357
5.2	Übersicht verschiedener Festkörper/Gas-Wechselwirkungen	358
5.2.1	Problemstellung	358
5.2.2	Verschiedene Wechselwirkungsmechanismen zwischen Teilchen und Festkörperoberflächen	363
5.2.3	Thermodynamisch und kinetisch kontrollierte Experimente	366
5.2.4	Exzeßgrößen an der Oberfläche	375
5.3	Phänomenologische und statistische Thermodynamik von Festkörper/Gas-Wechselwirkungen	389
5.3.1	Adsorptionsisothermen	390
5.3.2	Thermodynamische Grundbegriffe	395
5.3.3	Thermodynamik allgemeiner Adsorptionssysteme	403
5.3.4	Volumenreaktionen und Festkörperthermodynamik	407

5.3.5	Statistische Mechanik von Adsorptionssystemen . . .	413
5.4	Kinetik von Festkörper/Gas-Wechselwirkungen . . .	420
5.4.1	Übersicht	420
5.4.2	Adsorption und Akkomodationskoeffizienten	421
5.4.3	Desorption	427
5.4.4	Oberflächendiffusion adsorbierter Teilchen	440
5.5	Thermodynamisch und kinetisch bestimmte Oberflächenstrukturen	444
5.5.1	Adsorbate auf inerter Unterlage	445
5.5.2	Verdampfung und Teilchentransport an freien Festkörperoberflächen	445
5.6	Adsorption an Festkörperoberflächen	450
5.6.1	Übersicht	450
5.6.2	Physisorption	454
5.6.3	Chemisorption und Koordinationschemie	459
5.6.4	Chemisorption an Metallen	473
5.6.5	Chemisorption an idealen Halbleitern	482
5.6.6	Chemisorption an Halbleitern mit Defekten	499
6	Anwendungsbeispiele aus der allgemeinen Materialforschung	519
6.1	Die zentrale Problemstellung: Kontrollierte Grenzflächen	519
6.2	Sensorik	522
6.3	Katalyse	530
6.4	Anwendung dünner Schichten	534
6.5	Mikro- und Optoelektronik	538
6.6	Keramik und Hoch- T_c -Supraleitung	546
6.7	Molekularelektronik	548
6.8	Biotechnologie und Medizintechnik	553
7	Literatur	556
8	Anhang	587
8.1	Dreidimensionale Bandstruktur	587
8.2	Zoo der Festkörper-„Onen“	591
8.2.1	Phononen	591
8.2.2	Plasmonen	593

10 Inhalt

8.2.3	Exzitonen	593
8.2.4	Polaritonen	595
8.2.5	Magnonen	595
8.2.6	Solitonen	596
8.2.6.1	Solitonen in der Physik und Mathematik	596
8.2.6.2	Solitonen in organischen Materialien	597
8.2.7	Polaronen	598
8.2.7.1	Polaronen in anorganischen Materialien	598
8.2.7.2	Polaronen in halbleitenden Polymeren	599
8.2.8	Bipolaronen	600
8.3	Physikalische Größen, Einheiten und Naturkonstanten	600
8.3.1	Basisgrößen und Einheiten	600
8.3.2	Physikalische Größen im SI-System	601
8.3.3	Physikalische Konstanten im SI-System	604
8.3.4	Dezimale Vielfache und Teile von Einheiten	606
8.3.5	Druckdimensionen - Umrechnungsfaktoren	606
8.3.6	Energiedimensionen - Umrechnungsfaktoren	607
8.3.7	Kraftdimensionen - Umrechnungsfaktoren	608
8.3.8	Ladungsdimensionen - Umrechnungsfaktoren	608
8.3.9	Die Funktionen kT und RT in Abhängigkeit von der Temperatur	608
8.4	Dampfdrücke	609
8.5	Bildzeichen für die Vakuumtechnik	614
8.6	Gebräuchliche Oberflächenuntersuchungsmethoden	617
8.7	Erklärung der Abkürzungen	618
8.8	Bindungsenergien und Wirkungsquerschnitte für die Röntgenphotoemission	622
8.9	Periodensystem der Elemente	625
8.10	Auger-Elektronen-Energie	627
8.11	Spezifikationen ausgewählter Mikroanalysemethoden	628
	Sachverzeichnis	629