

Die Struktur epitaktisch aufgedampfter Goldfilme

I. Analyse der Röntgen-Beugungsreflexe

W. Fischer und P. Wißmann

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. 31a, 183–189 [1976]; eingegangen am 7. November 1975)

Structure of Epitaxially Grown Gold Films. I. Analysis of X-Ray Diffraction Patterns

Gold films of 400 Å thickness were evaporated under UHV-conditions on (111)-, (110)- and (100)-oriented silicon substrates and were subsequently investigated by x-ray diffraction. Mainly the influence of orientation and cleanliness of the substrate on film structure was studied.

Informations on the orientation and size of the crystallites as well as on lattice distortions were obtained by analysing intensity, angular displacement and width of the diffraction peaks. It is found that the gold films show a preferred (111)-orientation in all cases; only the degree of orientation changes with the pretreatment of the substrate. The size of the (111)-oriented crystallites corresponds to the film thickness, and a noticeable density of intrinsic stacking faults can be detected.

1. Einleitung

Frühere Untersuchungen^{1–4} hatten ergeben, daß auf Glasunterlagen aufgedampfte Metallfilme im allgemeinen eine polykristalline Struktur aufweisen. Andererseits benötigt man für das Studium der Chemisorptionsbindung von Gasen an Metallocerflächen Filme, die eine möglichst wohldefinierte kristallographische Orientierung der Oberfläche besitzen^{5, 6}. Deshalb lag es nahe, die Herstellung solcher einkristalliner Filme durch Aufdampfen auf geeignete Einkristallträger zu versuchen. Das Trägermaterial wurde nach folgenden Gesichtspunkten ausgewählt. Es sollte

- keine metallischen Eigenschaften besitzen, damit elektrische Messungen an den Filmen durchgeführt werden können^{7, 8},
- eine gewisse minimale Leitfähigkeit besitzen, damit eine Reinigung des Trägers durch direkte Stromheizung erfolgen kann,
- eine gute Temperaturbeständigkeit, also einen hohen Schmelzpunkt und einen niedrigen Dampfdruck besitzen,
- in verschiedenen Orientierungen in größeren Stückzahlen zu einem annehmbaren Preis käuflich zu erwerben sein.

Umfangreiche Vorversuche zeigten, daß diese Bedingungen besonders gut durch einkristalline Siliziumträger erfüllt werden. Auf diese Träger, die in

der Oberfläche je nach Wahl relativ ungestörte (111)-, (110)- oder (100)-Netzebenen aufwiesen, wurde bei Raumtemperatur Gold aufgedampft. Ziel der vorliegenden Arbeit war es, mit Hilfe der Röntgenbeugung durch Analyse der Reflexprofile Aussagen über Gitterfehler, Kristallitgrößen und Kristallorientierung in den Filmen zu erhalten. In einer nachfolgenden Arbeit⁹ wird dann an den gleichen Filmen das Texturverhalten analysiert und diskutiert.

2. Experimentelles

Die Goldfilme wurden bei Raumtemperatur in einer kugelförmigen Glaszelle nach Abb. 1 aufgedampft. Die Wendel W bestand aus Wolframdraht ($\varnothing = 0,3$ mm), der mit kleinen Reitern aus spektral-reinem Golddraht (Materials Research Corp., USA)

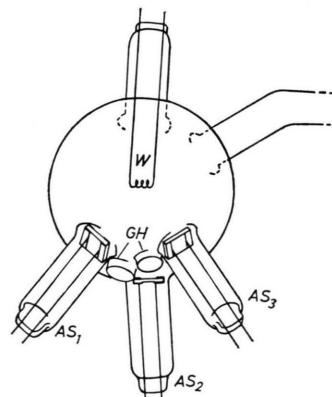


Abb. 1. Aufdampfzelle (schematisch). Bezeichnungen siehe Text.

Reprint requests to Priv.-Doz. Dr. P. Wißmann, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg, Egerlandstr. 3, D-8520 Erlangen.

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.



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.

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.

bestückt war. Die gesamte Goldmenge war dabei so bemessen, daß bei vollständigem Abdampfen die mittlere Schichtdicke der Filme etwa 400 \AA betrug. Der Restgasdruck während des Aufdampfens lag bei $2 \cdot 10^{-10} \text{ Torr}$, die Aufdampfgeschwindigkeit bei 10 \AA/min .

Am Boden der Zelle befanden sich drei etwas gegeneinander versetzte Ansatzstutzen AS, die jeweils mit zwei weitgehend beglasten Wolframdurchführungen versehen waren (Abbildung 1). An die Durchführungen waren Molybdänhalterungen angepunktet, die ein Glühen der Siliciumträger mittels Stromheizung möglich machten. Zusätzlich waren Glashalterungen GH für zwei weitere Träger angebracht. Mit dieser Anordnung war es möglich, jeweils einen bei höheren Glühtemperaturen vorbehandelten (111)-, (110)- und (100)-orientierten Siliciumeinkristall sowie einen ungeglühten Si-(111)-Kristall und einen Glasträger unter weitgehender Konstanthaltung aller übrigen Herstellungsparameter zu bedampfen.

Die verwendeten Siliciumeinkristalle (Fa. Wacker, Burghausen) besaßen die Abmessung $(20 \times 10 \times 1) \text{ mm}^3$ und waren schwach mit Bor dotiert ($\varrho > 500 \Omega \text{cm}$). An den Schnittflächen wiesen sie noch erhebliche Rauhigkeiten auf, deshalb wurden sie zunächst nach dem üblichen Verfahren¹⁰ chemisch poliert. Nach dem Einsetzen in die Vakuumapparatur wurden die Kristalle dann bei Stromstärken von 5 bzw. 10 A geäglüht. Dies entsprach etwa 900 K bzw. 1200 K , wie durch Messung der Trägertemperatur mit Hilfe eines Pyrometers ermittelt wurde.

Nach Beendigung der Glühbehandlung (Dauer etwa 20 Minuten) und Abkühlung auf Raumtemperatur wurden die Träger bedampft und anschließend aus der Vakuumapparatur herausgenommen. Die röntgenographische Untersuchung erfolgte bei Atmosphärendruck in einem Zählrohrgoniometer (Philips PW 1050), das mit automatischem Schrittschaltwerk und Druckereinheit ausgerüstet war. Hierdurch konnte die Reflexintensität in Schritten von $0,01^\circ$ über längere Zeit hinweg punktweise ausgezählt werden, woraus eine sehr hohe Meßgenauigkeit resultierte. Zusätzlich wurde die Untergrundstrahlung, von der die $\text{K}\alpha$ -Strahlung der verwendeten Kupfer-Feinfokussierungsrohre begleitet war, durch Anwendung eines doppelt-fokussierenden Monochromators stark geschwächt.

3. Ergebnisse

Da die Goldfilme verhältnismäßig dünn waren (400 \AA), erfuhren die an den einkristallinen Si-Trägern gebeugten Röntgen-Strahlen durch den Film keine nennenswerte Schwächung. Das hatte zur

Folge, daß neben den zu untersuchenden, von den Goldfilmen herrührenden Reflexen stets auch etwa um den Faktor 10^5 intensitätsstärkere Siliciumreflexe vorhanden waren. Es ist klar, daß unter diesen Umständen ein Vermessen der Filmreflexe nur möglich ist, wenn Film- und Träger-Reflexe weit genug entfernt voneinander liegen. Glücklicherweise ist diese Bedingung im System Au/Si sehr gut erfüllt. Abbildung 2 zeigt, daß mit einer Überlagerung

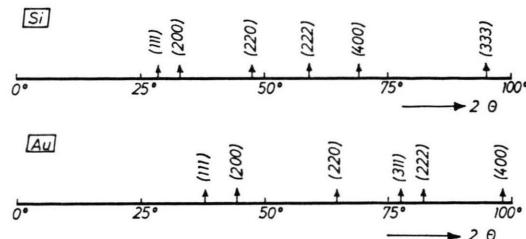


Abb. 2. Winkellage der verschiedenen Silicium- und Goldreflexe.

von Au-Reflexen (kubisch-flächenzentriertes Gitter, $a = 4,0784 \text{ \AA}$)¹¹ und Si-Reflexen (Diamantgitter, $a = 5,4308 \text{ \AA}$)¹¹ an keiner Stelle gerechnet werden muß.

Die gemessenen Goldreflexe stellen eine Überlagerung der von der α_1 - und α_2 -Komponente der Cu- $\text{K}\alpha$ -Strahlung herrührenden Reflexintensitäten dar. Aus diesem Grund wurden beide Anteile zunächst nach einem graphischen Verfahren^{4, 12} getrennt. Die auf diese Weise ermittelten α_1 -Reflexe wiesen stets eine symmetrische Form auf. Abbildung 3 zeigt ein typisches Beispiel. Zusätzlich ist in die Abbildung gestrichelt eine theoretische Kurve eingetragen, die gemäß einer Cauchy-Verteilung

$$y = (1 + k^2 x^2)^{-1} \quad (1)$$

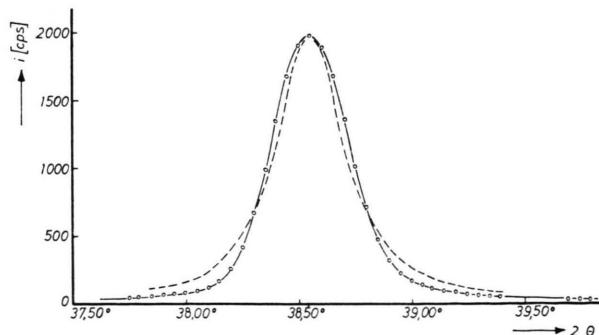


Abb. 3. Typisches Beispiel der α_1 -Komponente eines (111)-Reflexes. Gestrichelte Kurve berechnet nach Gl. (1) (Cauchy-Verteilung).

Tab. 1. Intensitäten der untersuchten Beugungsreflexe.

Nr.	Trägermaterial	Glühtemperatur [K]	I (111)	I (200)	I (220)	I (311)	I (222)
1	Glas	550	100	1,7	0,1	0,6	7,3
2	Si (111)	550	100	6,0	1,2	3,4	11,2
3	Si (111)	900	100	0,5	0,2	0,4	5,5
4	Si (110)	900	100	1,0	0,5	1,0	4,5
5	Si (100)	900	100	0,4	—	0,3	5,1
6	Si (111)	1 200	100	—	—	—	75
7	Si (110)	1 200	100	1,6	1,3	1,4	3,1
8	Si (100)	1 200	100	0,9	—	0,1	7,1

berechnet wurde. Man erkennt, daß die Meßpunkte durch diese Verteilung recht gut beschrieben werden. Deshalb wurde auf eine Fourieranalyse der Reflexprofile verzichtet und lediglich Reflexintensität, Winkellage des Reflexmaximums und Halbwertsbreite des Reflexprofils ausgewertet. Hieraus ließen sich dann Angaben über Orientierung, Fehlordnungsgrad und Größe der einzelnen Kristallite gewinnen.

3.1. Ermittlung der Kristallorientierung

Bei der verwendeten Bragg-Brentano-Fokussierung¹⁴ röhren die gemessenen Beugungsintensitäten stets nur von solchen Kristalliten her, deren Netzebenen für den untersuchten Reflex parallel zur Filmunterlage ausgerichtet sind. Die Reflexintensitäten stellen also unmittelbar ein relatives Maß für die Vorzugsorientierung der einzelnen Kristallite dar. Setzt man die Intensität des (111)-Reflexes willkürlich gleich 100, so erhält man durch Planimetrieren die in Tab. 1 eingetragenen Zahlenwerte. Alle Ergebnisse wurden mindestens einmal an Filmen, die unter vergleichbaren Bedingungen hergestellt waren, reproduziert. Deshalb stellen die eingetragenen Zahlenwerte repräsentative Mittelwerte dar. In Spalte 2 der Tabelle ist das verwendete Trägermaterial, in Spalte 3 die Temperatur der vor dem Bedämpfen durchgeführten Glühbehandlung eingetragen. Aus den Spalten 4–8 ersieht man, daß die Filme immer eine stark ausgeprägte (111)-Vorzugsorientierung aufweisen, d. h. die Intensitäten der (200)-, (220)- und (311)-Reflexe sind außergewöhnlich klein. Die stärkste Ausrichtung nach (111) erfolgt auf dem hoch ausgeheizten Si-(111)-Träger (Film Nr. 6), die schwächste auf dem nur nach dem üblichen Verfahren im UHV ausgeheizten Si-(111)-Träger (Film Nr. 2). Eine stärkere Ausrichtung der Filme nach (110) oder (100) wird in keinem Fall beobachtet. Dies steht in Übereinstimmung mit früheren Ergebnissen, die ebenfalls mit Hilfe der

Röntgenbeugung¹⁵ sowie mit Hilfe der Beugung langsamer Elektronen¹⁶ erhalten worden waren.

3.2. Ermittlung der Gitterverzerrungen innerhalb der Kristallite

Da die Reflexprofile eine symmetrische Form aufwiesen (vgl. Abb. 3), ließ sich die Gitterkonstante a unmittelbar aus der Winkellage Θ des Reflexmaximums nach der für kubische Kristalle gültigen Beziehung⁴

$$a = \lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} / 2 \sin \Theta \quad (2)$$

berechnen (λ = Wellenlänge der Cu-K α_1 -Strahlung, h, k, l = Millersche Indices). Um Justierfehler zu eliminieren, wurde zunächst ein als Eichsubstanz dienender (111)-orientierter Goldeinkristall vermessen. Abbildung 4 a zeigt die nach Gl. (2) berechneten Gitterkonstanten in einer Auftragung gegen $\cos^2 \Theta / \sin \Theta$. Diese Auftragung empfiehlt sich, wenn als Justierfehler im wesentlichen eine exzentrische Probenanordnung in Frage kommt¹⁴. Bei der Extrapolation auf $\cos \Theta = 0$ ergibt sich eine Gitterkonstante, die mit dem Literaturwert¹¹

$$a = 4,0784 \text{ \AA} \quad (3)$$

sehr gut übereinstimmt.

In früheren Untersuchungen^{4, 15, 17} konnte bereits nachgewiesen werden, daß Gitterverzerrungen in polykristallinen, auf Glasträgern aufgedampften Filmen im wesentlichen auf thermisch induzierte Spannungen¹⁸ und Verformungsstapelfehler¹⁹ zurückzuführen sind. Die thermisch induzierten Spannungen entstehen, wenn sich der Film während des Aufdampfprozesses lokal erhitzt und nach Beendigung des Aufdampfens wieder auf Raumtemperatur abkühlt. Infolge der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Film und Unterlage kann der Film in diesem Fall in der Filmebene gedehnt werden, was je nach Kristallorientierung eine

unterschiedlich starke Gitterkontraktion in der Richtung senkrecht zur Filmebene zur Folge hat^{17, 20}. Die verschiedenen Gitterverzerrungen äußern sich in charakteristischen Abhängigkeiten der Gitterkonstante vom Glanzwinkel Θ , wie sie für das Beispiel aufgedampfter Goldfilme in Abb. 4 b und 4 c ein-

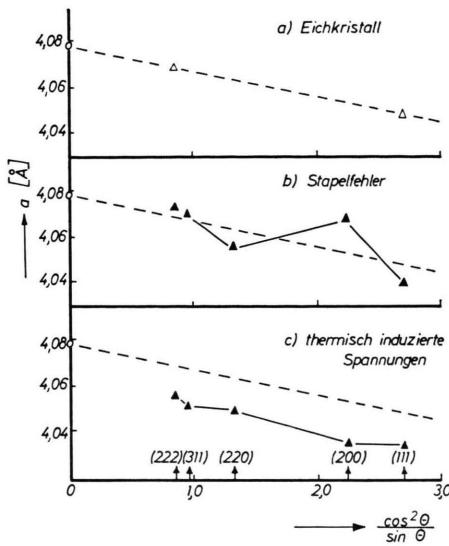


Abb. 4. Abhängigkeit der Gitterkonstanten a von der Funktion $\cos^2 \Theta / \sin \Theta$. a) Gemessen für den als Eichsubstanz dienenden Goldeinkristall, b) berechnet für den Fall, daß Verformungsstapelfehler¹⁹ wirksam sind, c) berechnet für den Fall, daß thermisch induzierte Spannungen¹⁸ wirksam sind. Der offene Kreis kennzeichnet den Literaturwert nach Gleichung (3).

getragen sind. Während infolge der Verformungsstapelfehler je nach Kristallorientierung sowohl eine Erhöhung als auch eine Abnahme der Gitterkonstanten beobachtet werden sollte, ist im Fall der thermisch induzierten Spannungen immer eine Abnahme zu erwarten.

Der Vergleich mit den experimentellen Werten soll an Hand der Abb. 5 erfolgen. Zunächst enthält die Abbildung wieder die charakteristische Gerade des Einkristalls nach Abb. 4 a (gestrichelte Gerade). Man erkennt, daß die für die Filme ermittelten Gitterkonstanten mehr oder weniger gut auf diesen Geraden liegen. Bei genauerer Betrachtung bemerkt man allerdings, daß in Abb. 5 a und 5 b die (200)-Meßpunkte etwas oberhalb, die (220)-Punkte etwas unterhalb der Geraden liegen. Der Vergleich mit Abb. 4 b macht deutlich, daß diese Abweichungen auf den Einfluß von Verformungsstapelfehlern zurückgeführt werden müssen. Wenn auch die Gitter-

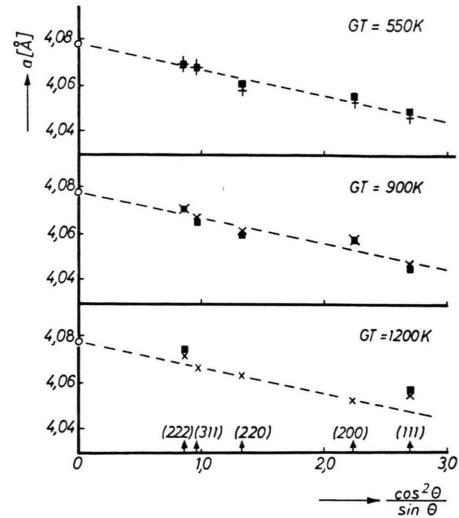


Abb. 5. Abhängigkeit der Gitterkonstanten a von der Funktion $\cos^2 \Theta / \sin \Theta$ für aufgedampfte Goldfilme. $[+]$ Glasträger, $[■]$ Si(111)-Träger, $[x]$ Si(110)- und Si(100)-Träger. Die gestrichelte Gerade kennzeichnet die Eichkurve nach Abbildung 4a.

verzerrungen im vorliegenden Fall an der unteren Grenze der Meßgenauigkeit liegen, so gelingt doch eine ungefähre Abschätzung der Stapelfehlerdichte α gemäß der Beziehung¹⁹

$$(\Delta a/a)_{hkl} = \alpha G_{hkl} \quad (4)$$

in der $(\Delta a/a)_{hkl}$ die relative Abweichung der Gitterkonstanten gegenüber dem ungestörten Metall und G_{hkl} eine für verschiedene Kristallorientierungen von Wagner et al.¹⁹ berechnete Funktion bedeuten. Für das Beispiel des Systems Au/Si(111) (Vierecke in Abb. 5 b) ergibt die quantitative Auswertung $\alpha = 1,4 \cdot 10^{-3}$.

Der Einfluß der Trägerorientierung auf die Gitterverzerrungen ist sehr gering. Eine Erniedrigung der mittleren Gitterkonstanten gegenüber dem Wert des kompakten Goldes, wie sie von Vook und Otooni²¹ an polykristallinen, ca. 400 Å dicken Goldfilmen beobachtet wurde, konnte hier nicht nachgewiesen werden. Vielmehr scheinen für die hochgeglühten Si-Träger (Abb. 5 c) die aus den (111)- und (222)-Reflexen berechneten Gitterkonstanten besonders hoch zu liegen.

3.3. Ermittlung der Kristallitgröße

Aussagen über die mittlere Größe der Kristallite lassen sich aus der Halbwertsbreite der $K\alpha_1$ -Reflexe ableiten¹⁴. Zunächst muß jedoch der Einfluß der in-

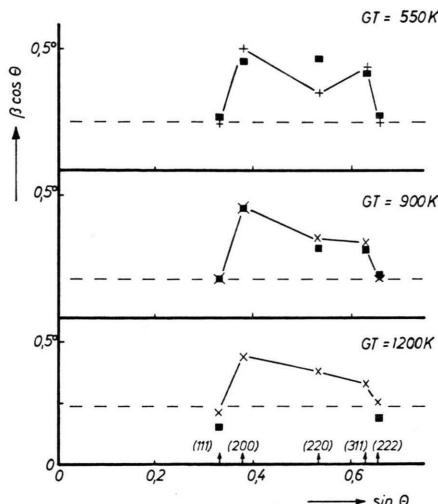


Abb. 6. Abhängigkeit der physikalischen Linienbreite β von $\sin \Theta$ für aufgedampfte Goldfilme. [+] Glasträger, [■] Si(111)-Träger, [X] Si(110)- und Si(100)-Träger.

strumentellen Linienverbreiterung, die von der natürlichen Linienbreite der Röntgenstrahlung und der verwendeten Fokussierungsanordnung herrührt, eliminiert werden. Das gelingt mit Hilfe des Verfahrens von Alexander²², wobei im vorliegenden Fall als Standard die Halbwertsbreite der Reflexe dient, die von dem bereits oben erwähnten, praktisch ideal geordneten (111)-orientierten kompakten Goldenkristall erhalten wurden. Die auf diese Weise korrigierte Linienbreite, auch physikalische Linienbreite β genannt, sollte der Gleichung¹⁴

$$\beta = \frac{K \lambda}{D} \frac{1}{\cos \Theta} + \frac{\Delta a}{a} \tan \Theta \quad (5)$$

gehören, da die Reflexe näherungsweise durch Cauchy-Profile beschrieben werden können (vgl. Abbildung 3). Der erste Summand auf der rechten Seite dieser Gleichung stellt den Beitrag der endlichen Ausdehnung der Kristallite, der zweite Summand den Beitrag einer einheitlichen Gitterverzerrung $\Delta a/a$ zur Linienverbreiterung dar. Θ bedeutet den Braggschen Glanzwinkel, λ die Wellenlänge der verwendeten Kupferstrahlung, D die mittlere Kristallitgröße und K die Scherrersche Konstante¹⁴ ($K = 0.89$). Gemäß Gl. (5) sollten die Halbwertsbreiten in einer Auftragung $\beta \cos \Theta$ gegen $\sin \Theta$ auf einer Geraden liegen, deren Steigung durch die mittlere Gitterverzerrung $\Delta a/a$ und deren Achsenabschnitt durch die mittlere Kristallitgröße D festgelegt wird. Abbildung 6 zeigt diese Auftragung für die in Tab. 1 aufgeführten Filme. Betrachtet man

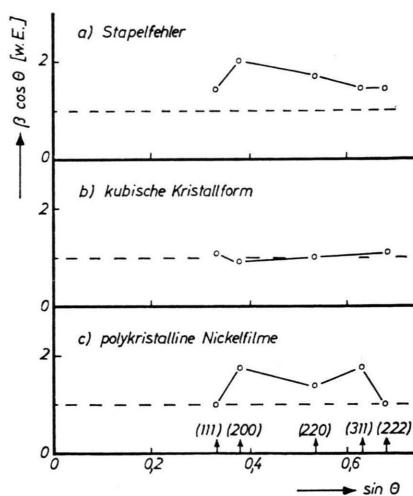


Abb. 7. Abhängigkeit der physikalischen Linienbreite β von $\sin \Theta$. a) Berechnet für den Fall, daß Verformungsstapelfehler²³ vorliegen, b) berechnet für eine kubische Kristallitform²⁴, c) gemessen für polykristalline Nickelfilme⁴.

zunächst nur die vom (111)- bzw. (222)-Reflex herrührenden $\beta \cos \Theta$ -Werte, so liegen diese gut auf der gestrichelten, parallel zur Abszisse verlaufenden Geraden. Einheitliche Gitterverzerrungen machen sich also, wie schon bei der Diskussion der Winkellage der Reflexmaxima festgestellt werden konnte, nicht bemerkbar. Die aus der Extrapolation $\sin \Theta \rightarrow 0$ berechneten Kristallitgrößen betragen 435 Å (550 K), 475 Å (900 K) und 390 Å (1200 K), sie entsprechen also etwa der mittleren Schichtdicke von 400 Å. Im Fall des hochgeglühten Si(111)-Trägers scheint der vom (111)-Reflex herrührende $\beta \cos \Theta$ -Wert etwas zu tief zu liegen. Wegen der Ergebnisse des Abschnitts 3.2. kann dieser Effekt jedoch nicht auf einheitliche Spannungen in dem Film zurückgeführt werden.

Bezieht man die (200)-, (220)- und (311)-Reflexe mit in die Betrachtung ein, so findet man, daß die aus diesen Reflexen ermittelten Halbwertsbreiten zu hohe $\beta \cos \Theta$ -Werte liefern. Das gilt weitgehend unabhängig von der Glühbehandlung und Orientierung des Siliciumträgers (Abb. 6) und stimmt ungefähr mit dem bereits früher an polykristallinen Nickelfilmen erhaltenen Befund⁴ (vgl. Abb. 7 c) überein. Man könnte zunächst versuchen, dieses Verhalten auf den Einfluß der Verformungsstapelfehler (vgl. Abschn. 3.2.) oder auf stärkere Abweichungen von einer kugelförmigen Kristallitform zurückzuführen. Nach Arbeiten von Wagner²³ bzw. von Stokes und Wilson²⁴ wäre in diesen Fällen die in

Abb. 7 a und 7 b dargestellte Abhängigkeit der $\beta \cos \Theta$ -Werte von $\sin \Theta$ zu erwarten. Der Vergleich mit Abb. 6 zeigt jedoch, daß die Meßwerte durch keine der beiden Modellvorstellungen zufriedenstellend gedeutet werden können. So spricht z. B. gegen einen starken Einfluß der Stapelfehler der relativ hohe $\beta \cos \Theta$ -Wert, der für den (311)-Reflex gemessen wird. Darüber hinaus wären auf Grund der nach Gl. (4) berechneten, verhältnismäßig kleinen Stapelfehlerdichten nur Änderungen der $\beta \cos \Theta$ -Werte von maximal 13% zu erwarten²³, während experimentell Änderungen von mehr als 100% (vgl. Abb. 6) beobachtet werden. Es bleibt deshalb auch im vorliegenden Fall nur die bereits an anderer Stelle⁴ vorgeschlagene Deutungsmöglichkeit, daß die nach (200), (220) und (311) orientierten Kristallite im Mittel wesentlich kleinere Dimensionen besitzen als die nach (111) orientierten.

4. Diskussion

Das wichtigste Ergebnis der vorliegenden Arbeit ist in der Tatsache zu sehen, daß es nicht gelang, durch Variation der Vorbehandlung und der Orientierung der Unterlage von (111) abweichende Orientierungen der Goldfilme herzustellen. Ein ähnliches Verhalten zeigen die Goldfilme auch, wenn man auf andere Träger aufdampft²⁵, offensichtlich ist also das (111)-orientierte Filmwachstum ein stark begünstigter Prozeß. Nur das Ausmaß der (111)-Vorzugsorientierung kann über die Orientierung der Unterlage beeinflußt werden. Dabei nimmt der Einkristallcharakter der Filme zu, wenn man von Glsträgern zu hochgeheizten (110)-, (100)- und (111)-orientierten Siliciumträgern übergeht.

- ¹ R. Suhrmann, R. Gerdes u. G. Wedler, Z. Naturforsch. **18a**, 1208 [1963].
- ² R. Suhrmann, R. Gerdes u. G. Wedler, Z. Naturforsch. **18a**, 1211 [1963].
- ³ G. Wedler u. P. Wißmann, Z. Naturforsch. **23a**, 1535 [1968].
- ⁴ G. Wedler u. P. Wißmann, Z. Naturforsch. **23a**, 1544 [1968].
- ⁵ G. Ertl, Ber. Bunsenges. phys. Chem. **75**, 967 [1971].
- ⁶ G. Wedler, Adsorption, Verlag Chemie, Weinheim (Bergstraße) 1970, S. 32 ff.
- ⁷ P. Wißmann, The Resistivity of Pure and Gas Covered Metal Films, in G. Höhler (Hrsg.), Springer Tracts in Modern Physics, Erg. exakt. Naturwiss. **Bd. 77**, Springer-Verlag, Berlin 1975.
- ⁸ J. Feder, P. Rudolf u. P. Wißmann, Proceedings of the Third Conference on Thin Films, Budapest 1975, im Druck.
- ⁹ W. Fischer u. P. Wißmann, Z. Naturforsch. (nachfolgende Arbeit).

Der Einfluß der Glühbehandlung des reinen Siliciums auf die Filmstruktur ist schwach, wenn sich auch eine Zunahme der Vorzugsorientierung mit zunehmender Glühtemperatur eindeutig nachweisen läßt. Diese Abhängigkeit kann erklärt werden, wenn man zusätzlich LEED-¹⁶ und Auger-Untersuchungen²⁶ mit in die Betrachtung einbezieht. Die Auger-Analyse ergibt, daß durch die Glühbehandlung insbesondere der Sauerstoffgehalt der Siliciumoberfläche herabgesetzt wird. Während bei den schwach ausgeheizten Si-Trägern ($GT = 550$ K) die Oxidation der Oberfläche oder/und Wasseradsorption zu einem Auger-Signal führen, das etwa einer Monoschicht reinen Sauerstoffs entspricht, beobachtet man bei höher ausgeheizten Trägern ($GT > 800$ K) eine Abnahme des Sauerstoff-Signals. Bei sehr hohen Glühtemperaturen ($GT \approx 1200$ K) ist praktisch kein Sauerstoff mehr nachzuweisen. Nur wenn man eine derartige sauerstofffreie Siliciumoberfläche mit Gold bedampft, erhält man in einer Beugungskammer für langsame Elektronen nachweisbare Gold-Reflexe. Offensichtlich stört also der Sauerstoff die Ausbildung einer Einkristallstruktur. Diese Ergebnisse stehen in gewissem Gegensatz zu Resultaten, die am System Au/Glimmer erhalten wurden²⁷. Dort fand man, daß eine Belegung mit Fremdmolekülen die Epitaxie begünstigt.

Dem Institutsleiter, Herrn Prof. Dr. G. Wedler, danken wir für sein stetes Interesse am Fortgang dieser Untersuchungen und für die Bereitstellung von Geräten. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft gilt unser Dank für die finanzielle Unterstützung der Arbeit.

- ¹⁰ C. C. Chang, Surface Sci. **23**, 283 [1970].
- ¹¹ K. Sagel, Tabellen zur Röntgenfeinstrukturanalyse, Springer-Verlag, Berlin 1958, S. 61 ff.
- ¹² I. W. M. du Mont u. H. Kirkpatrick, Phys. Rev. **37**, 136 [1931].
- ¹³ R. W. Vook, in J. W. Anderson (Hrsg.), Epitaxial Growth, Part A, Academic Press, New York 1975, S. 339 ff.
- ¹⁴ H. Neff, Grundlagen und Anwendungen der Röntgenfeinstrukturanalyse, Verlag R. Oldenbourg, München 1962, S. 250 ff.
- ¹⁵ R. W. Vook u. F. Witt, J. Vac. Sci. Technol. **2**, 243 [1965].
- ¹⁶ P. Wißmann u. Y. Summa, Vakuum-Technik **22**, 116 [1973].
- ¹⁷ R. W. Vook u. F. Witt, J. Vac. Sci. Technol. **2**, 49 [1965].
- ¹⁸ F. Witt u. R. W. Vook, J. Appl. Phys. **39**, 2773 [1968].
- ¹⁹ C. N. J. Wagner, A. S. Tetelman u. H. M. Otte, J. Appl. Phys. **33**, 3080 [1962].

- ²⁰ G. Wedler u. P. Wißmann, *Thin Solid Films* **2**, 391 [1968].
²¹ R. W. Vook u. M. A. Otooni, *J. Appl. Phys.* **39**, 2471 [1968].
²² L. Alexander, *J. Appl. Phys.* **25**, 155 [1954].
²³ C. N. J. Wagner, *Acta Met.* **5**, 427 [1957].
²⁴ A. R. Stokes u. A. J. C. Wilson, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **38**, 313 [1942].
²⁵ E. Bauer u. H. Poppa, *Thin Solid Films* **12**, 167 [1972].
²⁶ H. Geiger, Diplomarbeit Universität Erlangen-Nürnberg 1975.
²⁷ K. Müller u. H. Viefhaus, *Z. Naturforsch.* **21a**, 1728 [1966].