

von den Drahtmodellen geprägte Denken zu verändern.

Das vorliegende Buch spiegelt die Entwicklung des Gebietes in den letzten 18 Jahren und seine aktuelle Bedeutung wider. In 25 Kapiteln geben mehrere Autoren einen Überblick über Simulationstechniken, Kraftfelder und Anwendungen. Eingeleitet wird das Buch sehr ausführlich von Martin Karplus. Allein das Inhaltsverzeichnis des Buches ist länger als der hier zur Verfügung stehende Raum. Daher können nur einige der behandelten Themen herausgegriffen werden.

In den ersten beiden Teilen des Buches werden Grundlagen behandelt, nämlich Simulationstechniken (Moleküldynamik- und Monte-Carlo-Algorithmen) und Kraftfelder. Ein Kraftfeld soll einerseits die quantenmechanische Realität so gut wie möglich annähern, andererseits schnell und effizient zu berechnen sein. Die begrenzte Rechenzeit zwingt immer zu Kompromissen. Vereinfachte Kraftfelder sind nötig, um langsame Prozesse wie die Proteinfaltung zu studieren. Aber auch detaillierte Kraftfelder bleiben Näherungen, und es ist für den Anwender wichtig zu wissen, welche Konsequenzen dies auf die Resultate seiner Rechnungen haben kann.

Eine der wichtigsten Anwendungen von Moleküldynamiksimulationen ist die Berechnung von Freien Energien. Das Buch bietet eine hervorragende Einführung in diesen Bereich, wobei großer Wert auf die Beschreibung von Schwierigkeiten und Fehlerquellen gelegt wird. Es gibt viele Beispiele für erfolgreiche Berechnungen Freier Energien. Andererseits wird auch deutlich, warum die berechneten Vorhersagen nicht immer richtig sein müssen.

Die drei Kapitel über Moleküldynamik bei der Verfeinerung von Molekülstrukturen in der Röntgenstrukturanalyse und der NMR-Spektroskopie nehmen in gewisser Hinsicht eine Sonderstellung im Buch ein. Hier wird der Moleküldynamikalgorithmus nicht zur Untersuchung der Dynamik eines Moleküls benutzt, sondern zur Optimierung für ein schwieriges nichtlineares Problem. Die hervorragenden Konvergenzeigenschaften der Moleküldynamik haben die Verfeinerung revolutioniert. Heute müssen immer weniger Schritte mühsam von Hand durchgeführt werden, und das Endergebnis, die verfeinerte Struktur, wird deutlich schneller erreicht. Erwähnt wird jedoch auch die enge Verbindung gerade zwischen NMR-Spektroskopie und Moleküldynamik.

Bei der Lektüre des Buches habe ich viel gelernt, und ich würde das Buch als eine gründliche Einführung in das Gebiet der

Simulation von Makromolekülen empfehlen. Das Buch ist eine wertvolle Quelle für praktische Informationen und als Nachschlagewerk unentbehrlich. Bei dem Vielautorenwerk ist ein etwas heterogener Eindruck wohl unvermeidlich, ebenso wie Überschneidungen in mehreren Kapiteln über ähnliche Themen. Ich empfinde letzteres jedoch als einen Vorteil, weil so wichtige Themen von verschiedenen Seiten beleuchtet werden. Alle im Buch angesprochenen Bereiche der Simulation von Makromolekülen sind aktive Forschungsgebiete, und wie schon im Vorwort deutlich wird, gibt es selbst für manche methodischen Fragen noch keine endgültigen Antworten. Dankenswert ist die kritische Distanz vieler Autoren zur eigenen Arbeit. Gerade für einen Neuling ist es außerordentlich nützlich, auf Probleme bei der Anwendung hingewiesen zu werden.

*Michael Nilges*

Europäisches Labor für  
Molekularbiologie (EMBL), Heidelberg

**The Chemistry of Metal CVD.** Herausgegeben von *T. T. Kodas* und *M. J. Hampden-Smith*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1994. 538 S., geb. 228.00 DM. – ISBN 3-527-29071-0

Die chemische Abscheidung aus der Gasphase (chemical vapor deposition, CVD), eine Methode zur Herstellung reiner Metallfilme für eine Vielzahl von Anwendungen, ist in jüngerer Zeit im Aufschwung begriffen. Die ursprünglichen Bedenken, daß durch MOCVD (metal organic chemical vapor deposition) abgeschiedene dünne Metallfilme grundsätzlich mit nicht tolerablen Anteilen von Kohlenstoff (oder Kohlenwasserstoff-Fragmenten) verunreinigt seien und so gewonnene Beschichtungen folglich nur bedingten Wert hätten, sind heute bei der inzwischen erbrachten Fülle von Gegenbeispielen zu relativieren. Der weitere Fortschritt ist jedoch noch immer sehr durch den Kommunikationsmangel zwischen Chemikern, Verfahrenstechnikern, Materialwissenschaftlern und Elektrotechnikern gehemmt. Mit diesem Problemfeld vor Augen wollten die Herausgeber des obengenannten Buches einen umfassenden Überblick über den Stand der Forschung (ca. 1470 Referenzen bis 1994) anbieten, die für eine heterogene Leserschaft aus unterschiedlichen Disziplinen gleichermaßen von Nutzen sein sollte.

Eine kurze Einführung (Kap. 1) ist der Metallkontaktierung silicumbasierter Halbleiterbauelemente (z.B. Diffusions-

barrieren, Metallsilicidkontakte), zukünftigen Entwicklungsmöglichkeiten und den Vor- und Nachteilen gängiger Abscheidetechniken gewidmet. Danach wird in den Kapiteln 2–8 die Metallabscheidung von Al (2), W (3), Cu aus Cu<sup>II</sup>-Vorläufern (4), Cu aus Cu<sup>I</sup>-Vorläufern (5), Au und Ag (6), Pt, Pd und Ni (7) sowie Ta, Cr, Mo, Fe, Co, Rh, Ir und weniger gebräuchlichen Metalle, intermetallischen Phasen und Legierungen (8) behandelt. Die Beiträge über Al-CVD (M. G. Simmons und W. L. Gladfelter) und Cu-CVD (G. L. Griffin, A. W. Maverick, M. J. Hampden-Smith und T. T. Kodas) sind sehr geschlossen, inhaltsreich, didaktisch gut konzipiert und eignen sich daher auch als Rohstoff zum Einbau in materialchemisch ausgerichtete Kurse für Studenten der relevanten Fachrichtungen. Stichwörter wie das Zusammenspiel von Oberflächen und Gasphasenchemie, die Abhängigkeit von der Prozeßführung (Reaktortyp, Art der Energiezufuhr), ortsselektive Beschichtung, Pränucleation in der Gasphase, Reinheit, elektrische und morphologische Eigenschaften bilden nur einen kleinen Ausschnitt aus der Fülle der zwar knapp, aber prägnant und kompetent dargestellten Problemfelder. Die Kapitel 3, 6, 7 und 8 sind dagegen mehr im Stil einer nicht immer kritisch kommentierten, allerdings recht vollständigen Literaturübersicht abgefaßt. Die ausführliche stoffchemische Beschreibung der als Vorläufer eingesetzten Organometallverbindungen ist für den chemisch Vorgebildeten aber weitgehend, wenn nicht vollständig überflüssig. Für den Leser wäre es günstig gewesen, hätten die jeweiligen Autoren die Aufarbeitung der Literatur stärker gestrafft, da über weite Textpassagen lediglich die Inhalte von Tabellen paraphrasiert werden. In diesem Sinne unterscheiden sich die angebotenen Abhandlungen kaum von bereits verfügbaren neueren Übersichtsartikeln anderer Autoren in verschiedenen Journalen und Fortschrittsbänden. In Kapitel 8 wird eine gebündelte kritische Auseinandersetzung mit den vielen zusammengetragenen Einzelfakten versucht, die aber doch einiges vermissen läßt. So bleibt unter anderem weitgehend undiskutiert, welche Chancen für die MOCVD reiner metallischer Ti-, Cr-, V-, Nb- oder Ta-Filme, die ja alle ausgesprochene Carbidbildner sind, wirklich bestehen könnten. Insgesamt wird nur für wenige Fälle gesichertes mechanistisches Datenmaterial vorgestellt. Dies spiegelt aber weniger ein Versäumnis der Autoren denn die Tatsache wider, daß das Gebiet noch sehr in der Entwicklung begriffen ist, und so ist es nicht verwunderlich, wenn viele Abschnitte

deutlich spekulativen Charakter haben. Kapitel 9, „Overview of Metal CVD“, ist im wesentlichen eine 70 Seiten starke Zusammenfassung des Werkes, die auch einen Abriss verfahrenstechnischer Gesichtspunkte (z.B. Reaktordesign, Vorläufer-Transport, Wachstumskinetik) enthält. Dieser Teil ist jedoch, verglichen mit anderen Darstellungen (z.B. Hitchman und Jensen 1993, Vossen und Kern 1991), auf das Allernötigste beschränkt. Die Gesamtstruktur des Bandes, die Ordnung nach einzelnen Elementen oder Metallen und die Themenverteilung brachten viele Redundanzen mit sich. Eine rigorose Straffung des Textes und eine stärkere Bündelung der Einzelfakten unter übergeordneten Gesichtspunkten (z.B. C-Inkorporation, Nucleation, Selektivität, Morphologie, Einfluß der Prozeßvariablen etc.) wäre durchaus möglich gewesen.

Bleibt noch festzustellen, daß das Buch sehr ansprechend gestaltet und so gut wie fehlerfrei ist. Es ist sicher eine wertvolle Stütze sowohl für den interessierten Molekülchemiker wie auch für den Anwender, um rasch die weit verstreute Literatur zu überblicken. Es dürfte in Teilen als Grundlage für Lehrveranstaltungen gute Dienste leisten, aber als eine erste zusammenfassende Darstellung eines bereits etablierten Forschungsgebiets in Buchform, wie es der Titel nahelegt, kann es nur bedingt gelten. In jedem Fall ist es für den gebotenen Inhalt keineswegs preiswert!

Roland A. Fischer

Anorganisch-chemisches Institut  
der Technischen Universität München

**Practical Surface Analysis A2, Vol. 1. Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy.** 2. Auflage. Herausgegeben von D. Briggs und M. P. Seah. Wiley, Chichester, Salle + Sauerländer, Aarau, 1994. 649 S., Broschur 49.95 £. – ISBN 0-471-9540-7

Die erste Auflage dieses Buches, die 1983 in einem blauen Einband erschien („the blue book“), wurde schon bald zu einem unentbehrlichen Handbuch für den Praktiker auf dem Gebiet der angewandten Auger- und Photoelektronenspektroskopie

(AES bzw. XPS). 1990 erschien die zweite, in vielen Punkten verbesserte und erweiterte Ausgabe („the red book“), die jetzt broschiert herausgekommen ist.

Das ausdrückliche Ziel der Herausgeber ist es, eine praktische Hilfe, besonders auch für Anfänger, auf dem Gebiet der beiden wichtigsten elektronenspektroskopischen Methoden, AES und XPS, in einem Buch zu geben. Der Bogen spannt sich von der Einführung in die theoretischen Grundlagen bis hin zu den wichtigsten Anwendungsgebieten. Nicht zuletzt durch seine Homogenität wurde das Buch auch für viele Oberflächenanalytiker zu dem Standardbuch schlechthin.

Das Buch ist in zehn Kapitel aufgeteilt. Die ersten fünf befassen sich mit den Grundlagen von AES und XPS, während die Kapitel 6–10 den wichtigsten Anwendungsgebieten vorbehalten sind. Im ersten Kapitel wird der Leser in allgemeine Aspekte der Oberflächen- und Dünnschichtanalytik eingeführt, bei denen Elektronen-, Ionen- oder Photonenstrahltechniken eingesetzt werden. Das zweite Kapitel, „Instrumentation“, ist besonders für den Neueinsteiger in die Oberflächenanalytik interessant, da er hier mit einigen wichtigen Komponenten der UHV-Technik und der Elektronenspektrometer vertraut gemacht wird. Im dritten Kapitel werden die charakteristischen Merkmale der Auger- und der Photoelektronenspektren in Augenschein genommen und ihre Interpretation und ihr Informationsgehalt gut verständlich mitgeteilt. Die Kapitel 4 und 5 befassen sich mit der Eichung sowohl der Konzentrationsskala als auch der Tiefenskala bei der Tiefenprofilanalyse. Hier findet der Leser alle wichtigen theoretischen Ansätze sowie praktische Versuche für eine Quantifizierung auch unter Berücksichtigung der Problematik bei der Tiefenprofilanalyse durch Ionen-Sputtering. Diese beiden Kapitel zählen zu den besten des Buches.

In den folgenden Kapiteln werden wichtige Anwendungsgebiete für AES und XPS beschrieben, was zwangsläufig auch zu einer Übersicht über den aktuellen Stand in Forschung und Technik führt. Außerdem finden sich hier typische Beispiele zu den einzelnen Spezialgebieten. Dabei legen die Autoren besonderes Augenmerk auf experimentelle Problematiken wie Aufladung

der Oberfläche, strahlinduzierte Effekte und laterales und Tiefenauflösungsvermögen sowie auf wichtige komplementäre analytische Methoden. So wird das Ziel der Herausgeber, in die Anwendungsgebiete einzuführen und eine breite Übersicht zu präsentieren, in fast allen Fällen erreicht. Kapitel 6 handelt von „Applications of AES in Microelectronics“, Kapitel 7 von „AES in Metallurgy“. Nach zwei interessanten Abschnitten – Einführung und Charakterisierung der Segregation – befaßt sich letzteres intensiv mit theoretischen Aspekten, thermodynamischen Prozessen und der Segregationskinetik. Im Gegensatz zu diesen beiden eher schwachen Kapiteln enthält Kapitel 8, in dem die Elektronenspektroskopie auf die heterogene Katalyse angewendet wird, eine sehr gute Diskussion der methodischen Probleme und möglichen Fehlerquellen. XPS-Studien an Trägermaterialien, Platinmetall-Katalysatoren, Zeolithen und zur Entschwefelung werden ausführlich diskutiert. Die Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) als eine wichtige komplementäre Methode wird dargestellt. Kapitel 9 beschäftigt sich mit „XPS in Polymer Technology“; hervorzuheben sind die hilfreichen Abschnitte über Bindungsenergien und funktionelle Gruppen. In Kapitel 10 wird schließlich die Elektrochemie als eine wichtige komplementäre Methode auf dem Gebiet der Korrosionsforschung behandelt. Oberflächenrauheit und Strahlungseinflüsse werden grundlegend diskutiert.

Es folgen neun Anhänge, mit denen alle für die Elektronenspektroskopie relevanten physikalischen Aspekte und praktische Erfahrungen abgedeckt werden. Die Anhänge 5 bis 9 enthalten hilfreiche und aktuelle Tabellen über Energien, Empfindlichkeitsfaktoren und Linienpositionen.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die vorliegende Ausgabe ein Muß für jeden Analytiker auf dem Gebiet der Auger- und Photoelektronenspektroskopie ist und daß der Erwerb des Buches jetzt durch die kartonierte Ausgabe finanziell erleichtert wird.

Henning Bubert

Institut für Spektrochemie  
und Angewandte Spektroskopie  
Dortmund