

$$\chi_i(E) = \frac{h \nu_j}{2 m m u^2} \sqrt{\frac{h \nu_j}{2 m}} \int_E^{\infty} \frac{dE'' S(E'')}{E'' k T_e(E'')} \exp \left(\int_E^{E''} \frac{dE'}{k T_e(E')} \right); \quad (8b)$$

$$S_i(E) = m \sqrt{\frac{m}{2 h \nu_j}} \sum_{j=2}^3 A_j \frac{\nu_j}{\nu_2} \int_E^{\infty} dE' [(n_j+1) \sqrt{E(E-h\nu_j)} \bar{\chi}_i(E) + n_j \sqrt{E(E+h\nu_j)} \bar{\chi}_i(E) - n_j \sqrt{E(E-h\nu_j)} \bar{\chi}_j(E-h\nu_j) - (n_j+1) \sqrt{E(E+h\nu_j)} \bar{\chi}_j(E+h\nu_j)] \quad (9b)$$

In Gl. (9 b) haben wir $\bar{\chi}$ an Stelle von χ geschrieben, da in dem Iterationsverfahren ein Zwischenschritt eingeschaltet werden muß, der sichert, daß

$$S_i(0) = 0 \quad (16)$$

ist; dies bedeutet, daß die Gesamtzahl der Elektronen in jedem einzelnen Tal stationär ist, und sorgt für die Konvergenz des Integrals (8 b). Um (16) in jedem Iterationsschritt zu gewährleisten, muß man die Näherungsausdrücke für die χ_i in folgender Weise neu normieren (mit einer gemeinsamen Konstanten α , die für die Berechnung der Beweglichkeit nicht interessiert):

$$\bar{\chi}_i(E) = \frac{\alpha \chi_i(E)}{\int_0^{\infty} dE \sqrt{E(E+h\nu_j)} \{ (n_3+1) \chi_i(E+h\nu_j) + n_3 \chi_i(E) \}} \quad (17)$$

Das Iterationsverfahren — bestehend in der wiederholten Anwendung von (17), (9 b), (8 b) — konvergiert in wenigen Schritten und läßt sich graphisch bequem durchführen. Aus der erhaltenen Lösung berechnet sich der Beweglichkeitstensor zu

$$\beta = - \frac{2e}{3} \frac{\sum_i \frac{1}{m_i^*} \int_0^{\infty} dE \chi_i(E) \frac{d}{dE} (E^{3/2} \tau)}{\sum_i \int_0^{\infty} dE \chi_i(E)} \quad (18)$$

Auf Anwendungen des Iterationsverfahrens soll später im Zusammenhang mit experimentellen Untersuchungen zurückgekommen werden. Einige wesentliche Züge der Lösungen lassen sich an den Ausgangsgleichungen ablesen. Die Abnahme der Elektronentemperatur mit wachsender Energie gem. Gl. (14) — besonders nach Überschreiten der Anregungsenergien $h\nu_j$ — drängt den Einfluß der optischen und intervalley-Stöße gegenüber einer isothermen Behandlung der heißen Elektronen zurück. Andererseits zeigt Gl. (17) eine Umbesetzung der Täler infolge des Feldes; die Elektronen bevorzugen Täler, deren große Achsen kleine Winkel mit dem Feld bilden. Dieser Effekt ist als Ursache der Anisotropie der Leitfähigkeit von Ge⁵ — ähnliches ist für Si zu erwarten — in hohen Feldern anzusehen.

⁵ W. SASAKI, M. SHIBUYA et al., J. Phys. Chem. Solids **8**, 250 [1959].

Oberflächenzustände an hochreinem Germanium

Von K. SCHUEGRAF und K. SEILER

Institut für Theoretische und Angewandte Physik
der Technischen Hochschule Stuttgart

(Z. Naturforsch. **15 a**, 368—369 [1960]; eingegangen am 15. März 1960)

Durch geeignete Maßnahmen bei der Hydrolyse von GeCl₄ und mehrfache Anwendung einer tiegfelfreien Zonenreinigung nach KECK gelang es, Germanium mit einem elektrisch wirksamen Störstellengehalt von weniger als 10¹⁰ cm⁻³ zu erhalten.

Die Proben waren bei Temperaturen < 200 °K p-leitend. An den reinsten Proben wurde für die Löcherbeweglichkeit μ_p ein Temperaturgesetz

$$\mu_p \sim T^{-2,57}$$

gefunden.

Die hohe Reinheit der Proben erlaubt es, Oberflächenzustände, die als Akzeptoren wirken, durch Messungen von spez. Leitfähigkeit und HALL-Effekt zu untersuchen. Die spez. Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur zeigt im Störleistungsbereich ein Maximum bei etwa 200 °K. Daraus läßt sich an verschiedenen Proben eine

maximale Dichte der Oberflächenzustände N_A von 1,2 bis 1,4 · 10¹¹ cm⁻² bestimmen. Der Störleistungsbereich ist für Temperaturen von 120° bis 200 °K durch die Oberflächenzustände bedingt, die Restverunreinigung kann demgegenüber vernachlässigt werden. Aus der Temperaturabhängigkeit der Dichte der Träger, die durch die Ionisation der Oberflächenzustände entstehen, läßt sich die Lage des Oberflächen-Akzeptorniveaus E_A zu 0,20 eV über dem Valenzband bestimmen. Die Bandaufwölbung V_D ist von der Präparation der Probe abhängig und beträgt bei 200 °K etwa 0,30 eV. Die gesamte Raumladung zur Kompensation der Oberflächenzustände ist durch freie Löcher aufzubringen. Dies hat eine große Ausdehnung der Raumladungszone zur Folge. Die DEBYE-Länge x_0 beträgt bei 200 °K etwa 4 · 10⁻³ cm. Eine verringerte Beweglichkeit in der Randzone, wie sie von SCHRIEFFER¹ diskutiert wurde, kann für die Berechnung der Trägerdichte aus der spez. Leitfähigkeit außer Betracht bleiben.

Die Oberflächenzustände können als T_{AMM}-Zustände gedeutet werden. Ihre im Vergleich zur Zahl der Oberflächenatome geringe Dichte von 10¹¹ Zuständen pro

¹ J. R. SCHRIEFFER, Phys. Rev. **97**, 646 [1955].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

cm² wäre dann durch ein ähnliches Modell zu erklären, wie es von READ² für die Besetzung von Akzeptorzuständen entlang einer Versetzungslinie angenommen wurde.

Die Oxydation der Oberfläche hat eine Abnahme der effektiven Oberflächenzustände zur Folge. Dieser Vorgang läßt sich in Übereinstimmung mit HANDLER³ als Chemiesorption von Sauerstoff verstehen. Für die zeitliche Abnahme der Oberflächenzustände ergibt sich derselbe Zusammenhang wie er von WOLSKY⁴ für die Oxydation der Germaniumoberfläche durch Gewichtsänderung gefunden wurde. Die Aktivierungsenergie für die Bedeckung der Germaniumoberfläche mit einer monatomaren Sauerstoffschicht wurde von GREEN, KAFALAS und ROBINSON⁵ zu 0,24 eV bestimmt. Der von uns aus

der Abnahme der Oberflächenzustände bei zunehmender Oxydationstemperatur ermittelte Wert betrug 0,22 eV.

Die Einwirkung verschiedener Gasatmosphären auf die Oberfläche hat eine Verschiebung des Oberflächenpotentials Φ_s um maximal 0,052 eV zwischen Stickstoff mit Ammoniak und feuchtem Stickstoff bei 180 °K zur Folge. Hierbei ergibt sich eine qualitative Übereinstimmung mit den Untersuchungen von BRATTAIN und BARDEEN. Die Aktivierungsenergie E_A ändert sich bei Oxydation und in verschiedenen Gasatmosphären nicht.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die mit Mitteln und Geräten gewährte Unterstützung.

² W. T. READ JR., Phil. Mag. **45**, 119 u. 775 und **46**, 111 [1954].

³ P. HANDLER, Semiconductor Surface Physics, University of Pennsylvania Press, Philadelphia 1957, S. 23.

⁴ S. P. WOLSKY, J. Phys. Chem. Solids **8**, 114 [1959].

⁵ M. GREEN, J. A. KAFALAS u. P. H. ROBINSON, Semiconductor Surface Physics, University Pennsylvania Press, Philadelphia 1957, S. 349.

Dynamical X-ray Diffraction Theory of Spherical Waves

By N. KATO

Division of Engineering and Applied Physics,
Harvard University, Cambridge, Massachusetts, U.S.A. *
(Z. Naturforschg. **15 a**, 369—370 [1960]; eingegangen am 29. Februar 1960)

The usual theory of X-ray diffraction assumes that the incident beam is a pure plane wave. This assumption may not be allowed if $\Delta\theta \lesssim \Omega_0$, where $\Delta\theta$ is an angular width of reflection by a single crystal (assuming a plane wave) and Ω_0 is an angle in \mathbb{R} -space within which the FOURIER transform of the incident wave has appreciable value. Without using a lens system, Ω_0 of a spherical wave of wave number K cannot be reduced to less than $1/(KL)^{1/2}$ at a distance L from the radiation source. Typical figures such as $\Delta\theta \sim 10^{-5}$, $K \sim 2\pi \cdot 10^8$ cm⁻¹ and $L \sim 10$ cm show that $\Delta\theta \lesssim \Omega_0$ in X-ray cases. Thus we have to consider intrinsically a diffraction theory of a spherical wave.

Since a spherical wave can be expressed as a superposition of plane waves, wave fields in a crystal also can be expressed as a superposition of crystal waves due to plane waves which are obtained by the ordinary theory. The resultant crystal waves can be expressed as follows:

Transmitted wave:

$$\Phi_0^{(j)} = \frac{i}{8\pi^2 K} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C_0^{(j)} \exp i T^{(j)} \frac{dK_x dK_y}{\cos(\mathbb{R} \delta)}. \quad (1)$$

Reflected wave:

$$\Phi_g^{(j)} = \frac{i \exp 2\pi i (g \tau)}{8\pi^2 K} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C_g^{(j)} \exp i T^{(j)} \frac{dK_x dK_y}{\cos(\mathbb{R} \delta)} \quad (2)$$

where $T^{(j)} = (\mathbb{R} \tau_e) + (\mathbb{F}^{(j)} \tau - \tau_e)$, (3)
(j) = 1 and 2,

and $C_0^{(j)}$ and $C_g^{(j)}$ are amplitudes of a transmitted and reflected beam due to a plane wave $\exp i(\mathbb{R} \tau)$. The position vectors τ and τ_e drawn from the X-ray source denote respectively an observation point of the wavefield inside the crystal and a point on the incident surface of the crystal. Crystal wave vector $\mathbb{F}^{(j)}$ and vacuum wave vector \mathbb{R} are connected by a tangential continuity condition; g is a reciprocal lattice vector. K_x and K_y are x and y components of \mathbb{R} . As shown in Fig. 1, x and z axes are taken in a plane containing the g and τ vectors, the z axis being parallel to \mathbb{R}_B , that direction of \mathbb{R} which satisfies the BRAGG condition exactly.

Integration with respect to K_y has been carried out by a steepest descent method. Integration with respect to K_x has been carried out by a contour integral method with \mathbb{R} approximated as

$$(\mathbb{R} \tau) = K r + K_x x + 0(r/K) \quad (4)$$

and absorption effects neglected. The results are as follows:

$$\left| \sum_j \Phi_0^{(j)} \right|^2 = \frac{|\beta|}{32\pi K r} \left(\frac{a-q}{a+q} \right) J_1^2(t_0 |\beta| \sqrt{a^2 - q^2}) \quad |q| < a$$

$$= 0, \quad |q| > a \quad (5)$$

$$\left| \sum_j \Phi_g^{(j)} \right|^2 = \frac{|\beta| \sqrt{\gamma_0 \gamma_g}}{32\pi K r} J_0^2(t_0 |\beta| \sqrt{a^2 - q^2}) \quad |q| < a$$

$$= 0, \quad |q| > a \quad (6)$$

where $|\beta|$ is a parameter proportional to the structure factor of the reflection concerned, J_0 and J_1 are the zeroth and first order BESSEL functions, $a t_0$ and $q t_0$ have the meaning shown in Fig. 1, and γ_0 and γ_g are the cosines of the angles between the normal of the in-

* Now at H. H. Wills Physics Laboratory, Royal Fort, Bristol 8, England.