

Untersuchungen von
Stufenverteilungen
an der Si/SiO₂-Grenzfläche
mit HR-SPA-LEED

Vom Fachbereich Physik
der Universität Hannover
zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

von

Dipl. Phys. Peter Marienhoff
geboren am 14. Januar 1958
in Varel / Niedersachsen

Referent: Prof. Dr. M. Henzler

Koreferent: Prof. Dr. J. Graul

Tag der mündlichen Prüfung: 26.1.88

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	1
1. Einleitung	2
2. Die Apparatur	3
2.1 Funktionsweise der LEED-Anordnung	6
2.2 Beugungsgeometrie	19
2.3 Eigenschaften	20
3. Theorie zu den Auswertungen: Der Gitterfaktor	23
3.1 Klassifikation der Streuprofile von linearen Ketten	25
3.1.1 Die Terrassenbreitenverteilung	25
3.1.2 Der Algorithmus von Busch	31
3.1.3 Wenige Ebenen	31
3.1.4. Markoffprozesse	35
3.2 Spezielle Verteilungen	39
3.3 Zweidimensionales	47
3.4 Anpassungen	54
4. Die Si(100)-Fläche	57
4.1 Simulationen auf einer Modelloberfläche	57
4.2 Messungen	66
5. Die ebene 111-Fläche	73
6. Messungen an geneigten 111-Flächen	74
7. Schluß	80
Danksagung	83

Zusammenfassung

Untersuchungen von Stufenverteilungen an der Si/SiO₂-Grenzfläche

Die Beugung langsamer Elektronen an Einkristalloberflächen ist eine empfindliche Methode zur Messung von sowohl lateralen (ein- und zweidimensional) als auch vertikalen Rauigkeiten, wenn ein Spektrometer mit ausreichender Winkelauflösung verwendet wird. Die Information läßt sich durch eine Profilanalyse der LEED-Reflexe (SPA-LEED = spot profile analyzing low energy electron diffraction) gewinnen mit Hilfe der kinematischen Theorie der Beugung. Es werden verschiedene Modelle für Terrassenbreitenverteilungen auf linearen Gitterketten von Streuern vorgestellt, wobei sich die Terrassen auf zwei oder mehr Schichten verteilen können. Als besonders nützlich und verbreitet erweisen sich Markoffketten, die mikroskopisch dem Fall verschwindender Wechselwirkung zwischen den Einzelstufen entsprechen ("geometrische Verteilung").

Liegen die Messungen an zweidimensionalen Oberflächen vor, kann durch geeignete Integrationen der Profile eine Umrechnung auf lineare Atomketten erfolgen. Insbesondere für den Fall der statistischen Unabhängigkeit zwischen den Stufen in die verschiedenen kristallographischen Richtungen sowie für den gegensätzlichen Fall der Kreissymmetrie ergeben sich auch zweidimensionale analytische Ausdrücke für die Profildform.

Die Methode findet Anwendung auf die Grenzfläche Si/SiO₂. Messungen an verschiedenen industriell hergestellten Proben von (100)- und (111)-Silizium fanden statt. Die Oxiddicken variierten zwischen 10 und 50 nm, nach der Oxidation fanden verschiedene Temperungen statt. Die Auswertungen zeigen mittlere Stufenabstände im Bereich von 3 bis 19 nm und Rautiefen von 1.5 bis 2 Å innerhalb der instrumentell gegebenen Transferweite von 300 nm. In jedem Fall führten Temperungen zu deutlichen Vergrößerungen der Stufenabstände.

Die gemessenen Rauigkeiten sind kompatibel zu den Ergebnissen aus Beweglichkeits- und hochauflösenden TEM-Messungen.

Bei um 1.7° gegenüber der (111)-Fläche geneigten Proben wurden erstmals unter dem Oxid regelmäßige Stufenfolgen gefunden.

1. Einleitung

Technisch herstellbare Oberflächen von Kristallen sind weit entfernt vom Idealzustand. Sieht man von der Kontamination mit Fremdatomen ab, so besteht ein Hauptfehler darin, daß nicht eine einzelne Netzebene die Oberfläche bildet, sondern es i. a. kleine unregelmäßig geformte Flecken, die Terrassen, gibt, die durch Stufen voneinander getrennt sind. Die Stufenatome weisen eine geringere Bindung an das Kristallgitter auf als Atome im Innern von Terrassen, daher bilden sie Zentren für chemische oder elektrische Aktivitäten. Bei der Fertigung von Halbleiterbauelementen, besonders bei MOSFETs, sind sie sehr deshalb unerwünscht. Die Funktion des MOSFET beruht auf der Ausbildung eines leitenden "Kanals" zwischen zwei elektrischen Anschlüssen (Source, Drain) durch die elektrostatische Wirkung einer Steuerelektrode (Gate). Der Kanal bildet eine Gegenelektrode zum Gate und besteht aus quasifreien Ladungsträgern, die sich in einer Schicht der Dicke von etwa 2 nm unter dem Oxid ansammeln. In der klassischen Theorie liegt das Maximum der Ladungsträgerkonzentration exakt an der Grenzfläche, und auch in der quantenmechanischen Beschreibung wird es um nur 1 nm ins Innere verschoben. Ein Stromfluß durch den Kanal (parallel zur Oberfläche) wird daher an allen Grenzflächenfehlern empfindlich gestreut: Stufen (neben geladenen Störstellen und Relaxationen zum Abbau der mechanischen Verspannungen, die das Oxid auf das Silizium ausübt) wirken sich z.B. in einer Verringerung der Beweglichkeit der Ladungsträger aus. So mußte bisher jede Optimierung des Herstellungsprozesses durch Messung der erzielten elektrischen Eigenschaften^{1 2} gewonnen werden. Allerdings ist die Stufendichte nur ein Faktor von vielen, die in die Beweglichkeit eingehen. Es ist daher sehr wünschenswert, auch direkte Methoden zu ihrer Bestimmung zu haben. Dazu muß die freigelegte Grenzfläche im UHV betrachtet werden. Direkt abbildende Verfahren mit der benötigten atomaren Auflösung sind erst kürzlich an TEM^{3 4} und Tunnelmikroskop⁵ vorgestellt worden, weiterhin wurden noch XPS an den 2p-Elektronen⁶ und schließlich die Beugung von Atomen oder Elektronen erfolgreich eingesetzt. Goodnick et al untersuchten Si(100)-Oberflächen mit 200 nm Oxid im HRTEM (2.5 Å Auflösung). Die erhaltenen Bilder zeigen einen abrupten Übergang vom Si-Gitter in das strukturelose Oxid mit gelegentlichen Stufen der Höhe 2.71 Å. Die Autoren ermitteln Schätzwerte der ersten Autokorrelationen durch direktes Abzählen aus den Fotos und wenden dann Autoregressionsmodelle zur Ermittlung des kompletten Rauigkeitsspektrums an. Sie finden, daß bereits die 1. Ordnung, die einem exponentiellen Abfall der Autokorrelation entspricht, die über mehrere Bilder gemittelten Korrelationen beschreibt. Als Parameter treten die beiden Mittelwerte Korrelationslänge und Rauhtiefe auf. Die häufig verwendete gaußförmige Verteilung wird dagegen explizit als schlechter Fit vorgeführt. Ourmazd et al benutzen epitaktisch stufenfrei gewachsene Flächen als Ausgang für ihre Oxidationen (1.5 und 8

¹ B.Deal, J.Electrochem.Soc. **121** (1974),1980

² T.Ando,A.B.Fowler,F.Stern, Rev.Mod.Phys. **54** (1982),437

³ S.M.Goodnick,Ferry,Wilmsen,Liliental, Fathy,Krivanek Phys.Rev.B **32** (1985),8171

⁴ A.Ourmazd,D.W.Taylor,J.A.Rentschler, Phys.Rev.Lett. **59**,2(1987)

⁵ R.M.Feenstra,G.S.Oehrlein, Appl.Phys.Lett **47**(2) (1985),98

⁶ Grunthaner,Maserjian,Vasquez,Lewis, J.Vac.Sci.Techn. **16**(1979),1443

nm) und fanden eine richtungsabhängige Besonderheit in der ersten Oxidlage, die sie als kristallines SiO_2 (Tridymit) deuten.

Bei beugenden Verfahren gehen die Stufen ein in das Winkelprofil der Streuintensität und sind als rein kinematischer Effekt durch ihre Periodizität von dynamischen Einflüssen zu unterscheiden. Im Gegensatz zu den abbildenden Verfahren sind auch große Korrelationen ohne Schätzfehler zu ermitteln. Eine Grenze wird nur durch das Auflösungsvermögen der verwendeten Beugungsapparatur gesetzt.

2. Die Apparatur

Der hohe Qualitätsstandard bei industriell hergestelltem thermischen Oxid auf Silizium bedeutet sehr hohe Anforderungen an das Meßinstrument in Bezug auf Halbwertsbreite und Dynamik des fokussierten Elektronenstrahls. Geeignete Fokussierungseigenschaften zeigte das Instrument von Wulfert ⁷, bei dem ein homogenes Magnetfeld zur Fokussierung eingesetzt ist. In seinen weiteren Eigenschaften mußte es modifiziert werden:

Ein Ablenkbereich von wenigstens einer Brillouinzone ist zu überstreichen bei ortsfestem Primärstrahl auf dem Kristall. Dies ist durch magnetische Ablenkung nicht zu erreichen, daher mußte ein Kondensatorsystem hinzugefügt werden.

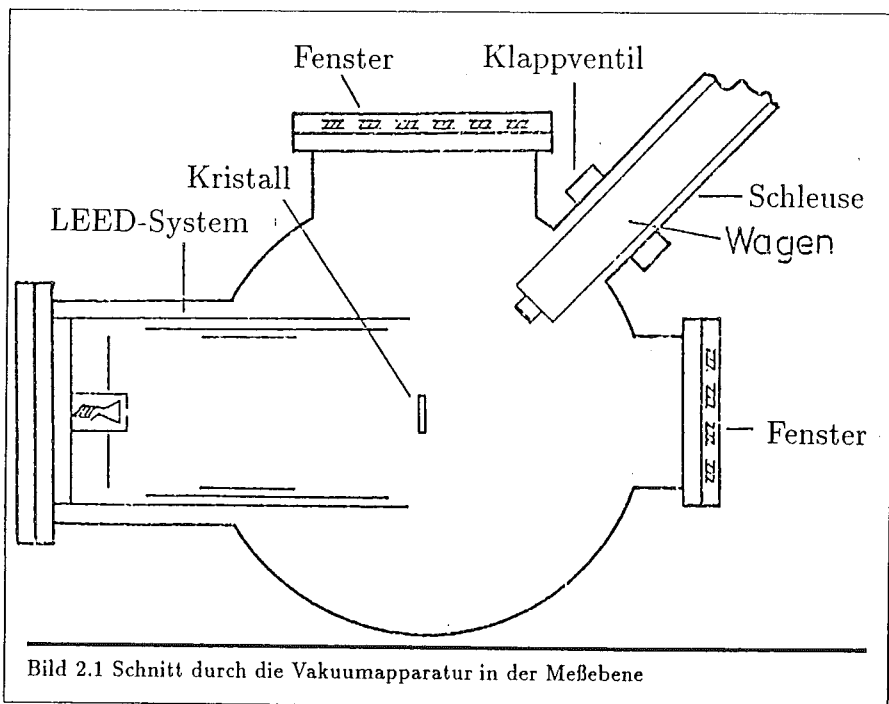
Ein Leuchtschirm in der Fokussierungsebene sollte das Auffinden und Indizieren der Beugungsreflexe vereinfachen. Damit wurde eine leistungsfähigere Elektronenkanone (mit auswechselbarem Filament) benötigt zum Sichtbarmachen des Beugungsbildes.

Das Gerät sollte mit konventionellen Vakuumapparaturen kompatibel sein, um weitere ergänzende Meßmethoden zur Verfügung zu haben. Dafür mußte die Fokusspule ins Vakuum verlegt werden. Das Gerät ist jetzt vollständig auf einem 6"-Flansch montiert.

Zur Freilegung der Zwischenfläche wurde die Methode von Hahn ⁸ weiterverwendet. Diese besteht aus chemischen Abätzen des Oxids in konzentrierter Flußsäure. Nach ca 1 Minute ist die (hydrophile) Oxidschicht entfernt, die Säure perlt mit 90° Kontaktwinkel von der Oberfläche. Es folgt Herausverdünnen der Säure mit Methanol und Einschleusen der Probe unter einem Tropfen Methanol, der eine erneute Bildung von 'native oxide' verhindern soll.

⁷ F.W.Wulfert, Dissertation Hannover 1982

⁸ P.O.Hahn, Dissertation Hannover 1981



Das Abpumpverhalten der Schleuse ist der kritische Punkt bei diesem Prozeß. Die beste Leistung wurde mit der folgenden Kombination erzielt: Die Schleuse wird mit einer Sorptionspumpe auf ölfreie 10^{-2} torr vorevakuiert. Dann wird ein (selbstkonstruiertes) 4.5"-Eckventil zu einer bereits laufenden Turbopumpe geöffnet, die Sorptionspumpe abgehängt. Bei einem Druck von 10^{-6} torr wird das 2.75"-Klappventil zum Rezipienten geöffnet und der Schleusenwagen mittels zweier Kobalt-Samarium-Magnete hineingeschoben. Innen übernimmt der Kristallhalter die Probe.

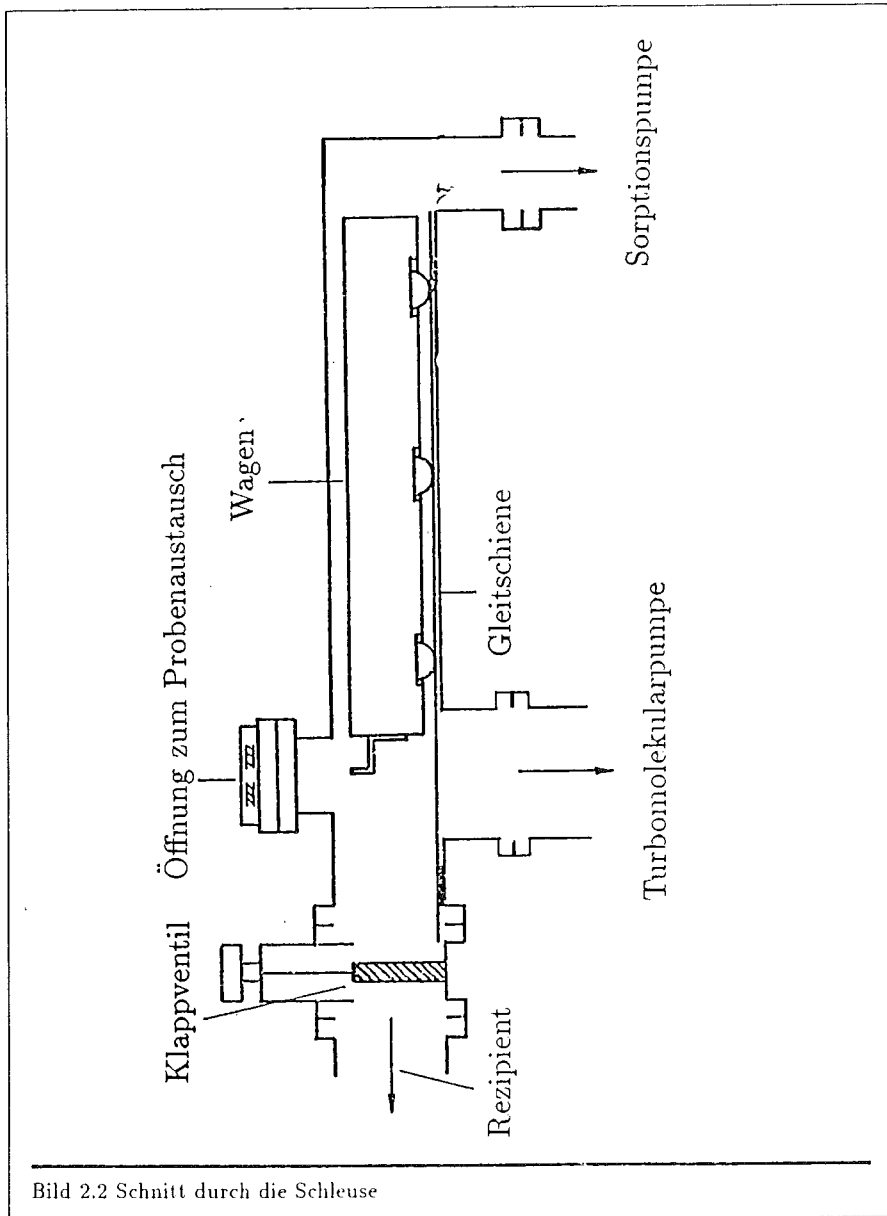


Bild 2.2 Schnitt durch die Schleuse

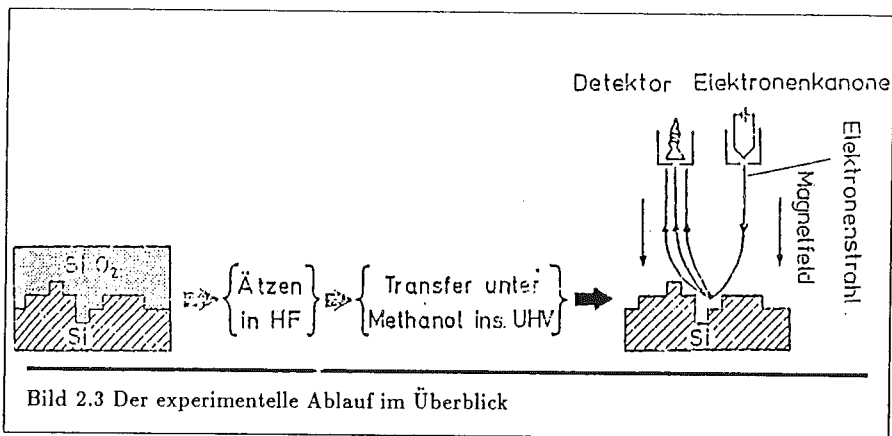


Bild 2.3 Der experimentelle Ablauf im Überblick

Der Kristallhalter erlaubt volle Drehung um $\varphi = 360^\circ$ um eine senkrechte Achse durch die Kristallmitte, außerdem eine Verkippung um $\theta = \pm 5^\circ$. Die Rotation des Kristalls kann von einem Schrittmotor erledigt werden. Er geht in Schritten von $1/100^\circ$ voran. Der Kristall ist durch zwei Saphirplättchen elektrisch von der Masse isoliert und kann auf Potential bis 2kV gelegt werden. Eine Kühlung über die Saphirplättchen wird durch einen kleinen Kupfertank für flüssigen Stickstoff ermöglicht, der über Röhren in Form von Spiralfedern gefüllt werden kann. Eine Heizung des Kristalls kann von einem Wolframfilament hinter der Probe erreicht werden. Reine Strahlungsheizung reicht bis 800°C , Elektronenbeschuss erreicht den Schmelzpunkt.

Untersucht man die eingebrachten Proben mit Augerelektronen-Spektroskopie, so zeigen sich neben dem dominierenden Siliziumpeaks noch Sauerstoff und Kohlenstoff mit jeweils einem Peak-to-Peak-Verhältnis von etwa 3% des Siliziums.

2.1 Funktionsweise der LEED-Anordnung

Allgemein gilt für die Bewegungsgleichung eines Elektrons im kombinierten elektrischen und magnetischen Feld :

$$m\dot{\vec{v}} = -e(\vec{v} \times \vec{B}) - e\vec{E} \quad 2.1.1$$

Das sind drei gekoppelte Differentialgleichungen für die Komponenten von \vec{v} . Legen wir unser Koordinatensystem so, daß die Anfangsrichtung der Elektronen in die z-Richtung zeigt, so gilt $v_x, v_y \ll v_z$ im gesamten gewünschten Bahnverlauf und es bietet sich an, von der Zeit t als unabhängigem Parameter überzugehen auf die Koordinate z . Mit den Differentialausdrücken

$$\dot{x} = x' \dot{z} \quad \text{und} \quad \ddot{x} = x' \ddot{z} + \dot{z}^2 x'' \quad 2.1.2$$

entsprechenden Gleichungen für y und mit dem Energiesatz

$$e\Phi = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(x'^2 + y'^2 + 1)\dot{z}^2$$

kann die Gleichung der z -Komponente

$$\ddot{z} = -\frac{e}{m}E_z + \frac{e}{m}\sqrt{\frac{2e\Phi}{m(1+y'^2+x'^2)}}(y'B_z + x'B_y)$$

eingesetzt werden in die beiden anderen, es bleiben zwei Differentialgleichungen für $x(z), y(z)$ übrig.

$$\begin{aligned} x'' &= \frac{1+y'^2+x'^2}{2\Phi}(x'E_z - E_x) - \sqrt{\frac{e(1+y'^2+x'^2)}{2m\Phi}}(y'B_z - (1+x'^2)B_y + x'y'B_x) \\ y'' &= \frac{1+y'^2+x'^2}{2\Phi}(y'E_z - E_y) + \sqrt{\frac{e(1+y'^2+x'^2)}{2m\Phi}}(x'B_z - (1+y'^2)B_x + x'y'B_y) \end{aligned} \quad 2.1.3$$

Mit diesen Gleichungen kann bei bekannten Feldern die Trajektorie sofort vom Rechner numerisch (Runge-Kutta-Gill-Verfahren) konstruiert werden. Zur analytischen Betrachtung soll nun die "paraxiale" Näherung benutzt werden. Sie geht davon aus, daß nur achsennahe und nicht stark geneigte Bahnen vorliegen und behält in den Bewegungsgleichungen nur Terme bis ersten Grades in x, y, x', y' .

Zur Orientierung zeigt Bild 2.4 den Aufbau der gesamten Beugungsanordnung. Die lange Spule erzeugt ein weitgehend homogenes Magnetfeld in z -Richtung, das den gesamten Bereich der Elektronenbewegung erfüllt und zur Fokussierung der Elektronen aus dem Filament der Elektronenkanone auf die Eintrittsblende des Channeltrons dienen soll. Die Elektronenkanone ist von Scheithauer⁹ übernommen, die gesamte Beschleunigung der Elektronen findet auf einem Wegstück unter 1 mm statt und soll hier nicht weiter betrachtet werden. Kanone und Detektor haben einen Abstand von $2y_0 = 30$ mm, der Kristall ist im Abstand von $z_0 = 180$ mm davor montiert. Wie aus den exakten Bahngleichungen folgt, werden die besten Abbildungseigenschaften bei möglichst symmetrischen Bahnen erreicht.

⁹ U.A.Scheithauer, Dissertation Hannover 1986

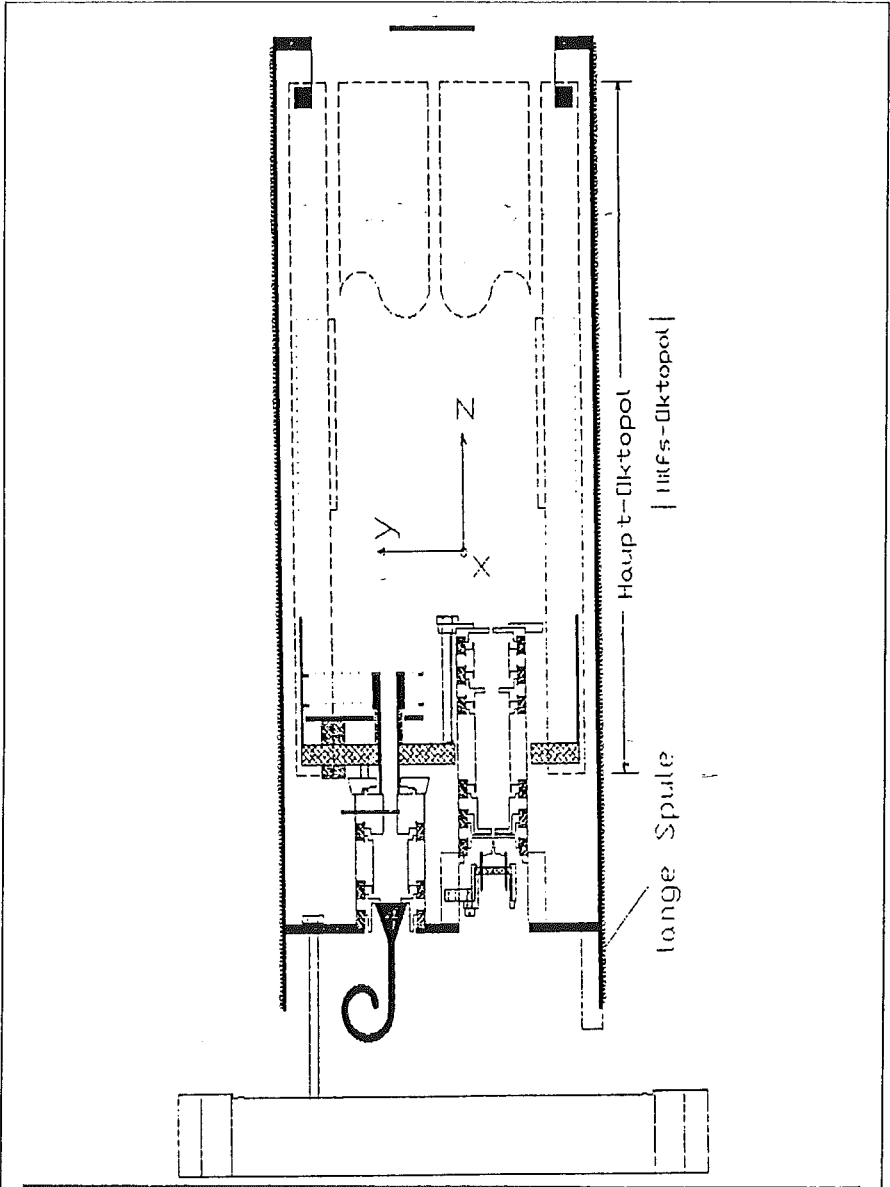


Bild 2.4 Schnitt durch das magnetisch fokussierte SPALD

Für die Einfädung des Spiegelreflexes in den Detektor gibt es zwei Möglichkeiten: Neigung von Kanone und Detektor um einen genau definierten Winkel in x-Richtung oder ein elektrisches Querfeld. Die erste Möglichkeit erschien mechanisch nicht unproblematisch zu sein. Ein elektrisches Querfeld beliebiger Richtung kann mittels einer im Institut entwickelten Anordnung von 8 Platten auf einem regelmäßigen Oktopol erzeugt werden.

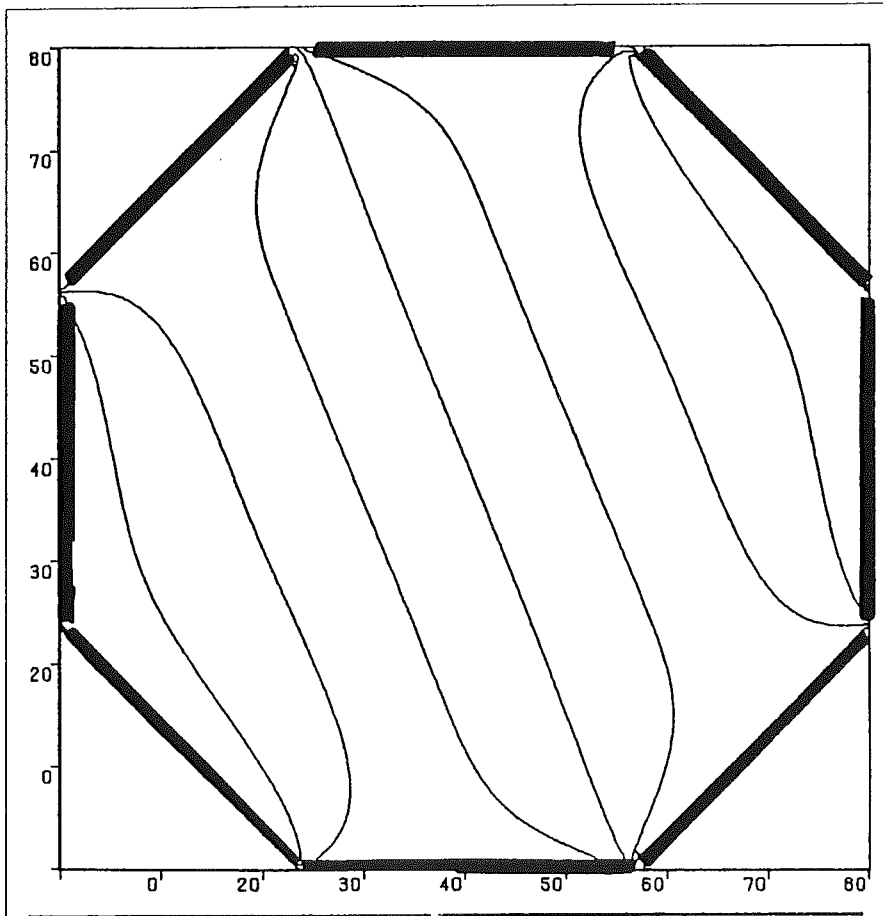
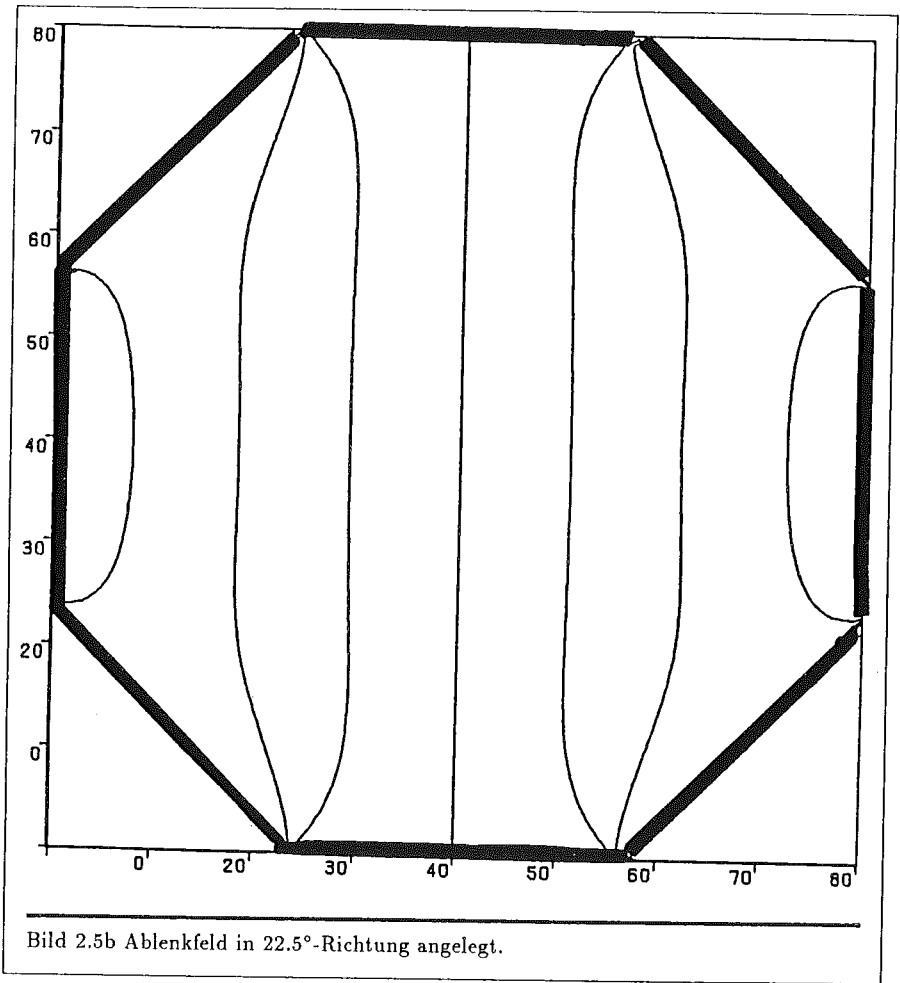


Bild 2.5a Querschnitt durch den Ablenkcondensator (Oktopol) mit durch Relaxation berechneten Potentialverlauf für ein Ablenkkfeld in x-Richtung.



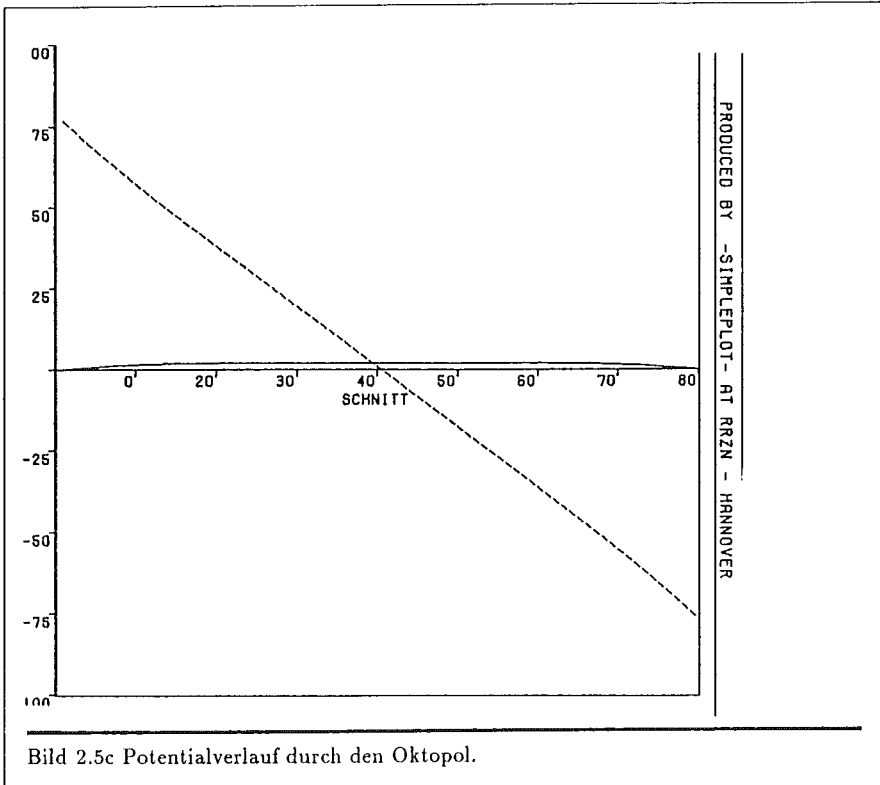


Bild 2.5c Potentialverlauf durch den Oktopol.

Die Bilder 2.5 zeigen, daß ein großer nutzbarer Bereich besteht, in dem die Abweichungen vom idealen Ablenkpoteential $\Phi = -E_x x - E_y y$ sehr gering sind. Die Elektronen sollen jetzt praktisch in ihrem gesamten Bahnverlauf dieses Ablenkpoteential zusätzlich zum konstanten $\Phi_0 = eU_0$ erfahren. Mit den Abkürzungen

$$E_{x,y} = \frac{E_{x,y}}{2\Phi_0} \quad , \quad B_{x,y,z} = \sqrt{\frac{e}{2m\Phi_0}} B_{x,y,z}$$

wird die paraxiale Näherung von Gleichung 2.1.3

$$\begin{aligned} x'' &= (-E_x \pm B_y) + y'(\mp B_z) + x(-2E_x^2 \pm E_x B_y) + y(-2E_x E_y \pm E_y B_y) \\ y'' &= (-E_y \pm B_x) + x'(\pm B_z) + x(-2E_x E_y \mp E_x B_x) + y(-2E_y^2 \mp E_y B_x) \end{aligned} \quad 2.1.4$$

Dabei gilt das obere Vorzeichen für den Hinweg zum Kristall, das untere für den Rückweg.

Es liegt ein inhomogenes lineares gekoppeltes Differentialgleichungssystem 2. Ordnung mit konstanten Koeffizienten vor. Die Lösung ist am einfachsten mittels der Laplacetransformation zu ermitteln. Diese ergibt eine Summe der partikulären Lösung (Ablenkung) mit den 4 homogenen Bestandteilen (Fokussierung), deren Anteile durch 4 Anfangswerte (x_0, y_0, x'_0, y'_0) gegeben ist. Nichtprimitive homogene Lösungen gibt es nur, falls die Koeffizientendeterminante verschwindet (Eigenwerte):

$$s^4 + ps^2 + qs = 0$$

$$p = B_z^2 + 2E_x^2 + 2E_y^2 \pm E_y B_x \mp E_x B_y \quad q = -B_z(E_x B_x + E_y B_y)$$

Außer $s_0 = 0$ gibt es drei weitere Nullstellen. Entwickelt sei die Cardanische Lösung

$$\sqrt[3]{-\frac{q}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2}} \approx \pm \sqrt{\frac{p}{3}} - \frac{q}{2p}$$

Bei typischen Geometrien weist diese Entwicklung einen relativen Fehler von nur 10^{-5} auf. Damit sind die drei restlichen Nullstellen

$$s_1 = -\frac{q}{p} \quad s_{2,3} = \frac{q}{2p} \pm i\sqrt{p}$$

Mit den drei Funktionen

$$f_1 = 1 - e^{qz/2p} \cos \sqrt{p}z \quad f_2 = z - e^{qz/2p} \frac{\sin \sqrt{p}z}{\sqrt{p}} \quad f_3 = e^{qz/2p} \frac{\sin \sqrt{p}z}{\sqrt{p}}$$

ergibt sich der analytische Ausdruck für die Bahn des Elektrons

$$\begin{aligned} x &= \frac{\pm E_y + B_x}{p} B_z f_2 + \frac{-E_x \pm B_y}{B_z^2} f_1 \\ &+ x_0 \left[1 + E_x \frac{B_x \pm 2E_y}{B_z} f_2 - E_x \frac{2E_x \mp B_y}{B_z^2} f_1 \right] + x'_0 \left[f_3 + E_y \frac{2E_y \pm B_x}{B_z^2} f_2 - \frac{q}{p^2} f_1 \right] \\ &+ y_0 \left[\pm E_y \frac{2E_y \pm B_x}{B_z} f_2 - E_y \frac{2E_x \mp B_y}{B_z^2} f_1 \right] + y'_0 \left[\mp \frac{f_1}{B_z} - E_x \frac{2E_y \pm B_x}{B_z^2} f_2 \mp \frac{1}{2} \frac{q}{B_z^3} f_3 \right] \\ y &= \frac{\mp E_x + B_y}{p} B_z f_2 + \frac{-E_y \mp B_x}{B_z^2} f_1 \\ &+ x_0 \left[E_x \frac{B_y \mp 2E_x}{B_z} f_2 - E_x \frac{2E_y \pm B_x}{B_z^2} f_1 \right] + x'_0 \left[\pm \frac{f_1}{B_z} - E_y \frac{2E_x \mp B_y}{B_z^2} f_2 \pm \frac{1}{2} \frac{q}{B_z^3} f_3 \right] \\ &+ y_0 \left[1 + E_y \frac{B_y \mp 2E_x}{B_z} f_2 - E_y \frac{2E_y \pm B_x}{B_z^2} f_1 \right] + y'_0 \left[f_3 + E_x \frac{2E_x \mp B_y}{B_z^2} f_2 - \frac{q}{p^2} f_1 \right] \end{aligned} \quad 2.1.5$$

Betrachten wir die zwei Strahlen, die bei $z=0$ den jeweils idealen Ort ($x_0 = 0; y_0 = \pm 15\text{mm}$) ohne Fehlwinkel ($x'_0 = y'_0 = 0$) kreuzen, den Detektor- und den Kanonenstrahl. Am Kristall (halber Fokus, $z_0 = \frac{\pi}{\sqrt{\rho}}$) wird dann die Position erreicht:

$$\begin{aligned}
 x(z_0) &= \frac{-2E_x \pm \pi E_y + \pi B_z \pm 2B_y}{B_z^2} + \frac{y_0 E_y}{B_z^2} (\mp 4E_x + 2B_y \pm \pi B_z + 2\pi E_y) \\
 y(z_0) &= \frac{\mp \pi E_x - 2E_y \mp 2B_z + \pi B_y}{B_z^2} + \frac{y_0 E_y}{B_z^2} (\mp 4E_y - 2B_z \pm \pi B_y - 2\pi E_x) + y_0 \\
 x'(z_0) &= \frac{2}{B_z} (1 \pm y_0 E_y) (B_x \pm E_y) \\
 y'(z_0) &= \frac{2}{B_z} (1 \pm y_0 E_y) (B_y \mp E_x)
 \end{aligned}$$

Wenn es sich um die Bestandteile eines einzigen reflektierten Strahls handeln soll, muß die Bedingung $x^{(+)} = x^{(-)}$ und $y^{(+)} = y^{(-)}$ erfüllt sein, also

$$\begin{aligned}
 \pi E_y + 2B_y + y_0 E_y (\pi B_z - 4E_x) &= 0 \\
 \frac{E_x}{B_z} + \frac{2}{\pi} \frac{B_x}{B_z} + y_0 E_y \left(\frac{4}{\pi} \frac{E_y}{B_z} - \frac{B_y}{B_z} \right) &= \frac{y_0}{z_0}
 \end{aligned}$$

Die Änderungen in x', y' müssen durch den Vorgang der Reflexion erzielt werden: die Normalkomponente zur reflektierenden Ebene wechselt ihr Vorzeichen, während der Rest ungeändert bleibt. Zugleich geht dz in $-dz$ über. Bezeichnet φ den Drehwinkel um die y -Achse und θ den Neigungswinkel um die x -Achse mit $-\vec{e}_z$ als Null, so ist der Kristall auf Stellung

$$\begin{aligned}
 \tan \varphi &= \frac{dx}{dz} = \frac{2}{B_z} (B_x + y_0 E_y^2) \\
 \tan \theta &= \frac{dy}{dz} = \frac{2}{B_z} (B_y + y_0 E_y E_x)
 \end{aligned}$$

zu bringen.

Ein Ablenkkfeld E_y erzeugt Astigmatismus am Ort des Detektors bereits in Termen 2. Grades, daher erscheint die Wahl $E_y = 0$ sinnvoll. Die obigen Bedingungen fordern dann $B_y = 0, \theta = 0, \frac{B_x}{B_z} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{y_0}{z_0} - \frac{E_x}{B_z} \right)$ und $\tan \varphi = \frac{2B_x}{B_z}$. Der Auftreffort am Kristall liegt bei $y \approx 0, x \approx \frac{\pi}{2} y_0 - \left(2 + \frac{\pi^2}{2} \right) \frac{E_x}{B_z^2}$, wandert also von $\frac{\pi}{2} y_0$ bei rein magnetischer bis $-\frac{2}{\pi} y_0$ bei rein elektrischer Ablenkung.

Vernachlässigt man bereits quadratische Terme wie $E_x B_x$ in Gleichung (2.1.4), sind alle Bildfehler verschwunden. Mit den so vereinfachten Gleichungen soll betrachtet werden, wie es sich auswirkt, daß nicht längs der gesamten Strecke z ein elektrisches Ablenkkpotential wirken kann: Bereiche um Kanone, Detektor und Kristall sollten aus konstruktiven Gründen frei von Ablenkkfeldern sein. Außer der bislang behandelten Grundablenkung soll auch der Winkelbereich um den Reflex herum abgetastet werden (Meßsweep). Dies ist

durch mechanisches Verdrehen des Kristalls möglich. Die Präzision der Elektronenoptik von etwa einer Bogenminute ist aber nicht einfach im Vakuum zu erreichen. Als Alternative bleibt ein Sweep mit dem Oktopol. Die Auftreffposition auf dem Kristall darf beim Sweep nicht geändert werden, und der Einfallswinkel in den Detektor muß senkrecht bleiben. Durch schrittweises Einfügen von Bereichen konstanter Ablenkkelder stellte ich fest, daß die einfachste Geometrie, die diese Forderungen erfüllen kann, aus einem großen mit eingefügten kleinen Ablenkbereich besteht.

Die Winkelgeschwindigkeit um die z-Achse $\omega = \frac{e}{m}B$ bleibt konstant in der paraxialen Näherung. Ihr Integral, die Bild Drehung $\vartheta = \omega t = \frac{\omega}{z'}z$ habe an den Ablenkkfeldgrenzen die Werte $\vartheta_1 \dots \vartheta_4$. Die Orte und Geschwindigkeiten auf Kristall bzw. Detektorblende ergeben sich zu

$$\begin{aligned}
 x'(z_0) &= S \frac{E_x}{B_z} \mp C \frac{E_y}{B_z} + s \frac{e_x}{B_z} \mp c \frac{e_y}{B_z} + 2 \frac{B_x}{B_z} \\
 y'(z_0) &= \pm C \frac{E_x}{B_z} + S \frac{E_y}{B_z} \pm c \frac{e_x}{B_z} + s \frac{e_y}{B_z} + 2 \frac{B_y}{B_z} \\
 x(z_0) &= C \frac{E_x}{B_z^2} \pm (T+S) \frac{E_y}{B_z^2} + c \frac{e_x}{B_z^2} \pm (t+s) \frac{e_y}{B_z^2} + \pi \frac{B_x}{B_z^2} \pm 2 \frac{B_y}{B_z^2} \\
 y(z_0) &= \mp (T+S) \frac{E_x}{B_z^2} + C \frac{E_y}{B_z^2} \mp (t+s) \frac{e_x}{B_z^2} + c \frac{e_y}{B_z^2} \mp 2 \frac{B_x}{B_z^2} + \pi \frac{B_y}{B_z^2} \pm y_0
 \end{aligned} \tag{2.1.6}$$

$$\begin{aligned}
 x'(2z_0) &= -2S \frac{E_x}{B_z} - 2s \frac{e_x}{B_z} - 4 \frac{B_x}{B_z} + 2 \tan \varphi \\
 y'(2z_0) &= -2S \frac{E_y}{B_z} - 2s \frac{e_y}{B_z} - 4 \frac{B_y}{B_z} + 2 \tan \theta \\
 x(2z_0) &= +2(T+S) \frac{E_x}{B_z^2} + 2(t+s) \frac{e_x}{B_z^2} - 4 \frac{B_x}{B_z^2} + 4 \frac{z_0}{\pi} \tan \theta \\
 y(2z_0) &= -2(T+S) \frac{E_y}{B_z^2} - 2(t+s) \frac{e_y}{B_z^2} + 4 \frac{B_y}{B_z^2} - 4 \frac{z_0}{\pi} \tan \varphi + y_0
 \end{aligned} \tag{2.1.7}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
 C &= \cos \vartheta_4 - \cos \vartheta_1 & c &= \cos \vartheta_3 - \cos \vartheta_2 \\
 S &= \sin \vartheta_4 - \sin \vartheta_1 & s &= \sin \vartheta_3 - \sin \vartheta_2 \\
 T &= \vartheta_4 - \vartheta_1 & t &= \vartheta_3 - \vartheta_2
 \end{aligned} \tag{2.1.8}$$

Die Linearität dieser Gleichung erlaubt es, einen Sweep unabhängig von der Grundablenkung zu betrachten und wie oben das Treffen von Detektor- mit Kanonenstrahl am gleichen Ort zu fordern. Man bekommt die Verknüpfung $e_{x,y} = -\frac{T+S}{t+s} E_{x,y}$. Die Forderung der Ortsfestigkeit beim Sweep heißt dann $\frac{C}{T+S} = \frac{c}{t+s}$. Der Änderungswinkel zum Kristall wird

$$\begin{aligned}
 \tan \varphi &= \left(S - s \frac{T+S}{t+s} \right) \frac{E_x}{B_z} \\
 \tan \theta &= \left(S - s \frac{T+S}{t+s} \right) \frac{E_y}{B_z}
 \end{aligned} \tag{2.1.9}$$

Numerisch ausgewählt wurden

$$\vartheta_1 = 45^\circ \quad \vartheta_2 = 70^\circ \quad \vartheta_3 = 115^\circ \quad \vartheta_4 = 165^\circ$$

$$\frac{T+S}{t+s} = 2.17 \quad S - s \frac{T+S}{t+s} = -0.38$$

Mit diesen Werten sollte ein ortsfester Sweep durch lineare Ansteuerung des inneren Oktopols mit der Transformation

$$e_x = \alpha E_x + \beta E_y \quad e_y = -\beta E_x + \alpha E_y$$

$$\alpha = -\frac{cC + (t+s)(T+S)}{c^2 + (t+s)^2} = -2.18$$

$$\beta = \frac{c(T+S) - C(t+s)}{c^2 + (t+s)^2} = 0.0005$$

erreicht werden. Experimentell wurde am Prototyp ermittelt: $\alpha = -1.90$, $\beta = 0.11$.

In den restlichen Bildern dieses Kapitels ist die Form der Elektronenbahnen wiedergegeben. Die Grundablenkung ist für den Fall dargestellt, die Probe am Ort $x=y=0$ zu treffen, die damit um die x -Achse um einen Winkel von 3.4° gedreht sein muß. Das erforderlichen ablenkende Magnetfeld beträgt $B_x/B = 5.14\%$, das elektrische Feld $E_x = 0.19/m \cdot \Phi$. Zusätzlich sind die Bahnen aufgenommen für Sweeps in positive und negative x - und y -Richtungen um etwa 0.5° entsprechend Ablenkungen in der Detektorebene von 3 mm.

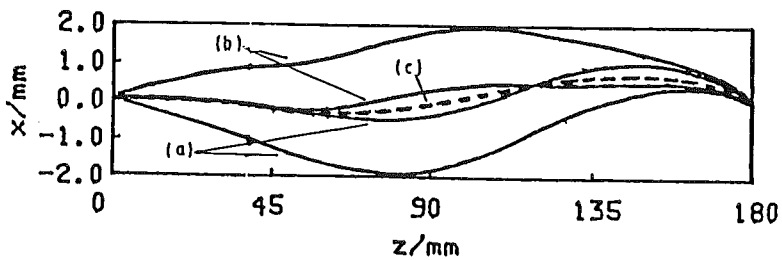


Bild 2.6a Projektion der Elektronenbahn auf die xz -Ebene. Kurve (c) ist die Grundablenkung, Kurven (a) bzw. (b) ergeben sich durch zusätzliches Anlegen eines Sweepfeldes in y -Richtung.

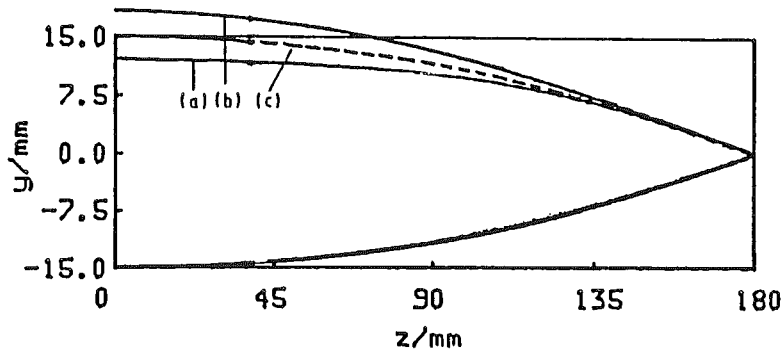


Bild 2.6b Projektion der obigen Elektronenbahn auf die yz -Ebene.

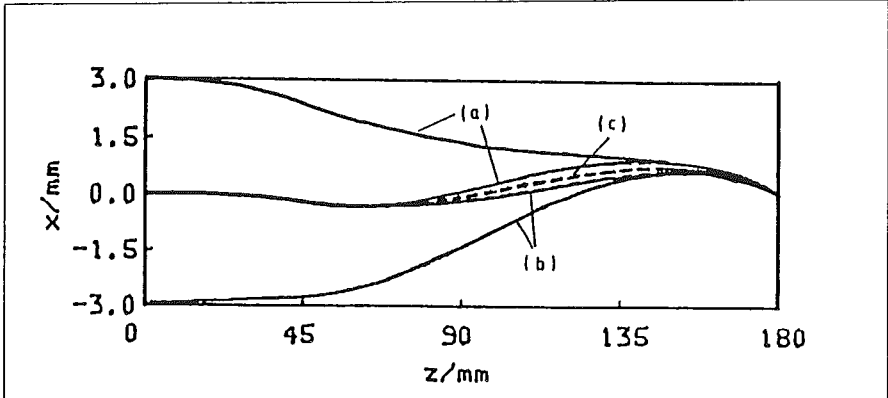


Bild 2.7a Projektion der Elektronenbahn auf die xz-Ebene. Kurve (c) ist die Grundablenkung, Kurven (a) bzw (b) ergeben sich durch zusätzliches Anlegen eines Sweepfeldes in x-Richtung.

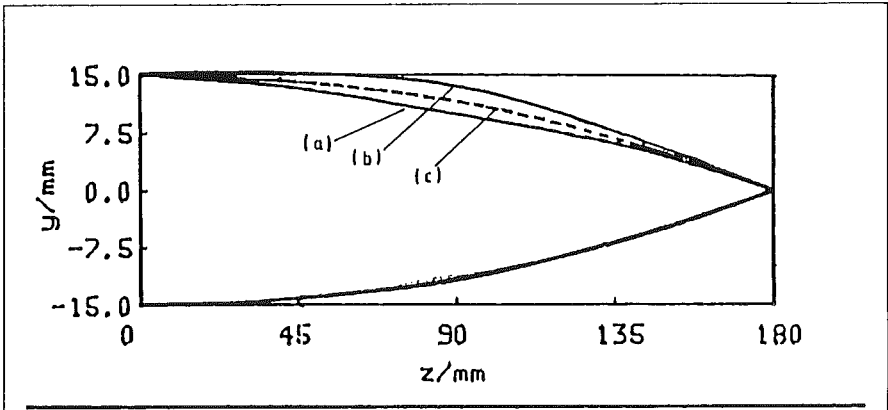


Bild 2.7b Projektion der obigen Elektronenstrahlen auf die yz-Ebene.

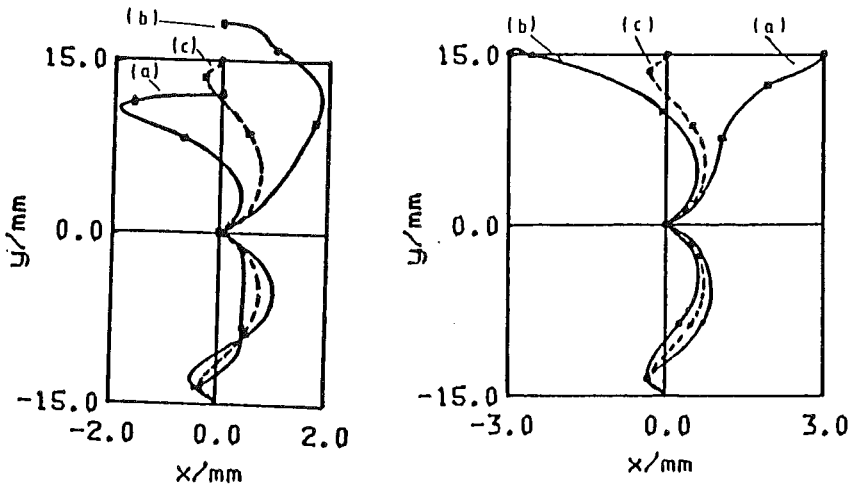


Bild 2.8 Projektion der Elektronenstrahlen auf die xy -Ebene.

2.2 Beugungsgeometrie

Die Gleichungen (2.1.6) für den Sweep des letzten Kapitels zeigen in x' und y' jeweils das gleiche Vorzeichen (und den gleichen Wert) für Elektronen- wie Detektorstrahl. Der Winkel zwischen den beiden Strahlen bleibt also konstant. Dies ist ein Unterschied zur 4-Gitter-LEED-Optik, bei der der Einfallswinkel konstant ist. Die bekannte Ewald-Konstruktion für die Position der Bragg-Reflexe muß damit modifiziert werden.

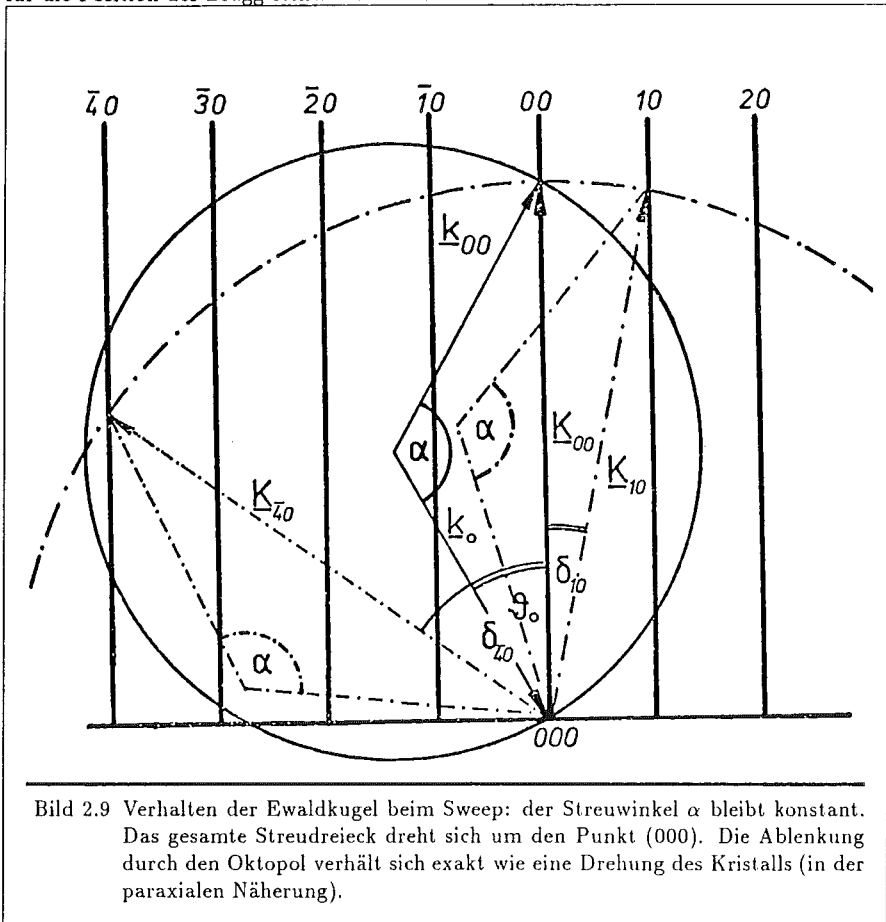


Bild 2.9 Verhalten der Ewaldkugel beim Sweep: der Streuwinkel α bleibt konstant. Das gesamte Streudreieck dreht sich um den Punkt (000). Die Ablenkung durch den Oktopol verhält sich exakt wie eine Drehung des Kristalls (in der paraxialen Näherung).

2.3 Eigenschaften

Die im letzten Kapitel angegebene Ablenkempfindlichkeit lässt sich experimentell bequem an Überstrukturen kontrollieren, wie sie bei Silizium nach Glühen im UHV auftreten: 7×7 an der (111)-Oberfläche und 2×1 an der (100).

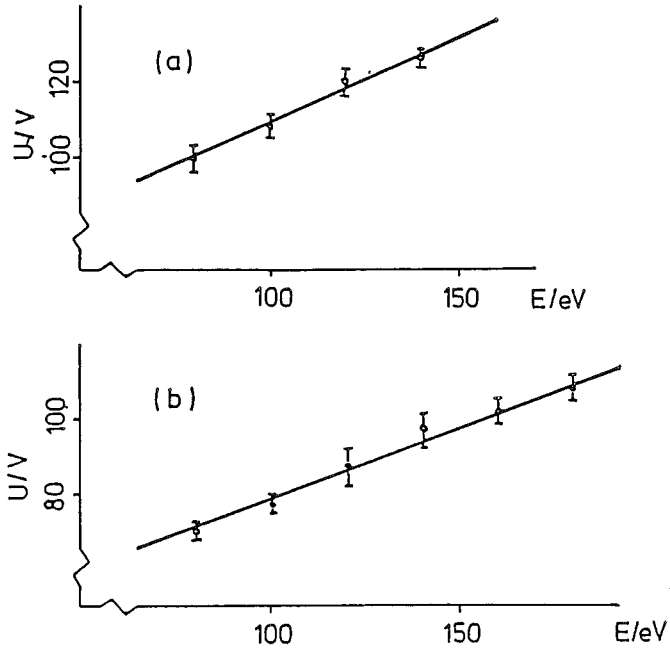


Bild 2.10 Gemessene Ablenkempfindlichkeiten für eine volle Brillouinzone bei Silizium(111) (oben) und unten für Si(100).

Ablenkempfindlichkeit	Silizium(111) :	$U = 10.6\sqrt{E(\text{in V})}$
	Silizium(100) :	$U = 7.9\sqrt{E(\text{in V})}$

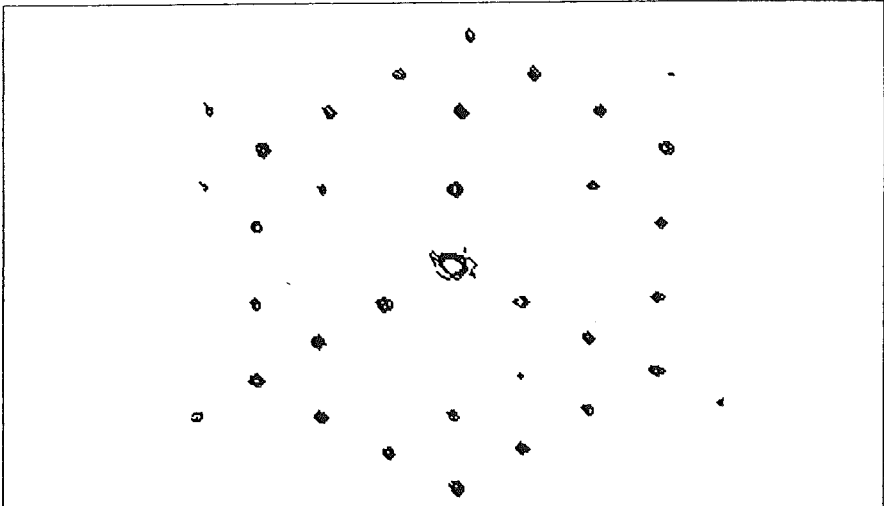


Bild 2.11 Höhenlinienbild einer 7×7 -Überstruktur auf der Si (111) bei einer Elektronenenergie von 80 eV.

Das 7×7 -Bild erlaubt eine gute Abschätzung der Nichtlinearität der Ablenkung : an der Brillouinzonengrenze wird sie etwa 10 % .

Das Einzelelektron mit bestimmter Wellenzahl \vec{k} ist praktisch als ebene Welle zu betrachten. Die inkohärente Überlagerung der einzelnen Elektronen erzeugt das Beugungsbild. Daher sind die statistischen Eigenschaften des Elektronenstrahls entscheidend für die Kohärenzlänge. Im wesentlichen sind drei Quellen für die Responsefunktion des Instruments entscheidend: Apertur des Strahls, Energieverteilung der Elektronen sowie endlicher Winkelbereich des Detektors. Die Größe der 1. Fresnelzone liegt im Bereich $\sqrt{1\text{Å} \cdot 18\text{cm}} = 4 \cdot 10^4 \text{Å}$. Es liegt noch Fraunhofer-Geometrie vor.

Der oben bereits erwähnte Astigmatismus tritt in geringem Maß auch ohne E_y auf, er ist am geringsten bei $x(t_0) = 0$ und bewirkt dabei Verbreiterungen von $y_0/1000 = 15\mu\text{m}$ in der Gaußschen Bildebene. Der "Kreis der kleinsten Verwirrung", auf den eine experimentelle Fokussierung erfolgt, dürfte etwa um den Faktor 2 kleiner sein. Obwohl ein Elektronenbündel bereits durch die Beschleunigungsspannung nur wenig Divergenz aufweist, begrenzt eine Blende an der Kanone die beleuchtete Kristallfläche auf nur etwa 4 mm im Durchmesser. Dieser Wert drückt den Öffnungsfehler auf $(0.01)^3 180\text{mm} = 0.2\mu\text{m}$. Einen wesentlicheren Einfluß hat die endliche Energiebreite einer thermischen Kathode. Nach Boersch ¹⁰ muß man bereits ab Kristallströmen von einigen nA mit einer energie-

¹⁰ H. Boersch, Z.Physik 139 (1954), 115

tischen Halbwertsbreite von 1eV rechnen (thermische Relaxation des Elektronenstrahls¹¹). Bei 100 eV bedeutet das einen chromatischen Zerstreungskreis von $\sqrt{\frac{0.5}{100} \frac{1}{100}} 360\text{mm} \approx 250\mu\text{m}$. Durch die Ablenkung wird er leicht elliptisch. Bei niedrigen Energien wird er neben der Größe der emittierenden Fläche auflösungsbestimmend sein. Beim Verlassen des optimalen Beugungsortes steigt der Astigmatismus kräftig: 5 mm rechts oder links von der mittleren Kristallposition werden $150\mu\text{m}$ erreicht. Wenn also ein größerer Bereich des Einfallswinkels überstrichen werden soll, ist es nötig, die Anode als Stigmator auszuführen. Störend wirken sich auch im Raum vorhandene zeitabhängige Magnetfelder (z.B. 50 Hz Netzbrumm). Sie erzeugen bei 100eV etwa 0.2% Verbreiterung und lassen sich durch aktive Gegenkopplung um den Faktor 10 verkleinern.

Generell ist vom Standpunkt der Bildfehler zu empfehlen, das fokussierende Feld möglichst kurz und möglichst in Kristallnähe anzuordnen. Dabei entspricht einem Magnetfeld von 5 Gauß über die vollen 180 mm in der Fokussierung einem von 15 Gauß über 20 mm. Der Öffnungsfehler sinkt dann auf etwa 1/10 seines ursprünglichen Wertes.

¹¹ Hartwig, Ulmer Z.Physik **173** (1963),294

3. Theorie zu den Auswertungen: Der Gitterfaktor

Die Bestimmung der Rückstreuintensität eines Elektronenstrahls von einem Kristallgitter wird wegen der starken Wechselwirkung der Elektronen mit dem Festkörper durch Vielfachstreuung bestimmt. Als geeignete Näherung hat sich dabei das "muffin tin"-Modell erwiesen, das kugelsymmetrische Atompotentiale durch ein konstantes Zwischenpotential verbindet. Dieses berücksichtigt pauschal durch einen imaginären Anteil die inelastischen Prozesse ("optische Potential"). Die ideale Oberfläche ist periodisch aus zweidimensionalen Einheitszellen aufgebaut. Senkrecht darunter liegen weitere Schichten, die jeweils getrennt behandelt werden müssen. Moritz et.al.¹² fanden Methoden zur Summation der Einzelwellen, die sehr rasch konvergieren (10 bis 20 Å Tiefe, wenige Nachbarzellen). Dieses Gebiet bezeichnen sie als Zone der Vielfachstreuung, die jeweils einem Gitterplatz zugeordnet ist. Bei einer gestuften Oberfläche streuen alle Innenplätze auf den Terrassen im wesentlichen gleichartig, nur die Kantenatome können abweichen. Rückstreuend wirken die zentralsymmetrischen inneren Schalen, die Atomkernpositionen selbst sind also die Streuzentren. Daher scheint LEED wesentlich bestimmter auf Stufen zu reagieren als etwa Atomstreuung, für die bereits die äußere verschmierte Elektronenhülle als "hard corrugated wall" wirkt. Für nicht zu kleine mittlere Terrassenbreiten kann man also schreiben, wenn die Gitterfunktion $g_l = \sum \delta(l)$ am Ort jeden Streuers eine δ - Funktion enthält:

$$\begin{aligned}
 I(k_x, k_y, k_z) &= \left| \sum_{l_{x,y,z}=-\infty}^{\infty} F_{(l)}(\vec{k}_{ein}, \vec{k}) g_l e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \right|^2 \\
 &= |F|^2 \sum_{l_{x,y,z}, l'_{x,y,z}=-\infty}^{\infty} g_l g_{l'} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_{l'})} \quad 3.0.1 \\
 &= |F(\vec{k}_{ein}, \vec{k})|^2 \sum_{l_{x,y,z}, j_{x,y,z}=-\infty}^{\infty} g_l g_{l+j} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_l}
 \end{aligned}$$

Der Strukturfaktor $|F|^2$ hängt von den Einfalls- und Ausfallsvektoren ab, während der Gitterfaktor nur vom Streuvektor bestimmt wird und sich durch Aufsummieren aller jeweils gleichen Abstände als Fouriertransformation einer dreidimensionalen Autokorrelation schreiben läßt. Bei N Streuern wird

$$\frac{I}{N} = G(u, v, s) = \sum_{m,n,h=-\infty}^{\infty} \Phi(m, n, h) e^{-2\pi i(u m + v n + s h)} \quad 3.0.2$$

$$\Phi(m, n, h) = \frac{1}{N} \sum_{z=-\infty}^{\infty} \sum_{y=-\infty}^{\infty} \sum_{x=-\infty}^{\infty} g(x, y, z) g(x+m, y+n, z+h) \quad 3.0.3$$

¹² H.Jagodzinski, W.Moritz, D.Wolf Surf.Sc. 77 (1978) 233

Durch Integration von G über eine volle Periode von u, v bzw. s erhält man speziell die Autokorrelationen mit l, m bzw. $h = 0$.

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 dv G(u, v, s) &= \sum_{m, n, h=-\infty}^{\infty} \Phi(m, n, h) e^{-2\pi i(u m + s h)} \int_0^1 e^{-2\pi i v n} dv \\
 &= \sum_{m, n, h=-\infty}^{\infty} \Phi(m, n, h) e^{-2\pi i(u m + s h)} \delta(n) \\
 &= \sum_{m, h=-\infty}^{\infty} \Phi(m, 0, h) e^{-2\pi i(u m + s h)} \\
 &= \sum_{m, h=-\infty}^{\infty} \phi(m, h) e^{-2\pi i(u m + s h)}
 \end{aligned} \tag{3.0.4}$$

$\phi(m, h)$ ist die Autokorrelation einer linearen Kette auf der Oberfläche (gemittelt bzw. alle Streifen hintereinandergehängt). Insbesondere gilt auch

$$\int_0^1 du \int_0^1 dv G(u, v, s) = 1 \tag{3.0.5}$$

Die gesamte kinematische Intensität ist für alle s normiert. Andererseits entsprechen die speziellen G Werte bei $u, v = 0$ entsprechenden Summen der Autokorrelation.

$$\begin{aligned}
 G(s) := G(0, 0, s) &= \sum_{h=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{m, n=-\infty}^{\infty} \Phi(m, n, h) \right) e^{-2\pi i s h} \\
 &= N \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_l \theta(l) \theta(h+l) e^{-2\pi i s h}
 \end{aligned} \tag{3.0.6}$$

Dabei wurde $\theta(h)$ als Mittelwert von g für die feste Höhe h definiert und die Größe $\sum_l \theta(l) \theta(h+l)$ kann als vertikale oder Bedeckungsautokorrelation $\Theta(h)$ angesehen werden. Liegen N Schichten vor, so bekommt man durch Wahl der Phasen $s_j = \frac{j}{N}$ ein nichtlineares Gleichungssystem zur Bestimmung der θ_j , das besonders für den Fall von sehr wenigen beteiligten Ebenen wichtig ist. Allgemein findet sich die Varianz von θ , Rauhtiefe oder MSHD (mean square height difference) $\sigma^2 = \theta^2 - \bar{\theta}^2$ genannt, direkt in $G(s)$ wieder durch die Relation $G''(s=0) = 2\sigma^2 s^2$.

3.1 Klassifikation der Streuprofile von linearen Ketten

Prinzipiell gibt es zwei Wege, zu mathematischen Beschreibungen der Streuintensität zu gelangen, die von stochastisch definierten linearen Anordnungen der Streuer erzeugt werden.

Zum einen kann man voraussetzen, daß jede mögliche Folge von Terrassenlängen mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftritt (keine Korrelation zwischen den Längen). Dann läßt sich für beliebige Terrassenbreitenverteilungen die zugehörige Autokorrelation bzw. Streuintensität konstruieren.

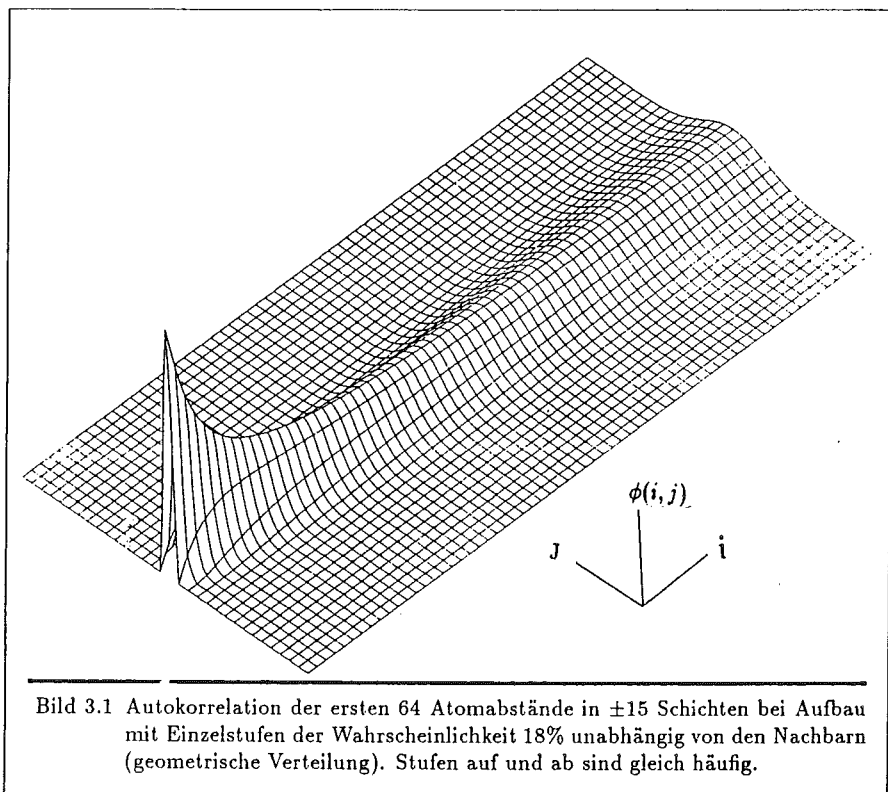
Zum andern kann man den stärker mikroskopischen Weg gehen, für verschiedene lokale Konfigurationen bedingte Wahrscheinlichkeiten zu formulieren, auf eine Stufe zu treffen. Die "Reichweite" gibt dabei die Anzahl von Gitterpunkten an, die in die bedingte Wahrscheinlichkeit explizit eingehen. Entferntere Korrelationen werden durch rein geometrische Fortsetzung erreicht. Die Annahme, daß bei der Entstehung der Stufen die ebenfalls lokalen atomaren Potentiale eine Hauptrolle spielen, macht diesen zweiten zum physikalischeren Ansatz.

Unabhängig davon ist in vertikaler Richtung eine langreichweitige Ordnung möglich. Normalerweise wird die MSHD (mean square height difference) proportional zum lateralen Abstand steigen. Äußere Zwangsbedingungen könnten die Maximalzahl beteiligter Ebenen begrenzen oder Konfigurationen, die sich weit von einer mittleren Ebene entfernen, mit einer Fensterfunktion unterdrücken (über die statistische Unterdrückung hinaus). Im k -Raum äußern sich solche Zwänge durch zusätzliche Deltafunktionen an den durch die Mittelebene gegebenen Positionen (Facettenstangen).

3.1.1 Die Terrassenbreitenverteilung

Trotz der physikalisch unklarerer Situation soll hier zunächst die erste Möglichkeit getestet werden, insbesondere sei der Fall betrachtet, daß alle an der Oberfläche beteiligten Ebenen gleichwertig sind, die gleiche Terrassenbreitenverteilung aufweisen; wie es z.B. bei einer leicht geneigten Oberfläche vorkommen kann. Die Kenntnis der Terrassenverteilung reicht dann aus zur Bestimmung der Beugungsintensität der Kette. Zunächst wurde zur Berechnung ein Computerprogramm¹³ benutzt, das die Wahrscheinlichkeiten direkt aufsummierte. Als Resultat ergibt sich eine Autokorrelation $\phi(m, h)$ wie in Bild 3.1.

¹³ M. Henzler Surf.Sci. **73** (1978),240



1984 gaben Pimbley/Lu¹⁴ ein Verfahren an, das die Summe formalisiert: Liegt am willkürlich gewählten Ursprung $(x,z) = (0,0)$ ein Atom, so ist die Autokorrelation $\phi(i, j)$ gegeben durch die Wahrscheinlichkeit, am Ort (i, j) ebenfalls einen Streuer vorzufinden. Sei zunächst $j=0$, so sind 0 bis $\lfloor \frac{i}{2} \rfloor$ zwischengefügte Terrassen möglich. Für den Fall keiner eingeschobenen Terrasse bildet $\gamma P(\gamma)$ normiert die Wahrscheinlichkeit, ein Atom in der Terrassenbreite γ anzutreffen und in $(\gamma - i)$ von γ Fällen liegen beide Atome auf der Terrasse.

$$\phi_0(i, 0) = \frac{\sum_{\gamma=i}^{\infty} \gamma P(\gamma) \frac{\gamma-i}{\gamma}}{\sum_{\gamma=1}^{\infty} \gamma P(\gamma)} = 1 - \frac{i + \sum_{\gamma=1}^{i-1} (i-\gamma) P(\gamma)}{\sum_{\gamma=1}^{\infty} \gamma P(\gamma)} \quad 3.1.1$$

Der Nenner stellt die mittlere Terrassenbreite $\bar{\Gamma}$ dar. Bei n eingeschobenen Terrassen gibt es $\binom{2n}{n}$ Reihenfolgen, Stufen hinauf und hinunter zu verteilen. Bezeichnet man das

¹⁴ J.M.Pimbley, T.M.Lu, J.Appl.Phys. 55(1) (1984) 182

Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten für Stufen hinauf zu hinunter mit α , dann bekommt man

$$\phi_n(i, 0) = \binom{2n}{n} \frac{1}{\sum_{\gamma=1}^{\infty} \gamma P(\gamma)} \frac{\alpha^n}{(\alpha+1)^n} \frac{1^n}{(\alpha+1)^n} \sum_{i_1=1}^{i+1-2n} \sum_{i_2=i_1+1}^{i+2-2n} \cdots \sum_{i_{2n}=i_{2n-1}+1}^i \left[1 - \sum_{\gamma=1}^{i_1-1} P(\gamma) \right] P(i_2 - i_1) P(i_3 - i_2) \cdots P(i_{2n} - i_{2n-1}) \left[1 - \sum_{\gamma=1}^{i-i_{2n}} P(\gamma) \right] \quad 3.1.2$$

Dabei sind i_1 bis i_{2n} die Orte der $2n$ Stufen. Insgesamt ergibt sich die Autokorrelation als Summe über die n . Die Fälle $j \neq 0$ bedeuten lediglich einzelne Stufen und damit innere Terrassen mehr. Die mögliche Zahl einzufügender Terrassen n kann nur noch von 0 bis $\lfloor \frac{i-j}{2} \rfloor$ laufen.

$$\phi_n(i, j) = \frac{1}{\Gamma} \frac{\alpha^j}{(\alpha+1)^j} \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{i-j}{2} \rfloor} \binom{2n+j}{n} \frac{\alpha^n}{(\alpha+1)^{2n}} \sum_{i_1=1}^{i+1-j-2n} \sum_{i_2=i_1+1}^{i+2-j-2n} \cdots \sum_{i_{2n}=i_{2n-1}+1}^i \left[1 - \sum_{\gamma=1}^{i_1-1} P(\gamma) \right] P(i_2 - i_1) P(i_3 - i_2) \cdots P(i_{2n+j} - i_{2n+j-1}) \left[1 - \sum_{\gamma=1}^{i+j-i_{2n}} P(\gamma) \right] \quad 3.1.3$$

Die Formel gilt für $j > 0$, für $j < 0$ ist überall $|j|$ anzugeben, und das α^j entfällt. Die Intensität ist die Fouriertransformierte der Autokorrelation, wobei negative i durch die Punktsymmetrie an $\phi(0, 0)$ zu bekommen sind. Da die Summen in obiger Gleichung die Form von Faltungen haben, vereinfachen sie sich im reziproken Raum zu Produkten. Bei den negativen j entfällt α^j ; $j = 0$ wurde als 1-Rest und damit ohne den Faktor $e^{-2\pi i s j}$ behandelt. Als Ergebnis geben Pimbley/Lu¹⁵ an

$$G(g, s) = \delta(g - n) + \frac{2}{\Gamma} \Re \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{(1+\alpha)^n} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1+\alpha^j}{(1+\alpha)^j} \binom{2n+j}{n} (e^{-2\pi i s j} - 1) \bar{P}_g^{2n+j-1} \bar{\xi}_g^2 \right\} \quad 3.1.4$$

Dabei wurde die Fouriertransformation der Terrassenverteilung abgekürzt mit

$$\bar{P}_g = \sum_{\gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \gamma} P(\gamma) \quad 3.1.5$$

¹⁵ J.M.Pimbley, T.M.Lu, J.Appl.Phys. 58(6) (1985) 2184

und der Beitrag der Randterrassen wird zu

$$\begin{aligned}\tilde{\xi}_g &= \sum_{\gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \gamma} \sum_{\Gamma=\gamma+1}^{\infty} P(\Gamma) = e^{-\pi i g} \sum_{\gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \gamma} \left(1 - \sum_{\Gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \Gamma} P(\Gamma) \right) \\ &= e^{-\pi i g} \frac{1 - \bar{P}_g}{1 - e^{-2\pi i g}} = \frac{1 - \bar{P}_g}{2i \sin \pi g}\end{aligned}\quad 3.1.6$$

Der Vorfaktor $e^{-\pi i g}$ kommt zustande, wenn die nach links bzw. rechts kumulierten Terrassenlängen gleichmäßig aufgeteilt werden, anstelle einer Richtung einen zusätzlichen Term in der Summe zuzuordnen. Der Wert bei $g = 0$ läßt sich durch direkte Taylorentwicklung der Exponentialfunktion bestimmen.

$$\bar{P}_g \approx 1 - 2\pi i g \bar{\Gamma} - \frac{4\pi^2}{2} g^2 (\bar{\Gamma}^2 + \sigma^2) \approx e^{-2\pi i g \bar{\Gamma}} \quad 3.1.6a$$

$$\tilde{\xi}_g \approx \frac{1 - 1 + 2\pi i g \bar{\Gamma}}{1 - 1 + 2\pi i g} = \bar{\Gamma} \quad 3.1.6b$$

Die Summe für G bildet bei konstantem j eine hypergeometrische Reihe¹⁶ mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned}G(g, s) &= \delta(g - n) + \\ &2\Re \left\{ \frac{\tilde{\xi}_g^2}{\bar{\Gamma}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1 + \alpha^j}{(1 + \alpha)^j} (e^{-2\pi i s j} - 1) \bar{P}^{j-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{(1 + \alpha)^{2n}} \bar{P}^{2n} \frac{(2n + j)!}{(n + j)! n!} \right\} \\ \text{mit} \quad \sum_n \dots &= 2^j \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha \bar{P}_g^2}{(1 + \alpha)^2}} \right)^{-j}}{\sqrt{1 - \frac{4\alpha \bar{P}_g^2}{(1 + \alpha)^2}}}\end{aligned}\quad 3.1.7$$

Die verbleibende Summe bildet 4 geometrische Reihen

$$\begin{aligned}G(g, s) &= \delta(g - n) + 2\Re \left\{ \frac{\tilde{\xi}_g^2}{\bar{\Gamma} \bar{P}_g \sqrt{1 - \frac{4\alpha \bar{P}_g^2}{(1 + \alpha)^2}}} \right. \\ &\left. \left(\frac{1}{\frac{W}{2 \exp(-2\pi i s) \bar{P}_g} - 1} - \frac{1}{\frac{W}{2 \bar{P}_g} - 1} + \frac{1}{\frac{W}{2\alpha \exp(-2\pi i s) \bar{P}_g} - 1} - \frac{1}{\frac{W}{2\alpha \bar{P}_g} - 1} \right) \right\}\end{aligned}\quad 3.1.8$$

¹⁶ Abramowitz/Stegun: Handbook of Mathematical Functions, Nr 15.1.13

$$W = (1 + \alpha) \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha \tilde{P}_g^2}{(1 + \alpha)^2}} \right)$$

Im Fall $\alpha \rightarrow \infty$ bleibt in (3.1.7) nur der $n=0$ Term und somit nur die geometrische Reihe. Dieser Fall wurde bereits von Pimbley/Lu angegeben und erwies sich für unsere leicht geneigten Proben als ausreichend.

$$G(g, s) = 2\Re \left\{ \frac{\tilde{\xi}_g^2}{\tilde{\Gamma}} \left(\frac{e^{-2\pi i s}}{1 - \tilde{P}_g e^{-2\pi i s}} - \frac{1}{1 - \tilde{P}_g} \right) \right\} \quad 3.1.9$$

Durch den Übergang auf kontinuierliche Variable

$$\phi(x, z) = \sum_{m, j = -\infty}^{\infty} \phi(m, j) \delta(x - m) \delta(z - j) \quad 3.1.10$$

fanden Pukite et al ¹⁷ eine noch etwas allgemeinere Form. Dabei benutzten sie, die Summen der γ bis ∞ zu erstrecken und die Auswahl der erlaubten Konfigurationen durch Multiplikation mit $\delta(x - \sum x_i) \delta(z - \sum z_i)$ zu erledigen. Die Darstellung der δ -Funktion durch

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dg e^{2\pi i g x} \quad 3.1.11$$

bewirkt eine Auftrennung in Einzelprodukte, wobei n hier alle Stufen (und nicht wie oben komplette Stufenpaare) durchzählt. Ohne Schwierigkeiten kann dabei noch eine Stufenhöhenverteilung $H(z_i)$ eingebracht werden. Die wichtigsten Fälle dafür sind

$$H(1) = 1 \quad \tilde{H} = e^{-2\pi i s} \quad \text{nur Einfachstufen aufwärts}$$

$$H(1) = \frac{\alpha}{\alpha + 1} \quad H(-1) = \frac{1}{\alpha + 1} \quad \text{Einfachstufen auf und ab} \quad 3.1.12$$

$$H(1) = \frac{\beta}{\beta + 1} \quad H(2) = \frac{1}{\beta + 1} \quad \text{Einfach- und Doppelstufen auf}$$

Damit ist also die Autokorrelation

¹⁷ P.R.Pukite, C.S.Lent, P.I.Cohen Surf.Sc. 161(1985) 39

$$\begin{aligned}
\phi(x, z) &= \frac{\sum_{\gamma=x}^{\infty} (\gamma - x) P(\gamma)}{\sum_{\gamma=1}^{\infty} \gamma P(\gamma)} \delta_y + \\
&\sum_{n=1}^{\infty} \int_{z_0=0}^{\infty} dx_0 \int_{z_1=-\infty}^{\infty} dz_1 \int_{x_1=0}^{\infty} dx_1 \int_{z_2=-\infty}^{\infty} dz_2 \dots \int_{z_n=-\infty}^{\infty} dz_n \int_{x_n=0}^{\infty} dx_n \\
&\cdot \xi(x_0) H(z_1) P(x_1) H(z_2) \dots H(z_n) \xi(x_n) \delta(x - \sum_{\gamma=1}^n x_i) \delta(z - \sum_{\gamma=1}^n z_i) \\
&= \phi_0 + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} ds e^{2\pi i s z} \bar{H}_s^n \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dg e^{2\pi i g x} \bar{\xi} \bar{P}^{n-1} \bar{\xi} \right)
\end{aligned} \tag{3.1.13}$$

und der Gitterfaktor

$$G(g, s) = 2\Re \left\{ \bar{\phi}_0 + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{H}^n \bar{\xi} \bar{P}^{n-1} \bar{\xi} \right\} \tag{3.1.14}$$

mit

$$\begin{aligned}
\bar{\phi}_0 &= \sum_{\Gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \Gamma} \left[1 - \frac{\Gamma}{\bar{\Gamma}} + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \sum_{\gamma=1}^{\Gamma-1} (\Gamma - \gamma) P(\gamma) \right] \\
&= \sum_{\Gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \Gamma} \left[1 - \frac{\Gamma}{\bar{\Gamma}} + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \sum_{\gamma=0}^{\infty} (\Gamma - \gamma + \gamma) e^{-2\pi i g \gamma} P(\gamma) \right] \\
&= \sum_{\Gamma=0}^{\infty} e^{-2\pi i g \Gamma} + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \sum_{\Gamma=0}^{\infty} \Gamma e^{-2\pi i g \Gamma} (\bar{P} - 1) \\
&= \delta(g + n) + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \frac{e^{-2\pi i g}}{(1 - e^{-2\pi i g})^2} (\bar{P} - 1)
\end{aligned}$$

Die Zerlegung von (3.1.9) findet sich hier also in allgemeinerer Form wieder. Phasenunabhängig streut $\bar{\phi}_0$, der zweite Term enthält \bar{H}_g in geometrischer Reihe. Für $g \neq 0$ ergibt der Vergleich die Identität.

$$\bar{\phi}_0 = \frac{\bar{\xi}_g^2}{\bar{\Gamma}} \frac{-1}{1 - \bar{P}_g} = \frac{-1 (1 - \bar{P}_g) e^{-2\pi i g}}{\bar{\Gamma} (1 - e^{-2\pi i g})^2} = \frac{1}{\bar{\Gamma}} \frac{1 - \bar{P}_g}{2 - 2 \cos 2\pi g}$$

und die zur Berechnung geeignete Form

$$G(g, s) = 2\Re \left\{ \delta(g + n) + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \frac{1 - \bar{P}_g}{2 - 2 \cos 2\pi g} + \frac{1}{\bar{\Gamma}} \frac{\bar{H} \bar{\xi} \bar{\xi}}{1 - \bar{H} \bar{P}} \right\} \tag{3.1.14a}$$

Analytisch einfachere Formen für die $\bar{\phi}_0, \bar{\xi}, \bar{P}$ ergeben sich, wenn man wie Pukite das Grundgitter herausfaltet. Bei Näherung der Summe für z.B. $\bar{\xi}$ durch ein Integral beträgt der Faktor vor dem $1 - \bar{P}_g$ nur $\frac{1}{2\pi i g}$. Man erhält die kontinuierliche Verbreiterung an jedem reziproken Gitterpunkt. Bei genügend engen Verbreiterungen braucht man den Beitrag der Nachbarreflexe nicht zu beachten.

3.1.2 Der Algorithmus von Busch

H. Busch konnte zeigen, daß bereits der Fall $s = \pi$ die Terrassenverteilung vollständig bestimmt¹⁸, sofern sie auf jeder Ebene gleich ist. Seine Formel ermöglicht sowohl eine Bestimmung der Intensität aus einer Terrassenverteilung als auch den umgekehrten Weg. Der Formalismus ist im Bild zusammengefaßt. An dieser Stelle ist ausnahmsweise φ_n die einfache Fouriertransformation des Gitterfaktors in Gegenphasestreue benachbarter Ebenen.

$$\begin{aligned}
 G(k) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varphi_n e^{2\pi i k n} \\
 \varphi_n &= \int_{-1/2}^{1/2} G(k) e^{-2\pi i k n} dk \\
 N_\gamma &= \frac{2\varphi_\gamma - \varphi_{\gamma-1} - \varphi_{\gamma+1}}{2(\varphi_0 - \varphi_1)} \\
 \tilde{N}_g &= \sum_{\gamma=1}^{\infty} N_\gamma e^{2\pi i g \gamma} \\
 \varphi_n &= \frac{\bar{\Gamma}}{4} - \frac{n}{2} - \sum_{j=1}^{n-1} (n-j) N_j \\
 N_n &= - \int_{-1/2}^{1/2} dg e^{-2\pi i g n} \frac{\tilde{P}_g}{1 + \tilde{P}_g} \\
 \tilde{P}_g &= \sum_{\gamma=1}^{\infty} P_\gamma e^{2\pi i g \gamma} \\
 P_\gamma &= - \int_{-1/2}^{1/2} dg e^{2\pi i g \gamma} \frac{\tilde{N}_g}{1 + \tilde{N}_g} \\
 \bar{\Gamma} &= \sum_{\gamma=1}^{\infty} \gamma P_\gamma = \frac{2\varphi_0}{\varphi_0 - \varphi_1}
 \end{aligned}$$

3.1.3 Wenige Ebenen

Im Fall von nur endlich vielen beteiligten Ebenen ist es vorstellbar, jeder Ebene eine eigene Terrassenbreitenverteilung zuzuordnen. Hier sei ein Dreischichtenmodell mit Einfachstufen betrachtet. Die gesamte Autokorrelation teilt sich sinnvoll in partielle Korrelationen auf,

¹⁸ H. Busch, Diplomarbeit 1983, Hannover

deren Nullpunkt in jeweils einer festen Höhe q liegt.

$$\phi(x, h) = \sum_q \phi_{q, q+h}(x) \quad 3.1.15$$

Die partiellen Korrelationen selbst lassen sich zerlegen in die Wahrscheinlichkeit, am Ort $\vec{0}$ ein Atom in Höhe h_0 zu finden und die bedingte Wahrscheinlichkeit, am Ort \vec{L} in der Höhe h_1 auf die Oberfläche zu treffen, falls am Ursprung die Höhe h_0 realisiert ist.

$$\phi_{h_0, h_1}(\vec{L}) = \theta(h_0) P_2(\vec{L}, h_1; h_0) \quad 3.1.16$$

Die partiellen Korrelationen sind linear abhängig: Die Summe über alle Höhen ergibt jeweils die bedingte Wahrscheinlichkeit 1, d.h.

$$\begin{aligned} \phi_{00} + \phi_{01} + \phi_{02} &= \theta_0 \\ \phi_{10} + \phi_{11} + \phi_{12} &= \theta_1 \\ \phi_{20} + \phi_{21} + \phi_{22} &= \theta_2 \end{aligned} \quad 3.1.17$$

Die Oberfläche sei reversibel, d.h. $\phi_{ki}(x) = \phi_{ik}(x)$. Dann läßt sich die Intensität berechnen zu

$$\begin{aligned} I(g, s) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2\pi i g x} [\phi_{00} + \phi_{11} + \phi_{22} + 2(\phi_{01} + \phi_{12}) \cos 2\pi s + 2\phi_{02} \cos(4\pi s)] \\ &= (\theta_0 + \theta_1 + \theta_2) \delta_g - 2(1 - \cos 2\pi s)(\bar{\phi}_{01} + \bar{\phi}_{12}) - 2(1 - \cos 4\pi s) \bar{\phi}_{02} \end{aligned} \quad 3.1.18$$

Da beim Aufbau der Terrassen die mittlere Ebene stets durchlaufen werden muß, kann man mit α = Wahrscheinlichkeit für Stufe zur obersten Fläche, β zur unteren schreiben

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{02} &= 2\beta \Re \left[\bar{\xi}_0 \bar{P}_1 \sum_{n=0}^{\infty} ((\alpha \bar{P}_0 + \beta \bar{P}_2) \bar{P}_1)^n \bar{\xi}_2 \right] \\ \bar{\phi}_{01} &= 2\Re \left[\bar{\xi}_0 \sum_{n=0}^{\infty} ((\alpha \bar{P}_0 + \beta \bar{P}_2) \bar{P}_1)^n \bar{\xi}_1 \right] \\ \bar{\phi}_{12} &= 2\beta \Re \left[\bar{\xi}_1 \sum_{n=0}^{\infty} ((\alpha \bar{P}_0 + \beta \bar{P}_2) \bar{P}_1)^n \bar{\xi}_2 \right] \end{aligned} \quad 3.1.19$$

Für $g \neq 2\pi n$ liegen wieder einfache geometrische Reihen vor, für $g \rightarrow 0$ betrachten wir die Taylorentwicklung:

$$\bar{P}_k(g) \approx 1 - 2\pi i g \bar{\Gamma}_k - \frac{4\pi^2}{2} g^2 (\bar{\Gamma}_k^2 + \sigma_k^2) \approx e^{-2\pi i g \bar{\Gamma}_k} \quad 3.1.20$$

$$\tilde{\xi}_k \approx \bar{\Gamma}_k \quad 3.1.21$$

$$\tilde{\phi}_{hk} \approx \theta_h \bar{\Gamma}_k 2\Re \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-2\pi i g (\bar{\Gamma}_h - \bar{\Gamma}_k)n} \right] \approx \frac{\theta_h \bar{\Gamma}_k}{\bar{\Gamma}_h + \bar{\Gamma}_k} \delta(g) \quad 3.1.22$$

Zusammengefaßt erhalten die partiellen Korrelationen

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{02} &= 2\beta\Re \left[\frac{\tilde{\xi}_0 \tilde{P}_1 \tilde{\xi}_2}{1 - (\alpha \tilde{P}_0 + \beta \tilde{P}_2) \tilde{P}_1} \right] (1 - \delta_g) + \theta_0 \theta_2 \delta_g \\ \tilde{\phi}_{01} &= 2\Re \left[\frac{\tilde{\xi}_0 \tilde{\xi}_1}{1 - (\alpha \tilde{P}_0 + \beta \tilde{P}_2) \tilde{P}_1} \right] (1 - \delta_g) + \theta_0 \theta_1 \delta_g \\ \tilde{\phi}_{12} &= 2\Re \left[\frac{\tilde{\xi}_1 \tilde{\xi}_2}{1 - (\alpha \tilde{P}_0 + \beta \tilde{P}_2) \tilde{P}_1} \right] (1 - \delta_g) + \theta_2 \theta_1 \delta_g \end{aligned} \quad 3.1.23$$

Die Aufteilung eines gemessenen Gitterfaktors in diese Bestandteile setzt nur voraus, daß die Deltafunktion eindeutig erkannt wird. Solche in der Ebenenanzahl begrenzte Systeme werden als "glatt" bezeichnet. Bei geneigten Oberflächen kann dann die Verteilung bereits innerhalb einer langen Terrasse wechseln und so in diesem Algorithmus größere begriffliche Schwierigkeiten bereiten als bei rauen Systemen. Im Prinzip aber gelten die Überlegungen auch für geneigte Proben. Betrachten wir speziell den Anteil von Deltafunktionen am Gitterfaktor. Ist θ_1 der Anteil der Atome, die auf der idealen Treppe liegen, so ist eine Entfaltung der idealen Treppe von der Gesamtverteilung möglich. Im idealen Fall ist der Gitterfaktor gegeben durch:

$$A = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n (gL-s)} \sum_{m=0}^{n-1} e^{2\pi i gm} = \frac{1 - \exp(2\pi i gL)}{1 - \exp(2\pi i g)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(gL - s - n) \quad 3.1.24$$

Bei der Bildung des Betragsquadrates wird der Vorfaktor zu

$$\frac{1 - \cos 2\pi gL}{1 - \cos 2\pi g} = \frac{\sin^2 \pi gL}{\sin^2 \pi g} \quad 3.1.25$$

Die Deltafunktion beschreibt schräge Stangen im Abstand $\Delta g = L^{-1}$, die die reziproken Gitterpunkte kreuzen. Der Verlauf des Vorfaktors ist in Bild 3.2 wiedergegeben.

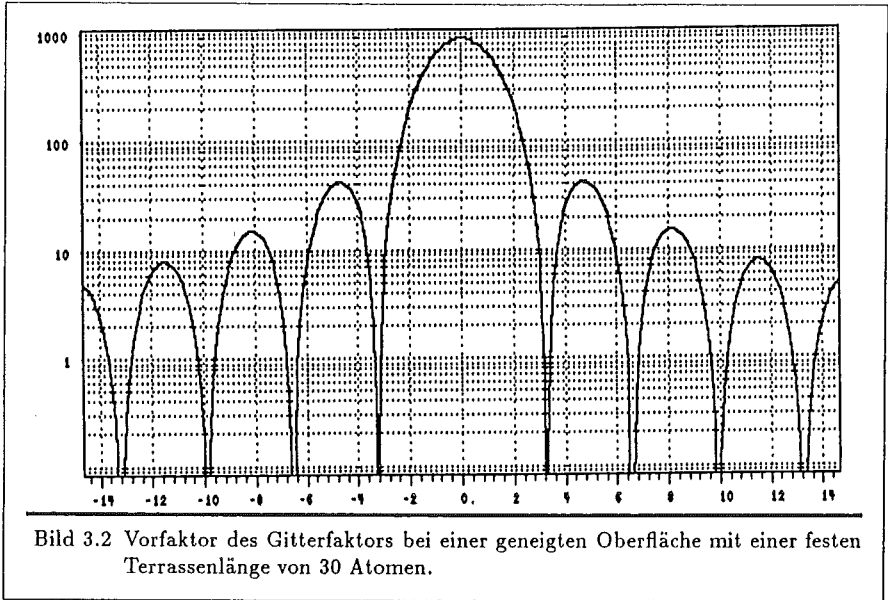


Bild 3.2 Vorfaktor des Gitterfaktors bei einer geeigneten Oberfläche mit einer festen Terrassenlänge von 30 Atomen.

Man erkennt das Maximum bei ganzzahligen s , der Abfall auf 0.5 ist bei halbzahligem s auf der ersten Facettenstange des reziproken Gitters erreicht.

Bei der Beteiligung von zwei Ebenen an der Oberfläche wird sich im ebenen Fall in Gleichung (3.1.50) ein Anteil der Deltafunktion bei Gegenphasestreue von $(\theta_1 - \theta_0)^2$ ergeben. Multiplikation mit dem obigen Vorfaktor ergibt direkt die beiden Deltafunktionen der geneigten Oberfläche zu je dem halben Wert. Im Fall von drei Ebenen ohne Doppelstufen ergab Gleichung (3.1.18) mit (3.1.23) einen Anteil von $(\theta_1 - \theta_0 - \theta_2)^2$, der sich auch wieder auf zwei gleich große Spikes aufteilt.

Es bleibt die Betrachtung über die Form der Verbreiterung. Der Fall nur einer Stufensorte ($\alpha = 0$) läßt bei nur geringen Abweichungen von der idealen Treppe die Busch'sche Konstruktion zu mit lediglich aus den "richtigen" Positionen γ_n um μ_n verschobenen Stufenpositionen.

$$G(g, s) = \frac{\sin^2 \pi g L}{\sin^2 \pi g} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n e^{2\pi i n (g L - s)} \quad 3.1.26$$

Es handelt sich um eine Faltung der Verbreiterung mit den Deltastangen der regelmäßigen Stufenfolge. Entfernt man sich von $s = 0.5$, so verschiebt sich die Intensität entsprechend Bild 3.2 von einer auf die Nachbarstange, ohne ihre Form zu verändern. Bislang ist dieser Fall bei uns experimentell noch nicht aufgetreten. Daher beschränke ich mich im Folgenden bei geneigten auf "rauhe" Flächen.

3.1.4. Markoffprozesse

Eine entscheidende Voraussetzung für die bisherigen Algorithmen ist die verschwindende Korrelation zwischen benachbarten Terrassenlängen. Die Alternative der festen bedingten lokalen Wahrscheinlichkeiten versucht, ausgehend von Gleichung (3.1.16) die Oberfläche zu modellieren. Anstatt Verteilungen zu postulieren, wird die Folge von Oberflächenatomen als stochastischer Prozeß gedeutet. Während ein gegebener stochastischer Prozeß eine eindeutige Terrassenbreitenverteilung liefert, muß das Gegenteil nicht zutreffen. Dennoch gibt es eine Verbindung: Der spektrale Bereich, in dem die Autokorrelation oder das Leistungsspektrum meßtechnisch erfaßt werden, ist eng begrenzt. Optimal sollte diejenige Wahrscheinlichkeitsverteilung gewählt werden, die mit den Meßwerten konsistent ist und im übrigen die größte Anzahl an möglichen Realisierungen erlaubt, eine maximale Neutralität gegenüber willkürlichen Annahmen, d.h. die maximale Entropie aufweist.

Eine kurze Herleitung zur Maximierung der Informationsentropie liefert Jaynes¹⁹: ist p_j eine Verteilung, so ist die Informationsentropie nach Shannon definiert als $S = -\sum p_j \ln p_j$. Die thermodynamische Entropie unterscheidet sich nur durch die Boltzmann-Konstante k . Gesucht sind die p_j mit der Forderung, daß S maximal wird und eine Reihe von Zwangsbedingungen der Form $\sum_j p_j f_j^{(k)} = f_k$ eingehalten wird. Eine der Zwänge ist die Normierung von p . Üblicherweise werden Zwänge durch Lagrangesche Multiplikatoren λ_k berücksichtigt.

$$\delta \left(S - \sum_{j,k} \lambda_k p_j f_j^{(k)} \right) = 0 \quad 3.1.27$$

Differentiation nach den p_j ergibt

$$-\ln p_j - 1 - \sum_k \lambda_k f_j^{(k)} = 0 \leftrightarrow p_j = \exp\left(-\sum_k \lambda_k f_j^{(k)}\right) \quad 3.1.28$$

Einsetzen dieser Gleichung in die Zwangsbedingungen liefert die λ_k . Mit

$$Z := \sum_j \exp\left(-\sum_{k=1}^K \lambda_k f_j^{(k)}\right) \quad 3.1.29$$

wird

$$\lambda_0 = \ln Z; \quad f_k \equiv \langle f_i^{(k)} \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_k} \quad 3.1.30$$

Sind die gegebenen Zwangsbedingungen f_k die ersten R Korrelationen $\langle x_j x_{j-k} \rangle$, so fordert die entropiemaximierte Verteilung gerade die lineare Fortsetzung der Korrelationen

$$\phi_t = \gamma_1 \phi_{t-1} + \gamma_2 \phi_{t-2} + \dots + \gamma_s \phi_{t-R} \quad 3.1.31$$

¹⁹ E.T.Jaynes, Phys. Rev. 106 (1957), 620

Die x_t bilden also auch einen linearen Prozeß R -ten Grades und dürfen noch eine Zufallsabhängigkeit α ohne Korrelation (weißes Rauschen) enthalten.

$$x_t = \gamma_1 x_{t-1} + \gamma_2 x_{t-2} + \dots + \gamma_R x_{t-R} + \alpha \quad 3.1.32$$

Diese Differenzengleichung ist mittels einer z -Transformation

$$X(z) = \sum_{k=0}^{\infty} x_k z^{-k} = Z(x_k) \quad 3.1.33$$

(Laurentreihenentwicklung) zu lösen.

$$P_E(g) = \frac{c}{|1 + \sum_{j=1}^{R-1} \gamma_j \exp(-2\pi i g j)|^2} \quad 3.1.34$$

stellt den Ausdruck für die (Leistungs-)Spektraldichte dar, die Autokorrelation ergibt sich aus der Rücktransformation

$$x_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{Q(z)} z^{n-1} dz = \sum_{i=1}^k \text{Res}_j \left[\frac{1}{Q(z)} z^{n-1} \right] \quad 3.1.35$$

wobei Res_j das Residuum an der Stelle z_j bezeichnet und

$$Q(z) = z^R + \gamma_1 z^{R-1} + \dots + \gamma_R \quad 3.1.36$$

Durch Partialbruchzerlegung von Q bekommt man Terme der Art $(z - z_0)^{-1}$ mit den zugehörigen Ergebnisfunktionen z_0^n . Komplikationen ergeben sich bei mehrfachen Nullstellen, dann sind weitere Terme der Form $n^k z_0^n$ nötig. Sonderfälle sind negative z_0 , die alternierenden Folgen $(-1)^n |z_0|^n$ entsprechen sowie konjugiert komplexe Paare, die gedämpfte Schwingungen ergeben. Zusammengefaßt

$$\phi(j) = \sum_n x(n)x(n-j) = \alpha_1 \lambda_1^{-|j|} + \alpha_2 \lambda_2^{-|j|} + \dots \quad 3.1.37$$

mit den λ_j als Nullstellen des Polynoms und den von den Randbedingungen bestimmten α_j . Das Verfahren ist als R -stufiges "linear predictive filter" oder Autoregression bekannt.

Es bietet sich an, direkt die Differenzengleichung der Autokorrelationen zur numerischen Analyse zu verwenden, da hier noch keine Werte für die Zerfallskonstanten bekannt sein müssen und sich erst als die Nullstellen des Polynoms ergeben. Aus $2R$ Autokorrelationswerten bestimmt das lineare Gleichungssystem 3.1.31 die R γ_j (Exponentialfit). Die spezielle Form der Koeffizienten $\phi_{j,t} = \phi_{j-t}$ ist unter dem Namen Toeplitz bekannt und läßt sich auf über R rekursivem Weg effizient lösen. Nutzt man die Symmetrie $\phi_j = \phi_{-j}$, reichen sogar R Koeffizienten.

Die Rauhtiefe σ^2 steigt linear mit dem Abstand, dagegen sagt z.B. das Isingmodell einen logarithmischen Anstieg voraus, und bei glatten Oberflächen gibt es einen endlichen Grenzwert. Der letzte Fall erfordert, Stufenwahrscheinlichkeiten zwischen sämtlichen vorkommenden Schichten festzulegen, so daß die Größen x_j stochastischer Vektoren $\rho_h^{(n)}$ bilden, an der Stelle n die Oberfläche in der Höhe h anzutreffen. Die Koeffizienten γ_1 sind daher quadratische Matrizen (lineare Abbildung $\rho^{(n+1)} = f(\rho^{(n)})$). In der diffusen Röntgenstreuung ist diese Methode der stochastischen Matrizen bekannt und die Intensitätsgleichung für beliebige Reichweiten R hergeleitet²⁰. Der Fall $R = 1$ ("stationär 2. grades") wurde von Lent und Cohen²¹ durchgezogen. In diesem Fall bilden die ρ_i eine Markoffkette und es lassen sich eine Reihe von Aussagen treffen über die stochastischen Matrizen und die Intensität. Für die Komponenten gilt

$$\rho_h^{(n)} = \sum_j \Lambda_{hj} \rho_j^{(n-1)} \quad 3.1.38$$

Mittelwertbildung zeigt

$$\theta_h = \sum_j \Lambda_{hj} \langle \rho_j \rangle = \sum_j \Lambda_{hj} \theta_j$$

Damit ist ein Eigenwert (+1) und der zugehörige Eigenvektor (θ_j) der Matrix bereits gefunden. Der Gitterfaktor

$$G(g, s) = \sum_n e^{-2\pi i g n} \sum_{q,r} e^{-2\pi i s(r-q)} \theta_q \phi_{rq}(n) = \sum_n e^{-2\pi i g n} \sum_{q,r} e^{-2\pi i s(r-q)} \theta_q \Lambda_{rq}^n \quad 3.1.39$$

soll zuerst in Richtung s transformiert werden. Der Exponentialterm läßt sich in die Matrix einbeziehen

$$\begin{aligned} \sum_{q,r} e^{-2\pi i s(r-q)} \Lambda_{rq}^n &= \sum_{q,h,r} e^{2\pi i s q} \Lambda_{hq}^{n-1} \Lambda_{rh} e^{-2\pi i s(r-h)} e^{-2\pi i s n} \\ &= \sum_{q,h,1,r} \left(\Lambda_{hq}^{n-1} e^{-2\pi i s(h1-q)} \right) \dots \left(\Lambda_{rh_n} e^{-2\pi i s(h-q)} \right) \end{aligned} \quad 3.1.40$$

Definieren wir also

$$\bar{\Lambda}_{rq} = \Lambda_{rq} e^{-2\pi i s(r-q)} \quad 3.1.41$$

Zur Bildung der $|n|$ -fachen Matrixprodukte der $\bar{\Lambda}$ ist es wünschenswert, die Matrix in Diagonalform vorliegen zu haben. Dazu muß sie im Basissystem ihrer Eigenvektoren ausgedrückt werden.

²⁰ J.Kakinoki, Y.Komura, J.Phys.Soc.Japan, **7**,1(1952) 30

²¹ C.S.Lent, P.I.Cohen, Surf.Sc. **139** (1984) 121

$$\Delta = \Upsilon \Lambda \Upsilon^{-1} \quad \Delta_{mn} = \bar{\lambda}_m \delta_{mn} \quad \Upsilon_{mn} = u_m^{(n)} \quad 3.1.42$$

Die Diagonalisierungsmatrix Υ besteht aus den Eigen(spalten)vektoren. Die Potenz bekommt die einfache Form

$$\Lambda^n = \Upsilon^{-1} \Delta^n \Upsilon = \Upsilon^{-1} \bar{\lambda}_m^n \mathbf{1} \Upsilon \quad 3.1.43$$

Der Gitterfaktor setzt sich additiv für jeden Eigenwert zusammen aus Lorentzkurven in g , deren Breite direkt vom Eigenwert bestimmt ist. Der oben erwähnte Eigenwert 1 bedeutet verschwindende FWHM (Deltafunktion). Die s -Abhängigkeit steckt nur in den Gewichten der Summanden.

Das bekannte Beispiel zweier möglicher Schichten schreibt sich mit diesen Definitionen, wenn u die Wahrscheinlichkeit für eine Stufe von der unteren zur oberen Ebene und d für die andere Richtung ist.

$$\bar{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1-d & ue^{2\pi is} \\ de^{-2\pi is} & 1-u \end{pmatrix} \quad 3.1.44$$

$$\det \bar{\Lambda} = (1-d-u)(1-u-d) - ud = 0 \implies \bar{\lambda}_1 = 1, \quad \bar{\lambda}_2 = 1-u-d \quad 3.1.45$$

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} ue^{2\pi is} \\ d \end{pmatrix} \quad \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} -e^{2\pi is} \\ 1 \end{pmatrix} \quad 3.1.46$$

$$\Upsilon = \begin{pmatrix} ue^{2\pi is} & -e^{2\pi is} \\ d & 1 \end{pmatrix} \quad \Upsilon^{-1} = \frac{1}{u+d} \begin{pmatrix} e^{-2\pi is} & 1 \\ -de^{-2\pi is} & u \end{pmatrix} \quad 3.1.47$$

Wegen

$$\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{u+d} \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \quad 3.1.48$$

wird

$$\bar{\Lambda}^n = \begin{pmatrix} \theta_1 + \theta_2 \bar{\lambda}_2^n & \theta_1 (1 - \bar{\lambda}_2^n) e^{2\pi is} \\ \theta_2 (1 - \bar{\lambda}_2^n) e^{-2\pi is} & \theta_2 + \theta_1 \bar{\lambda}_2^n \end{pmatrix} \quad 3.1.49$$

mit

$$G = \sum_p \sum_{q,r} \theta_q \Upsilon_{rp} \Upsilon_{pq}^{-1} \sum_p \bar{\lambda}_p^{|n|} \quad 3.1.50$$

$$= [\theta_1^2 + \theta_2^2 + 2\theta_1\theta_2 \cos 2\pi s] \delta(g) + 2\theta_1\theta_2 [1 - \cos 2\pi s] \frac{1 - \bar{\lambda}_2^2}{1 + \bar{\lambda}_2^2 - 2\bar{\lambda}_2^2 \cos 2\pi g}$$

3.2 Spezielle Verteilungen

Aus der Statistik sind eine Reihe von Verteilungsfunktionen bekannt. Als brauchbarste hat sich bei vielen ebenen Proben die geometrische Verteilung erwiesen, die sich mikroskopisch dann ergibt, wenn man für jeden Gitterplatz unabhängig von den Nachbarn stets eine konstante Wahrscheinlichkeit p annimmt, dort auf eine Stufe zu treffen. Sie ist benannt nach der geometrischen Reihe, die von der Terrassenverteilung gebildet wird:

$$P(\gamma) = p(1-p)^{\gamma-1} \quad \bar{\Gamma} = \sum_{\gamma} \gamma P(\gamma) = \frac{1}{p} \quad 3.2.1.1$$

$$\tilde{P}_g = \frac{pe^{-2\pi ig}}{1 - (1-p)e^{-2\pi ig}} \quad 3.2.1.2$$

$$G(g, s) = \frac{1 - \varrho^2}{1 - 2\varrho \cos(2\pi g + \psi) + \varrho^2} \quad 3.2.1.3$$

für den Fall von Einfachstufen an geneigten (rauh) Ebenen mit

$$\varrho = \sqrt{(1-p)^2 + p^2 + 2p(1-p) \cos 2\pi s + p^2 \alpha(\alpha-2) \sin^2 2\pi s} \quad 3.2.1.4$$

$$\tan \psi = \frac{p(\alpha-1) \sin 2\pi s}{1-p+p \cos 2\pi s} \quad 3.2.1.5$$

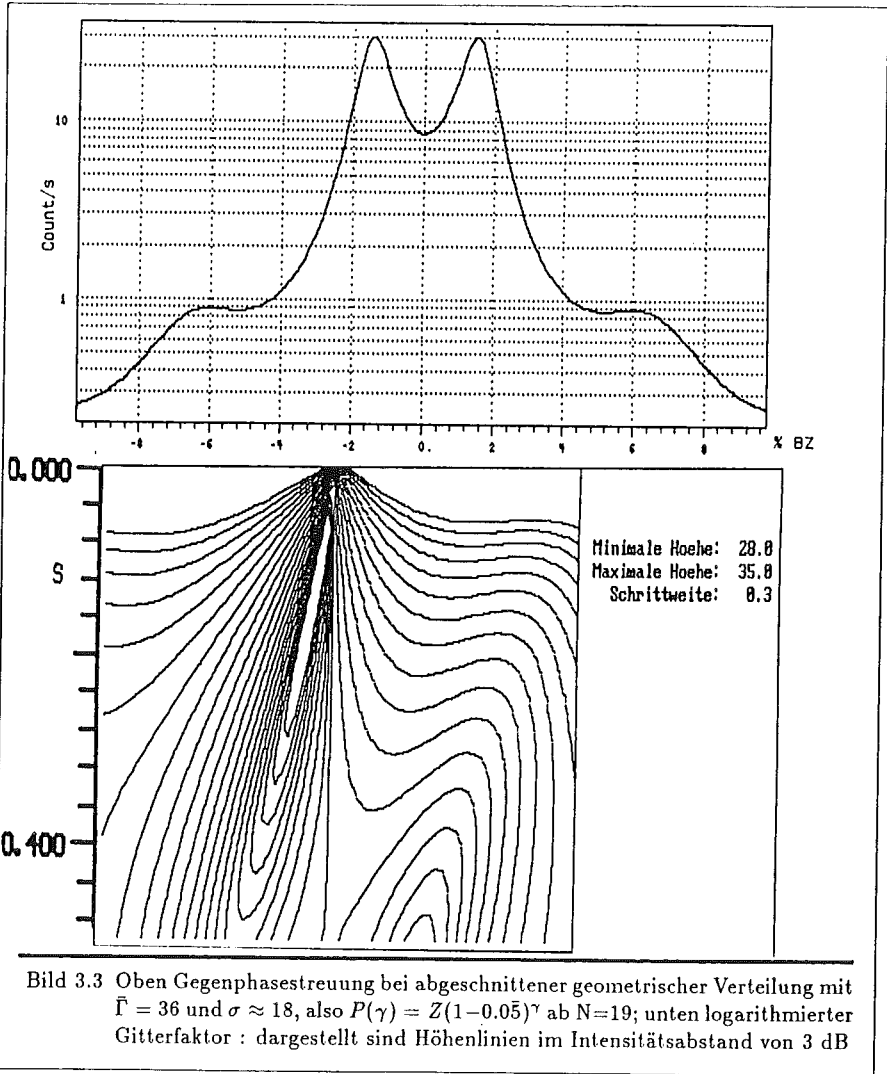
Dabei ist die Verschiebung der Gitterlorenz aus der Position $g=0$ mit unserem Gerät nicht meßbar, da die nötigen Strahloptimierungen mit Verschiebungen verknüpft sind.

Es gibt keine Reflexaufspaltung; diese kann nur durch eine Absenkung der Terrassenwahrscheinlichkeit bei kleinen γ erreicht werden, also eine "abstoßende" Wechselwirkung zwischen den Stufen. Einige einfache Ansätze sollen im Folgenden für die in Kapitel 6 gemessenen Werte von $\sigma, \bar{\Gamma}$ verglichen werden. Eine sehr nützliche Eigenschaft von 3.1.9 besteht darin, daß an der Stelle $g=0$ die Intensität $\sigma^2/\bar{\Gamma}$ (abgesehen von einer möglichen Deltafunktion) beträgt und somit die Parameter $\bar{\Gamma}, \sigma$ direkt aus Reflexabstand und Einbauchung des Gegenphasespektrums abgelesen werden können und die Zweiparameterverteilungen bereits festliegt.

Zunächst ist die "abgeschnittene" geometrische Verteilung der Grenzfall, daß jede Stufe, die sich näher als N Atomabstände an einer anderen Kante ausbilden möchte, geschluckt wird.

$$P(\gamma) = p(1-p)^{\gamma-N_0} \quad \gamma > N_0 \quad \bar{\Gamma} = \frac{1}{p} + N_0 \quad 3.2.2.1$$

$$\tilde{P} = \frac{\gamma e^{-2\pi i g N_0}}{1 - (1-p)e^{-2\pi i g}} \quad 3.2.2.2$$

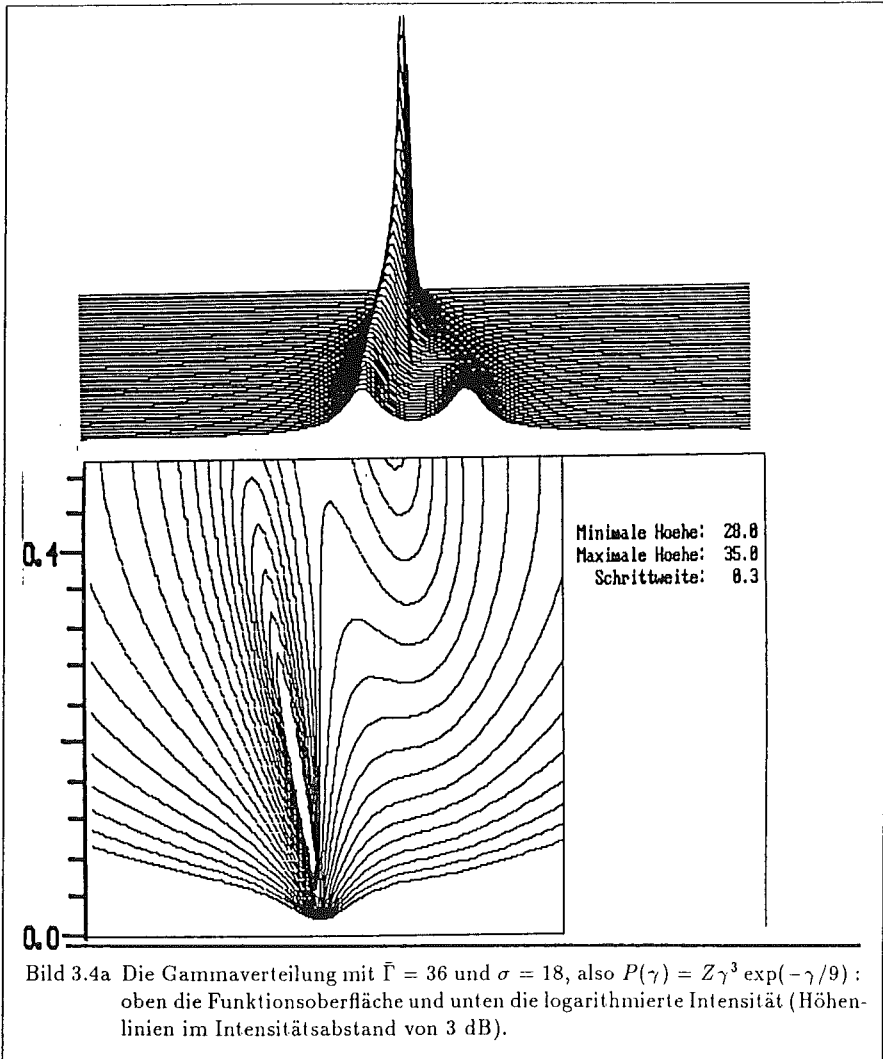


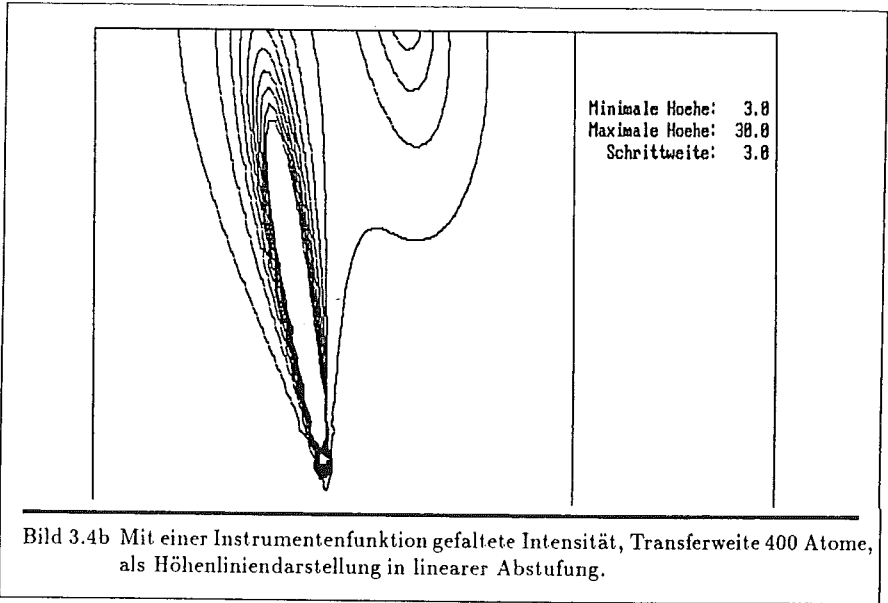
Die Gamma-Distribution war der beste Fit für die geeigneten Proben in Kap.6.

$$P(\gamma) = Z\gamma^n p^\gamma$$

3.2.3.1

$$\tilde{P}_g = Z \sum_{k=1}^n \nu_{nk} \frac{p^k e^{-2\pi i k g}}{(1 - p e^{-2\pi i g})^{k+1}} \quad \text{mit } \nu_{n1} = 1, \nu_{nn} = n! \dots \quad 3.2.3.2$$





Eine Variation der Gammaverteilung ist analytisch einfacher durchzurechnen, mit P_0 bis $P_n = 0$:

$$P(\gamma) = Z \gamma(\gamma - 1) \cdots (\gamma - n) p^\gamma \quad 3.2.3.3$$

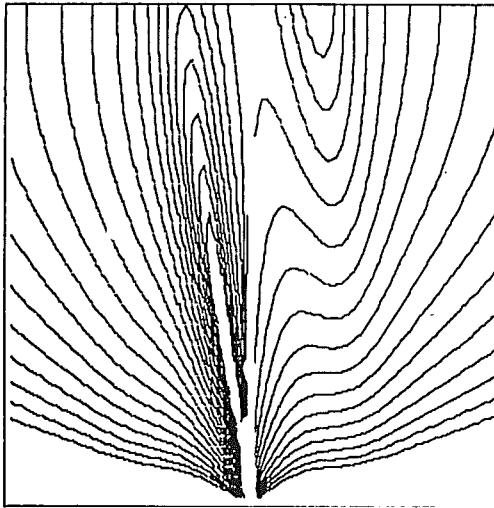
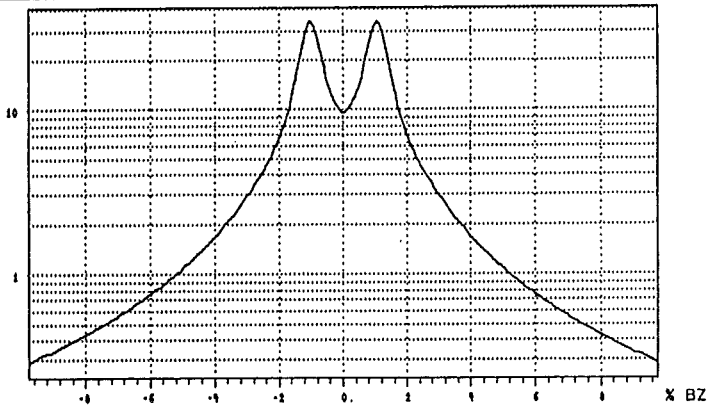
$$\bar{P}_g = Z \sum_{\gamma=n}^{\infty} e^{-2\pi i g \gamma} p^n \frac{\partial^{(n)}}{\partial p^n} p^\gamma = Z p^n \frac{\partial^{(n)}}{\partial p^n} \frac{1}{1 - p e^{-2\pi i g}} = Z n! \frac{p^n e^{-2\pi i g n}}{(1 - p e^{-2\pi i g})^{n+1}} \quad 3.2.3.4$$

Bei fast regelmäßiger Stufenfolge erscheint auch eine Faltung der Folge mit einer geometrischen Verteilung als sinnvoll.

$$P(\gamma) = Z(1 - p)^{|\gamma - N_0|} \quad \gamma > 0 \quad 3.2.4.1$$

Weitere getestete Verteilungen sind die Weibull-, die Log-Normal-, die Beta-, die Ostwald-Reifungs- und natürlich die verschobene Normalverteilung. Die letztere hat übrigens dann die Maximalentropie, wenn außer $\bar{\Gamma}$, σ nichts weiter bekannt ist.

$$P(\gamma) = Z \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\gamma - \bar{\Gamma}}{\sigma}\right)^2\right) \quad 3.2.5.1$$



Minimale Hoehe: 28.8
 Maximale Hoehe: 35.8
 Schrittweite: 0.3

Bild 3.5a Gegenphasestreue bei einer um 36 Atome zentrierten gaußförmigen Terrassenbreitenverteilung mit $\sigma = 18$. Unten die logarithmierte Intensität; dargestellt sind Höhenlinien im Abstand von 3 dB mit Variation von g um 4% der BZ im Bereich von $s=0$ bis 0.5.

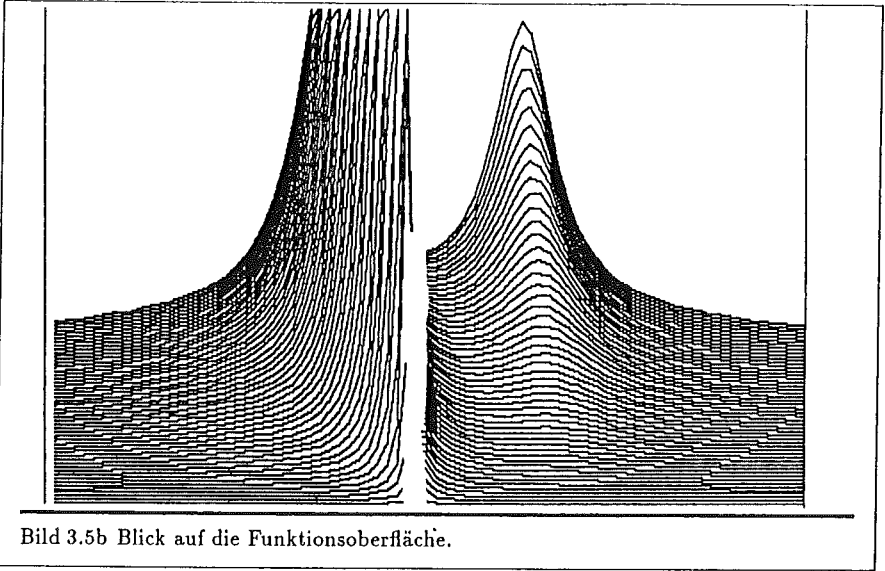


Bild 3.5b Blick auf die Funktionsoberfläche.

Diese Verteilung beschreibt unsere gemessenen Reflexe nur sehr ungenügend: Abweichungen von einer geometrischen Verteilung sind nur im Bereich der kleinen Terrassenlängen erlaubt.

Für den Fall der Gammaverteilung sei jetzt der Einfluß von zusätzlichen Stufen in Gegenrichtung betrachtet. Der Intensitätswert bei $g=0$ modifiziert sich zu

$$G(g = 0, s) = 2\Re \left\{ \check{\sigma}_0(g = 0) + \bar{\Gamma} \frac{\check{H}}{1 - \check{H}} \right\} = \frac{\sigma^2}{\bar{\Gamma}} + \bar{\Gamma} \left(1 + 2\Re \left\{ \frac{1}{\check{H}^{-1} - 1} \right\} \right)$$

Mit α aus Gleichung 3.1.12 heißt das

$$G(g = 0, s) = \frac{\sigma^2}{\bar{\Gamma}} + 2\alpha \bar{\Gamma} \frac{1 + \cos 2\pi s}{1 + \alpha^2 - 2\alpha \cos 2\pi s}$$

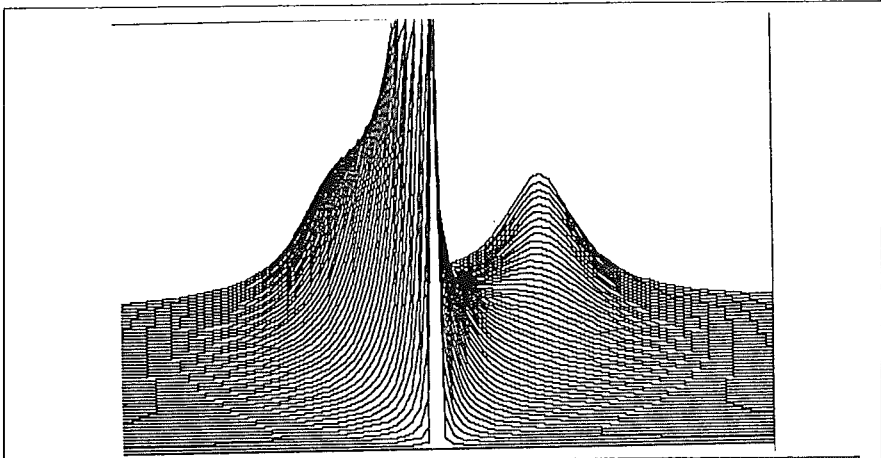


Bild 3.6a Oberflächenbild des Gitterfaktors bei Gammaverteilung bei Vorhandensein von beiden Stufenrichtungen, hier 25 % Anteil ($\alpha = 3$).

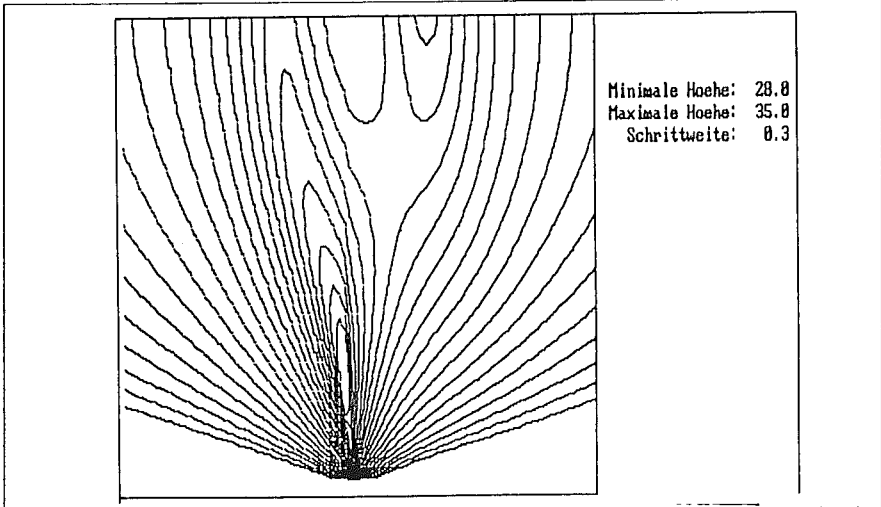


Bild 3.6b Logarithmierte Gammaverteilung: dargestellt sind Höhenlinien im Intensitätsabstand von 3 dB.

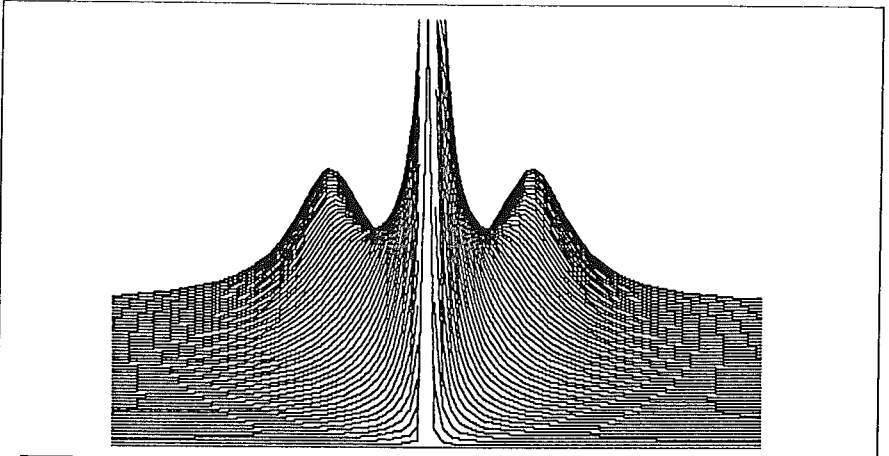


Bild 3.7a Oberflächenbild der Gammaverteilung bei Vorhandensein von beiden Stufenrichtungen in gleicher Anzahl.

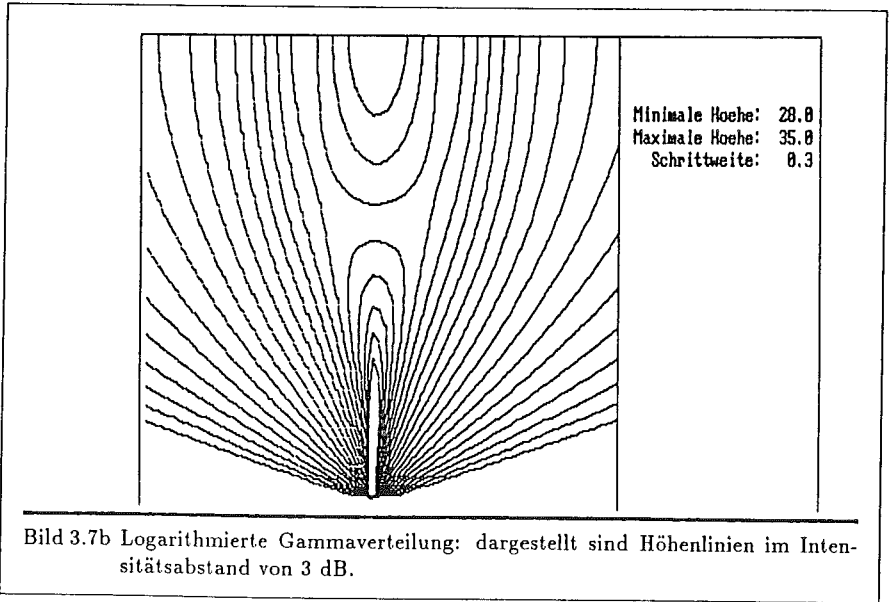


Bild 3.7b Logarithmierte Gammaverteilung: dargestellt sind Höhenlinien im Intensitätsabstand von 3 dB.

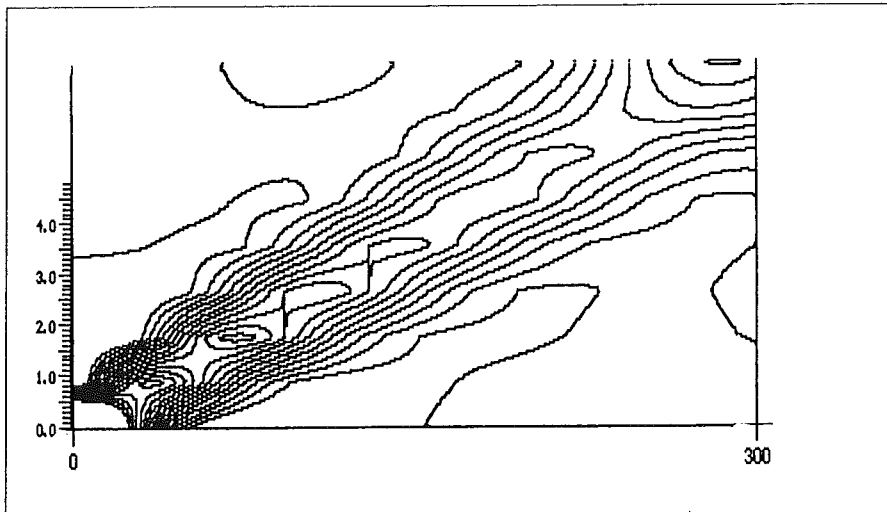


Bild 3.8 Verlauf der Autokorrelation als Funktion der Höhe und des lateralen Abstandes bei der Gammaverteilung mit $\alpha \rightarrow \infty$. Man erkennt die mittlere Neigung der Oberfläche und die Zunahme der Rauhtiefe.

3.3 Zweidimensionales

Bei LEED wird die Intensität eines 2-dimensionalen Gitters mit einer Lochblende aufgenommen. Die bisherigen Modelle gehen von einer Kette aus. Um die daraus ermittelten Intensitäten mit den Messungen zu vergleichen, muß nach Kapitel 3.0 die Messung erst senkrecht zur gewünschten Richtung über eine Brillouinzone aufintegriert werden.

Für eine wirklich zweidimensionale Auswertung kann man zwei Grenzfälle unterscheiden. Sind die Stufenwahrscheinlichkeiten stark verkoppelt, kann man von Isotropie der Autokorrelation ausgehen²². Betrachtet man wieder die Intensität nach Herausfalten der diskreten (atomaren) Struktur, so wandelt die Integration die 2-dim. Fouriertransformation in eine 1-dim. Besseltrafo und führt auf eine radiale Spektraldichte. Mit $\phi = \exp(-\beta r)$ als allgemeinem Bestandteil der Autokorrelation wird

$$\begin{aligned}
 G(u) &= \int_0^\infty r dr \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-\beta r - i(\vec{u} \cdot \vec{r} + v y)} \\
 &= \int_0^\infty r dr e^{-\beta r} 2\pi J_0(ur) = \frac{1}{(\beta^2 + u^2)^{3/2}}
 \end{aligned}
 \tag{3.3.1}$$

²² J. Lapujoulade, Surf.Sc. 108 (1981) 526

²³ wobei u eine beliebige feste Richtung ist. Wie im 1-dim. Fall liegt eine Summe von einer δ -Funktion, die nur von den Bedeckungen abhängt und beliebig vielen Lorentzfunktionen (hier $\text{Lor} \frac{3}{2}$ vor. Auch der umgekehrte Weg ist eine Besseltransformation. Zu beachten ist, daß der Gitterfaktor nur den einen Normalreflex bei $k_r = 0$ enthält und Ausläufer bis ∞ statt bis zu Brillouinzonengrenze eingehen.

$$\phi(n) = \int_0^\infty k_r dk_r \int_0^{2\pi} d\varphi G(k_r) e^{-in k_r \cos \varphi} = \int_0^\infty G(k_r) J_0(n k_r) k_r dk_r \quad 3.3.2$$

Vollständig entkoppelte Wahrscheinlichkeiten entstehen im Markoff-Feld. Es gibt dann Parameter, bezüglich derer die Wahrscheinlichkeit separierbar (quadrantensymmetrisch) ist. Im Zusammenhang mit "surface roughening" rechnet Spadacini/Tommei zwei Geometrien durch ²⁴. Sie betrachten dafür die bedingte Wahrscheinlichkeit, einen Streuer an der Stellen (\vec{L}_l, h_l) zu finden, falls es einen an der Stelle $(\vec{0}, h_0)$ gibt. Eine kürzeste Verbindung zwischen diesen beiden Punkten auf dem Kristallgitter bestehe aus der Sequenz der \vec{L}_m , $m=0..l$ aus jeweils benachbarten Gitterpunkten. Auf jedem Zwischenschritt ist jede Höhe h_m möglich. Die bedingte Wahrscheinlichkeit läßt sich dann schreiben

$$P_2(\vec{L}_l, h_l; \vec{0}, h_0) = \sum_{h_{l-1}=-\infty}^{\infty} \sum_{h_{l-2}=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{h_1=-\infty}^{\infty} P_l(\vec{L}_l, h_l; \vec{L}_{l-1}, h_{l-1}; \dots; \vec{0}, h_0) \\ P_3(\vec{L}_{l-1}, h_{l-1}; \vec{L}_{l-2}, h_{l-2}; \vec{0}, h_0) \cdots P_2(\vec{L}_1, h_1; \vec{0}, h_0) \quad 3.3.3$$

wobei P_m die bedingte Wahrscheinlichkeit für m Punkte ist (Chapman-Kolmogorov-Gleichung). Die Markoff-Eigenschaft besagt, daß überall auf der Oberfläche unabhängig von den entfernteren Nachbarn die Stufenwahrscheinlichkeit zwischen zwei festen Ebenen konstant ist, so daß die P_m gleich den P_2 sind. Darüber hinaus nehmen Spadacini/Tommei die gleiche Eigenschaft auch für die Höhen an, d.h. es gibt keine ausgezeichnete Ebene. Hier soll jedoch wie bei Lent/Cohen eine komplette Übergangsmatrix Λ_{h_1, h_2} (stochastische Matrix) zwischen zwei lateral benachbarten Streuern angenommen werden.

$$P_2(\vec{L}_l, h_l; \vec{0}, h_0) = \sum_{h_{l-1}=-\infty}^{\infty} \sum_{h_{l-2}=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{h_1=-\infty}^{\infty} \Lambda_{\vec{L}_l - \vec{L}_{l-1}}(h_l, h_{l-1}) \quad 3.3.4 \\ \Lambda_{\vec{L}_{l-2} - \vec{L}_{l-1}}(h_{l-2}, h_{l-1}) \cdots \Lambda_{\vec{L}_1 - \vec{L}_0}(h_1, h_0)$$

Der vektorielle Index der Λ ist jetzt ein Basisvektor des Gitters, eine Verbindung zwischen nächsten Nachbarn. Das Teilprodukt mit einem gegebenen Basisvektor \vec{a} hat daher die Form eines $|n|$ -fachen Matrixproduktes.

$$P_2(n\vec{a}, h_n; h_0) = \Lambda_{\vec{a}}^{|n|} \quad 3.3.5$$

Es braucht nur ein \vec{a} betrachtet werden, die Gesamtintensität bekommt man durch Addieren aller Kombinationen wie in 3.1.50.

²³ Gradstein/Ryshik Tafeln (1981), Integrale 3.715.19 und 6.623.2

²⁴ R.Spadacini, G.E.Tommei, Surf.Sc. 133 (1983) 216

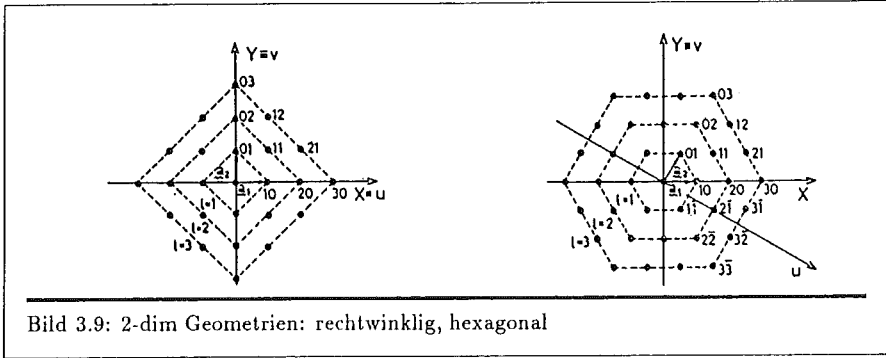


Bild 3.9: 2-dim Geometrien: rechteckig, hexagonal

Beim rechteckigen Grundgitter ergibt sich der kürzeste Weg von $(0,0)$ zu $n\vec{a} + m\vec{b}$ durch $|n| + |m|$ Schritte in die Richtungen $\vec{L}_j - \vec{L}_{j-1} = \vec{a}$ bzw \vec{b} .

$$P_2(n\vec{a} + m\vec{b}, h_1; \vec{0}, h_0) = \sum_{h_{l-1}=-\infty}^{\infty} \sum_{h_{l-2}=-\infty}^{\infty} \dots \sum_{h_1=-\infty}^{\infty} \bar{\lambda}_a^{|n|} \bar{\lambda}_b^{|m|} = \left(\bar{\lambda}_a^{|n|} \bar{\lambda}_b^{|m|} \right)_{h_1, h_0} \quad 3.3.6$$

Der Gitterfaktor wird über die Fouriertransformation zu einem Produkt der $\bar{\lambda}_s$,

$$G(u, v, s) = \sum_{n, m=-\infty}^{\infty} \bar{\lambda}_a^{|n|} \bar{\lambda}_b^{|m|} e^{2\pi i(nu + mv)} \quad 3.3.7$$

$$= \frac{(1 - \bar{\lambda}_a^2)(1 - \bar{\lambda}_b^2)}{(1 + \bar{\lambda}_a^2 - 2\bar{\lambda}_a \cos 2\pi u)(1 + \bar{\lambda}_b^2 - 2\bar{\lambda}_b \cos 2\pi v)}$$

Beim hexagonalen Gitter gibt es zu jedem Oberflächenatom 6 nächste Nachbarn mit den Vektoren $\pm\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, die jeweils in 60° Winkeln zueinander stehen. Im Koordinatensystem dieser drei Vektoren besteht damit analog zum rechteckigen Fall der Weg aus $|p| + |q| + |r|$ Schritten, wenn man jeden der sechs Grundsektoren durch die beiden angrenzenden Grundvektoren aufspannt. Der dritte Basisvektor bekommt jeweils die Komponente Null. Das Skalarprodukt in der Fouriertransformation hat die Form $\vec{q} \cdot \vec{l} = (u\vec{a}^* + v\vec{b}^*) \cdot (p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}) = 2\pi(up + vq + (v - u)r)$. Insgesamt setzt sich G zusammen aus

$$\begin{aligned}
G = & \sum_{p=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{\bar{a}}^{|p|} e^{2\pi i u p} + \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{\bar{a}}^{|p|} \bar{\lambda}_{\bar{b}}^{|q|} e^{2\pi i (u p + v q)} + \\
& \sum_{q=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{\bar{b}}^{|q|} e^{2\pi i v q} + \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{\bar{b}}^{|q|} \bar{\lambda}_{\bar{c}}^{|r|} e^{2\pi i (v q + (v-u)r)} + \\
& \sum_{r=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{\bar{c}}^{|r|} e^{2\pi i (v-u)r} + \sum_{p=-1}^{-\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{-\bar{a}}^{|p|} \bar{\lambda}_{\bar{c}}^{|r|} e^{2\pi i (u p + (v-u)r)} + \\
& \sum_{p=-1}^{-\infty} \bar{\lambda}_{-\bar{a}}^{|p|} e^{2\pi i u p} + \sum_{p=-1}^{-\infty} \sum_{q=-1}^{-\infty} \bar{\lambda}_{-\bar{a}}^{|p|} \bar{\lambda}_{-\bar{b}}^{|q|} e^{2\pi i (u p + v q)} + \\
& \sum_{q=-1}^{-\infty} \bar{\lambda}_{-\bar{b}}^{|q|} e^{2\pi i v q} + \sum_{q=-1}^{-\infty} \sum_{r=-1}^{-\infty} \bar{\lambda}_{-\bar{b}}^{|q|} \bar{\lambda}_{-\bar{c}}^{|r|} e^{2\pi i (v q + (v-u)r)} + \\
& \sum_{r=-1}^{-\infty} \bar{\lambda}_{-\bar{c}}^{|r|} e^{2\pi i (v-u)r} + \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{r=-1}^{-\infty} \bar{\lambda}_{\bar{a}}^{|p|} \bar{\lambda}_{-\bar{c}}^{|r|} e^{2\pi i (u p + (v-u)r)} + 1
\end{aligned} \tag{3.3.8}$$

Der Gitterfaktor ergibt sich zu

$$G(u, v, s) = \frac{A + 2[B \cos 2\pi u + C \cos 2\pi v + D \cos 2\pi(v-u)]}{(1 + \bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 - 2\bar{\lambda}_{\bar{a}} \cos 2\pi u)(1 + \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2 - 2\bar{\lambda}_{\bar{b}} \cos 2\pi v)(1 + \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2 - 2\bar{\lambda}_{\bar{c}} \cos 2\pi(v-u))} \tag{3.3.9}$$

$$\begin{aligned}
A &= 1 - \bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 - \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2 - \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2 - \bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2 - \bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2 - \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2 \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2 + \bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2 \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2 + 4\bar{\lambda}_{\bar{a}} \bar{\lambda}_{\bar{b}} \bar{\lambda}_{\bar{c}} \\
B &= \bar{\lambda}_{\bar{a}}(\bar{\lambda}_{\bar{b}}^2 + \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2) - \bar{\lambda}_{\bar{b}} \bar{\lambda}_{\bar{c}}(1 + \bar{\lambda}_{\bar{a}}^2) \\
C &= \bar{\lambda}_{\bar{b}}(\bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 + \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2) - \bar{\lambda}_{\bar{a}} \bar{\lambda}_{\bar{c}}(1 + \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2) \\
D &= \bar{\lambda}_{\bar{c}}(\bar{\lambda}_{\bar{a}}^2 + \bar{\lambda}_{\bar{b}}^2) - \bar{\lambda}_{\bar{a}} \bar{\lambda}_{\bar{b}}(1 + \bar{\lambda}_{\bar{c}}^2)
\end{aligned} \tag{3.3.10}$$

Der Spezialfall identischer $\bar{\lambda}$ wurde von Spadacini/Tommei angegeben:

$$B = C = D = -\bar{\lambda}^2(1 - \bar{\lambda})^2, \quad A = (1 - \bar{\lambda}^3)^2 + 3B \tag{3.3.11}$$

Einen Überblick über die möglichen LEED-Strukturen, die sich so auf einer hexagonalen Oberfläche bei rein geometrischer Stufenverteilung bekommen lassen, geben die Bilder 3.10.

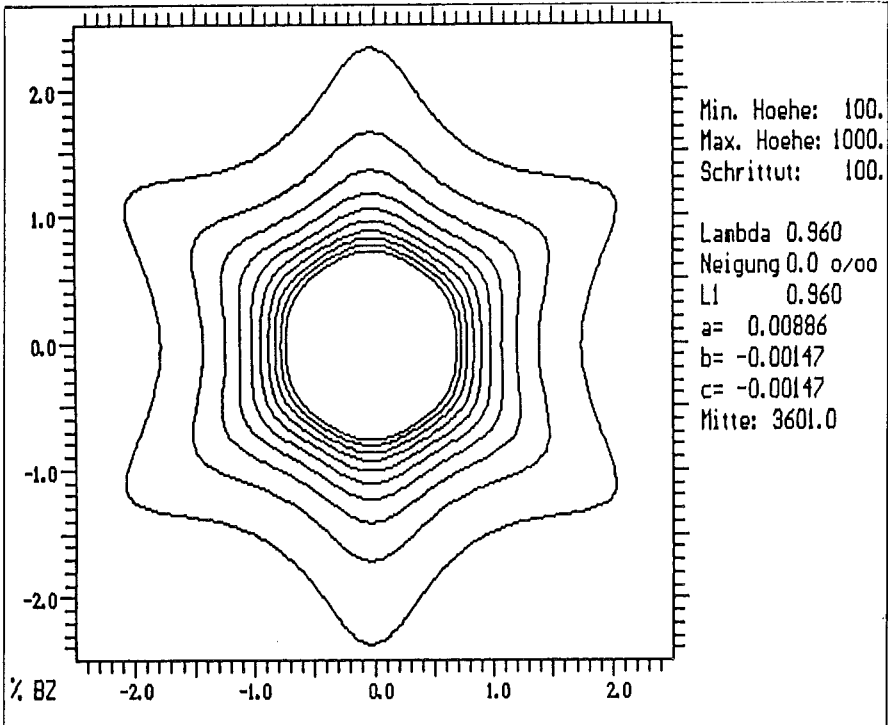
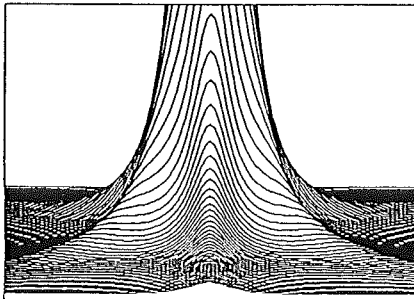
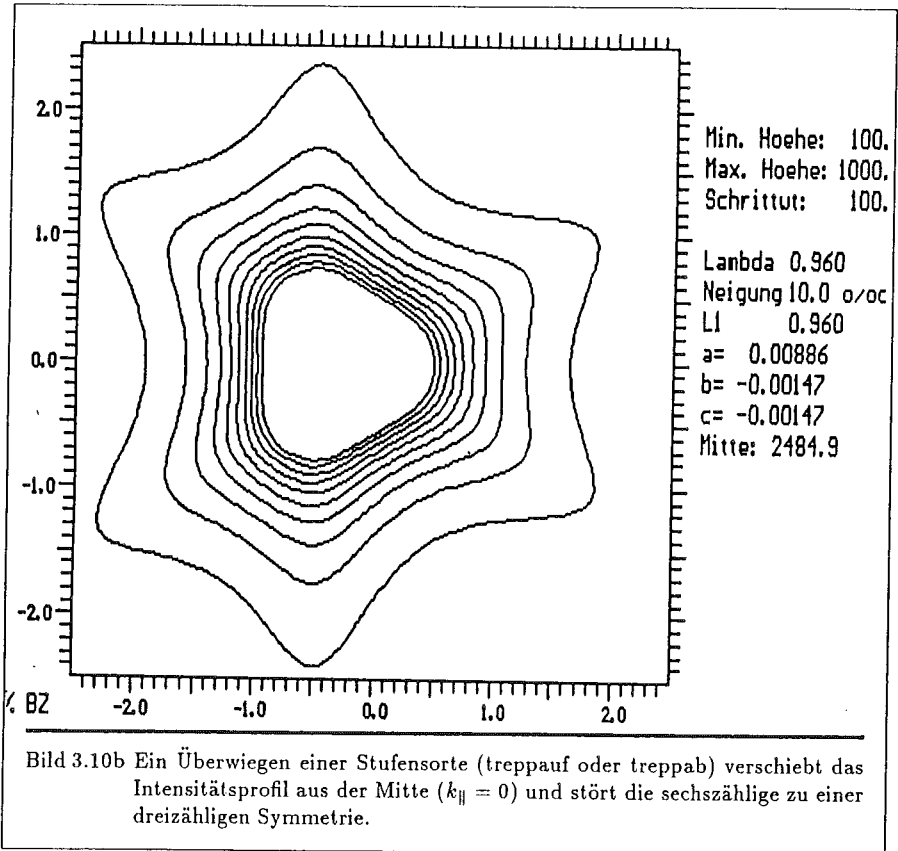
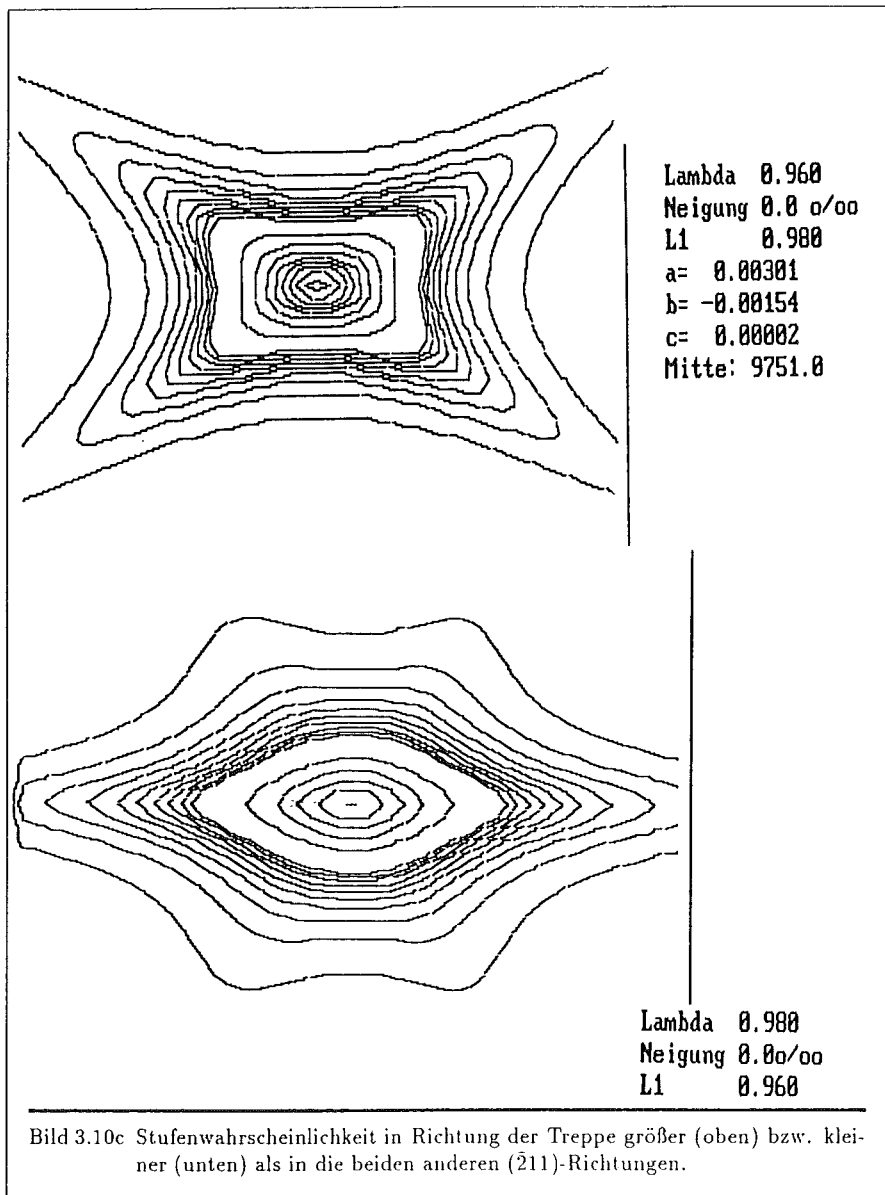
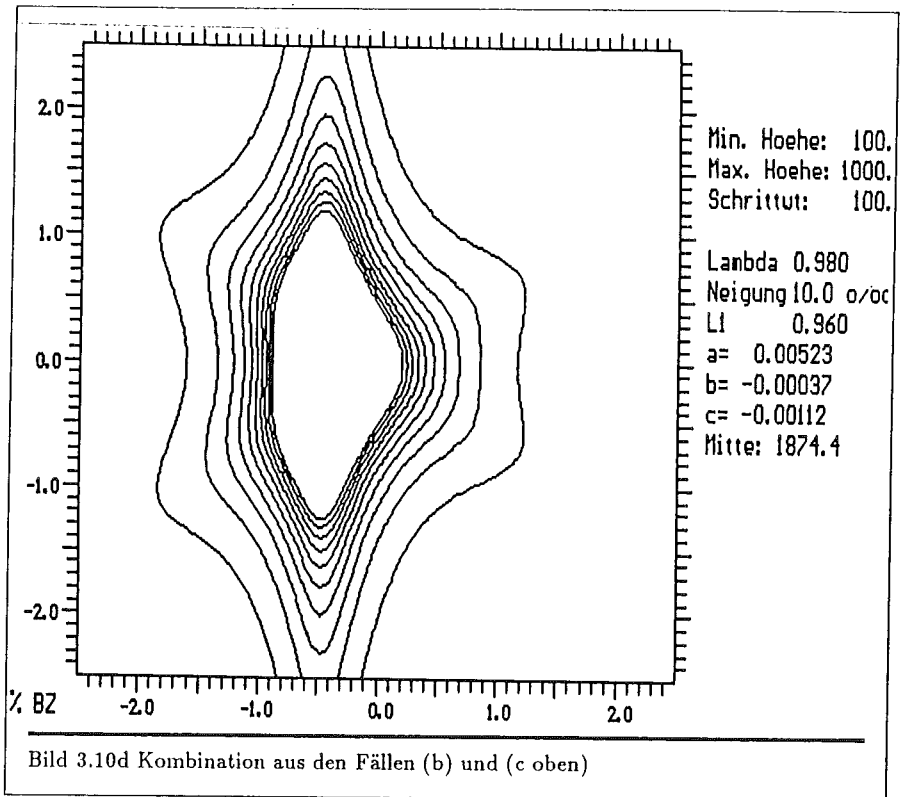


Bild 3.10a Gitterfaktor der hexagonalen Oberfläche. Stufenwahrscheinlichkeiten in allen $(\bar{2}11)$ -Richtungen identisch, rein geometrische Verteilung mit 4 % Wahrscheinlichkeit, auf einem beliebigen Gitterplatz ein Kantenatom anzutreffen.









3.4 Anpassungen

Nach Formel 3.0.5 ist das Integral über den Gitterfaktor normiert, so daß auch gemessene Profile zu normieren und damit unabhängig vom Formfaktor sind.

Um die Terrassenbreitenverteilung zu finden, können die verschiedenen Wege der vorigen Kapitel genutzt werden. Der direkteste Weg ist die Transformation des Gitterfaktors mit dem Busch'schen Algorithmus. Allerdings ist das Verfahren numerisch nicht sehr stabil und kann durch Meßfehler stark gestört werden. Im allgemeinen wird man neben den gewünschten elastischen noch eine unbekannte (nur schwach winkelabhängige) Anzahl an inelastischen Elektronen zählen. Wenn diese dann teilweise dem kinematischen Untergrund zugeschlagen werden, versagt der Algorithmus.

In solchen Fällen kann man versuchen, mit physikalisch sinnvollen Terrassenverteilungen (wie die geometrische) einen Fit des Gitterfaktors zu bekommen. Speziell bei den Modellen

mit wenigen an der Oberfläche beteiligten Netzebenen ist eine Summe von Lorentzkurven mit zunächst unbestimmten Halbwertsbreiten zu anpassen. Die direkte Bestimmung der Halbwertsbreiten ist eine nichtlineare Optimierungsaufgabe. Wenn die beteiligten Breiten stark unterschiedlich sind, gibt es keine Schwierigkeiten. Ansonsten kann der Umstand ausgenutzt werden, daß die Fouriertransformation einer Lorentz- eine einfache Exponentialfunktion ist. Nach Logarithmieren können die Steigungen schrittweise aus der Autokorrelation entnommen werden. Der Untergrund kann nur ϕ_0 erhöhen. Eine deltaförmige Spitze des Gitterfaktors taucht als Konstante auf, die von der endlichen Responsefunktion des Instruments zu einer schwach (gaußförmig) abfallenden Funktion wird. Eine Entfaltung vom Instrument ist so durch Division der Fourierreihe durch eine solche Gaußkurve zu erreichen, daß ein endlicher asymptotischer Anteil enthalten ist.

Im allgemeinen bestimmen wir die Amplituden von fest vorgegebenen theoretischen Bestandteilen im Spektrum. Jede Einzelmessung j ist dabei mit zufälligen Fehlern behaftet, die sich durch eine Verteilungsfunktion P_j charakterisieren läßt. Die sogenannte Maximum-Likelihood-Schätzung betrachtet die Gesamtwahrscheinlichkeit,

$$P = \prod_j P_j(y_j, y(x_j), \sigma_j) \quad 3.4.1$$

daß die Meßwerte y_j aus dem Modell $y(x_j)$ mit der Varianz σ_j^2 stammen. Enthält das Modell die freien Parameter α_k , so wird gefordert, den Parametern die Werte zu geben, die P maximieren. Liegt das erhaltene P unter einer gegebenen Schranke (z.B. 10^{-3}), so ist das Modell abgelehnt. Unsere Messungen sind Impulzzählungen und folgen damit wenigstens der Poissonverteilung mit $\sigma^2 \approx \bar{n}$. Im Fall vieler Counts wird näherungsweise eine Normalverteilung erreicht. Enthält das Modell z.B. vier freie Parameter in linearer Form

$$y(x_j) = \alpha_0 F_{0j} + \alpha_1 F_{1j} + \alpha_2 F_{2j} + \alpha_3 F_{3j}$$

Maximiert man den Logarithmus der Normalverteilungen, so fordert (3.4.1):

$$\sum_j \left(\frac{y_j - \alpha_0 F_{0j} - \alpha_1 F_{1j} - \alpha_2 F_{2j} - \alpha_3 F_{3j}}{\sigma_j} \right)^2 \stackrel{!}{=} \min$$

Die Summe wird χ^2 in der Statistik genannt. Der Index j läuft über alle Meßwerte, die 4 Anpaßkurven sollen durch i gezählt werden.

Das Minimum zeichnet sich dadurch aus, daß die partiellen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial \alpha_k}$ verschwinden. Es bleibt nur die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\sum_k F_k F_{ik} = \alpha_0 \sum_k F_{0k} F_{ik} + \alpha_1 \sum_k F_{1k} F_{ik} + \alpha_2 \sum_k F_{2k} F_{ik} + \alpha_3 \sum_k F_{3k} F_{ik}$$

Trotz der Anpassung der σ an die Meßwerte läßt die Poissonverteilung bei kleinen Zählraten stärkere Ausreißer zu, so daß es sich meistens empfiehlt, mit $\sigma = \text{const}$ zu operieren oder die

Ausreißer vor der Analyse zu entfernen. Die Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems ist meist singular und erfordert deshalb eine geeignete Variante der Gauß-Jordan-Elimination oder eine Eigenwertzerlegung. Die inverse Matrix enthält sofort alle Korrelationen und speziell auf der Diagonalen die Varianzen des Fit.

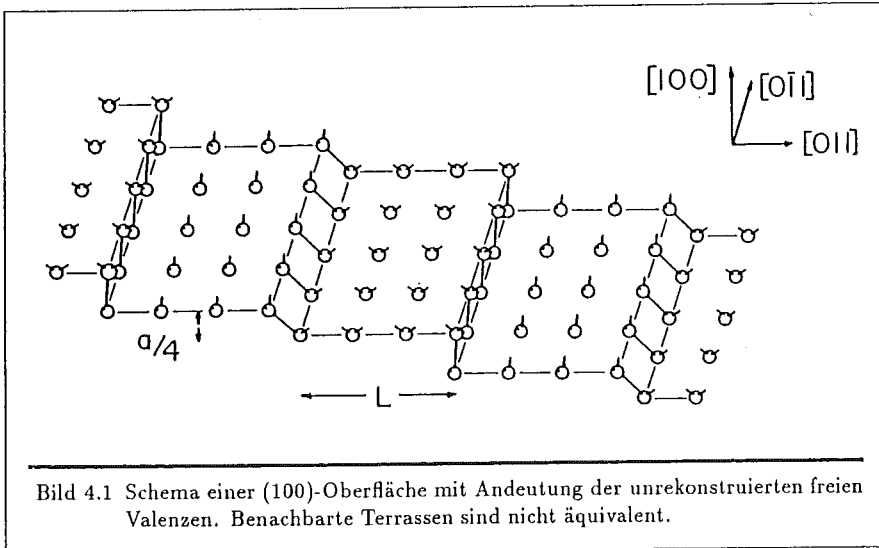
Auch bei den Fits nach 3.1.31 (maximum-entropie-method) mußten in der Praxis diese maximum-likelihood-Schätzungen eingeführt werden, um stabile Ergebnisse zu bekommen.

Nach Messung eines Profils und Integration in die senkrechte Richtung erzeugt im 3-Schichten-Modell eine Linearkombination aus zwei Lorentzfunktionen und einem δ -Spike. Nach Faltung mit der gaußförmigen Instrumentenfunktion und Hinzufügen eines winkelunabhängigen (oder höchstens linear variierenden) Untergrundes aus quasielastischen (z.B. thermischen) Elektronen ist die theoretische Kurve bereit zum Vergleich mit der Messung.

4. Die Si(100)-Fläche

4.1 Simulationen auf einer Modelloberfläche

Zum Test der in Kapitel 3 angegebenen analytischen Formeln wurde eine Modelloberfläche von 128×128 Zellen einer (100)-Oberfläche zugrundegelegt, die einzeln auf beliebige Kristallhöhen des 3-d-Gitters gelegt werden konnten. Als Komplikation tritt auf, daß eine ABAB...-Folge von nichtgleichwertigen Ebenen auftritt und die Stufen auch verschiedene laterale Verschiebungen beinhalten (Bild 4.1).



Als Beispiel hier die berechnete Beugungsintensität einer (100)-Oberfläche, die regelmäßige Terrassen von 16 Atomen Breite aufweist, die abwechselnd auf zwei Schichten verteilt sind. Dabei wurden für die Beugung 4 Atome (Punktstreuer) in die Tiefe hinein berücksichtigt mit einem optischen Potential, das die Wellen von Schicht zu Schicht auf ca. 14% abschwächt.

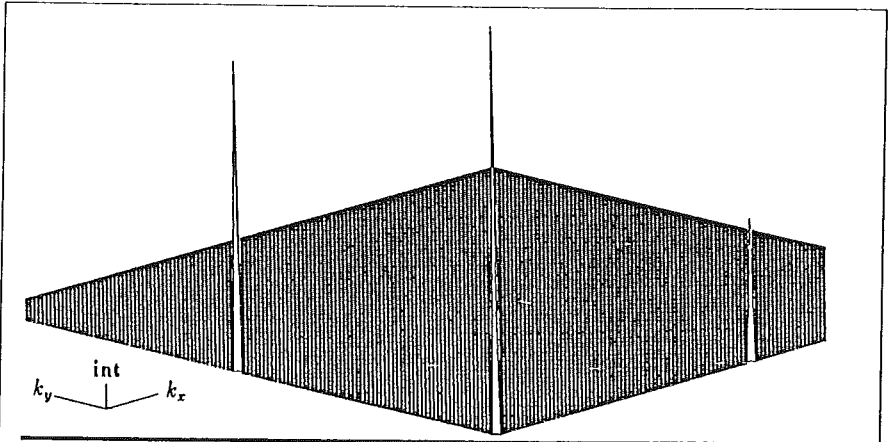


Bild 4.2a Fouriertransformation: k_x, k_y -Abhängigkeit der Beugungsintensität für die Phase 0

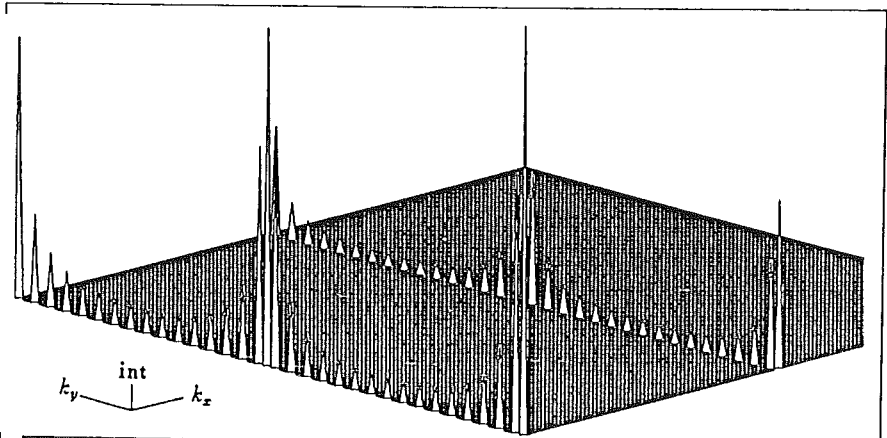
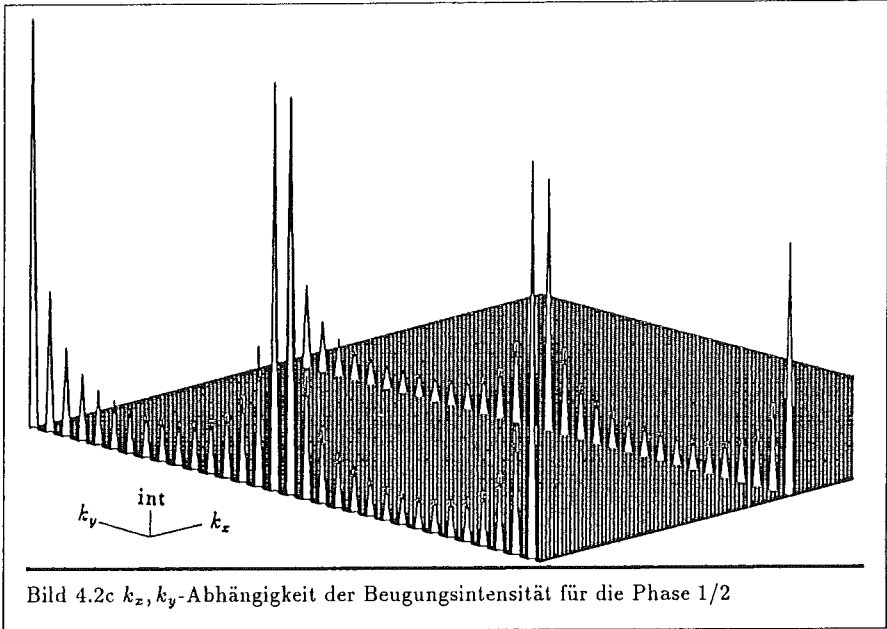


Bild 4.2b k_x, k_y -Abhängigkeit der Beugungsintensität für die Phase $1/4$



Eine mittlere Neigung von 12° kann durch regelmäßige Terrassen der Länge 4 mit Einfachstufen oder auch durch die doppelte Terrassenlänge bei reinen Doppelstufen erreicht werden. Diese zwei Fälle lassen sich gut durch die Periode des Intensitätsverlaufs auf den Terrassenstangen unterscheiden. Die Bilder 4.3 zeigen den Fall der Einfachstufen, 4.4 der Doppelstufen. Dargestellt sind die Intensitäten in Abhängigkeit von k_x und k_z bei festen k_y (0 und π). Deutlich erkennbar ist auch die Verschiebung der (10)-Stangen um $s/2$.

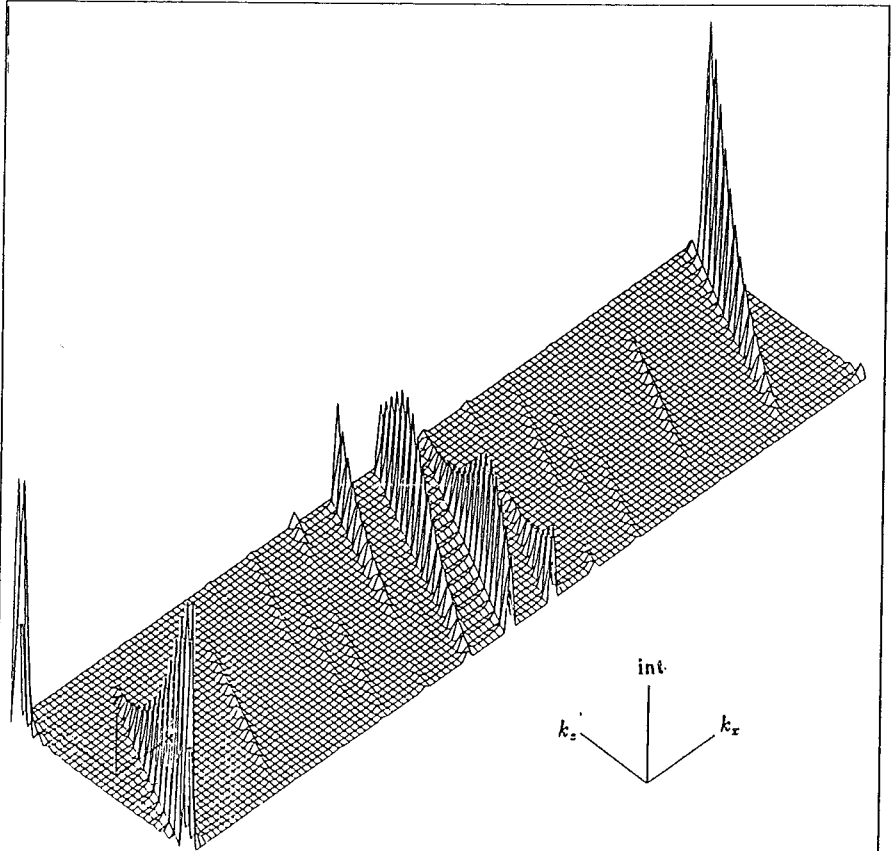
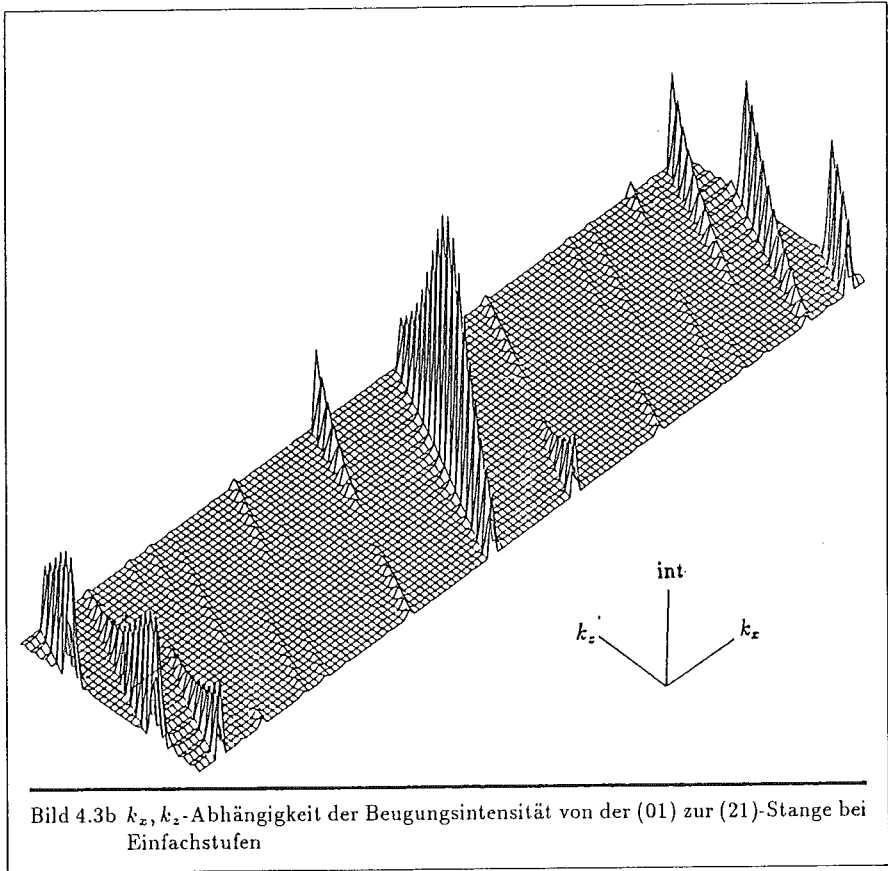


Bild 4.3a k_x, k_z -Abhängigkeit der Beugungsintensität von der (00) zur (20)-Stange bei Einfachstufen



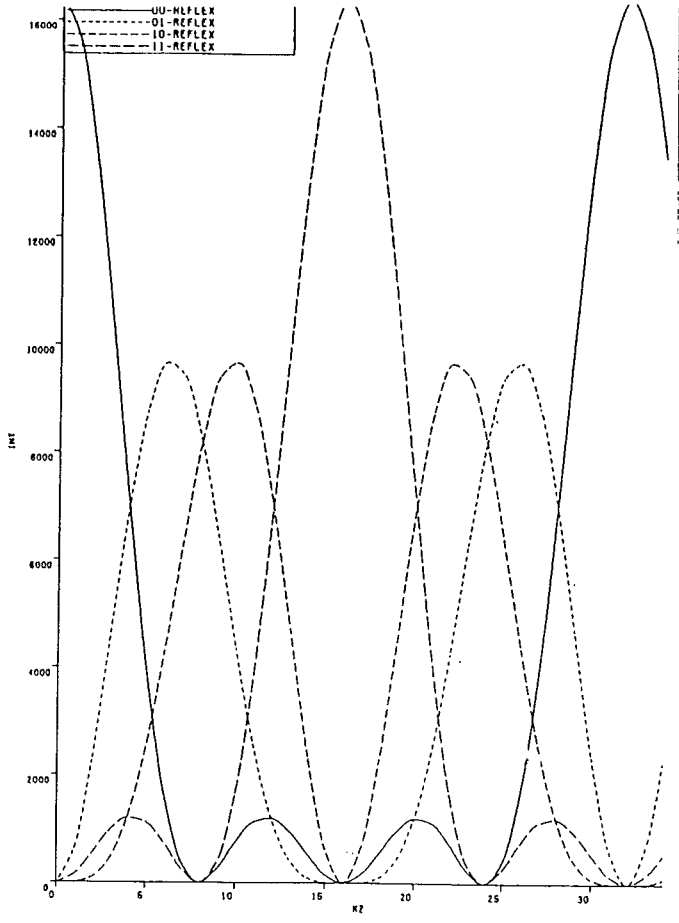
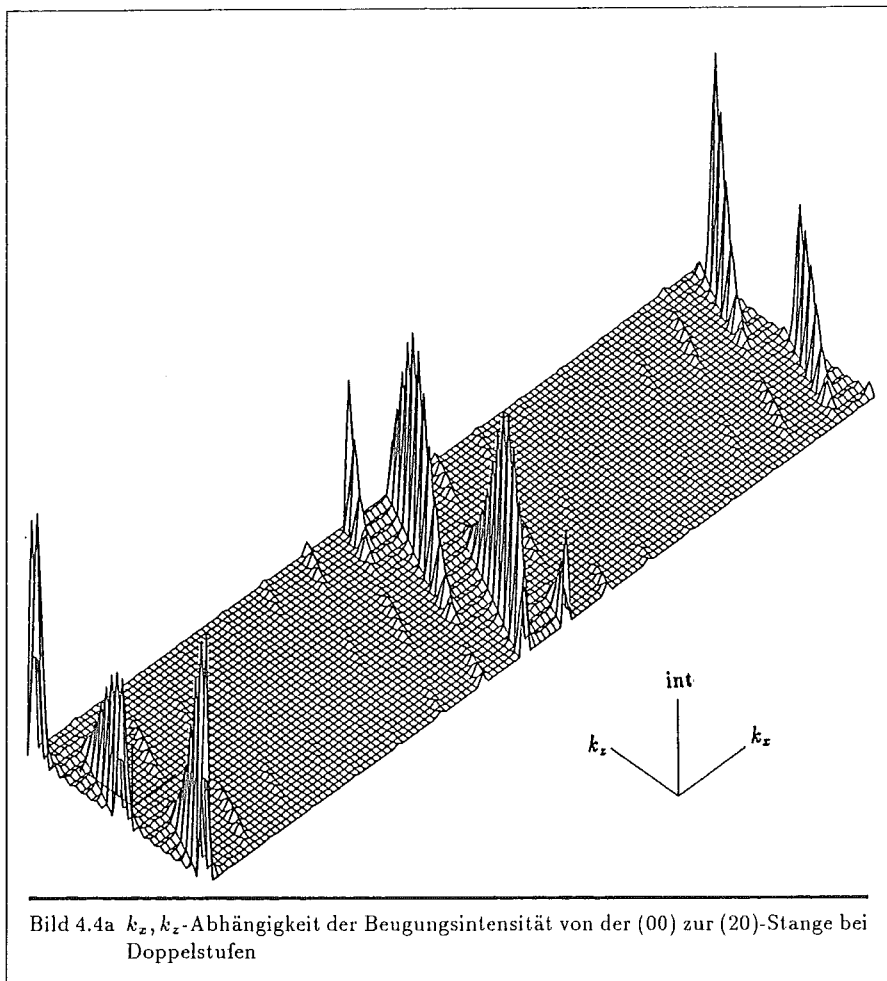


Bild 4.3c k_z -Abhängigkeit der Beugungsintensität auf den Stangen der Einzelterrassen des reziproken Gitters



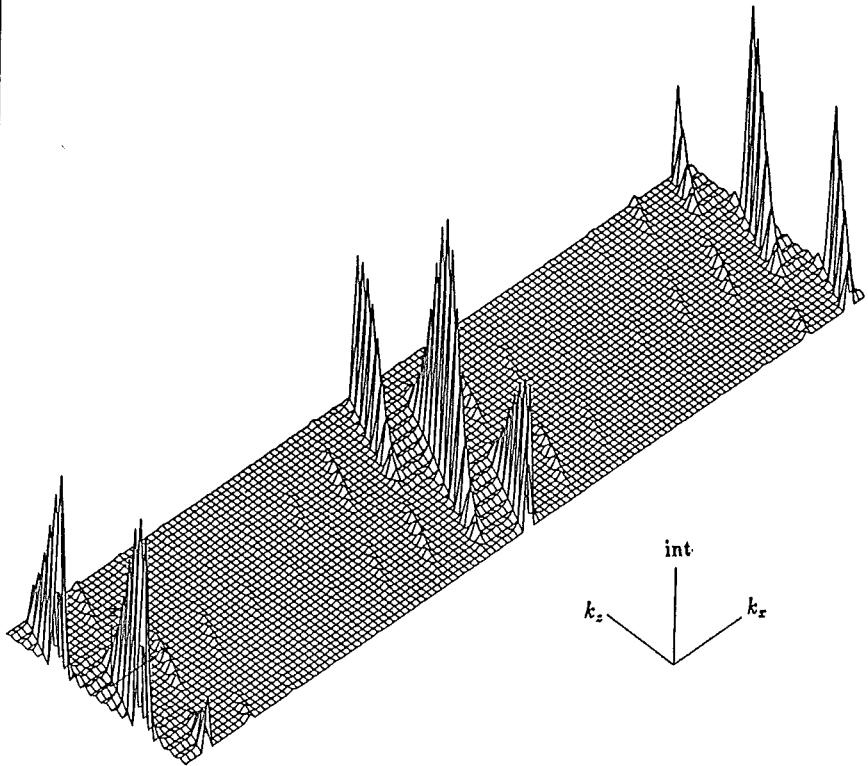


Bild 4.4b k_x, k_z -Abhängigkeit der Beugungsintensität von der (01) zur (21)-Stange bei Doppelstufen

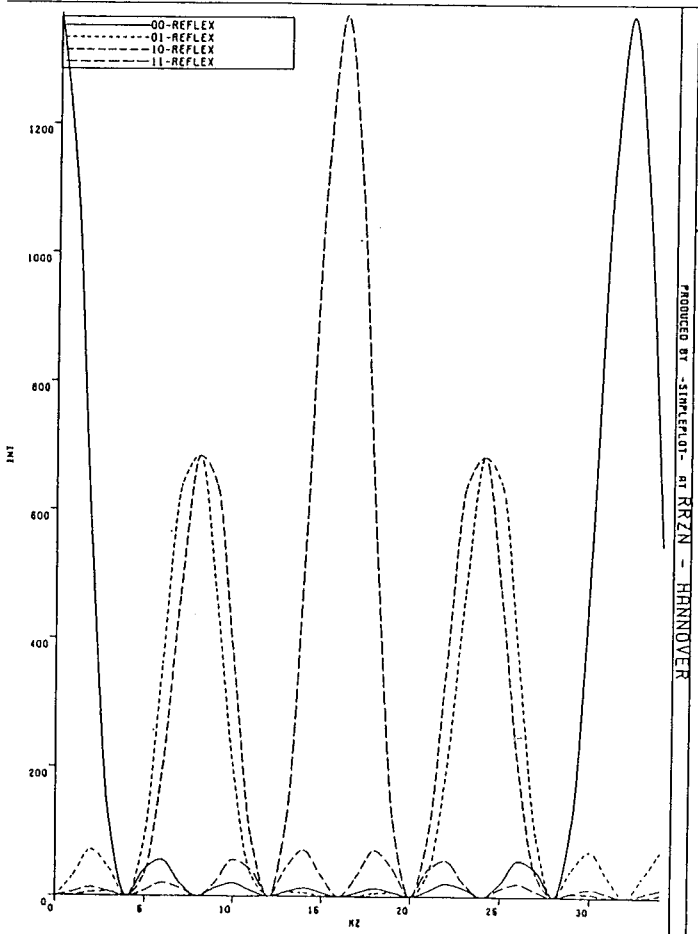


Bild 4.4c k_z -Abhängigkeit der Beugungsintensität auf den Stangen der Einzelterrassen des reziproken Gitters

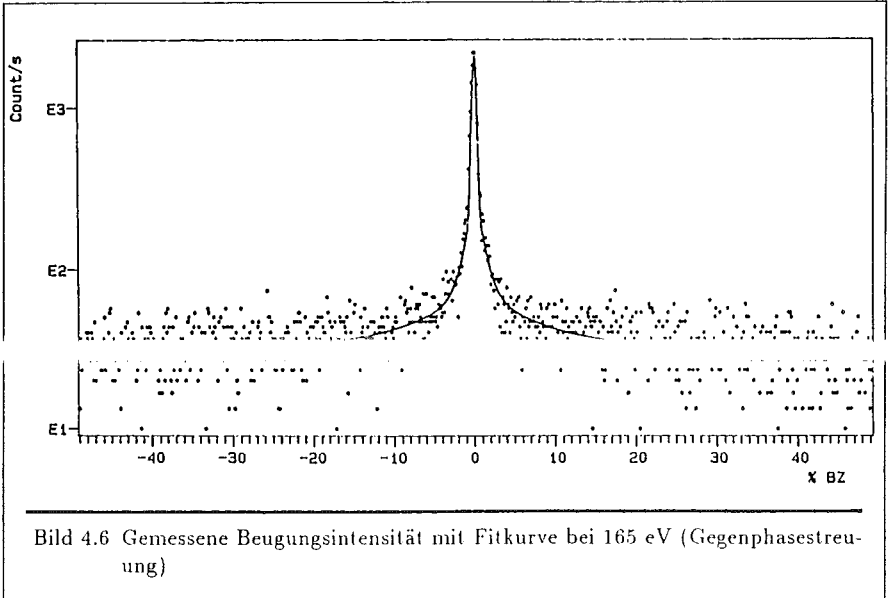
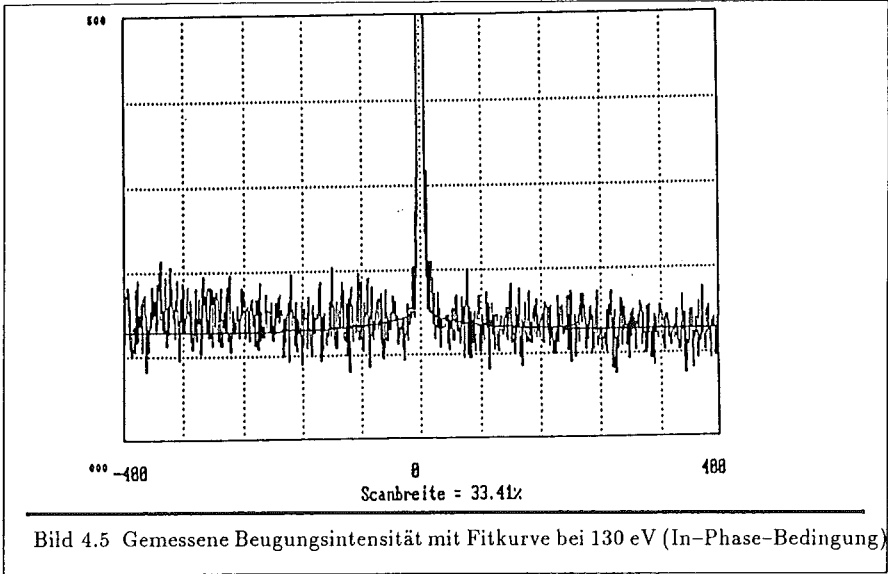
4.2 Messungen

Die Firma Siemens stellte dankenswerterweise (in Zusammenarbeit mit einer anderen Dissertation) eine Reihe von Proben her. Als Vorbehandlung fand eine spezielle naßchemische Reinigung und eine halbstündige Temperung bei 900° C statt. Die (trockene mit 4% HCl) Oxidation erfolgte bei der gleichen Temperatur und führte zu einer Schichtdicke von 42 nm. Eine Probe wurde dann noch 1 Minute in Stickstoffatmosphäre weitergetempert. Eine 30-minütige Einwirkung von 450° C heißer Wasserstoffatmosphäre schloß die allgemeine Behandlung ab. Weitere Behandlungsschritte bis zum Bau von Kurzkanaltransistoren sollten der Untersuchung von Piezowiderstand und Substratstrom dienen ²⁵. Weder bei der LEED-Untersuchung noch bei den Messungen von B. Borchert bei Siemens konnte ein eindeutiger Unterschied zwischen den beiden Proben gefunden werden, daher gibt es nur ein Ergebnis.

Der dynamische Formfaktor der (100)-Oberfläche variiert heftig mit der Energie. Bild 4.5 zeigt eine Meßkurve mit eingetragener Fitkurve bei einer Inphasebedingung für Doppelstufen (130 eV), Bild 4.6 die Gegenphase. Die Gesamtzählrate im Peak betrug etwa 3200 bzw 2100 counts/sec. Der stark rauschende Untergrund in Bild 4.5 deutet an, wie schwach die Rückstreuung trotz kinematischer In-Phase-Bedingung ist. Auch die Streuwinkelabhängigkeit des Formfaktors ist bereits sichtbar: zur Anpassung kann nur ein Teil der Brillouinzone Verwendung finden.

Die Messungen erfolgten mit einer (011)-Einfallrichtung. Damit erscheint die Oberflächenkonfiguration jeder Terrasse um 90° gedreht gegenüber der nächsten Ebene (Bild 4.1) und so mit verschiedenen (Vielfach)-Streufaktoren. Die Messung bei 130 eV erscheint nur in diesem speziellen Azimuth "scharf", bei (010)-Einfallrichtung ist der Reflex vollständig verschwunden. Damit ist die Stufenhöhe von 2.72 Å (d.h. Doppelstufen) nur ein Artefakt der Vielfachstreuung, in Wirklichkeit liegen Einfachstufen vor.

²⁵ B.Borchert, Dissertation Hannover/ München 1987



Die Reflexe sind rund im Rahmen der Meßgenauigkeit. Auch mit Kreisfouriertransformationen um das Maximum konnten keine systematischen Zähligkeiten gefunden werden. Daher findet Formel (3.3.1) Anwendung, die Anpassungen mit $\text{Lor}^{3/2}$ vornimmt. In den Bildern 4.5 und 4.6 wurde nur die rechte Seite des Reflexes angepaßt, links kann man so die instrumentenbedingte Abweichungen von der Symmetrie erkennen. Die eingetragenen Fitkurven sind nur in ihren Amplituden direkt aus der Meßkurve bestimmt, ihre Halbwertsbreiten wurden mittels Fouriertransformation ermittelt.

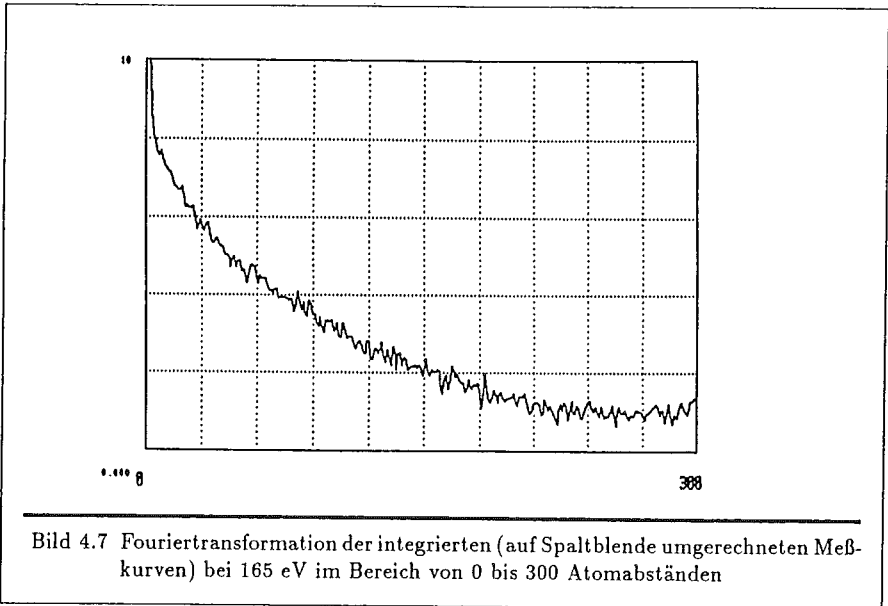


Bild 4.7 Fouriertransformation der integrierten (auf Spaltblende umgerechneten Meßkurven) bei 165 eV im Bereich von 0 bis 300 Atomabständen

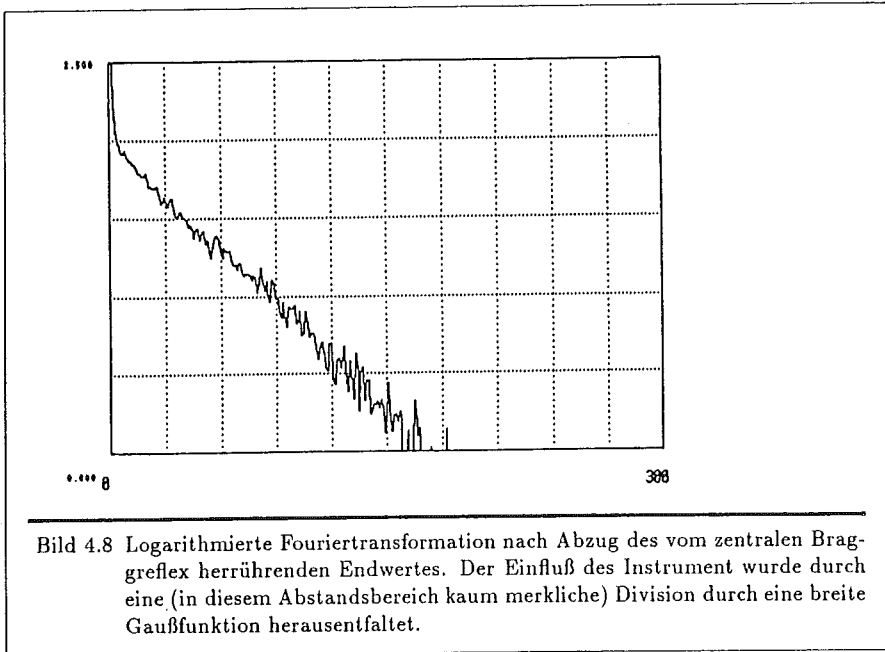
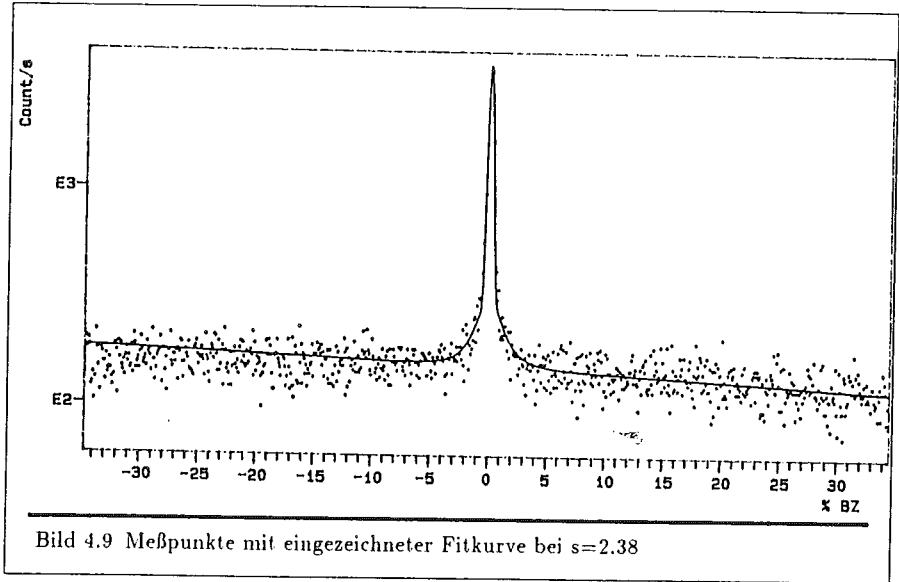


Bild 4.8 Logarithmierte Fouriertransformation nach Abzug des vom zentralen Braggreflex herrührenden Endwertes. Der Einfluß des Instrument wurde durch eine (in diesem Abstandsbereich kaum merkliche) Division durch eine breite Gaußfunktion herausentfaltet.

Im Bereich von 10 bis 150 Gitterabständen ist eine gut linear abfallende logarithmierte Autokorrelation zu erkennen, die Steigung bestimmt die Halbwertsbreite der Lorentzkurve. Das nächste Bild zeigt, wie sich die erhaltene Fitkurve aus 4 Bestandteilen zusammensetzt: ein Deltaspitze mit 0.25% FWHM, eine schmale Lorentzkurve mit 1.6% FWHM und eine breite Lorentz (12%) mit den Amplituden 1719:357:28 sitzen auf einem nichtkinematischen Untergrund (32 counts). Die integralen Verhältnisse berechnen sich zu 4810:2440:10780, der Untergrund enthält in diesem Maßstab 250000 counts.

An Bild 4.5 fällt auf, daß trotz Inphasebedingung eine schwache breite Schulter vorhanden ist. Dies ist mit dem Modell des Gittergases nicht zu vereinbaren und darf deshalb in der Auswertung nicht auftauchen. Bild 4.9 zeigt eine Situation, in der die Gegenphasebedingung bereits ein Stück verlassen wurde. Trotzdem weist die angepaßte $\text{Lor}^{3/2}$ -Kurve noch immer die gleiche Halbwertsbreite auf, nur ihr Anteil hat abgenommen. Die tatsächlich gemessene Intensität ist bei dieser Spannung aber deutlich höher als bei den beiden vorigen Bildern. Dies gilt allerdings nicht für die breite Schulter, die nicht mitgewachsen ist und im hier winkelabhängigen Untergrund kaum nachzuweisen ist.



Formal könnte man nach Absatz 3.1.2 aus den gewichteten Anteilen der schmalen ($\gamma_k = 14.1\text{\AA}$) und der breiten geometrischen Verteilung ($\gamma_l = 119\text{\AA}$) die mittlere Terrassenbreite zu $\bar{\gamma} = 35\text{\AA}$ (entsprechend einer zweidimensionalen Stufendichte von 22%) bestimmen. Das oben angesprochene phasenabhängige Verhalten des breiten Anteils zeigt aber, daß er als nicht relevant für die Stufen anzusehen ist. Man sollte daher lieber beide Zahlen getrennt betrachten. Im nächsten Bild geht so der kinematische Anteil des Bragg- am Gesamtreflex bis auf 1 hinauf.

KRISTALL: VO_1

A = 0.05

A = 0.00

..... B0=0.20

..... B0=0.20

B1=0.30

B1=0.30

B2=0.30

B2=0.30

B3=0.20

B3=0.20

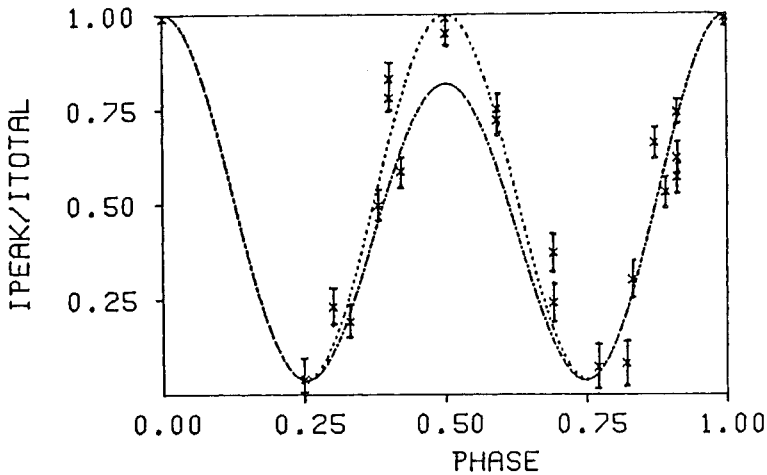


Bild 4.10 Anteil des Deltaspikes an der gesamten kinematischen Intensität

Die eingezeichneten Anpaßkurven für Schichtenverteilung demonstrieren, daß der Betrag der relativen Streuamplitude jeder zweiten Ebene $A \approx 0$ gewählt werden, um trotz Einfachstufenhöhe bei $s=2.5$ wieder auf volle Höhe zu gelangen. Der Bereich ± 0.25 um ganzzahlige s -Werte bleibt praktisch unbeeinflusst. Es liegt ein 4-Schichten-System vor, die Rauhtiefe liegt bei 1.8 \AA .

Die breite Schulter hat bei der Gegenphase eine große Intensität, die die Rundheit der schmalen Schulter vortäuscht. Leichtes Glühen (800°) senkt ihre Intensität aber drastisch ab. Das folgende Bild zeigt, wie dann die typisch sternförmige Struktur des Markoff-Feldes sichtbar wird. Leider beginnen dabei auch die anderen Rauheitsparameter, sich zu ändern, so daß eine quantitative Auswertung nicht sinnvoll ist. Eine gleiche Temperung bei Anwesenheit des Oxids hat dagegen keinen Einfluß auf die breite Schulter.

iMax=101 jMax=101 Contours= 400 bis 8000 step 400

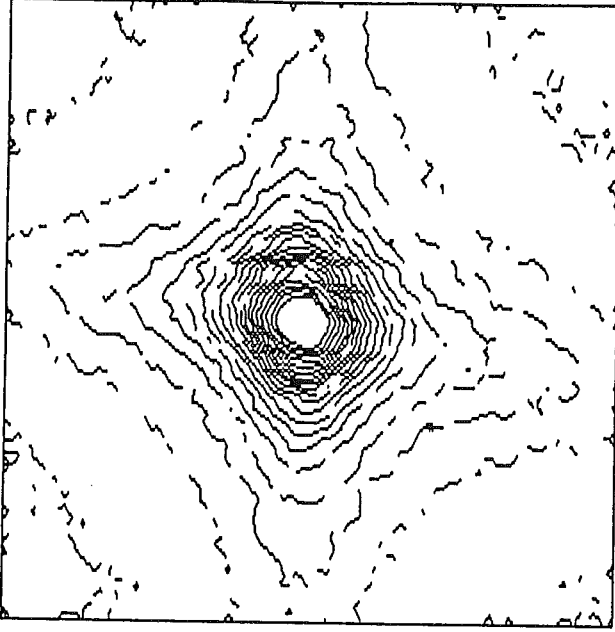


Bild 4.11 Leicht geglühte (100)-Oberfläche. Die oberste Höhenlinie liegt auf der halben Maximalzählrate.

Eine weitere Serie von Proben mit 100 Å Oxid wurde für uns von der Firma Wacker in vier Variationen in Oxidations- und Temper-Temperatur hergestellt. Neben exakten (100)-Flächen liegen auch um 2° gegen die (100)-Richtung geneigte Exemplare vor. Ausführlich sind die Messungen bei Wollschläger²⁶ dargestellt. Hier nur das Ergebnis für die Rauigkeiten in einer Tabelle

Probe	Temperung	$\gamma_l(\text{Å})$	$\gamma_k(\text{Å})$	$\bar{\gamma}(\text{Å})$	Stufendichte	$\sigma(\text{Å})$
Si(100)	ohne	77	12.3	36	22%	1.8
Si(100)	10' 800°	127	13.8	36	22%	1.8
Si(100)	10' 1000°	127	16.5	43	18%	1.8
Si(100)	1h 1000°	192	23.8	64	12%	1.8
Si(100),2°	ohne	96	10.8	28	27%	1.8
Si(100),2°	10' 800°	96	13.5	34	23%	1.8
Si(100),2°	10' 1000°	192	15.4	38	20%	1.8
Si(100),2°	1h 1000°	192	20.8	53	15%	1.8

5. Die ebene 111-Fläche

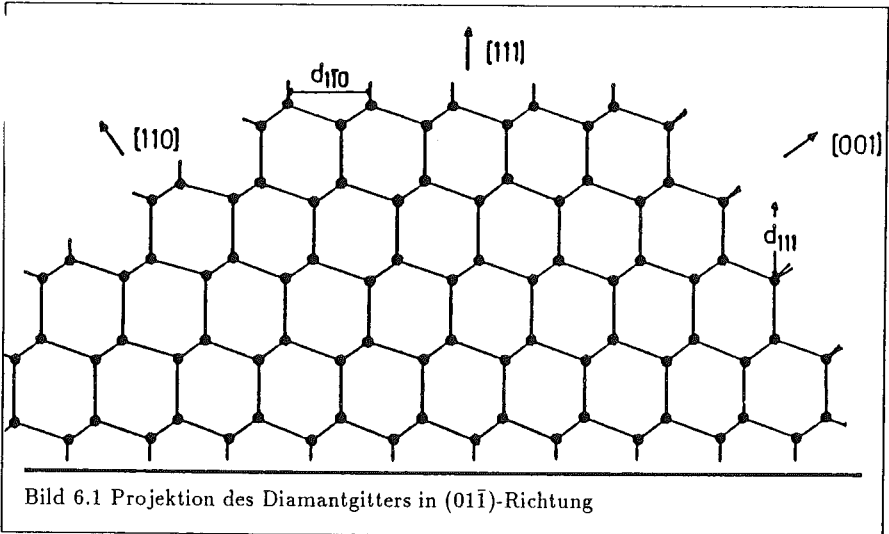
Die Wacker-Proben aus Kapitel 4 lagen auch mit (111)-Oberfläche vor. Wieder sind hier nur die Ergebnisse von Wollschläger zusammengefaßt.

Probe	Temperung	$\gamma_l(\text{Å})$	$\gamma_k(\text{Å})$	$\bar{\gamma}(\text{Å})$	Stufendichte	$\sigma(\text{Å})$
Si(111)	ohne	63	11.0	42	15%	2.0
Si(111)	10' 800°	63	12.6	40	16%	1.6
Si(111)	10' 1000°	63	17.9	58	11%	1.5
Si(111)	1h 1000°	63	24.5	105	6%	1.5

²⁶ J. Wollschläger, Diplomarbeit, Hannover 1987

6. Messungen an geneigten 111-Flächen

Die (111)-Oberfläche besteht aus einer Doppellage von Siliziumatomen, die abwechselnd in den beiden Unterebenen liegen. Diese Geometrie läßt zwei verschiedene Stufenkonfigurationen zu. In der $(\bar{2}11)$ -Richtung bleibt ohne Rekonstruktion eine freie (nicht abgesättigte) Bindung an der Stufe übrig, unmittelbar aufeinanderfolgende Stufen formen wieder eine (111)-Oberfläche. In der Gegenrichtung bleiben demgegenüber zwei Bindungen ungesättigt; die Konfiguration des Kantenatoms entspricht einem Atom der (100)-Oberfläche.



Frühere LEED-Untersuchungen zeigten, daß an der Spaltfläche²⁷ sowie bei der Epitaxie Si auf Si²⁸ regelmäßige Stufenfolgen in der $(\bar{1}\bar{1}2)$ -Richtung auftreten können. Bei Tempern auf über 600°C verschwinden sie allerdings, wenn sie nicht (bei Anwesenheit von Nickel)²⁹ zu Doppelstufen verwachsen.

Energiebetrachtungen zeigen, daß das Kantenatom trotz zwei freien Valenzen durch Rehybridisierung (2-fach besetzter sp- und 1-facher p-Zustand) wie auf der (100)-Fläche eine günstige Konfiguration darstellt. (Die reine Silizium(100)-Oberfläche rekonstruiert mit einer 2×1 Überstruktur durch Bildung von Dimeren³⁰).

Wir untersuchten eine Gruppe von Siliziumwafern mit $1.72 \pm 0.1^\circ$ Neigungswinkel zur (111)-Richtung in Zusammenarbeit mit Dr. P.O. Hahn. Die Bestimmung des Fehlwinkels erfolgte

²⁷ M.Henzler, Surf.Sc. **36** (1973) 109

²⁸ M.Horn, Diplomarbeit Hannover 1985

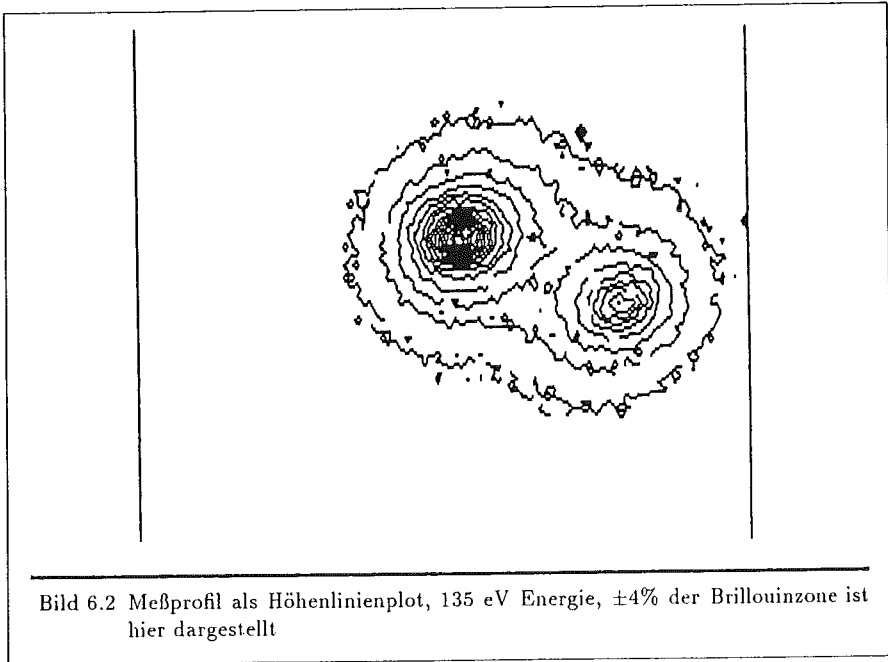
²⁹ F.Jentzsch, Diplomarbeit Hannover 1983

³⁰ Appelbaum, Hamann, Surf. Sc. **74** (1978) 21

im Institut mit einer Zweikristall- Röntgenfeinjustierungsanlage. Die Neigung der Wafer lag azimuthal in $(\bar{1}\bar{1}2)$ -Richtung, also mit einem (100)-Stufenvektor. Die Stufen können nach Somorjai³¹ als $\text{Si}(s)-36(111)\times 1(100)$ klassifiziert werden. Die Proben wurden von der Firma Wacker hergestellt und beidseitig poliert und vom Institut für Halbleitertechnologie, Hannover, in 6 verschiedenen Varianten oxidiert.

Hier seien Messungen an zwei dieser Proben vorgestellt. Als Vorbehandlung fand eine Oxidation der Stärke 50 nm bei 1000° C in trockenem Sauerstoff gefolgt von Tempern bei der gleichen Temperatur 1 Stunde lang in Stickstoff. Vor der Oxidation im Institut für Halbleitertechnologie wurde das alte Oxid mit Flußsäure entfernt. Bei 950° C fand dann die Bildung von 45 nm Oxid statt. Bei der zweiten Probe wurde dann noch der Temperschnitt wie oben wiederholt. Diese zweite Probe sei jetzt vorgestellt.

Dabei konnten erstmals aufgespaltene Reflexe auf der Si/SiO₂-Zwischenfläche nachgewiesen werden. Bild 6.2 zeigt ein Höhenlinienbild von etwa 8% der Brillouinzone in der unmittelbaren Nähe einer Gegenphasebedingung auf der (10)-Stange im 2-dimensionalen reziproken "Stangenwald".



³¹ Somorjai, Surf.Sc. 30 (1972) 440

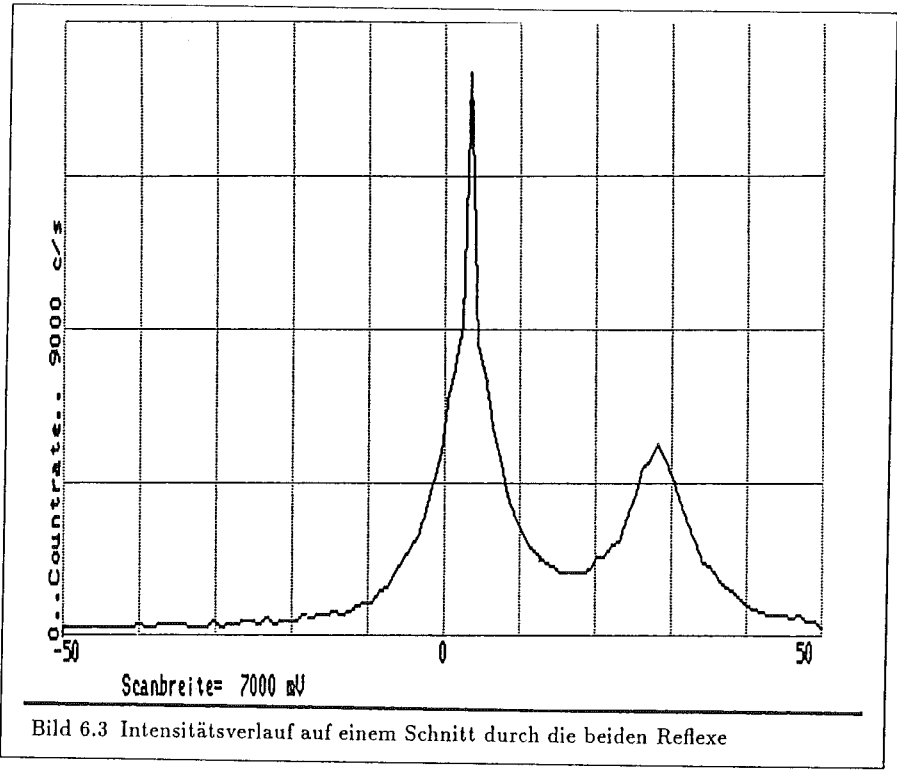


Bild 6.3 Intensitätsverlauf auf einem Schnitt durch die beiden Reflexe

Der Abstand der beiden Facettenreflexe beträgt $3.17\% \pm 0.04\%$ des Abstandes zum nächsten Normalreflexes. Die angegebene Schwankung ist die rein statistische Unsicherheit aus 12 Meßkurven in drei Beugungsordnungen. Umgerechnet auf Neigungswinkel entspricht der Abstand $1.71 \pm 0.02^\circ$ und liegt innerhalb der Fehlergrenze zum röntgenoptisch bestimmten Winkel.

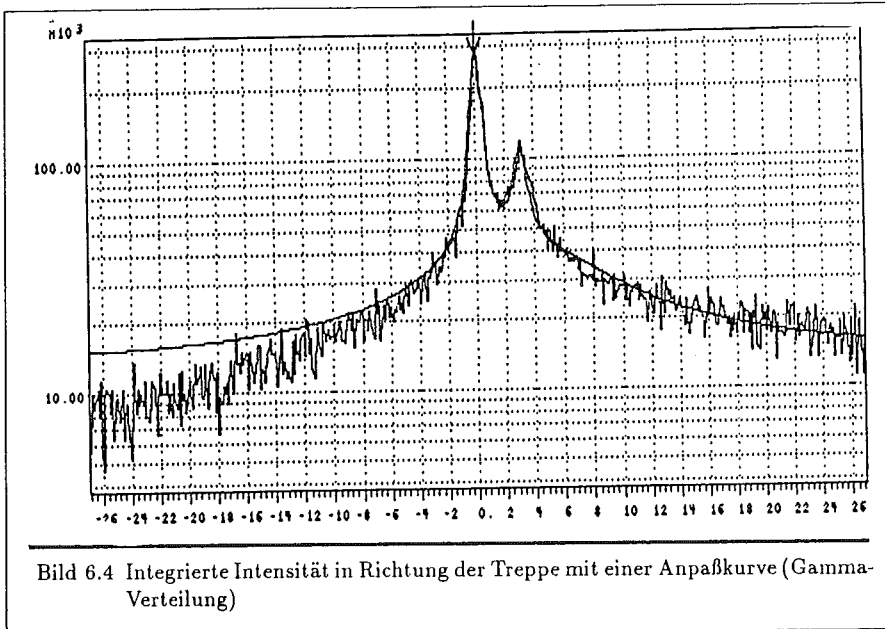


Bild 6.4 Integrierte Intensität in Richtung der Treppe mit einer Anpaßkurve (Gamma-Verteilung)

Das folgenden Bild zeigt eine Intensitätsverteilung, die mit dem Rechner aus zweidimensionalen Scans direkt aufsummiert wurde zu einer hypothetischen Spaltblendenmessung. Diese kann zur Anpassungen an verschiedene analytisch gegebene Terrassenbreitenverteilungen (über die Integralformel von Pimbley oder Pukite) benutzt werden. Eingetragen ist ein Fit, der als Terrassenverteilung die Gamma-Distribution dritten Grades benutzt. Als Fitparameter ergeben sich eine mittlere Terrassenlänge von 36 Atomen, die häufigste Terrasse liegt bei 55. Die Streuung beträgt dann ± 18 Atomabstände.

Außer einer geringen quadratischen Abweichung zwischen Meß- und Anpaßkurve gibt es weitere Anhaltspunkte für die Wahl einer bestimmten analytischen Terrassenbreitenverteilung: Entfernt man sich von $s = 1/2$, wird bei exponentiellen Verteilungen der dominierende Peak schnell schmaler, der andere entsprechend breiter. Bei der Gammaverteilung erfolgt die Verbreiterung langsamer, und bei der Normalverteilung bleibt er fast schmal.

Läßt man Stufen in beide Richtungen zu, so wird bereits ab einem Anteil von etwa 5% die Reflexform verändert (Kap. 3.2). Dieses Verhältnis ist ein empfindlicheres Maß als die Übereinstimmung zwischen $\bar{\Gamma}$ und $\frac{d}{\theta}$, so daß die Messung auf eine monotone Stufenfolge hinweist.

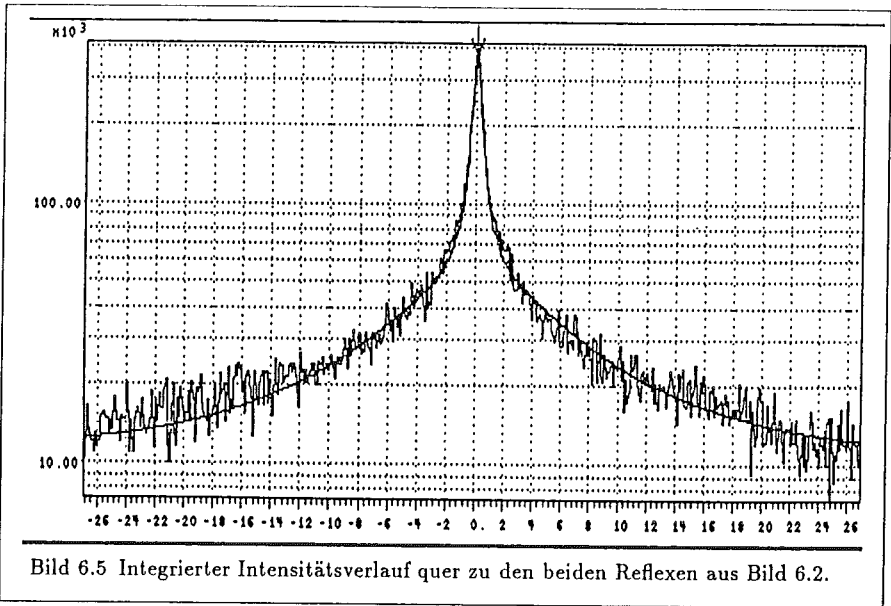


Bild 6.5 Integrierter Intensitätsverlauf quer zu den beiden Reflexen aus Bild 6.2.

Deutlich sind mehrere Bestandteile zu erkennen: ein braggähnlicher Peak, der durch eine langreichweitige mittlere Ebene (von der es nur lokale Abweichungen durch Rauigkeiten gibt) zustandekommt. Hinzu kommt ein breiter lorentzförmiger Unterbau. In der Richtung parallel zu den Stufen liefert der Fitprozeß entsprechend die Rauigkeit der Terrassenkanten (Kinks).

lMax=15 ,lMax=15 Contours= 3 bis 10 step 0,3

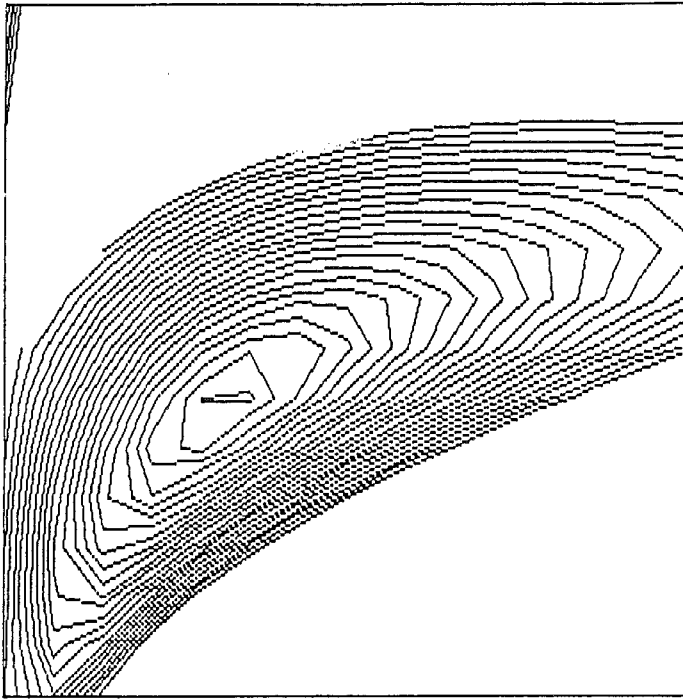
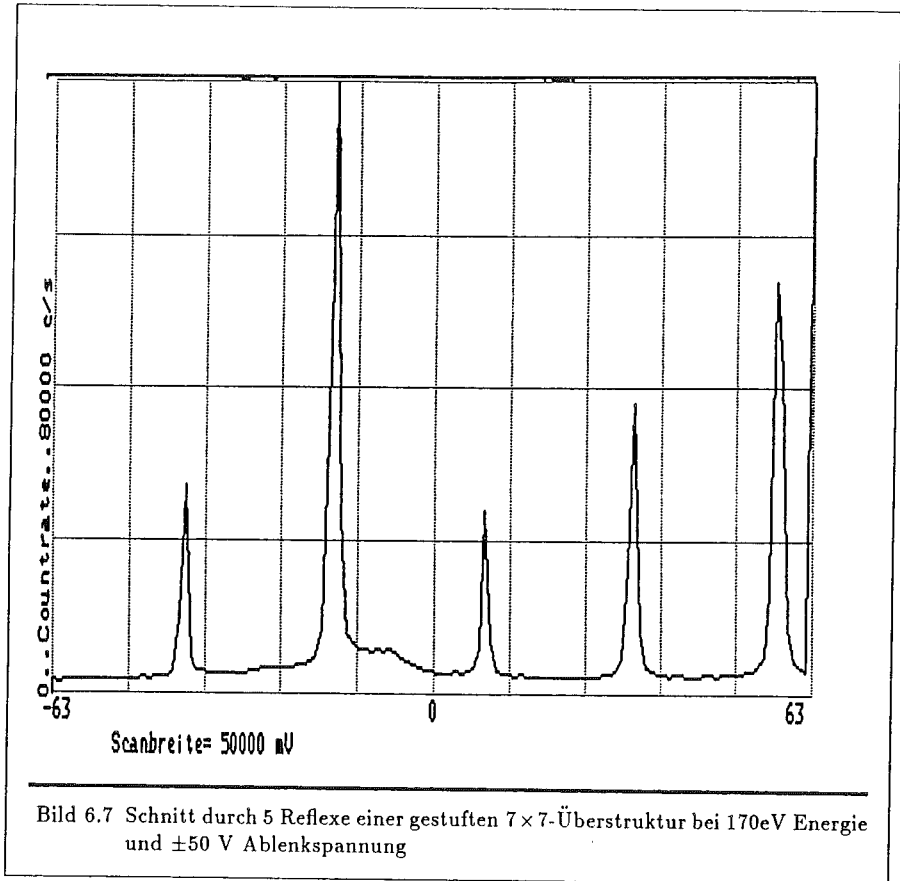


Bild 6.6 Variation der Parameter für Lorentz- und Instrumentenkurve und Darstellung der mittleren quadratischen Abweichung zwischen Meßprofil und jeweils optimal gefitteten Anpaßkurven.

Die beste Halbwertsbreite der Lorentzkurve liegt bei 1.6% . Eine zusätzliche breite Lorentzkurve bleibt unberücksichtigt. Die mittlere Terrassenlänge beträgt somit 99Å.

Der nicht nachgetemperte Wafer zeigt eine deutlich höhere Stufendichte als die bisherige Probe. Seine mittlere Terrassenlänge beträgt nur 56 Å, der gleiche Faktor von 1.8 tritt auch in Stufenrichtung auf.

Eine regelmäßige Stufenfolge an diesen Proben blieb auch nach Glühen auf 7×7 -Überstruktur erhalten. Zwischen großen ebenen Bereichen mit der Überstruktur finden sich noch Gebiete mit kaum veränderter regelmäßiger Stufenfrequenz. Zur Erzielung des makroskopischen Neigungswinkels ist noch eine weitere (unbeobachtete) steile Facette nötig.



7. Schluß

Die Transporteigenschaften eines zweidimensionalen Elektronengases wurde zuletzt theoretisch und experimentell untersucht von A.Gold^{32 33 34} aufbauend auf den Arbeiten von Ando/Fowler/Stern³⁵. Die Beweglichkeit ergibt sich nach der Matthiesenschen Regel

³² A.Gold, V.T.Dolgoplov, Phys.Rev.B **33**,2 (1986) 1076

³³ A.Gold, Phys.Rev.B **32**,6 (1985)

³⁴ A.Gold, Appl.Phys.Lett. **48**(6) (1986)

³⁵ T.Ando, A.B.Fowler, F.Stern, Rev.Mod. Phys. **54** (1982) 37

durch reziproke Addition der Einzelstreuvorgänge. Die Phononenstreuung steigt sehr stark mit der Temperatur, bei der Temperatur des flüssigen Heliums ist sie "ausgefroren". Die Streuung an elektrisch geladenen Störstellen sinkt mit steigender Inversion (Abschirmwirkung der frei beweglichen Elektronen), die Streuung an der Rauigkeit dagegen steigt (erhöhte Konzentration an der Grenzfläche): es bildet sich eine $\mu(n)$ -Funktion mit einem Maximum. Dieses verschiebt sich beim Nachtempern zu kleineren Werten der Elektronendichte. Quantitativ ist die Grenzflächenrauigkeitsstreuung abhängig vom Produkt der lateralen und vertikalen Parameter, die als bei Gold als gaußförmige Verteilung angenommen wird. Trotz dieses Modellunterschiedes stimmen die Parameterwerte etwa mit den bei uns gemessenen überein.

Bereits ungetempert liegen auf der (100)-Oberfläche Rautiefen um eine Schicht vor. Tempern bei 1000°C verdoppelt etwa die lateralen Terrassenlängen. Der starke Einfluß der Zeit läßt eine Ausheilsschwelle bei einer leicht höheren Temperatur vermuten. Daneben wirkt im geringen Maß auch die Oxidation selbst (im diffusionsbegrenzten Bereich) glättend in lateraler Richtung, wie die Siemens-Probe zeigt, die in ihrer Rauigkeit etwa der bei Oxidationstemperatur nachgetemperten 100 Å-Probe entspricht.

Bei den geneigten (111)-Proben ist parallel zu den Stufen bereits ohne Temperung die Rautiefe von nur 0,5 Schichten erreicht. Lateral allerdings ist das Tempern sehr wirksam und verbessert die mittlere Terrassenlänge von 17 auf 30 Atomabstände. Zusammengefaßt ergibt sich das Bild von wellenförmigen Terrassen auf der Oberfläche, die durch das Tempern ausgerichtet werden (Verkürzung der Terrassenkanten): die Kinks an den Stufenkanten sind die bevorzugt ausheilenden Plätze.

Die beste einparametrische Anpassung für den Doppelreflex ergibt sich bei $\alpha \rightarrow \infty$, nur Einfachstufen und Gamma-Distribution mit $a=3$. Als abstoßende Wechselwirkung zwischen zwei Stufen können elastische oder elektrostatische Kräfte vermutet werden. Bei beiden ist eine Energie ρ^4 pro Stufe als treibende Kraft gegeben.

Die weitgehend geometrische Stufenverteilung deutet an, daß die Stufen bei der Oxidation/Temperung diffundieren. Dazu ist ein dreistufiger Prozeß nötig: Emission eines Atoms aus einer Stufe, Diffusion über die Terrasse und Absorption an der nächsten Kante. Mullins¹ hält dabei die Diffusion für den ratenbestimmenden Prozeß. Etwa vorhandene Stufen in Gegenrichtung rekombinieren beim Zusammentreffen mit der dominierenden Sorte.

Die geneigten Proben wurden auch mittels EPR-Messungen von E.H. Poindexter² charakterisiert. Dabei wird das Fermi-niveau an der Oberfläche über ein Gatepotential langsam durch die verbotene Zone gefahren und die paramagnetische Resonanz gemessen. Etwa 0,3 eV oberhalb der Valenzbandkante werden die Grenzflächenzustände mit einem Elektron besetzt und damit 'sichtbar'; etwa 0,5 eV höher wird das zweite Elektron gefangen, so daß das Orbital seinen Paramagnetismus verliert. Dazwischen gibt die gemessene Spindichte P_b die Dichte an Störstellen ($D_{it}/2$) bestehend aus Siliziumatomen mit einer freien Valenz und drei Bindungen zum Siliziumgitter an. Nach den Erfahrungen dieser Arbeitsgruppe

¹ W.W. Mullins, J. Appl. Phys **30**(1959) 77

² E.H. Poindexter, Appl. Phys. Lett **49**(6). (1986). 348

sollten über 10^{12} Spins/cm² entstehen, insbesondere nach den Temperungen in Stickstoffatmosphäre, aber die Messung zeigte nur $2 \cdot 10^{11}$ bei den oxidierten und $5 \cdot 10^{10}$ bei den nachgetemperten Proben und damit weniger als 0.1% einer Monolage. Möglicherweise waren Spuren von Wasserdampf dafür verantwortlich, denn bekanntermaßen sättigt Wasserstoff diese Art von dangling Bonds ab. Obwohl sich die Stufendichte selbst bereits als überraschend klein erwiesen hat, sind nur sehr wenige der Stufen tatsächlich elektrisch aktiv (als schnelle Grenzflächenzustände). Der aktive Anteil könnte durch Wasserstoff bestimmt sein.

Danksagung

Hiermit danke ich Herrn Prof. Dr. M. Henzler für die Möglichkeit, diese Arbeit am Institut für Festkörperphysik durchführen zu können.

Weiterer Dank gilt allen Mitarbeitern des Instituts für die angenehme Zusammenarbeit und für die zahlreichen Vorschläge und Diskussionen, die mir eine große Hilfe waren.

Bei den Mitarbeitern der Feinmechanikwerkstatt bedanke ich mich für den Bau einer Anzahl von Komponenten des Systems und bei der Elektronikwerkstatt für die Herstellung von Geräten.

Auf dem Gebiet der Software bin ich dem RRZN mit der NAG-Bibliothek und SimplePlot sowie den Schöpfern des symbolischen Mathematikprogramms MuMath, das den Elektronenstrahlen analytisch folgen konnte, Dank schuldig.

Dem Institut für Halbleitertechnologie danke ich für die Durchführung von Oxidationen.

Die Firmen Wacker und Siemens stellten freundlicherweise die Siliziumwafer zur Verfügung.

Dem European Research Office (United States) danke ich für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

Lebenslauf

Name Peter Marienhoff
Geburtsdatum 14. 1. 1958
Geburtsort Varel
Eltern Horst Marienhoff und
Ehefrau Lisa, geb. Kuper
Familienstand ledig, keine Kinder
Wohnung Dorotheenstr. 5b
3000 Hannover 21

Schulen 1964-67: Ev. Volksschule Bockhorn
1967-73: Realschule Friesische Wehde
1973-76: Gymnasium Westerstede
Wehrdienst Ausmusterung am 10.3.76
Studium 1976-83 an der Universität Hannover
Physik-Diplomprüfung am 11.8.83
Berufstätigkeit seitdem als wissenschaftlicher Angestellter
am Institut für Festkörperphysik
an der Universität Hannover

Hannover, den 8.10.87

P. Marienhoff

(P. Marienhoff)

