

Reflexionsspektroskopische Untersuchungen
an $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$
im Energiebereich 1.5 bis 25 eV

Diplomarbeit
von
Nikolaus Dietz

Technische Universität Berlin
Institut für Festkörperphysik
1988

Inhaltsverzeichnis

<u>E : Einleitung</u>	3
.....	
<u>I. Grundlagen:</u>	
1.1 Kristallstrukturen und Bindung	
1.1.1 Kristallstrukturen	4
1.1.2 Bindung	8
1.1.3 Bandstrukturmodelle	10
1.1.4 Das Prinzip der Empirischen Pseudopotentiale (EPM)	12
1.2 Interbandübergänge	
1.2.1 Quantenmechanische Betrachtung	15
1.2.2 Einbeziehung der experimentell bestimmten Reflexionswerte	17
1.2.3 Interbandübergänge und kritische Punkte	24
1.3 Bandstruktur CdTe und ZnTe	26
1.4 Einfluß des Mangans auf das Mischsystem CdZnMnTe	30
.....	
II. Experimenteller Aufbau PN414	
2.1 Experimentelle Komponenten:	
2.1.1 Vakuumsystem	34
2.1.2 XBO - Lampe	34
2.1.3 Monochromator	35
2.1.4 Abbildungsoptik	36
2.1.5 Photomultiplier und Stromverstärker	37
2.1.6 Kryostat und Temperaturregelung	39
2.1.7 Probenhalter und Probenheizung	40
2.1.8 Drehspiegeljustiereinheit	41
2.2 Elektronischer Aufbau:	
2.2.1 Monochromatoransteuerung	42
2.2.2 Drehspiegelansteuerung	43
2.2.3 Modulator	46
2.3 Aufbau für Reflexionsmessungen	
2.3.1 Prinzipieller Aufbau	47
2.3.2 Meßwerterfassung	51
.....	
III. Experimenteller Aufbau BESSY	
3.1 Synchrotronstrahlung als Lichtquelle	55
3.2 Monochromator: 3m NIM 1	56
3.3 Detektionssystem	59
3.4 Prinzipieller Aufbau	61

IV. Meßbereiche und deren Gültigkeit

4.1	<i>Meßbereiche</i>	63
4.2	<i>2. Ordnung im Meßbereich (220-100 nm)</i>	64
4.3	<i>Abschätzung von Meßfehlern</i>	69

V. Experimentelle Ergebnisse und Diskussion

5.1	<i>Kristalle</i>	71
5.2	<i>Experimentelle Ergebnisse</i>	75
5.3	<i>Reflexionsspektren von CdTe</i>	77
5.4	<i>ϵ_2-Spektren von CdTe</i>	82
5.4.1	Interbandübergängen im Energiebereich von 1 bis 10 eV	82
5.4.2	Höhere Interband- und Rumpfniveauübergänge im Energiebereich von 10 bis 25 eV	89
5.5	<i>Zusammenfassende Darstellung von Ergebnissen sowie der optischen Konstanten von CdTe</i>	92
5.6	<i>Reflexionsspektren $Cd_x Zn_y Mn_z Te$</i>	99
5.6.1	Untersuchung der Bandkantenverschiebung in Abhängigkeit der Mangankonzentration	99
5.6.2	Einfluß der Mangankonzentration z auf die Reflexionsmaxima E_1 und $E_1 + \Delta_1$	103
5.7	<i>Höherenergetische Reflexionsmessungen an $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x:y = 1:1$)</i>	105

VI. Zusammenfassung:

.....111

Anhang

- a.) *Tests zur Wellenlängenmodulation*
- b.) *Meßwerterfassungs- und Meßdatenauswertungssysteme (Kurzbeschreibung)*
- c.) *Schaltpläne zu den Ansteuerungseinheiten*
- d.) *Abbildungen zum Aufbau des Modellspektrums CdTe*

Literaturverzeichnis

E Einleitung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Untersuchungen zur elektronischen Struktur des semimagnetischen Halbleiters $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$. Es werden Reflexionsmessungen, die mit einer konventionellen Lichtquelle und mit Synchrotronstrahlung durchgeführt wurden, vorgestellt.

Die Aufgabenstellung lag u. a. in der Weiterentwicklung der von D. Theis /The73/ aufgebauten Reflexionsapparatur im Energiebereich von 1 bis 6 eV sowie in der Entwicklung und Programmierung von rechnergesteuerten Komponenten.

Im höheren Energiebereich (von 3 bis 25 eV) entwickelten M. Krause und E. Flach eine Meßapparatur für relative Reflexionsmessungen mit Synchrotronstrahlung. Für temperaturlaufgelöste absolute Reflexionsmessungen wurde die Anordnung durch eine Drehspegeleinheit und einen He-Verdampferkryostaten /Jun88/ ergänzt.

Dies ist eine der Voraussetzungen, um durch eine Kramers-Kronig-Transformation der absoluten Reflektivitäten, Informationen über die optischen Konstanten und somit über die elektronischen Eigenschaften der untersuchten Halbleiter zu erhalten.

Verursacht durch meßtechnische Anfangsprobleme der Reflexionsmeßapparatur für Synchrotronstrahlung weisen die ersten am Mischkristallsystem $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ durchgeführten Reflexionsmessungen teilweise erhebliche Mängel auf. Die Ergebnisse sind daher im Bereich der Synchrotronstrahlung nur eingeschränkt auswertbar, so daß der Schwerpunkt auf dem binären System CdTe liegt.

In dieser Arbeit wird erstmals die Richtigkeit der durchgeführten Kramers-Kronig-Transformation nachgewiesen. Damit ist es möglich, alle optischen Konstanten allein aus der Kenntnis der absoluten Reflektivität zu bestimmen.

Gezeigt wird dies an dem binären Halbleiter CdTe, der den Schwerpunkt des Auswertungsteils bildet. CdTe stellt einen der Eckpunkte des Mischungssystems $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ dar, so daß dieser Kristall besonders ausführlich untersucht wurde. Wegen der zahlreich vorliegenden Untersuchungen anderer Autoren eignet sich CdTe zudem hervorragend zur Überprüfung der aufgebauten Meßapparaturen.

I. Grundlagen

1.1 Kristallstrukturen, Bindungen und Bandstrukturen

1.1.1 Kristallstrukturen

Die drei binären Halbleiterkristalle CdTe, ZnTe und das hypothetische MnTe stellen die Eckpunkte der quaternären Mischungsreihe $Cd_xZn_yMn_zTe$ dar. Über deren kristallographische und elektronische Struktur liegen zahlreiche Untersuchungen vor, die hier im folgenden kurz zusammengefaßt sind.

CdTe und ZnTe bauen ein kubisch flächenzentriertes Gittersystem (fcc) auf (Fig 1.1.1.0) .

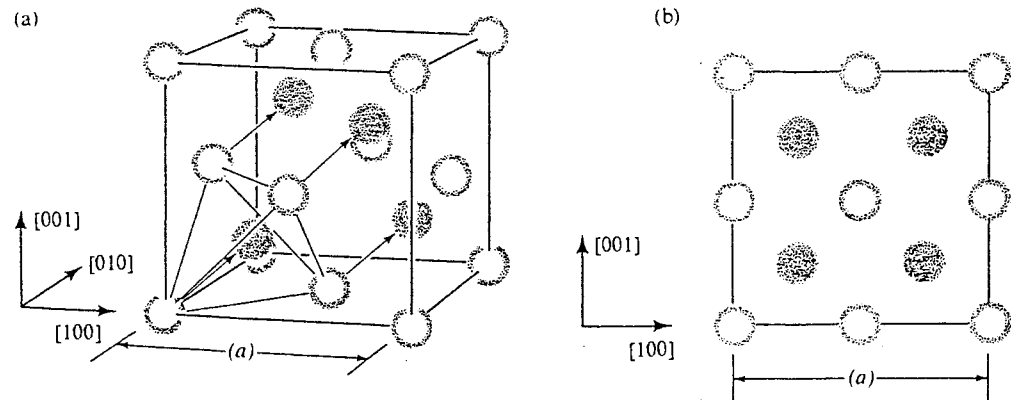
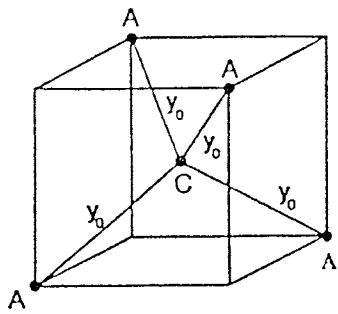


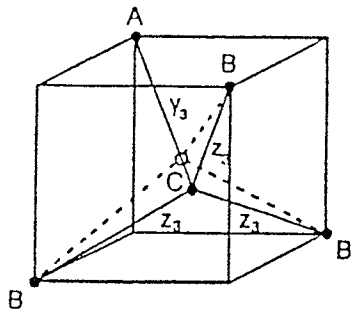
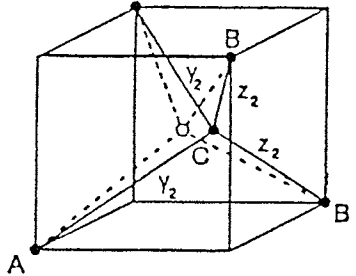
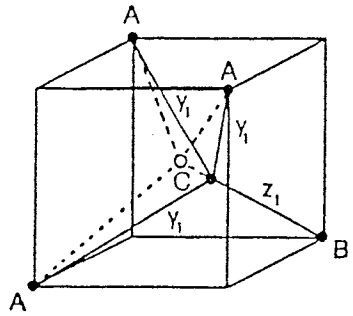
Fig.1.1.1.0: Einheitszelle einer kubisch flächenzentrierten Gitterstruktur (Zinkblende) /Har80/:
a) 3-dimensionale Darstellung; b) Sicht in [010] Richtung

Durch Substitution von Cd durch Zn kann ein kontinuierlicher Übergang von CdTe zu ZnTe erreicht werden, wobei die Gitterstruktur erhalten bleibt. Da die Zn-Atome einen größeren Durchmesser als die Cd-Atome besitzen, kommt es zu unterschiedlichen Bindungslängen zwischen den einzelnen Atomen und somit zu einer Verzerrung der Gitterstruktur. Das Te-Atom wird aus der Mittellage des Tetraeders herausgedrängt. In Fig.1.1.1.a wird dieser Vorgang der Verzerrung modellhaft dargestellt. Die Darstellung ist eine Zusammenfassung der Ergebnisse der Arbeit von A. Balzarotti, der mit Röntgenstrahlanalysen (X-Ray) und Extended X-Ray Absorption Fine Structure (EXAFS) Messungen die Mischkristallreihen

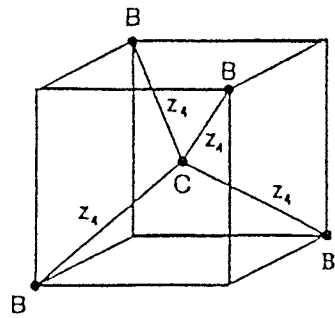
$Cd_{1-x}Zn_xTe$ und $Cd_{1-x}Mn_xTe$ auf Kristallstruktur und Bindungslängen hin untersucht hat. Die Bindungslängen zwischen einzelnen Atomen wurden mit der EXAFS vermessen, die mittlere Gitterkonstante mittels Röntgenstrahlbeugung (X-Ray diffraction).



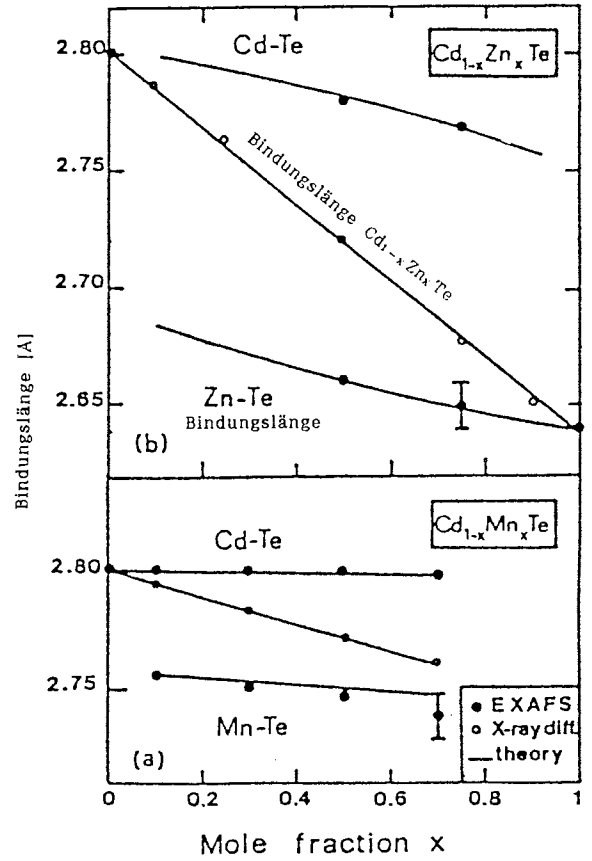
Das Tetraeder ist aufgebaut mit dem Anion Te [C] im Zentrum und den Kation Cd [A] an den gegenüberliegenden Raumdiagonalen. Die Atomabstände zu allen nächsten Bindungspartnern ist gleich groß.



Sukzessive Ersetzung des Kations "Cd" [A] durch Zink (Zn) oder Mangan (Mn) [B].



ZnTe kristallisiert wie CdTe in tetraedrischer Struktur. Die Bindungslängen unterscheiden sich jedoch. Die vollständige Substitution von Cd oder Zn durch Mn ist nicht möglich, da MnTe eine hexagonale Gitterstruktur besitzt.



Für die Bestimmung der Bindungslängen zwischen den einzelnen Atomen wurde die Extended X-Ray Absorption Fine Structure Methode (EXAFS) verwandt. Die Messungen der mittleren Gitterkonstanten wurden nach dem Debye-Scherrer-Pulververfahren (X-ray-diff) durchgeführt.

Fig. 1.1.1.a:

Bindungsmodell für Cd_{1-x}Zn_xTe und Cd_{1-x}Mn_xTe bzw. bei Kombination für Cd_xZn_yMn_zTe. (Die Untersuchungsergebnisse und Abbildungen wurden aus der Arbeit von A. Balzarotti et al. zusammengestellt /Bal84/).

Die Mischungsreihe $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ zeigt mit Erhöhung der Zinkkonzentration eine Verkleinerung der Bindungslängen zwischen dem Cd und Te bzw. Zn und Te. Dagegen bleiben bei $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ die Bindungslängen von Cd und Te bzw. Mn und Te für den gesamten möglichen Mischungsbereich nahezu konstant.

Bei den Mischungsreihen $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ und $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ besetzt das paramagnetische Mn-Atom Cd- bzw. Zn-Gitterplätze in gleicher Weise wie das Zn in $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Da das reale MnTe jedoch eine hexagonale Gitterstruktur besitzt, kommt es ab einer bestimmten Konzentration zu Phasenumwandlungen. So ist Mn in $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ nur bis etwa 70 at % und in $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ nur bis 78 at % mischbar (bezogen auf Cd bzw. Zn).

Beim Übergang von ternären zum quaternären Kristallsystem $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ erhält man keine grundlegende Änderung der Verhältnisse. Untersuchungen von Brun del Re et al. /Bru83/ zeigen, daß auch $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ eine Zinkblendestruktur hat. Die Gitterkonstanten für unterschiedliche Konzentrationsverhältnisse wurden mit dem Debey-Scherrer-Pulver-Verfahren bestimmt (Fig. 1.1.1.b). Aus den Messungen wurden die Konstanten A, B und C der Gleichung (1.1) bestimmt /Bru83/. Gleichung (1.1) gibt die Abhängigkeit der Gitterkonstante a von den Mischungsparametern y und z (mit $x+y+z=1$) wieder.

$$(1.1) \quad a = (A - B \cdot y - C \cdot z) \text{ [nm]} \quad \text{mit}$$

$$A = 0.6483 \text{ nm}$$

$$B = 0.0388 \text{ nm}$$

$$C = 0.0150 \text{ nm}$$

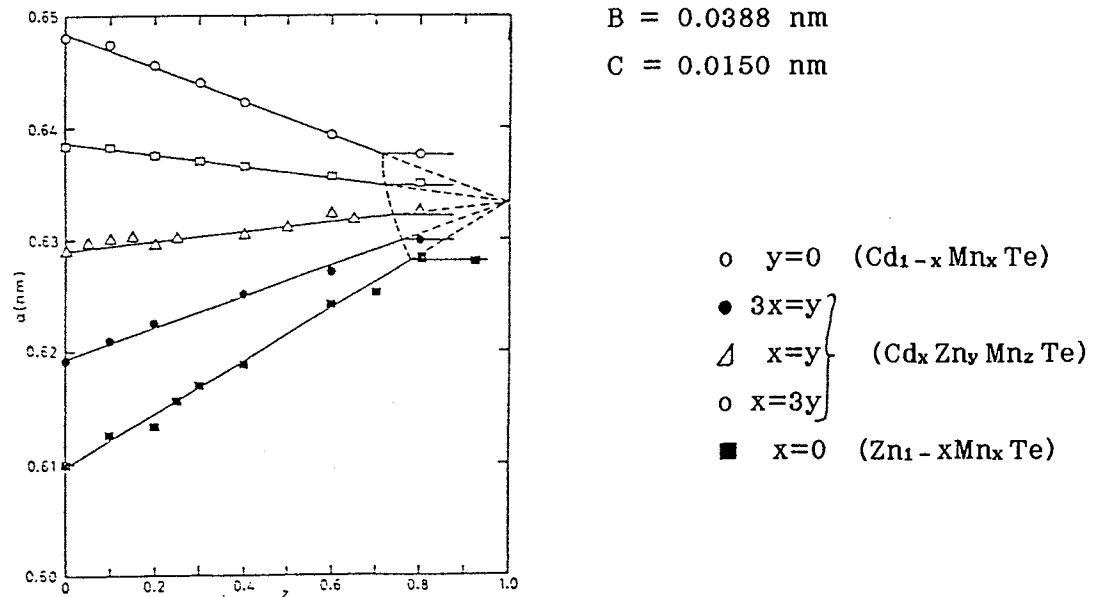


Fig.1.1.1.b : Gitterkonstanten von $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ bei Variation von z und festen $x:y$ Verhältnissen (mit $x+y+z=1$) nach /Bru83/.

Weiter wurde in der Arbeit von Brun del Re die Abhängigkeit der Bandkante vom Mischungsparameter (Mn bzw. Zn) mit Hilfe der wellenlängenmodulierten Reflexionsspektroskopie untersucht. Die Ergebnisse sind in Fig.1.1.1.c dargestellt. Bei einem konstanten Verhältnis von Cd zu Zn ergibt sich danach in Abhängigkeit vom Mn-gehalt eine lineare Verschiebung der Bandkante zu höherer Energien. Für eine feste Mn-Konzentration und Variation des Zn-Anteils ergibt sich ein quadratische Abhängigkeit der energetischen Lage der Bandkante.

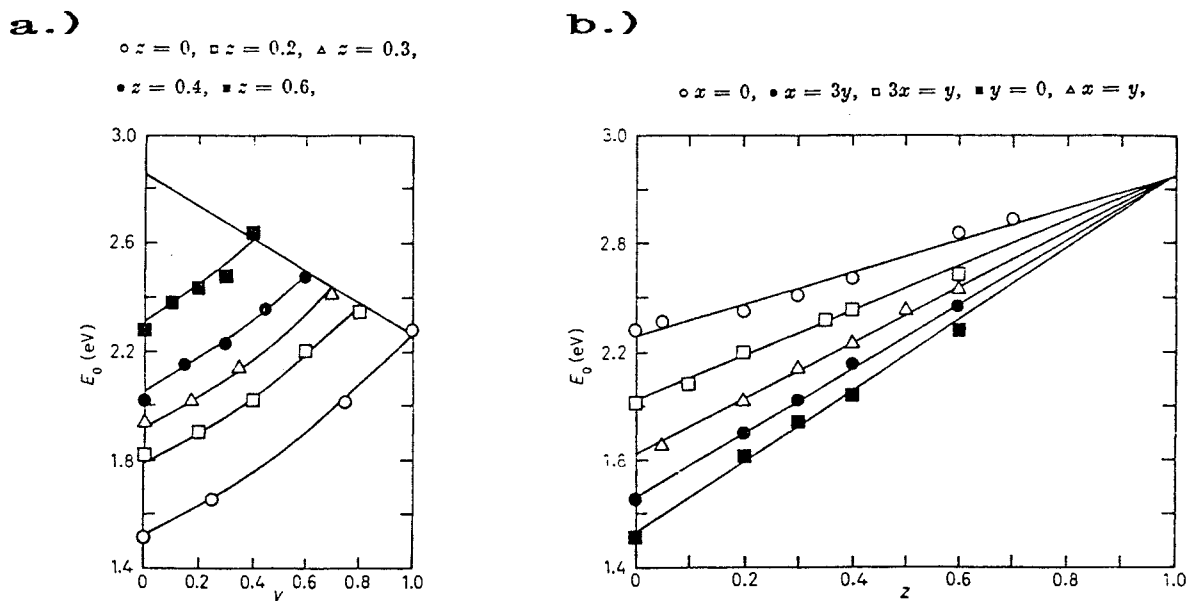


Fig. 1.1.1.c: Abhängigkeit der Bandkante E_0 bei Variation der Konzentration:
 a): Feste Mn-Konzentration z ; Variation von y (Zn)
 b): Feste Zn-Konzentration y ; Variation von z (Mn)
 Alle Angaben beziehen sich dabei auf Raumtemperatur /Bru83/.

Für die erhaltenen Daten ermittelte Brun del Re die Gleichung

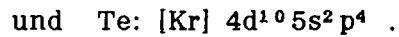
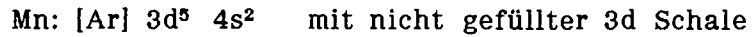
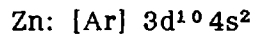
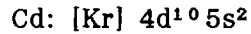
$$(1.2) \quad E_0 = A \cdot (1-z) + B \cdot (2y+z-1)/\sqrt{3} + C \cdot [4y(y+z-1) + (z-1)^2]/(3-3z) + E_m$$

mit den Konstanten: $A = -1.033 \text{ eV};$ $B = 0.633 \text{ eV}$
 $C = 0.223 \text{ eV}$ und $E_m = 2.847 \text{ eV},$

welche die Lage der Bandkante E_0 in Abhängigkeit der Konzentrationsparameter y und z wiedergibt. Auf den Eckpunkt MnTe wurde linear extrapoliert. Dieses MnTe stellt das hypothetische MnTe in Zinkblendestruktur dar.

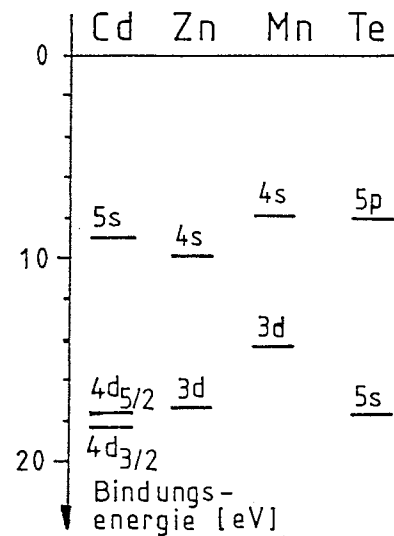
1.1.2 Bindung

Für die elektronische Struktur des Festkörpers sind die Bindungsverhältnisse der Atome ausschlaggebend. Die Elektronenkonfigurationen der betrachteten Atome sind :



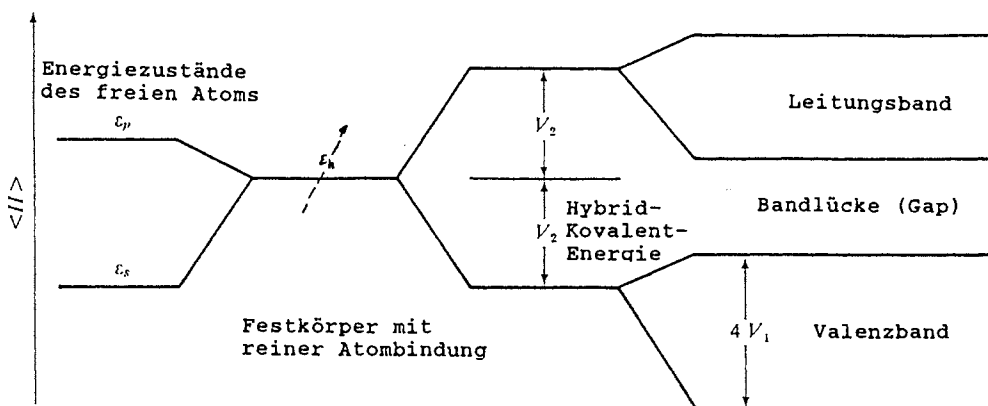
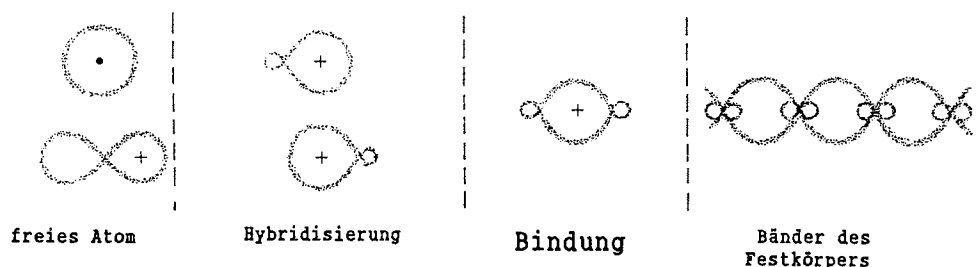
Für die Bindung entscheidend sind die Valenzelektronen der äußeren Schalen. Cd, Zn und Te verfügen über vollbesetzte innere d-Schalen, so daß sie bei einer Bindung nicht betrachtet werden müssen. Die nur halbbesetzte 3d-Schale des Mn ist für seinen paramagnetischen Charakter und die daraus resultierenden magnetischen Effekte verantwortlich. Für die einzelnen betrachteten Atome gibt Fig 1.1.2.a die energetischen Lagen der atomaren Zustände wieder. Die Bindung erfolgt bei CdTe, ZnTe und dem hypothetischen MnTe über eine sp^3 -Hybridisierung der äußeren Valenzelektronen. Ausgangspunkt ist dabei die Annahme einer kovalenten Bindung - wie sie auch bei Silizium oder Germanium vorliegt - jedoch mit einem ionischen Bindungsanteil.

Fig. 1.1.2.a:
Schematische Darstellung
der Bindungsenergien
der oberen atomaren
Zustände /Kra86/.



Entsprechend der Methode der Linearkombination atomarer Orbitale (LCAO) ist der sukzessive Übergang vom freien Atom zum gebundenen Zustand bis hin zu den elektronischen Bändern des Festkörpers schematisch in Fig 1.1.2.b dargestellt. Besitzen alle an der Bindung beteiligten Atome die gleiche Elektronegativität, wie dies bei den Halbleitern Silizium oder Germanium der Fall ist, so ergibt sich eine rein kovalente Bindung.

a.) reine kovalente Bindung



b.) Kovalente Bindung mit ionischen Bindungsanteil

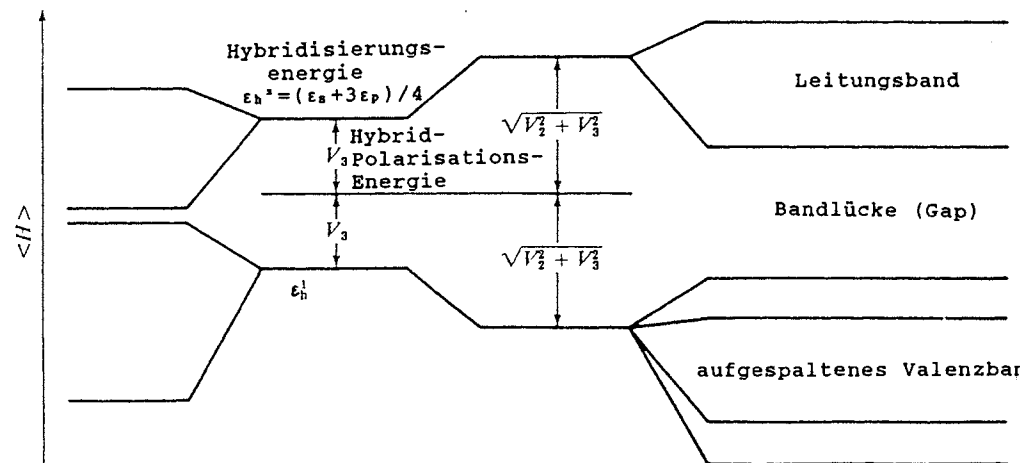
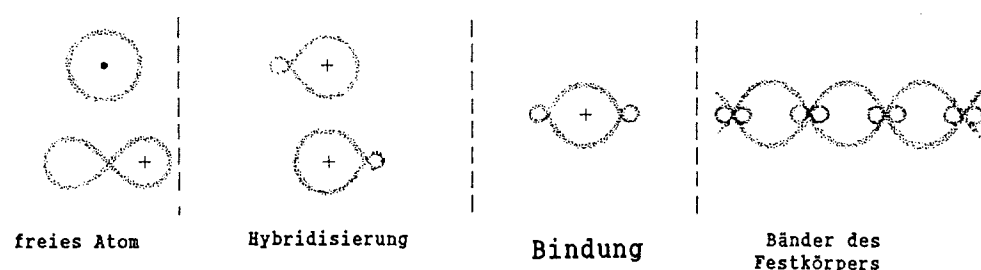


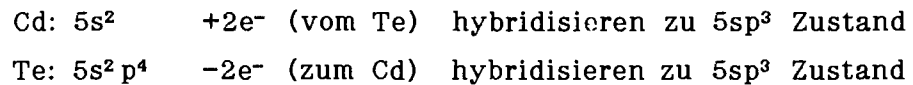
Fig. 1.1.2.b:

Sukzessive Anwendung der Methode der Linearkombinationen von Atomorbitalen, ausgehend von den Atom s- und p-Orbitalen, Bildung von sp^3 Hybriden, Übergang zu Bindungsorbitalen, und am Ende zur Bandstruktur des Festkörpers. Die Bandstruktur repräsentiert genau die Lösung des LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) Problems (/ Har80 / S. 65 ff).

Die atomaren s - und p -Zustände mischen mit einer mittleren Hybridisierungsenergie von $E_h = \frac{1}{4}(E_s + 3E_p)$, die in der Bindung symmetrisch mit der kovalenten Hybridisierungsenergie V_2 in einen bindenden und antibindenden Term aufspaltet /Har80/.

Anders ist die Situation bei unterschiedlicher Elektronegativität der an der Bindung beteiligten Atome. Es bilden sich verschieden große sp^3 -Hybride, aus denen die Hybrid-Polarisations-Energie V_3 resultiert. Der gebundene Zustand ist dann um den Energiebetrag $\sqrt{(V_2^2 + V_3^2)}$ aufgespalten.

Beispiel CdTe :



Beide Atome besitzen jetzt vier Valenzelektronen und können eine tetraedrische Bindung wie Kohlenstoff oder Silizium bilden. Da das Te jedoch eine weitaus größere Elektronegativität als Cd besitzt, existiert zusätzlich ein ionischer Bindungsanteil, d.h. das Maximum der Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte liegt näher am Te. Der nächste Schritt ist der Übergang zu den entstehenden elektronischen Bändern im Festkörper.

1.1.3 Bandstrukturmodelle

Bei der Betrachtung einer regelmäßigen periodischen Anordnung der Atome ('idealer Kristall') finden wir die Periodizität auch in den elektronischen Eigenschaften des Kristalls wieder. Die Zinkblendestruktur besitzt eine T_d -Symmetrie (Schönflies Notation) /Fig 1.1.3.a/. Dies heißt, das fcc-Gitter besitzt (z.B. Diamantstruktur)

- 1) 3-zählige polare Drehachsen in den Raumdiagonalen $[111]$
- 2) 4-zählige Rotationachsen bezügl. der Basisvektoren \underline{a}_i und
- 3) 6 Spiegelebenen senkrecht zu den Diagonalflächen (110)

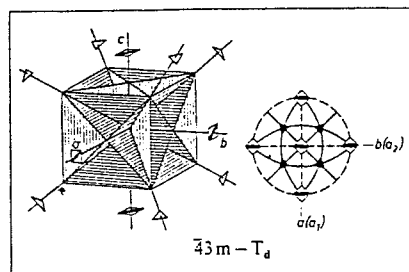


Fig 1.1.3.a

verschiedene Darstellungsweisen der T_d -Symmetrie.

Hermann-Maugin-Notation : $43m$

Die Lösung der Schrödingergleichung (SG): $\mathbf{H} \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r})$ mit dem gitterperiodischen Potential $V(\mathbf{r})$ stellt ein N -Teilchen-Problem dar, das in dieser Allgemeinheit nicht lösbar ist.

Beim Übergang vom Realraum in den reziproken Raum vereinfacht sich die mathematische Beschreibung. Das fcc-Gitter transformiert sich im reziproken Raum zum kubisch raumzentrierten Gitter (bcc) mit der entsprechenden Wigner-Seitz-Zelle (Brillouin-Zone). In der Brillouin-Zone bleiben alle Symmetrieeigenschaften des realen Gitters erhalten (siehe Fig. 1.1.3.b).

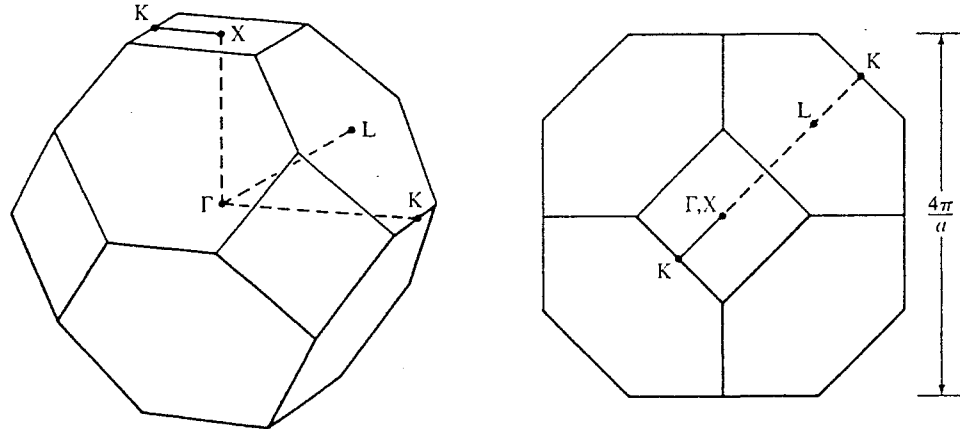


Fig. 1.1.3.b: Transformation des fcc-Gitters in in den reziproken Raum mit der dabei entstehenden Wigner-Seitz-Zelle /Har80/.

Für die Beschreibung der elektronischen Eigenschaften des Festkörpers genügt es, sich auf die 1. Brillouin-Zone zu beschränken (reduziertes Zonenschema). Tabelle 1.1.3.1 stellt die Basisvektoren und wichtigsten Symmetriepunkte in der Brillouin-Zone dar.

Tabelle 1.1.3.1: Basisvektoren des fcc-gitters und der dazugehörigen Brillouin-Zone mit einigen wichtigen Symmetriepunkten. /Pau82/

Gittervektoren im Realraum	$\underline{a}_1 = (1, 1, 0) (a/2)$ $\underline{a}_2 = (1, 0, 1) (a/2)$ $\underline{a}_3 = (0, 1, 1) (a/2)$	
Gittervektoren im reziproken Raum	$\underline{b}_1 = (1, 1, -1) (2\pi/a)$ $\underline{b}_2 = (1, -1, 1) (2\pi/a)$ $\underline{b}_3 = (-1, 1, 1) (2\pi/a)$	
Symmetriepunkte in der Brillouin-Zone	$\Gamma (0, 0, 0)$ $X (1, 0, 0) (2\pi/a)$ $L (1/2, 1/2, 1/2) (2\pi/a)$ $(k, 0, 0)$ (k, k, k)	Multiplizität 1 3 4 6 8
allgemeiner Punkt	$k (k_1, k_2, k_3)$	48

Zur Lösung der Schrödingergleichung und der damit verbundenen Kenntnis der elektronischen Bandstruktur des Festkörpers, gibt es verschiedene Näherungsverfahren. Die LCAO-Methode (Linear combination of atomic orbitals) oder LMTO-Methode (Linearised Muffin-Tin Orbitals) stellen rein theoretische Modelle dar, die den qualitativen Verlauf gut wiedergeben. So berechnete Bandstrukturen werden in den anschließenden Kapiteln vorgestellt.

Die Empirical Pseudopotential Method (EPM) verknüpft die theoretischen Aussagen der Quantenmechanik und der klassischen Elektrodynamik mit den experimentellen Daten aus Reflexions- und Absorptionsmessungen und kommt so zu berechneten Bandstrukturen, die den elektronischen Aufbau des Festkörpers realistisch wiedergeben. Die in dieser Arbeit gemessenen Reflektivitäten und berechneten optischen Konstanten können unmittelbar mit den Ergebnissen der EPM verglichen werden. Aus diesem Grund soll hier das Prinzip der Empirischen Pseudopotentialmethode kurz dargestellt werden.

1.1.4 Das Prinzip der Empirischen Pseudopotentialmethode (EPM)

Ausgangspunkt ist die Einelektronennäherung für ein freies Elektron in einem gitterperiodischem Kristallpotential $V(\mathbf{r})$:

$$(1.3) \quad H \tau(\mathbf{r}) = [T + V(\mathbf{r})] \tau(\mathbf{r}) = E \tau(\mathbf{r})$$

(siehe z.B. /BroVL/)

Im ersten Schritt erfolgt die Trennung der Kristallelektronen in Valenz- und Rumpfelektronen. Auf die Rumpfelektronen wirkt das Kristallpotential in gleicher Weise wie das normale Atompotential, so daß die Wellenfunktionen ϕ_j mit den Eigenfunktionen E_j ähnlich denen des freien Atoms sind.

Zur Berechnung der Energiezustände der Valenzelektronen wird das Kristallpotential $V(\mathbf{r})$ durch ein Pseudopotential V^{PS} ersetzt /San70/, womit die Schrödingergleichung (SG) die Form

$$(1.4) \quad [T + V^{PS}] \phi = E \phi$$

$$\text{mit } V^{PS} = V + V_R \quad \text{und } V_R = \sum (E - E_i) (\tau_i, \phi) \tau_i$$

ϕ und E = Eigenfunktion und -werte für das freie Elektron im Potential $V = \text{const.}$
 τ_i und E_i = Eigenfunktionen und -werte entwickelt nach ϕ und E .

erhält.

Die Entwicklung der SG (1.4) nach ebenen Wellen $\exp[i(k+k_m) r]$ und Störungsrechnung erster Ordnung liefert die Säkulardeterminante:

$$(1.5) \quad \det \left| \left[\frac{\hbar^2}{2m} (k+k_m)^2 - E_n \right] \delta_{nm} + V_{nm}^{PS} \right| = 0$$

k stellt hier den reduzierten Wellenvektor der gesuchten Lösung ϕ_k , und k_m die reziproken Gittervektoren dar. Als Störung erscheint das Pseudopotential V^{PS} mit den Matrixelementen:

$$(1.6) \quad V_{nm}^{PS} = \frac{1}{N\Omega} \int_V \exp[iq r] V^{PS} \exp[i(k+k_m) r] d^3 r$$

Die Integration erfolgt über das ganze Grundgebiet der N Elementarzellen vom Volumen Ω . In der lokalen Näherung mit ($V^{PS} \phi(r) \approx V^{PS}(r) \phi(r)$) /San70/ vereinfacht sich die Gleichung (1.6) zu:

$$(1.7) \quad V_{nm}^{PS} = \frac{1}{N\Omega} \int_V \exp[iq r] V^{PS}(r) d^3 r = V^{PS}(q)$$

$$\text{mit } q = k_n - k_m$$

Wird das Pseudopotential V^{PS} als Überlagerung kugelsymmetrischer, atomarer Pseudopotentiale v_j betrachtet, so kann das Pseudopotential V^{PS} durch die Strukturfaktoren $S(q)$ und die Formfaktoren $F(q)$ dargestellt werden. In die Formfaktoren $F(q)$ gehen die Atomeigenschaften ein, die durch die atomaren Pseudopotentiale v_j dargestellt werden. Die Strukturfaktoren $S(q)$ sind nur von der Gittersymmetrie abhängig. Für binäre Kristalle in Zinkblendestruktur spaltet das Pseudopotential zusätzlich in einen symmetrischen (bzgl. der Vertauschung der Atomsorten A und B) und einen antisymmetrischen Anteil auf, womit dann das Pseudopotential zu

$$(1.8) \quad \begin{aligned} V_{nm}^{PS} &= F_A(q) S_A(q) + F_B(q) S_B(q) \\ &= \cos(Rq) F_A(q) + i \sin(Rq) F_B(q) \end{aligned}$$

wird.

Die Aufgabe der Empirischen Pseudopotential Methode liegt nun in der Bestimmung der Formfaktoren $F(q)$ unter Berücksichtigung der experimentell gewonnenen Daten. In Fig 1.1.4.a wird dieses Variationsproblem schematisch dargestellt. Eine sehr ausführliche Darstellung der EPM ist in den Arbeiten von R. Bückler /Büc84/, und /San70/ wiedergegeben.

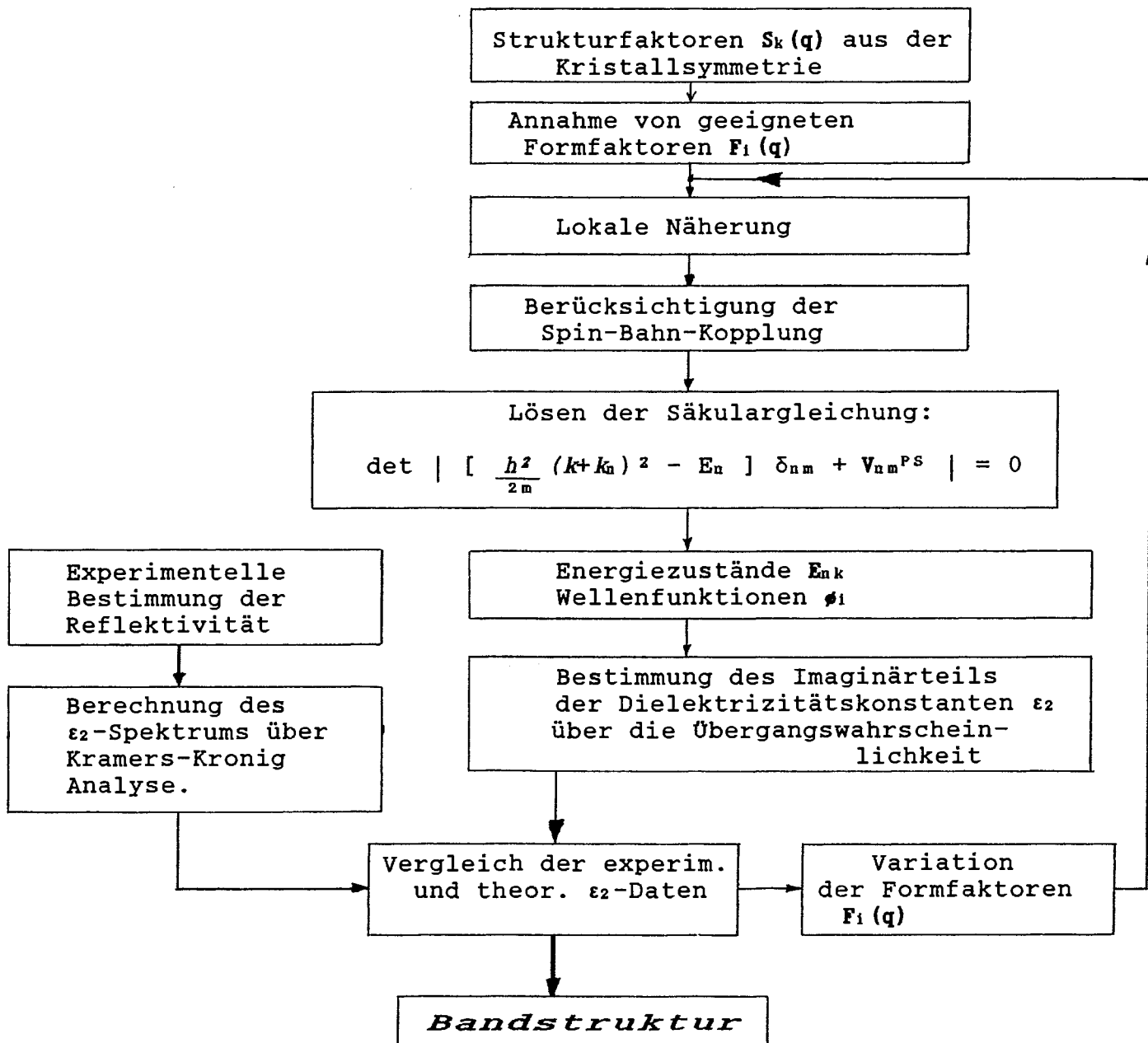


Fig 1.1.4.a: Prinzip der Empirischen Pseudopotential Methode.
(siehe auch /Büc84/ und /San70/)

1.2 Interbandübergänge

1.2.1 Quantenmechanische Betrachtung

Die Wechselwirkung der elektromagnetischen Strahlung mit den Kristallelektronen geht in die Schrödingergleichung (SG) als zeitabhängiger Störoperator ein. Die Einelektronenzustände, beschrieben durch die Energieeigenwerte $E_n(\mathbf{k})$, die Wellenfunktionen $\phi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ und den Wellenvektor \mathbf{k} liegen in der 1. Brillouin-Zone und repräsentieren Lösungen der ungestörten SG.

Der Hamiltonoperator H wird um das Vektorpotential \mathbf{A} des elektromagnetischen Feldes erweitert zu:

$$(1.9) \quad H = \left[\frac{1}{2} m^{-1} (\mathbf{p} + e \mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \right]$$

Bei Vernachlässigung des quadratischen Anteils von $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vereinfacht sich der Hamiltonoperator zu:

$$(1.10) \quad H = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{e_0}{m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) \right] = H_0 + H'$$

$$\text{mit } H' = \frac{e_0}{m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) \quad : \text{ Störoperator}$$

Für eine ebene einfallende Welle ist das Vektorpotential \mathbf{A} :

$$(1.11) \quad \mathbf{A} = A_0 \mathbf{e} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + c.c$$

\mathbf{e} = Einheitsvektor der Polarisation in Richtung des elektrischen Feldes.

$c.c$ beschreibt den konjugiert komplexen Anteil.

Die Übergangswahrscheinlichkeit eines Elektrons vom gefüllten Valenzbandzustand $E_v(\mathbf{k})$ in einen freien Leitungsbandzustand $E_c(\mathbf{k})$ ist dann:

(1.12)

$$W(w, t, k_v, k_c) = \frac{e^2}{m^2 \hbar^2} \left| \int^t dt \int_V d^3r \phi_c(k_c, r, t) \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \phi_v(k_v, r, t) \right|^2$$

/Har72/

Wird für die Wellenfunktionen $\phi_v(k_v, r, t)$ die Gitterperiodizität des Kristalls berücksichtigt (Bloch-Wellenfunktionen) und über die Übergangszeit t sowie über alle möglichen Zustände im Valenz- und Leitungsband integriert, so ergibt sich die gesamte Übergangswahrscheinlichkeit W_{vc} pro Zeiteinheit und Einheitszelle zu:

$$(1.13) \quad W_{vc} = \frac{\hbar e^2 E_0^2}{2\pi^2 m^2 w^2} \int_V dk \left| e M_{vc} \right|^2 \delta(E_c - E_v - \hbar w)$$

$$\text{mit } M_{vc} = \langle \phi_{c, k'} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \phi_{v, k'} \rangle$$

Der Energieverlust einer senkrecht einfallenden ebenen Lichtwelle ergibt sich zu $E_v = \hbar w W_{vc}$. Aus der Maxwelltheorie (klassische Dispersionstheorie /BroVL/) erhält man einen Energieverlust von $E_v = \frac{1}{2} \sigma E_0^2$, wodurch die Leitfähigkeit σ zu:

$$(1.14) \quad \sigma = \frac{2 W_{vc} \hbar w}{E_0^2}$$

bestimmt wird.

Unter Zuhilfenahme der klassischen Dispersionstheorie für $\sigma \neq 0$ und $\mu \approx 1$ mit

$$(1.15) \quad n^* = n - i k = \sqrt{(\epsilon - i \frac{4\pi\sigma}{w})}, \quad (\text{Komplexer Brechungsindex})$$

$$(1.16) \quad n^{*2} = \epsilon^* = \epsilon_1 - \epsilon_2,$$

$$(1.17) \quad \epsilon_2 = \frac{4\pi\sigma}{w}, \quad (\text{Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten})$$

und

$$(1.18) \quad \alpha = \frac{2 w k}{c} \quad (\text{Absorptionskoeffizienten})$$

wird eine Beziehung zwischen den Übergangswahrscheinlichkeiten der Interbandübergänge mit den der Messung zugänglichen optischen Konstanten geschaffen.

$$(1.19) \quad \varepsilon_2 = \frac{4\pi \cdot 2 W_{vc} \hbar \omega}{\omega E_0}$$

$$= \frac{4\hbar^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \int_v dk |e M_{vc}|^2 \delta(E_c - E_v - \hbar\omega)$$

1.2.2 Einbeziehung der experimentell bestimmten Reflektivitäten

Die Reflektivität $R(\omega)$ läßt sich über die optischen Konstanten n und k , beziehungsweise über die Streuamplitude ε und den Phasenfaktor Θ ausdrücken. Für senkrechten Einfall gilt:

$$(1.20) \quad R(\omega) = R_s = R_p = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} = |\varepsilon|^2;$$

$$R = \left(\frac{\sqrt{\varepsilon} - 1}{\sqrt{\varepsilon} + 1} \right)^2$$

/Vel 68/

$$\text{mit } r(\omega) = r_s = r_p = \varepsilon \exp[i\Theta] = \frac{n+ik-1}{n+ik+1}.$$

Durch Umformung von $r(\omega)$ zu

$$(1.21) \quad r(\omega) = \varepsilon \cos\Theta + i \varepsilon \sin\Theta$$

kann n und k als Funktion von $R(\omega)$ und Θ dargestellt werden:

$$(1.22) \quad n(\omega) = \frac{1 - R(\omega)}{1 + R - 2\sqrt{R} \cos\Theta}$$

$$(1.23) \quad k(\omega) = \frac{2\sqrt{R} \sin\Theta}{1 + R - 2\sqrt{R} \cos\Theta}$$

Der Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten ε wird mit diesen Beziehungen zu:

$$(1.24) \quad \varepsilon_2(\omega) = 2nk = \frac{(1-R)(2\sqrt{R} \sin\Theta)}{(1+R-2\sqrt{R} \cos\Theta)^2}$$

und $\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2$

Der Phasenfaktor Θ kann mittels der Kramers-Kronig-Relationen /Car69/:

$$(1.25) \quad \text{Re}[F(a)] = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{w \text{Im}[F(w)]}{w^2 - a^2} dw$$

und

$$(1.26) \quad \text{Im}[F(a)] = -\frac{2}{\pi} a P \int_0^{\infty} \frac{\text{Re}[F(w)]}{w^2 - a^2} dw$$

durch die gemessene Reflektivität $R(w)$ dargestellt werden.

$$(1.27) \quad \Theta(a) = -\frac{2}{\pi} a P \int_0^{\infty} \frac{\ln(\sqrt{R})}{w^2 - a^2} dw$$

Durch Umformung (/Bal72/ bzw. /Car69/) des Cauchy Hauptwert Integrales zu:

$$(1.28) \quad \Theta(a) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \ln \left(\frac{w+a}{|w-a|} \right) \frac{d[\ln(R)]}{dw} dw$$

verschwindet die Singularität und der Phasenfaktor Θ kann numerisch berechnet werden, da der Ausdruck $d/dw[\ln(R)]$ hinreichend schnell konvergiert. Für die exakte Berechnung der Phase ist die Kenntnis der Reflektivität im gesamten Energiebereich von $w=0$ bis $w=\infty$ notwendig, da bei jedem Punkt der Berechnung von Θ über das gesamte Energiespektrum integriert werden muß.

Zur Berechnung der ϵ_2 -Spektren wurde, zusammen mit T. Bitzer, der oben beschriebene Algorithmus aus Balkanski /Bal72/ und - zum Vergleich und zur Kontrolle - M. Cardona /Car69/ implementiert.

Da zur Rücktransformation keine neuen Parameter zur Verfügung stehen, kann - auf diesem Weg - keine Beweisführung über die Richtigkeit der Transformation erfolgen. In der Schwierigkeit der Beweisführung ist vermutlich die Ursache der differierenden ϵ_2 -Darstellungen in der Literatur zu suchen.

Erste Anhaltspunkte für die Richtigkeit der gewählten Transformation liefern die ellipsometrischen Messungen von Lautenschlager et al. /Lau85/ für $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ im Energiebereich von 1 bis 6 eV. Hierbei zeigt sich, daß bei einer Extrapolation des hochenergetischen Anteils:

$$(1.29) \quad (E_e / E)^n$$

mit

E : Energie (von E_e bis ∞)

E_e : Beginn der Approximation
(letzter Meßwert)

n = Exponent

der von der Theorie geforderte Exponent $n=4$ sehr gute Übereinstimmung mit den ellipsometrischen Messungen liefert.

Auffallend sind jedoch die extrem starken Abweichungen von einzelnen Reflexions- und ϵ_2 -Maximalagen. Bei Kenntnis der Oszillatoren und Betrachtung der temperaturabhängigen Aufspaltung einzelner Strukturen läßt sich jedoch wieder eine eindeutige Zuordnung finden (siehe Kap. 5.3). Die Forderung nach einer von der Kramers-Kronig-Transformation unabhängigen Beweisführung für die Richtigkeit des über die Transformation erhaltenen ϵ_2 -Spektrums führt zu dem hier verwendeten Ansatz:

Das experimentell berechnete ϵ_2 -Spektrum wird nach dem Modell des gedämpften harmonischen Oszillators durch eine Summe von Lorentzlinien approximiert.

Der Real- und der Imaginärteil der dielektrischen Funktion $\epsilon(w)$ wird dargestellt durch:

$$(1.30) \quad \epsilon_1(w) = 1 + \sum_{i=1}^N \frac{S_i (w_i^2 - w^2)}{(w_i^2 - w^2)^2 + (w \Gamma_i)^2}$$

und

$$(1.31) \quad \epsilon_2(w) = \sum_{i=1}^N \frac{S_i w \Gamma_i}{(w_i^2 - w^2)^2 + (w \Gamma_i)^2}$$

mit S_i = Oszillatorstärke des i-ten Oszillators
 Γ_i = Halbwertsbreite " " "
 w_i = energetische Lage " " "

Über die optischen Funktionen

$$(1.32) \quad n(w) = \sqrt{\frac{1}{2}(\epsilon_1^2 + \sqrt{[\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2]})}$$

$$(1.33) \quad k(w) = \epsilon_2 / [2 n(w)]$$

und die Phasenbeziehung

$$(1.34) \quad \Theta(w) = - \operatorname{atan} ([2 k(w)] / [1 + n^2 - k^2])$$

wird ein theoretisches Reflexionsspektrum nach Gleichung (1.20) berechnet und mit den experimentellen Daten verglichen.

Wegen der Vielzahl der zu variierenden Fitparameter konnte nicht auf bestehende Fitalgorithmen zurückgegriffen werden. Es wurde hier ein Fitsystem aufgebaut, das auf dem Prinzip der Evolutionsstrategie beruht. Das Prinzip ist im Anhang (Teil b) kurz dargestellt.

In Fig. 1.2.2.a ist eine Sequenz zur Überprüfung der Kramers-Kronig-Transformation am Beispiel von CdTe (300 K) dargestellt: Das untere Bild zeigt das mit einem Exponenten $n=4$ ("Experiment") transformierte ϵ_2 -Spektrum (Die Darstellung ist um einen konstanten Wert verschoben). Darunter ist das durch 48 Lorentzkurven aufgebaute ϵ_2 -Spektrum dargestellt. Nur durch die große Anzahl von Oszillatoren kann die Abweichung kleiner 1% zwischen dem theoretischen und dem experimentellen ϵ_2 -Spektrums im gesamten Energiebereich erreicht werden.

Im oberen Bild ist das aus Lorentzlinien berechnete - und um einen konstanten Wert verschoben - das experimentell gemessene Reflexionsspektrum von CdTe dargestellt. Die beiden Reflexionsspektren sind innerhalb der Meßgenauigkeit als identisch anzusehen, wodurch die Richtigkeit der Transformation gezeigt ist.

Die Parameter der einzelnen Oszillatoren sind in der Tabelle 1.2.2.1 zusammengefaßt.

Für alle anderen Exponenten $n \neq 4$ ergeben sich Abweichungen beim Vergleich des experimentellen und theoretischen Reflexionsspektrums. Ein Beispiel hierfür zeigt Fig. 1.2.2.b. Der Exponent n ist so gewählt, daß sich eine möglichst gute Übereinstimmung des transformierten ϵ_2 -Spektrums mit anderen Literaturdarstellungen /Fre73, Ken81/ ergab.

Reflexionsspektrum

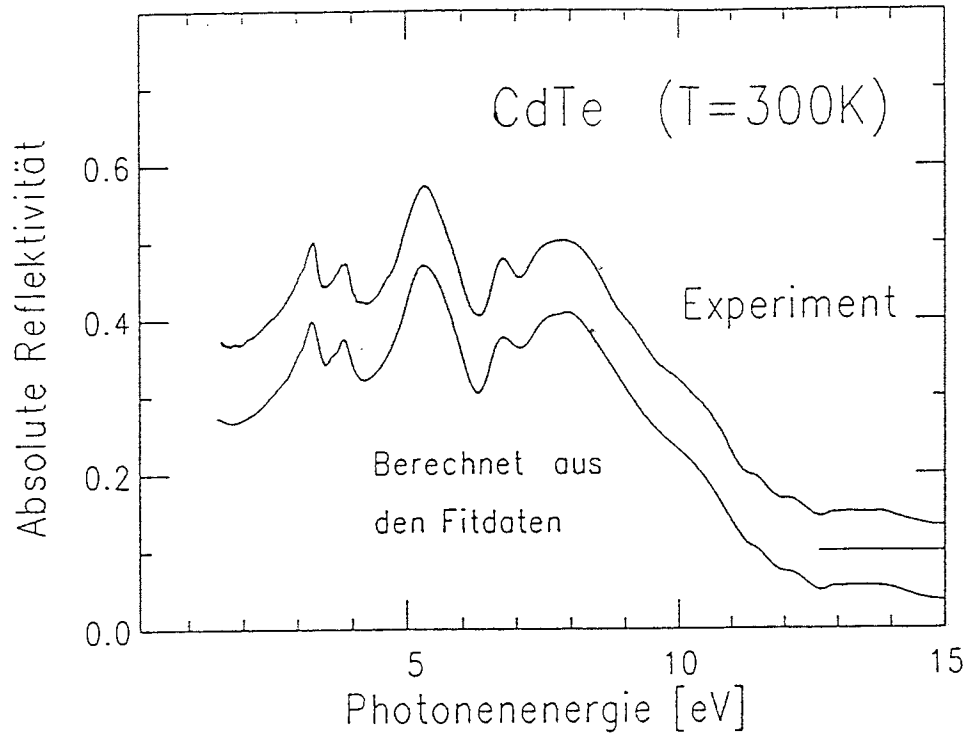
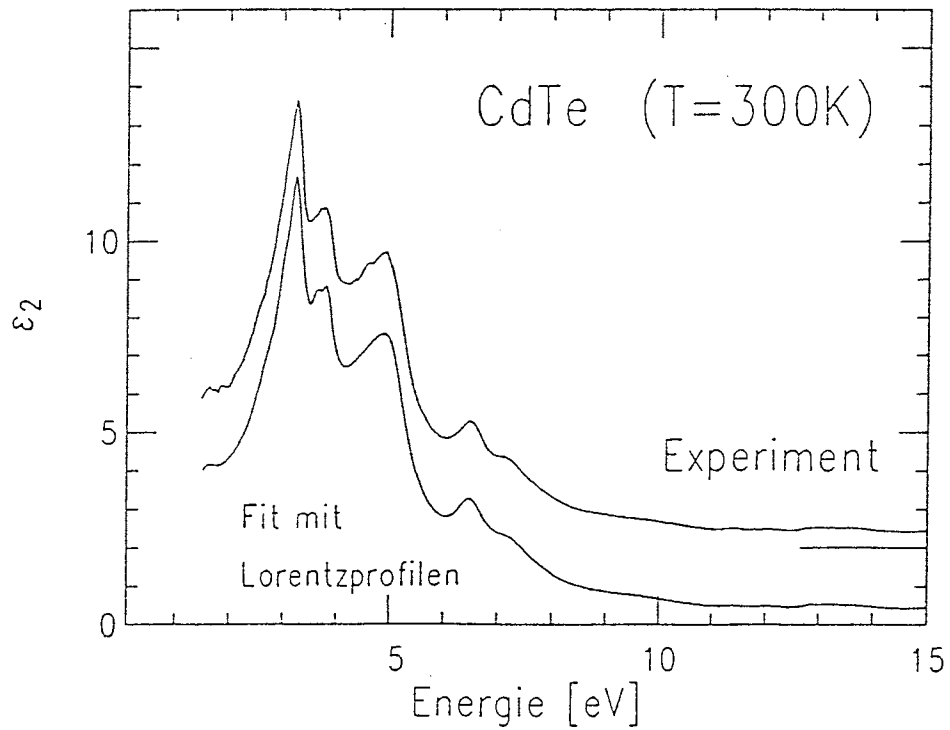
 ϵ_2 -Spektrum

Fig 1.2.2.a

- a) theoretisches - und experimentell gemessenes Reflexionsspektrum.
 b) Durch Lorentzkurven aufgebautes - und experimentelles ϵ_2 -Spektrum.
 (siehe Text)

! Nr. !	! Lage !	! Halbwerts- ! breite !	! Oszillator- ! staerke !
! 1. !	! 1.611277 !	! 0.399297 !	! 0.030725 !
! 2. !	! 1.485917 !	! 1.946188 !	! 0.337380 !
! 3. !	! 2.543012 !	! 4.141549 !	! 0.037651 !
! 4. !	! 2.735942 !	! 0.627141 !	! 0.242070 !
! 5. !	! 2.963475 !	! 2.343959 !	! 1.024640 !
! 6. !	! 3.028313 !	! 0.358409 !	! 0.250545 !
! 7. !	! 3.257777 !	! 0.309778 !	! 0.508731 !
! 8. !	! 3.626498 !	! 1.554254 !	! 0.516779 !
! 9. !	! 3.638511 !	! 0.288685 !	! 0.175034 !
! 10. !	! 3.826667 !	! 0.258136 !	! 0.208428 !
! 11. !	! 4.039797 !	! 6.463666 !	! 3.647707 !
! 12. !	! 4.471466 !	! 3.612384 !	! 0.182830 !
! 13. !	! 4.472077 !	! 1.396431 !	! 1.052883 !
! 14. !	! 4.507798 !	! 1.456474 !	! 0.400273 !
! 15. !	! 4.836024 !	! 1.022721 !	! 0.884550 !
! 16. !	! 5.023459 !	! 0.724091 !	! 0.529179 !
! 17. !	! 5.064179 !	! 0.494502 !	! 0.200718 !
! 18. !	! 5.146735 !	! 4.056851 !	! 0.518501 !
! 19. !	! 6.500181 !	! 0.661039 !	! 0.579123 !
! 20. !	! 7.257681 !	! 1.046183 !	! 0.656884 !
! 21. !	! 7.831589 !	! 0.515742 !	! 0.031972 !
! 22. !	! 8.149646 !	! 2.810362 !	! 0.093928 !
! 23. !	! 8.570376 !	! 2.077847 !	! 0.109456 !
! 24. !	! 9.334137 !	! 10.392480 !	! 0.151274 !
! 25. !	! 9.207880 !	! 1.923442 !	! 0.000925 !
! 26. !	! 9.233900 !	! 3.383669 !	! 0.003858 !
! 27. !	! 9.843550 !	! 2.128408 !	! 0.188780 !
! 28. !	! 9.624537 !	! 2.106113 !	! 0.036676 !
! 29. !	! 9.778375 !	! 2.516482 !	! 0.144579 !
! 30. !	! 11.420992 !	! 0.456205 !	! 0.023541 !
! 31. !	! 12.068678 !	! 0.661290 !	! 0.062877 !
! 32. !	! 12.721539 !	! 12.394670 !	! 0.364588 !
! 33. !	! 12.827876 !	! 0.352311 !	! 0.031205 !
! 34. !	! 13.014355 !	! 0.758821 !	! 0.014189 !
! 35. !	! 13.151524 !	! 0.295970 !	! 0.007541 !
! 36. !	! 13.430299 !	! 1.474135 !	! 0.317781 !
! 37. !	! 13.913179 !	! 0.968321 !	! 0.047269 !
! 38. !	! 14.450061 !	! 5.903927 !	! 0.238605 !
! 39. !	! 14.711606 !	! 2.863113 !	! 0.067955 !
! 40. !	! 15.407061 !	! 2.008745 !	! 0.419671 !
! 41. !	! 15.225726 !	! 0.500390 !	! 0.008332 !
! 42. !	! 15.938801 !	! 1.349900 !	! 0.084858 !
! 43. !	! 16.547621 !	! 1.465623 !	! 0.116948 !
! 44. !	! 15.273275 !	! 4.005555 !	! 0.042257 !
! 45. !	! 17.799931 !	! 1.977436 !	! 0.096111 !
! 46. !	! 17.924534 !	! 4.871655 !	! 0.187713 !
! 47. !	! 19.099922 !	! 1.963655 !	! 0.178191 !
! 48. !	! 22.182314 !	! 8.067074 !	! 3.922936 !

Tab. 1.2.2.1: Tabelle der Parameter für das in Fig. 1.2.2.a dargestellte ϵ_2 -Spektrum - aufgebaut durch 48 Lorentzlinien.
(Fit: Beginn = 1.0 eV, Ende = 20 eV, Konstanter Faktor bei der Oszillatorstärke $A = 10.0$)

Im unteren Bild ist wie in Fig. 1.2.2.a das transformierte- (durchgezogen) und durch Lorentzprofile approximiertes (gestrichelte Linie) ϵ_2 -Spektrum dargestellt, diesmal jedoch wurde die Transformation mit dem Exponenten $n = -2$ durchgeführt, um einen Vergleich mit den Literaturdarstellungen /Fre73, Ken81/ zu erhalten. Bild a) zeigt nun wiederum das aus Lorentzlinien berechnete (gestrichelt) - und um einen konstanten Wert verschobene - das experimentell gemessene (durchgezogen) Reflexionspektrum von CdTe.

Oberhalb 7 eV ist deutlich die starke Abweichung des theoretischen Reflexionsspektrums vom Experiment zu erkennen. Im niederenergetischen Bereich bis etwa 6 eV sind dagegen die Abweichungen kaum sichtbar.

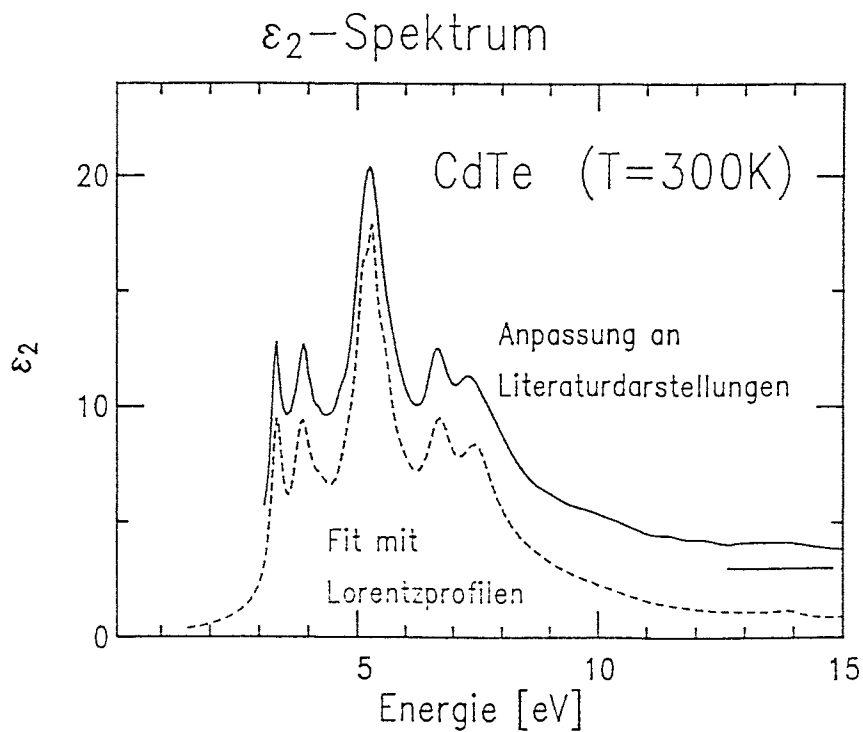
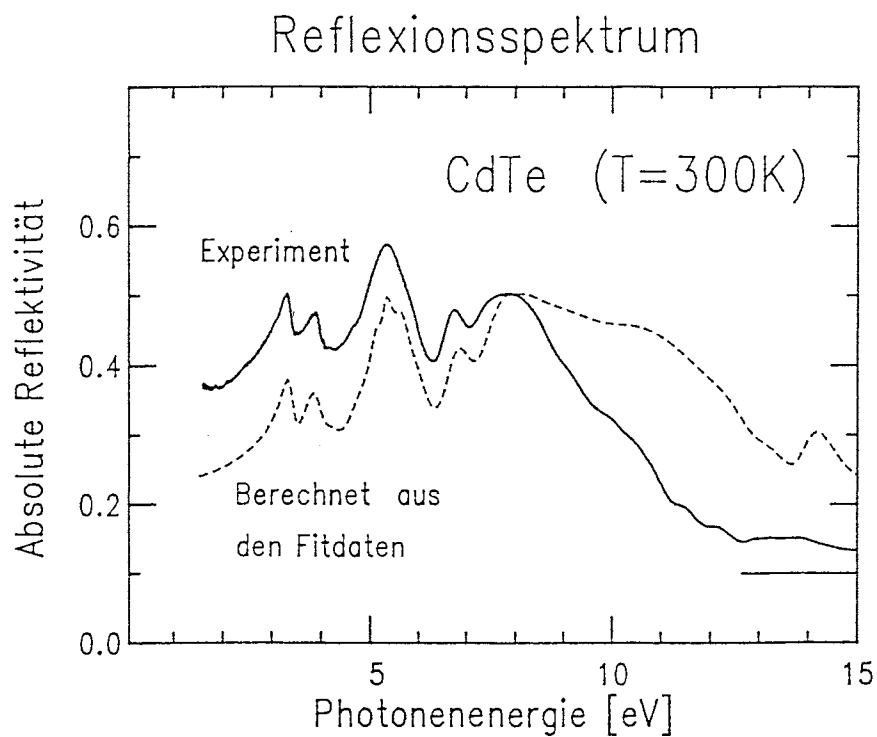


Fig 1.2.2.b

- a) theoretisches - und gemessenes Reflexionsspektrum.
- b) Durch Lorentzkurven aufgebautes - und experimentelles ϵ_2 -Spektrum, jedoch mit einem Exponenten $n = -2$ (siehe Text).

1.2.3 Interbandübergänge und kritische Punkte

Durch Umformung der Gleichung (1.19) vom Volumenintegral über die gesamte Brillouin-Zone in ein Oberflächenintegral konstanter Energie, wird der Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten ϵ_2 /Bal72/ zu:

$$(1.35) \quad \epsilon_2 = \frac{4 \hbar e^2}{\pi m^2 \omega^2} \int dS \frac{|e M_{vc}|^2}{|\nabla_k (E_c - E_v)|_{E_c - E_v = \hbar \omega}}$$

mit $S = E_c - E_v - \hbar \omega = \text{konstant}$

Wird eine Phononenbeteiligung ausgeschlossen ($T = 0K$), so ergibt sich für ϵ_2 nur dann ein Maximum in der Intensität, wenn die Energieerhaltung ($E_c - E_v = \hbar \omega$) und die Impulserhaltung ($M_{vc}(k_c = k_v) = 0$ - direkte Übergänge) gewährleistet ist.

Ein Extremum tritt dann auf, wenn beide Energiebänder in $E(k)$ -Raum die gleiche Steigung $\nabla E_c = \nabla E_v$ haben, dabei unterscheidet man zwischen kritischen Punkten 1. Art ($\nabla E_v = 0$, symmetriebedingte kritische Punkte sowohl in der elektronischen Bandstruktur als auch in der kombinierten Zustandsdichte) und kritischen Punkten 2. Art ($\nabla E \neq 0$, kritische Punkte die nur in der kombinierten Zustandsdichte auftreten).

In der Umgebung solcher kritischer Punkte kann das Übergangsmatrixelement $M_{vc}(\hbar \omega)$ als konstant angesetzt werden, wodurch sich der Imaginärteil ϵ_2 der Dielektrizitätskonstanten als proportional zur kombinierten Zustandsdichte J_{vc} ergibt.

$$(1.36) \quad J_{vc} = \int dS \cdot \frac{1}{|\nabla (E_c - E_v)|_{E_c - E_v = \hbar \omega}}$$

Die Extremalwerte der kombinierten Zustandsdichte werden als Van Hove Singularitäten bezeichnet. Die Form der kritischen Punkte kann in mehrere Fälle unterschieden werden.

Hierzu wird eine Reihenentwicklung um k_{o1} für die Übergangsenergie $E_c(k) - E_v(k)$ durchgeführt:

$$(1.37) \quad E_c(k) - E_v(k) \approx E_0 + \sum [a_i | (k_i - k_{o1}) |^2]$$

(parabolische Näherung. /BroVL/)

Die unterschiedlichen Arten der Extremalwerte können durch die Koeffizienten a_i charakterisiert werden (siehe Tabelle 1.2.3.1 und Fig. 1.2.3.a).

Typ	Benennung	a_1	a_2	a_3	$E < E_0$	$E > E_0$
Minimum	M_0	+	+	+	0	$K_0 (E - E_0)^{1/2}$
Maximum	M_3	-	-	-	$K_3 (E - E_0)^{1/2}$	0
Sattelpunkt I	M_1	+	+	-	$K_1 - K'_1 (E_0 - E)^{1/2}$	K_1
Sattelpunkt II	M_2	+	-	-	K_2	$K_2 - K'_2 (E - E_0)^{1/2}$

Tab. 1.2.3.1 : Bezeichnung der kritischen Punkte nach /BroVL/.

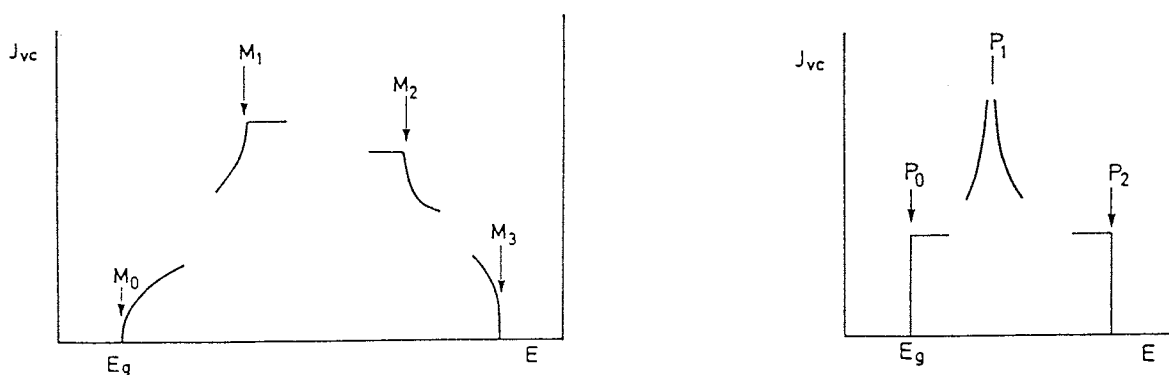


Fig. 1.2.3.a : Linienformen von kritischen Punkten /Bas83/.

Für ein experimentell berechnetes Spektrum werden jedoch erhebliche Abweichungen vom theoretischem Verlauf erwartet, da thermische Effekte, Elektron-Phonon-Wechselwirkungen oder Exzitonische Effekte die Linienform verändern können.

1.3 Bandstruktur CdTe und ZnTe

Fig 1.3.a (a und b) zeigt die Ergebnisse einer Bandstrukturberechnung für CdTe nach der nicht lokalen Empirischen Pseudopotential (EP)-Methode von Chelikowski und Cohen /Che76/. In der Berechnung wurde die Spin-Bahn-Kopplung und die Winkelverteilung in der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der p-Elektronen mitberücksichtigt, so daß eine gegenüber Chadi et al. (lokale Pseudopotential Methode /Cha72/) verbesserte Bandstruktur erreicht wurde. Da in der EP-Methode nur die Valenzelektronen als dispersiv betrachtet werden, sind in der Berechnung die Rumpfniveaustände nicht berücksichtigt. Aus den der Bandstruktur zugrunde liegenden Werten wurde die Reflektivität berechnet. Für den hochenergetischen Bereich (größer 8 eV) ergeben sich dabei erhebliche Abweichungen zu den experimentell bestimmten Reflexionsdaten, dessen Ursache in der Nichtberücksichtigung der hochenergetischen Übergänge vermutet werden (siehe Kap. 5.3).

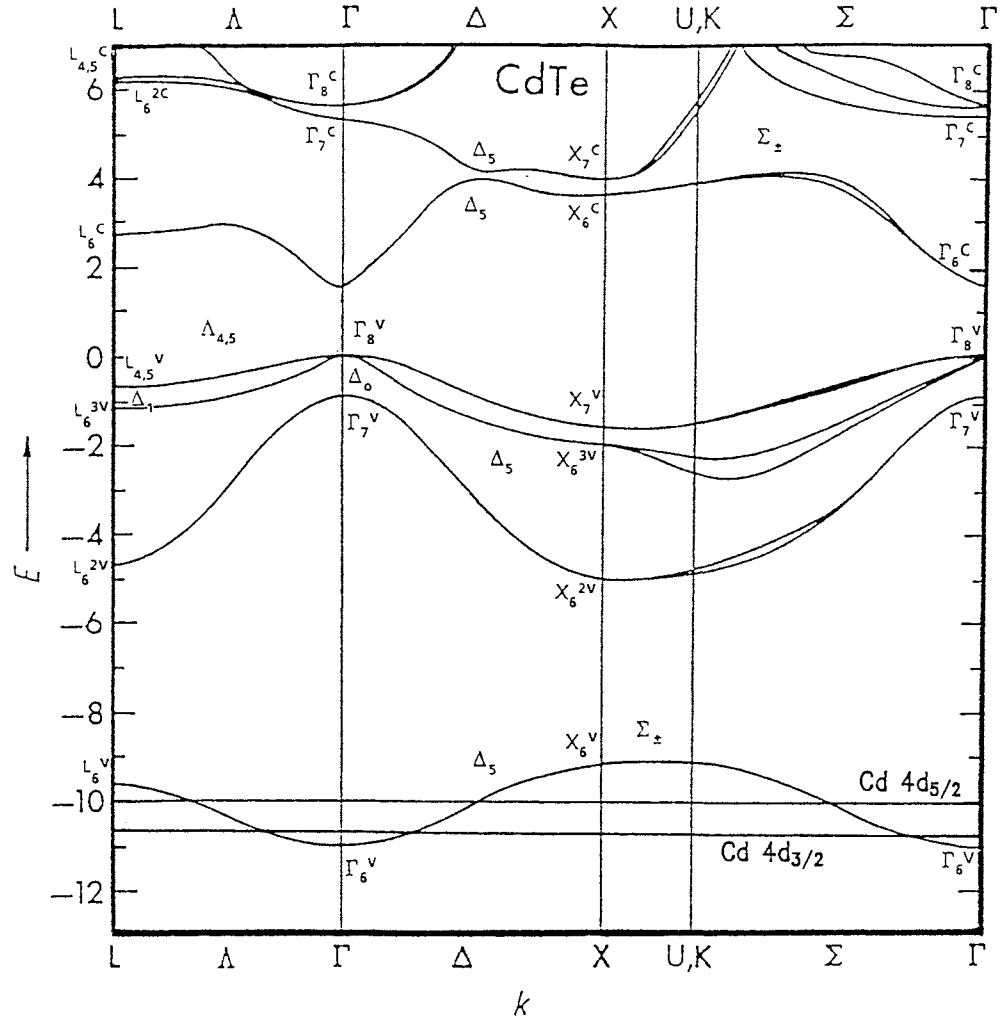
Der Aufbau der Valenz- und Leitungsbandstrukturen (Fig 1.3.a Bild c) entsteht aus einer sp-Hybridisierung der Cd5s und Te5p Zuständen, sowie einer Linearkombination der Cd5p- und Te5p-Zustände /Tan86/. Durch winkelaufgelöste inverse Photoelektronen-Spektroskopie /Mag87/ wurde der Verlauf der Leitungsbandstruktur in $\Gamma - (K) - X$ - Richtung im wesentlichen bestätigt. Die quantitativen Eigenwertenergien liegen höher als bei der Berechnung nach Chelikowsky /Che76/:

Lage:	nach /Che76/	nach /Mag87/	nach /Cha72/
Γ^c_8	5.61	6.4	6.3
X^c_6	3.48	3.7	3.85

Angaben in eV, bezogen auf das Valenzbandmaximum.

Die Cd $4d_{5/2}$ und Cd $4d_{3/2}$ Rumpfniveaustände wurden mit der Photoemissionsspektroskopie bei 10.0 und 10.65 eV (± 0.05 eV) ermittelt; für das Te 4d-Dublett ergaben sich die Werte 39.25 und 40.70 eV /Tan86/. Neuere winkelaufgelöste Photoemissionsmessungen von V. Chab et al /Cha88/ an CdTe ergaben eine Aufspaltung des Cd 4d-Bandes zu 0.69 eV. Die Lage der d-Bänder wurden mit ca. 9.7 eV (Cd $4d_{5/2}$) etwa 0.3 eV kleiner als bei Taniguchi et al. bestimmt. Für das Te 5s-Band wurde eine kleinere Dispersion (ca. 0.3 eV) - als theoretisch angenommen - ermittelt.

a) Bandstruktur CdTe nach /Che76/

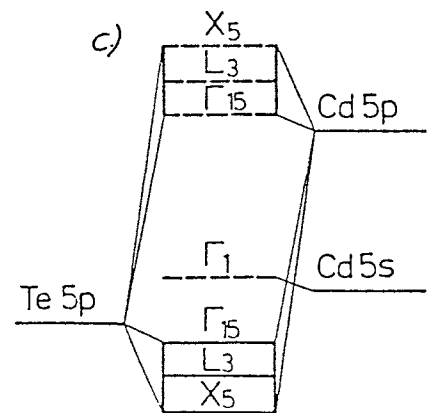


b)

Eigenwerte des kubisch-flächenzentrierten Halbleiters: CdTe nach /Che76/								
Punkt	Lage	Energie [eV]	Punkt	Lage	Energie [eV]	Punkt	Lage	Energie [eV]
Γ	Γ ₆ ^v	-11.07	X	X ₆ ^v	-9.12	L	L ₆ ^v	-9.64
	Γ ₇ ^v	-0.89		X ₆ ^{2v}	-5.05		L ₅ ^{2v}	-4.73
	Γ ₈ ^v	-0.00		X ₆ ^{3v}	-1.98		L ₅ ^{3v}	-1.18
	Γ ₆ ^c	1.59		X ₇ ^v	-1.60		L _{4,5} ^v	-0.65
	Γ ₇ ^c	5.36		X ₆ ^c	3.48		L ₆ ^c	2.82
	Γ ₈ ^c	5.61		X ₇ ^c	3.95		L ₅ ^{2c}	6.18
							L _{4,5} ^c	6.35

Cd 4d_{5/2} = 10.0 eV; Cd 4d_{3/2} = 10.65 eV nach /Tan86/

c)



Hybridisierungsmodell /Tan86/

Fig. 1.3.a: a.) Bandstruktur CdTe nach Chelikowski und Cohen /Che76/
 b.) Tabelle der Energieeigenwerte für CdTe nach /Che76/
 c.) Hybridisierungsmodell für CdTe nach /Tan86/.

Zur anschaulichen Darstellung wurden die Cd 4d-Zustände nach /Tan86/ in die Bandstruktur für CdTe eingetragen - wohlbewußt, daß dies dem Ein-elektronenbild der Bandstruktur widerspricht. Die Endzustände unterscheiden sich in der Gesamtdrehimpulsquantenzahl j , so daß der Endzustand Cd $4d^{9}_{5/2}$ oder $4d^{9}_{3/2}$ ist ($4d^{10} \rightarrow 4d^9_j + e$) /Kra86/.

Von N.A. Cade /Cad85/ wurde eine Bandstrukturberechnung für CdTe (s. Fig. 1.3.b) nach der Linearised Muffin-Tin Orbital Methode vorgestellt, wobei die Cd 4d-Zustände mit berücksichtigt werden. Als experimentelle Parameter gehen die Bindungslängen Cd - Te und die Kristallstruktur ein. Der qualitative Vergleich zeigt eine gute Übereinstimmung mit anderen Bandstrukturberechnungen, jedoch ergeben sich erhebliche Abweichungen bei einer quantitativen Betrachtung. So wird die Bandlücke zu 0.7 eV (1.5eV) und die Cd $4d_{5/2}$ und Cd $4d_{3/2}$ -Zustände zu 7.6 bzw. 8.1 eV berechnet.

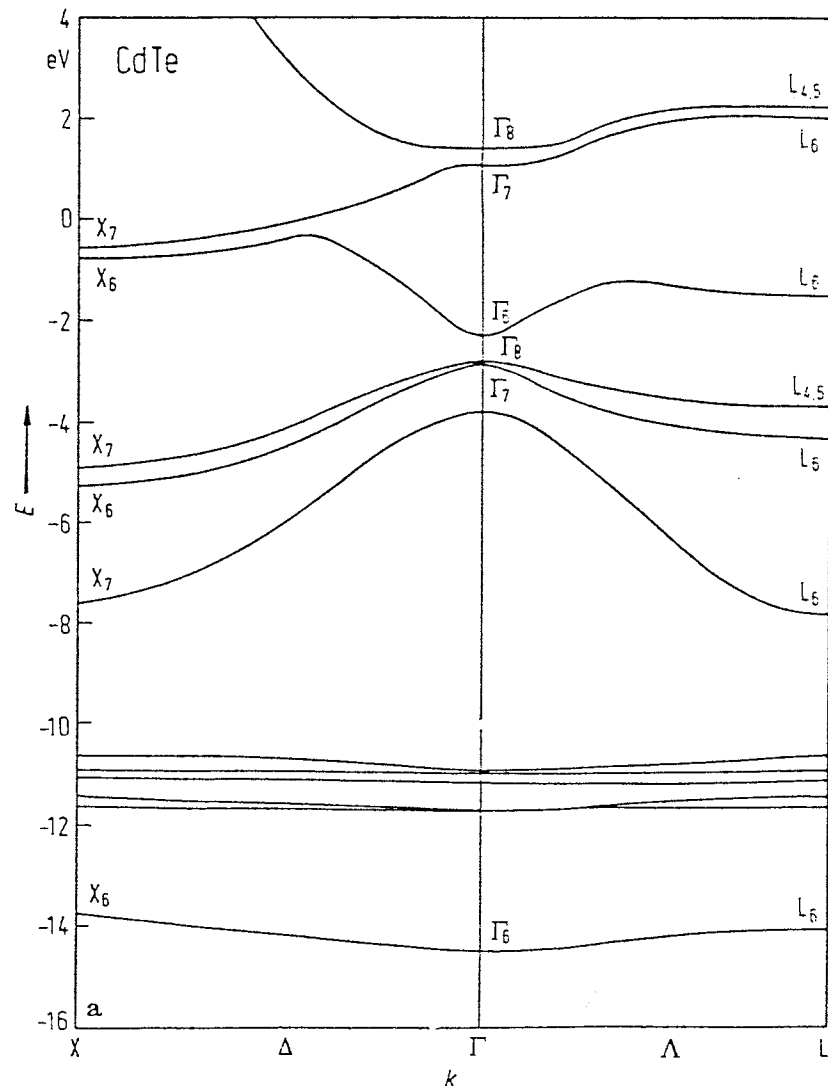


Fig. 1.3.b: Bandstruktur CdTe nach der Linearised Muffin-Tin Orbital Methode von N. A. Cade /Cad85/.

Für das ZnTe liegt eine Bandstrukturberechnung von Walter und Cohen /Wal70/ vor. Die Berechnung wurde nach der lokalen empirischen Pseudopotentialmethode durchgeführt und ist in Fig. 1.3.c dargestellt. Der qualitative Aufbau der ZnTe-Bandstruktur ist im oberen Valenzband- und unteren Leitungsbandbereich im wesentlichen identisch zur CdTe-Bandstruktur. Als deutliche Unterschiede sind hervorzuheben:

- eine größere Bandlücke.
- stärker ausgeprägte Maxima und Minima der oberen Leitungsbandstrukturen längs der Symmetrieachsen Δ und Σ , wodurch sich bei der kombinierten Zustandsdichte J_{vc} deutlich geringere Übergangswahrscheinlichkeiten ergeben.
- eine energetisch tiefere Lage des Te 5s-Niveaus (ca. 10.2 eV) mit einer deutlich kleineren Dispersion (ca. 1.2 eV) als beim CdTe (nach der Bandstrukturberechnung von /Che76/).

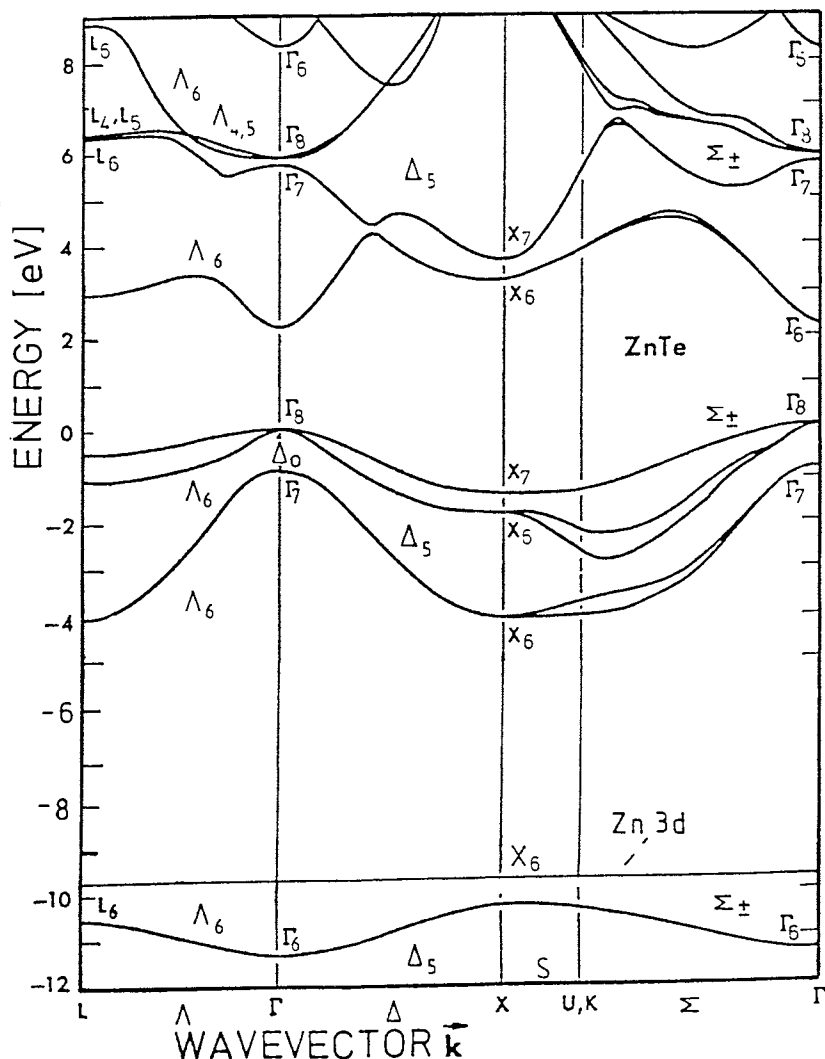


Fig. 1.3.c: Bandstruktur ZnTe nach der empirischen Pseudopotentialmethode /Wal70/. Zn 3d-Rumpfniveaus nach XPS-Messungen /Ley74/.

Für die Zn 3d¹⁰ - Zustände, die in der Bandstrukturberechnung nicht berücksichtigt werden, sind in der folgenden Tabelle 1.3.1 die experimentell ermittelten Werte zusammengefaßt.

Zn 3d		Spin-Bahn- Aufspaltung (SBA) und Dispersion (D)	Methode	Veröffentlichung
3/2 [eV]	5/2			
	9.84	-----	XPS	nach /Ley74/ Lage ab Valenzbandoberkante
	9.1±0.4		UPS	C. J. Vesely /Ves72/: Messungen am ZnTe
10.35±0.4; 9.66±0.37		SBA = 0.69 ± 0.1 eV	XPS	C.J. Vesely und D.W. Langer /Ves71/ am ZnTe.
10.0	9.4	D _{3/2} = 0.05eV D _{5/2} = 0.27eV SBA = 0.60 eV	XPS	F. J. Himpsel /Him80/ Messungen an elementaren Zn-Metall.

Tab. 1.3.1: Untersuchungen zur Lage der Zn 3d Zustände

Die von L. Ley /Ley74/ ermittelten Werte wurden in die Bandstruktur (Fig. 1.3.c) übernommen.

1.4 *Bandstruktur MnTe und der Einfluß des Mangans auf das Mischkristallsystem Cd_xZn_{1-x}Mn_xTe*

1.4.1 Bandstruktur des hypothetischen MnTe

Unter Normalbedingungen kristallisiert MnTe in NiAs-Struktur (α -MnTe) mit den Gitterkonstanten $a=0.4138$ nm und $c=0.6706$ nm. Für die Bandkante wurde der Wert $E_0=1.3$ eV ermittelt. Der Halbleiter α -MnTe zeigt bis 323 Kelvin ein antiferromagnetisches Verhalten und wird oberhalb 323 K paramagnetisch /Gme76 S.315ff/. Eine Bandstrukturberechnung für α -MnTe nach der APW-Methode wurde von Podgorny et. al /Pod83/ vorgestellt.

Auf die Eigenschaften des hypothetischen MnTe in Zinkblende-Struktur kann über das konzentrationsabhängige Verhalten in Mischkristallsystemen Cd_{1-x}Mn_xTe bzw. Hg_{1-x}Mn_xTe extrapoliert werden.

Aus der Vielzahl der theoretischen Bandstrukturberechnungen /Car84, Mas86/ wird hier die nach der "Empirischen Tight Binding"-Methode von K. C. Hass /Has84/ erhaltene Bandstruktur für das hypothetische MnTe in Zinkblendestruktur vorgestellt (Fig. 1.4.1.a). In der Berechnung wurde keine Spin-Spin-Austauschwechselwirkung berücksichtigt (siehe auch zusammenfassende Darstellung in /Kra86/ S.27ff).

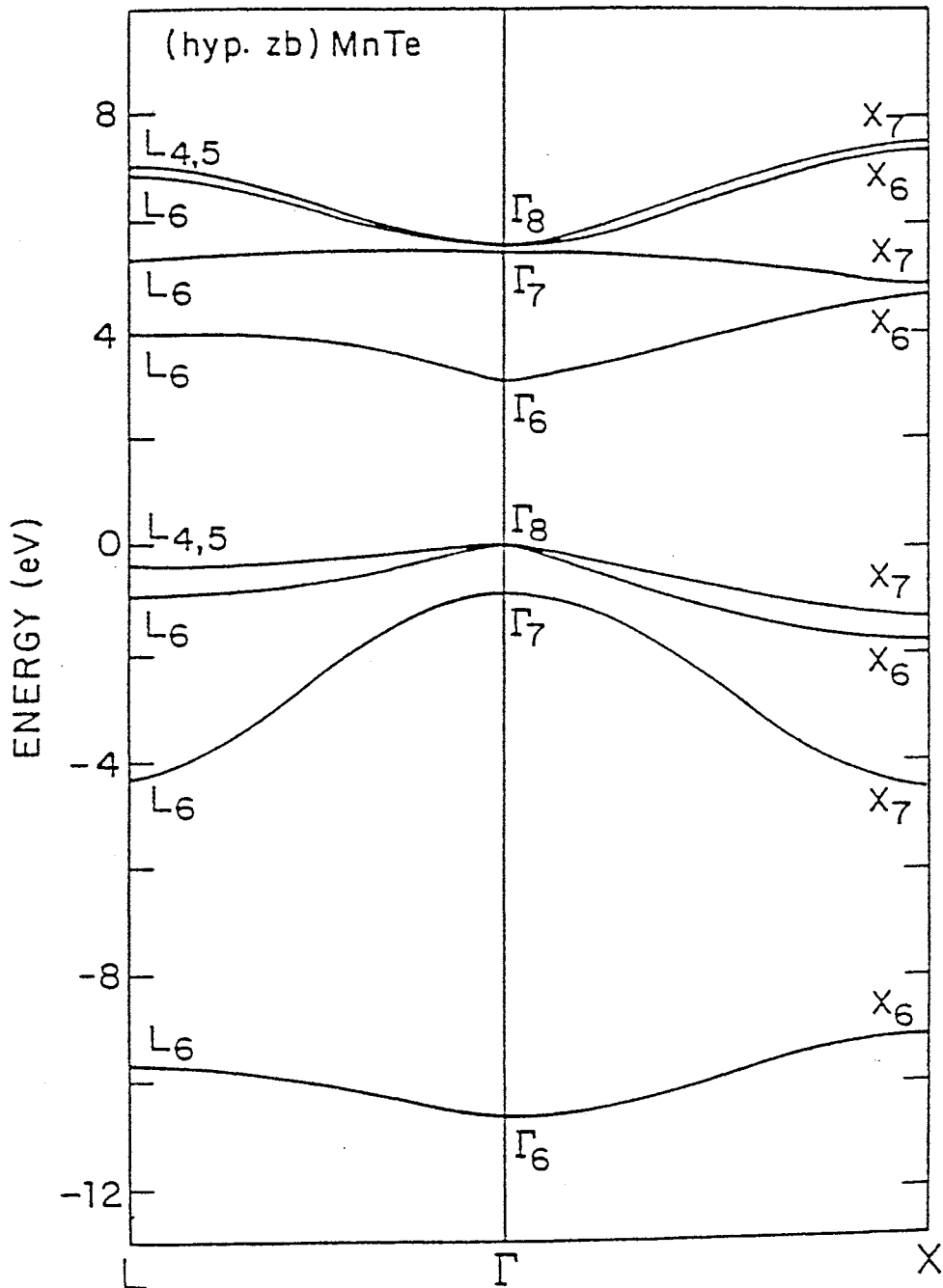


Fig. 1.4.1.a: Bandstruktur für das hypothetische MnTe (T_d) nach der "Empirischen Tight Binding"-Methode /Has84/.

1.4.2 Einfluß der Mn 3d-Zustände in $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$

Beim Einbau von Mn in CdTe (siehe Kap.1.1.1) zeigt sich eine lineare Verringerung der Gitterkonstante $a = 0.648 \text{ nm}$ (CdTe, 300K) auf $a = 0.6385 \text{ nm}$ ($\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, $x=0.7$, $T=300\text{K}$) /Gal82/. Die Bandkante vergrößert sich linear mit der Mangankonzentration von 1.59 eV (CdTe, 20K) auf 3.21 eV (hpoth. ZB-Struktur MnTe, 20K, extrapoliert) /Büc84, S.75ff/. Der Einfluß des Mangans durch die Hybridisierung mit dem Wirtskristallsystem CdTe wurde mittels der Reflexionsspektroskopie im Energiebereich von 1 bis 5 eV ausführlich untersucht /Büc84/. Es konnte in diesem Energiebereich jedoch kein Mangan-spezifischer Übergang nachgewiesen werden, so daß die Frage nach der Lage der Mn-Bänder offen blieb.

Mit Hilfe der Photoemissionspektroskopie wurde in zahlreichen Arbeiten versucht, die Mn 3d-Bänder zu bestimmen:

In der Arbeit von P. Oelhafen et al. /Oel82/ konnte kein dem Mangan zuzuordnendes Maximum festgestellt werden. Mit UPS-Messungen wurde das Mn 3d bei 7.2 eV /Orl79/, 3.5 eV /Web81/ und bei 3.4 (7.0) eV /Tan86/ zugeordnet.

Eine zusammenfassende Deutung der teilweise recht unterschiedlichen Ergebnisse stellt die Arbeit von Taniguchi et al. /Tan86/ dar. Es wird gezeigt, daß bei ca. 3.4 eV unterhalb der Valenzbandoberkante ein relativ scharfes Photoelektronensignal den Mn 3d - Zuständen ($E - \text{Symmetrie}$) zugeordnet werden kann, das zudem eine Konzentrationsabhängigkeit zeigt. Hinzu kommt eine allgemeine Verbreiterung von Zuständen im Valenzbandbereich durch die Hybridisierung von Mn 3d-Zuständen ($T_2 - \text{Symmetrie}$) mit den Cd- und Te-Zuständen.

Das von Taniguchi et al. vorgeschlagene Modell über die energetische Lage und Hybridisierung der Mangan-Zustände ist in Fig. 1.4.2.a dargestellt.

Es zeigt die Aufspaltung des Mn 3d-Zustandes durch die Antiferromagnetische Austauschwechselwirkung mit der anschließenden Kristallfeldaufspaltung in 2 Zustände. Der Zustand mit T_2 -Symmetrie hybridisiert mit den Te 5p- und Cd 5p-Valenzbändern (Die Cd 5p-Hybridisierung ist nicht eingezeichnet) und führt zu der beobachteten Verbreiterung der Valenzbandzustände.

Der Mn 3d-Zustand in E -Symmetrie hybridisiert nicht mit anderen Valenzbändern und führt somit zu einem scharfen Maximum bei 3.4 eV.

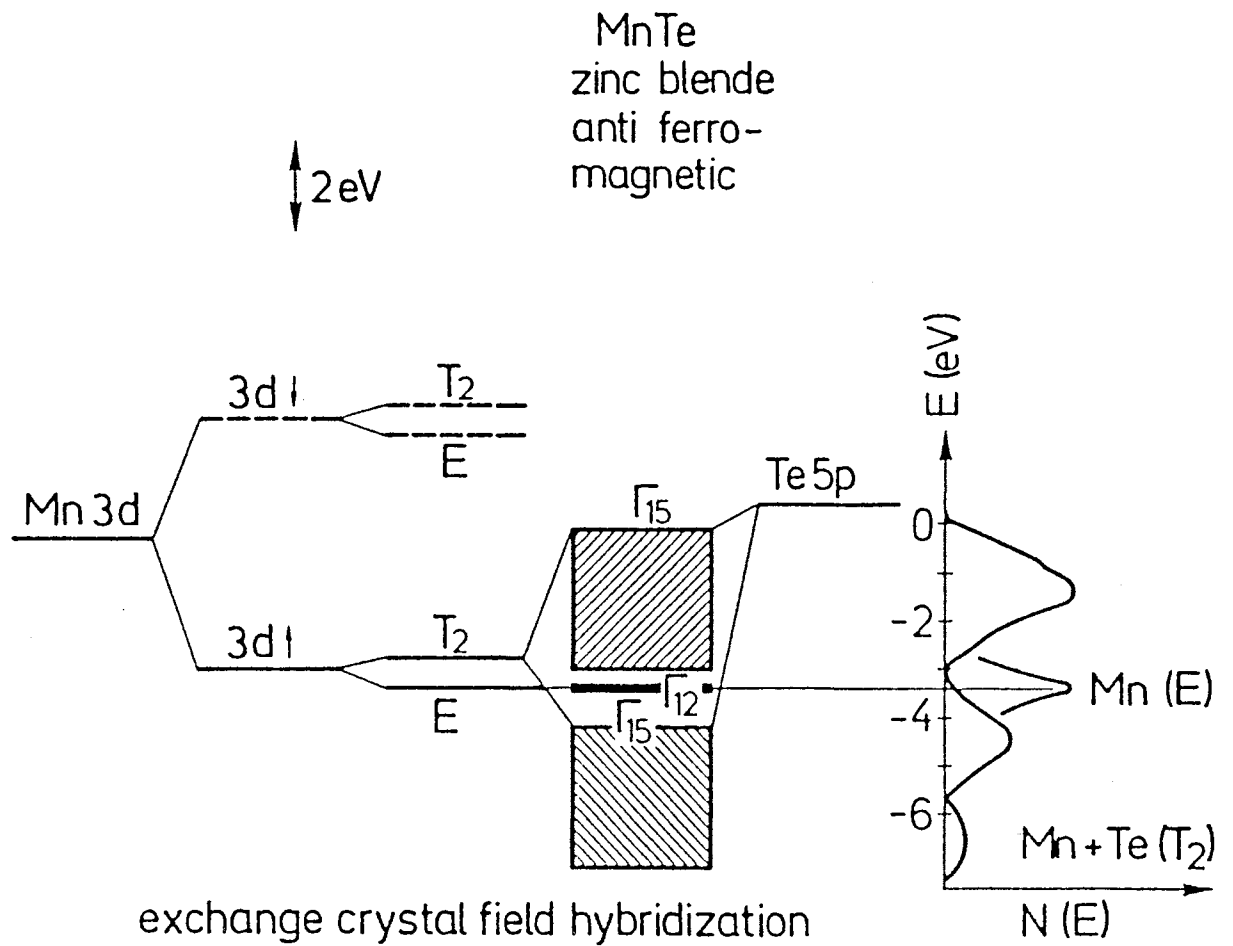


Fig. 1.4.2.a: Hybridisierungsmodell und Kristallfeldaufspaltung der Mn 3d-Zustände in der Bandstruktur von CdTe /Tan86/.

II. Experimenteller Aufbau

Laborlichtquelle von 1 bis 6 eV.

2.1 Experimentelle Komponenten

2.1.1 Vakuumsystem

Das Vorvakuum wird mittels einer Drehschieberpumpe D6A von Leybold Heraeus erzeugt. Ihr ist eine Kühlfalle mit 1-N_2 nachgeschaltet, wodurch ein Vorvakuum $< 10^{-3}$ mbar erreicht wird. Der Enddruck im Probenraum von ca. $8 \cdot 10^{-8}$ mbar wird durch eine Turbopumpe 'Turbovac 150' mit einer Saugleistung von 150 l/s erreicht.

Wird keine Kühlfalle oder eine Ceolith-Adsorptionsfalle benutzt, so zeigen sich bei Restgasanalysen deutliche Hinweise auf Öl-Crackprodukte.

Die Druckmessung erfolgt mit einer Kaltkathoden-Meßröhre 'IKR020' von der Firma Balzers (Meßbereich: $5 \cdot 10^{-3}$ bis $4 \cdot 10^{-10}$ mbar). Die Genauigkeit dieser Kaltkathoden-Meßröhren (Penning) ist geringer als bei Heißkathoden-Meßröhren. Diese erzeugen jedoch keine störenden Glühemissionen und sind somit auch während einer Messung zur Druckkontrolle einsetzbar. Parallel zu dem Penning kann eine Massenspektrometermeßröhre (QMG64, Firma Balzers) in den Probenraum eingebaut werden, um Restgasanalysen zur Abschätzung von Adsorbaten auf der Probe durchzuführen.

2.1.2 Xenon-Kurzbogenlampe (XBO)

Um Reflexionsmessungen in einem möglichst großen Energiebereich (von 1 bis 6 eV) durchzuführen, wurde eine XBO-Lampe (450 W) mit Suprasilkolben verwendet. Die XBO-Lampe besitzt ein stark verbreitertes Linienspektrum, das vom Infrarot- bis zum UV-Bereich (200 nm) reicht (siehe Fig. 2.1.2.a). Die einzelnen intensiven Linienstrukturen haben den Nachteil, daß sie die Aussteuerung des Detektionssystems stark einschränken. Jedoch bieten diese intensitätsreichen Linien auch die Möglichkeit, die Justierung des Strahlengangs zu überprüfen, da bei nicht korrekter Justierung sofort Einbrüche in der Reflektivität R auftreten.

Um die intensive Wärmestrahlung der XBO-Lampe zu unterdrücken wird eine Küvette mit H_2O in den Strahlengang vor den Monochromatoreintrittsspalt gebracht.

Nullspektrum der Xenon-Kurzbogenlampe

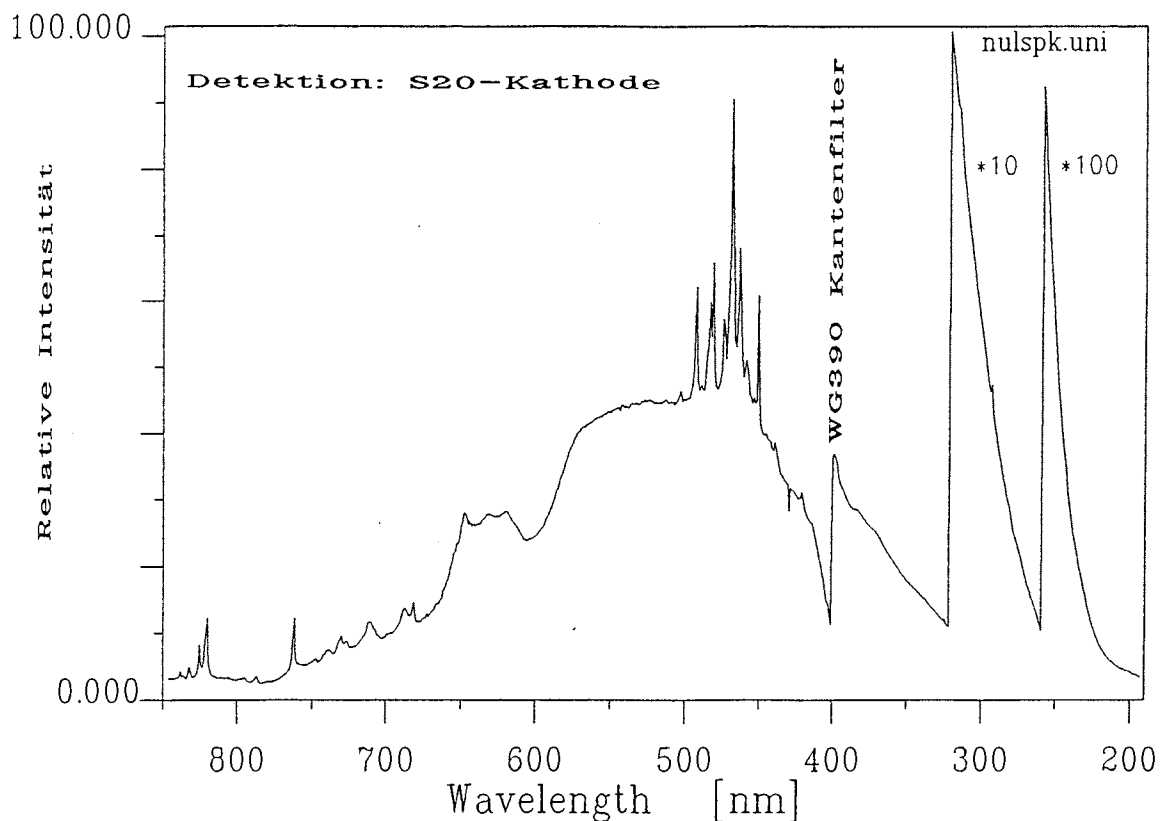


Fig. 2.1.2.a: Lampenspektrum der Xenon-Kurzbogenlampe XBO 450 W/4 im Bereich von 200-850 nm. Gefaltet mit der Monochromator- und Multiplifiercharakteristik. Im Bereich 850 bis 410 nm ist dem Spektrum noch die Filterfunktion des Kantenfilters WG390 überlagert.

2.1.3 Monochromator

Bei dem benutzten Monochromator handelt es sich um einen evakuierbaren Jarrel-Ash-Monochromator mit einer Spiegelbrennweite $f=500$ mm (siehe Fig. 2.1.3.a). In der ersten Meßphase wurde ein geritztes Strichgitter ($64 \times 64 \text{ mm}^2$) mit 1180 Strichen pro mm verwendet. Der Blaze-Winkel L_B des stufenförmig geritzten Strichgitters liegt bei 500 nm. Die Effizienz eines geritzten Gitters fällt in den Randgebieten sehr schnell ab und beträgt bei $(\pm L_B)/2$ nur noch 0.6 bis 0.7. Aus diesem Grund wurde ein holographisches Strichgitter mit 1180 Strichen/mm eingebaut. Die Ausformung der Ritzungen ist hier fast sinusförmig, so daß nur kleine Verzerrungen der Lampenintensität auftreten. Die Effizienz des Gitters im Bereich 200-300 nm liegt damit deutlich über der des mechanisch geritzten Gitters. Für die Eichung des Monochromators wurde eine Hg-Spektrallampe benutzt.

Die Eichung erfolgte bei folgenden Spektrallinien:

in 1.Ordnung:

253.652 nm, 312.566 nm, 313.155 nm, 404.66 nm,
435.835 nm, 546.074 nm;

in 2.Ordnung:

809.312 nm, 871.67 nm, und 1092.148 nm.

Als zusätzlicher Eichpunkt wurde die Laserlinie $\lambda = 632.8$ nm verwendet, die gleichzeitig zur Kontrolle und Vorjustierung des Gitters diente.

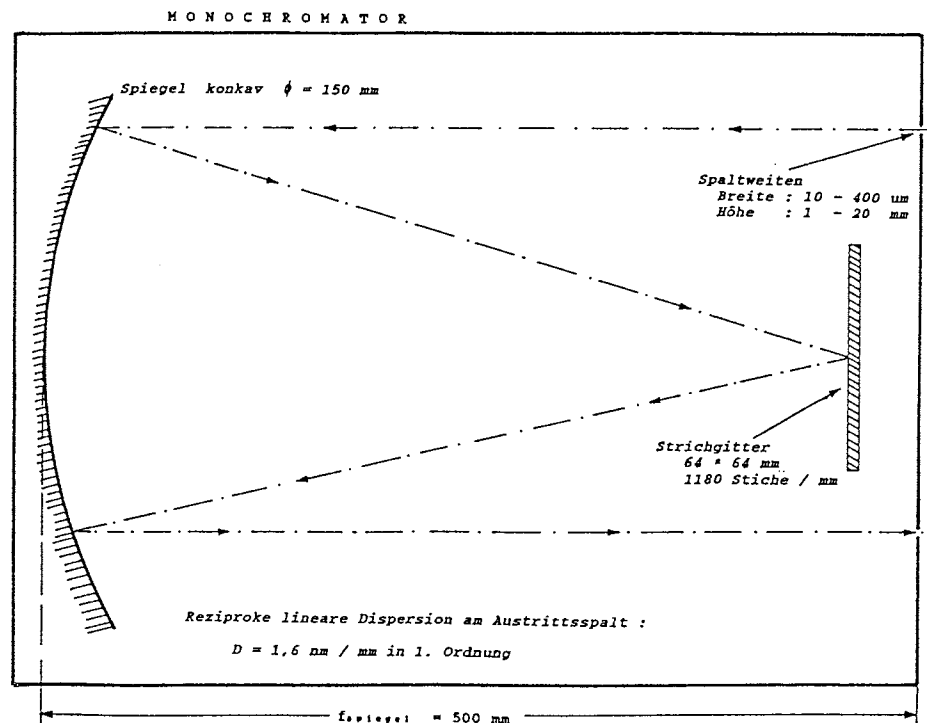


Fig.2.1.3.a: Aufbau des evakuierbaren Jarrel-Ash-Monochromators ($f=500$ mm).

Die Fehlertoleranz liegt im gesamten justierten Bereich unter ± 0.08 nm. Da die Reflexionsmessungen mit Schrittweiten von 1 nm durchgeführt wurden, sind die Abweichungen vernachlässigbar.

2.1.4 Abbildungsoptik

Um den Brennpunkt der Lichtquelle genau auf die Probe abbilden zu können, wurde eine Abbildungseinheit, bestehend aus einem

Planspiegel ($10 \times 25 \text{ mm}^2$) und einem Konkavspiegel ($20 \times 30 \text{ mm}^2$) mit einem Krümmungsradius von $R=200 \text{ mm}$ konstruiert. Der Lichtstrahl läßt sich mit dem dreipunkt-gelagerten Konkavspiegel auf die Probe justieren. Der Austrittsspalt kann dann durch eine Parallelverschiebung des Planspiegels (Variation der Länge des Lichtweges) auf die Probe abgebildet werden. Die gesamte Abbildungseinheit ist in einem lichtdichten Gehäuse am Austrittsspalt des Monochromators untergebracht. Für die tatkräftige Hilfe bei der Ideensammlung und Konstruktion möchte ich an dieser Stelle Herrn Erhard Flach danken.

2.1.5 Photomultiplier und Stromverstärker

Zur Detektion der Lichtstrahlung wurde eine S20-Kathode verwendet. Die lichtempfindliche Schicht besitzt einen Durchmesser von 50 mm und besteht aus $\text{Na}_2\text{KSb:Cs}$, das auf eine Suprasil-Scheibe aufgetragen ist. Die charakteristische Empfindlichkeit ist in Fig. 2.1.5.a dargestellt. Die maximale Empfindlichkeit liegt bei 420 nm , der maximale Ausgangsstrom bei $10 \mu\text{A}$.

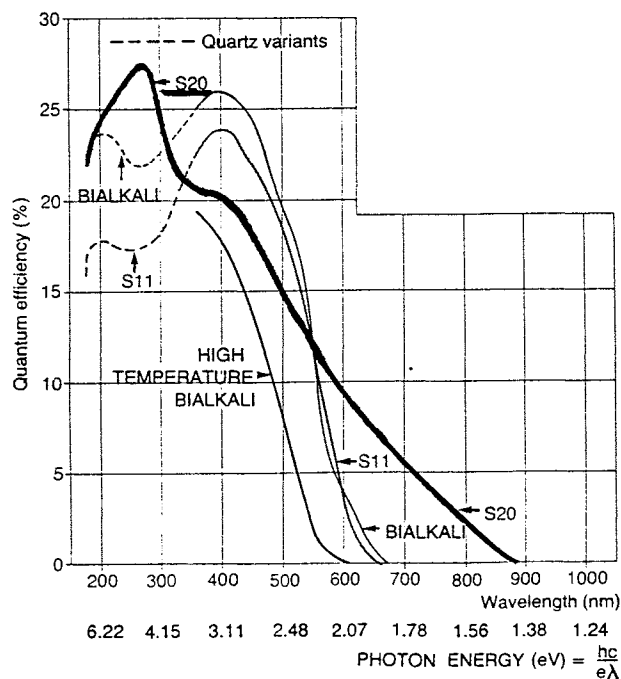


Fig.2.1.5.a: Charakteristik der S20-Kathode

Der Stromverstärker (Keithley : 425 current amplifier) verstärkt den Ausgangsstrom und liefert ein dem Strom des jeweiligen Verstärkungsbereichs (Gain) proportionales Spannungssignal von 0-10 V. Die an dem Photomultiplier anliegende Hochspannung kann in einem Bereich von 700 bis 1000 V variiert werden. Wird eine Hochspannung unter 700V eingestellt, so treten Übersteuerungseffekte der Kathode auf.

Bei Verstärkungsfaktoren von 10^{+8} bis 10^{+9} und einer Hochspannung größer 800 V wächst der Dunkelstrom des Multipliers (siehe Fig. 2.1.5.b) in die Größenordnung der Signale.

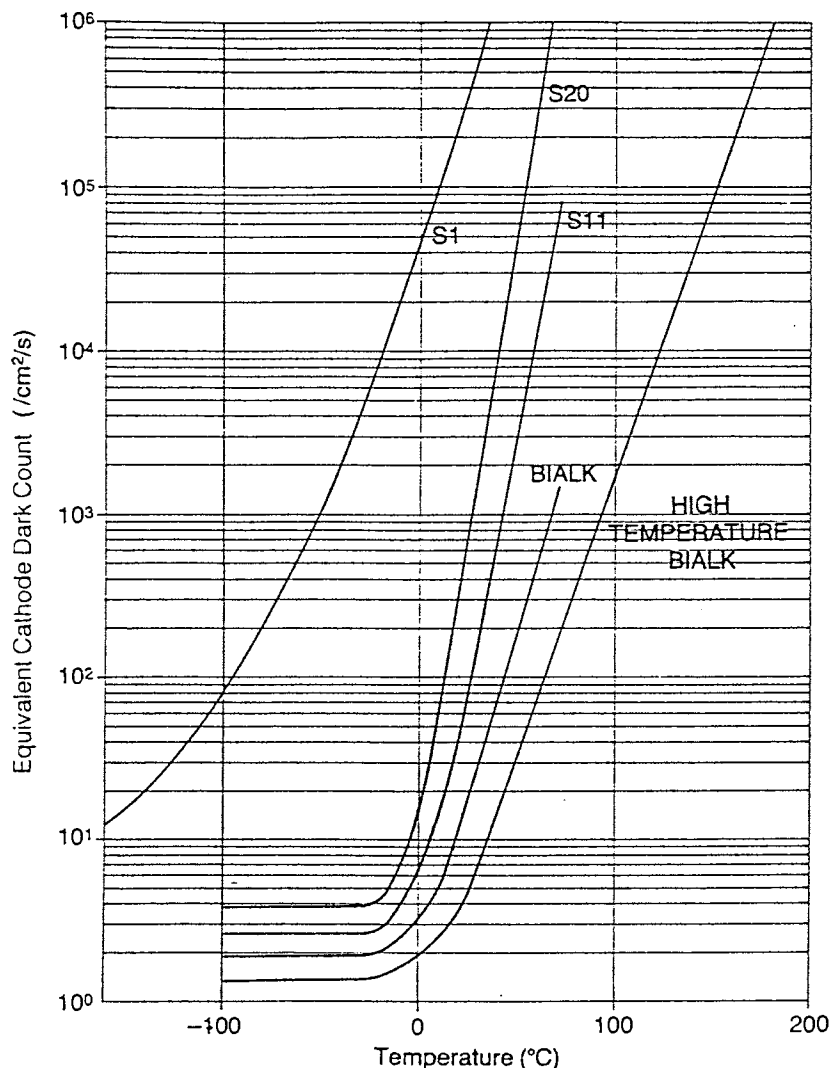


Fig.2.1.5.b: Abhängigkeit des Dunkelstrom von der Temperatur

Für die Verbesserung des Signal-/Rauschverhältnisses, wurde eine Kühlvorrichtung für die Kathode konstruiert. Dabei wird l-N₂ in einen äußeren, die Kathode umgebenden, Mantel geleitet. Das kalte N₂-Gas gelangt anschließend in den Innenraum, wodurch die gesamte Multiplierzöhre gekühlt wird. Mit dieser Anordnung kann bis zu einem Verstärkungsfaktor von 10^{+9} und einer Hochspannung bis 1000 V mit einem ausreichenden Signal-/Rauschverhältnis gearbeitet werden.

2.1.6 Kryostat und Temperaturregelung

Für die temperaturabhängigen Messungen wurde ein UHV-tauglicher l-He Kryostat, der auch bei 'BESSY' zum Einsatz kam, verwendet. Durch einen Unterdruck, erzeugt mit einer He-Förderpumpe, wird flüssiges Helium (l-He) über einen Heber zum Kryostatenkopf gefördert. Der aus einem Kupferblock bestehende Kopf kann bis auf 5.5 K abgekühlt werden. Zur Temperaturmessung befindet sich in der Heberspitze ein AuFe/Chromel-Thermoelement (Meßbereich 2-500K) und auf dem Probenhalter (s. Kap. 2.1.7) ein RhFe-Widerstand (Meßbereich 1.5-500K). Die in der Temperaturregelungseinheit (Oxford: Modell TC4) gespeicherten Spannungs- bzw. Widerstandscharakteristiken müssen durch Eichung an zwei Temperaturpunkten den verwendeten Elementen angepaßt werden. Die Eichung des RhFe-Widerstandes erfolgte bei l-N₂ (77.3K) und bei 373 K (Kontrolle mit konventionellem Thermometer). Zur Proben temperaturregelung steht eine Heizwicklung (Leistung 60 W) im Heberkopf zur Verfügung. Da die Heizung räumlich von der eigentlichen Probe getrennt ist und der Regelkreis eine große Zeitkonstante besitzt, kann die Proben temperatur nicht direkt geregelt werden, sondern nur indirekt über die Regelung der Temperatur am Kryostatenkopf.

zu regelnde Temperatur am Kryostatenkopf (AuFe/Chromel)	sich einstellende Temperatur des Probenhalters	Temperatur des Probenstiftes:
5.1 K	16 K	20 K
22 K	28 K	30 K
32 K	38 K	40 K
44 K	48 K	50 K
68 K	72 K	75 K
91 K	97 K	100 K
142 K	147 K	150 K
191 K	197 K	200 K

Tabelle 2.1.6.0: Übersicht über die zu regelnde Temperatur und die sich dadurch einstellende Proben temperatur.

Die Temperatur des Probenstiftes wurde mit einem NiCrNi-Thermoelement, das auf einen Probenstift montiert wurde, bestimmt.

2.1.7 Probenhalter und Probenheizung

Der Probenhalter wurde so konstruiert, daß die Proben mit der "konventionellen Lichtquelle" (TU-Berlin) und der Meßanordnung "Synchrotronstrahlung" (BESSY) auf dem gleichen Probenstift meßbar sind. Die Probe wird auf den Probenträger, einen vergoldeten Kupferstift, mit einem UHV-Kleber fixiert und kann dann in die verschiedenen Halterungen eingebaut werden.

Der Probenhalter (Fig. 2.1.7.a) besteht aus einem dicken Kupferblock, der fest mit dem Kryostatenkopf verbunden ist. Auf dem Kupferblock sitzt dreipunktgelagert der Probenteller, in dem der Probenstift fixiert wird. Der Kupferblock und der Probenteller sind zur Wärme- und Kälteleitung über drei flexible Kupferleitungen miteinander verbunden. Die Drei-Punkt-lagerung dient zur Vorjustierung der Probe.

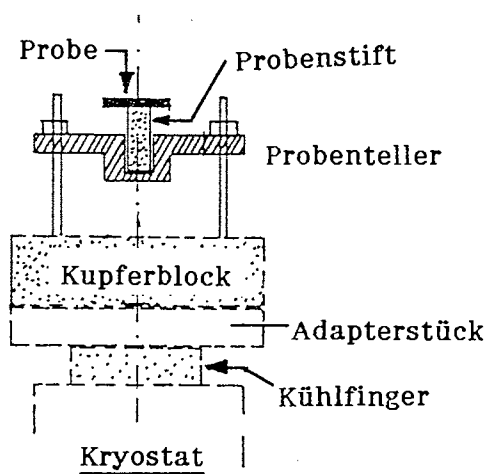


Fig. 2.1.7.a: schematischer Aufbau des Probenträgers.

Zur Probentemperaturmessung ist auf dem Kupferblock ein RhFe-Widerstand befestigt.

Durch eine Halogenlampe (Osram: 100W) mit geöffnetem Glaskörper, die in ca. 5 mm Abstand vor der Probe montiert wurde, kann die Probe lokal stark aufheizen werden. Das Aufheizen der Probe auf 500 K ermöglicht das Entfernen von Adsorbaten auf der Probenoberfläche. Der Glaskörper wurde geöffnet, da das Füllgas aus dem Kolben in das Vakuum diffundierte.

2.1.8 Drehspiegeljustiereinheit

Die Drehspiegeljustiereinheit ist eine weitere Justiermöglichkeit des optischen Strahlengangs. Sie ist dreipunktgelagert an der Grundplatte des Gesamtaufbaus (Fig. 2.1.8.a) befestigt und über einen Wellbalg mit der Kammer flexibel verbunden. Über 3 Feingewindestangen ist eine Höhenverstellung und eine Verkippung des Drehspiegels bezüglich der Kammer möglich. Eine vertikale Verschiebung zum optischen Strahlengang kann über die 2. Platte mit einer Verstellerschraube erreicht werden. Über 2 Stell-schrauben fixiert, kann die 1. Platte parallel zum optischen Strahlengang verschoben werden. Der Wellbalg ist für einen lateralen Versatz von ± 10 mm in der x-y-Ebene ausgelegt. Die Drehspiegeljustiereinheit für die Reflexionsapparatur bei 'BESSY' ist nach dem gleichen Prinzip, jedoch ohne Parallelversatz zur optischen Achse, aufgebaut.

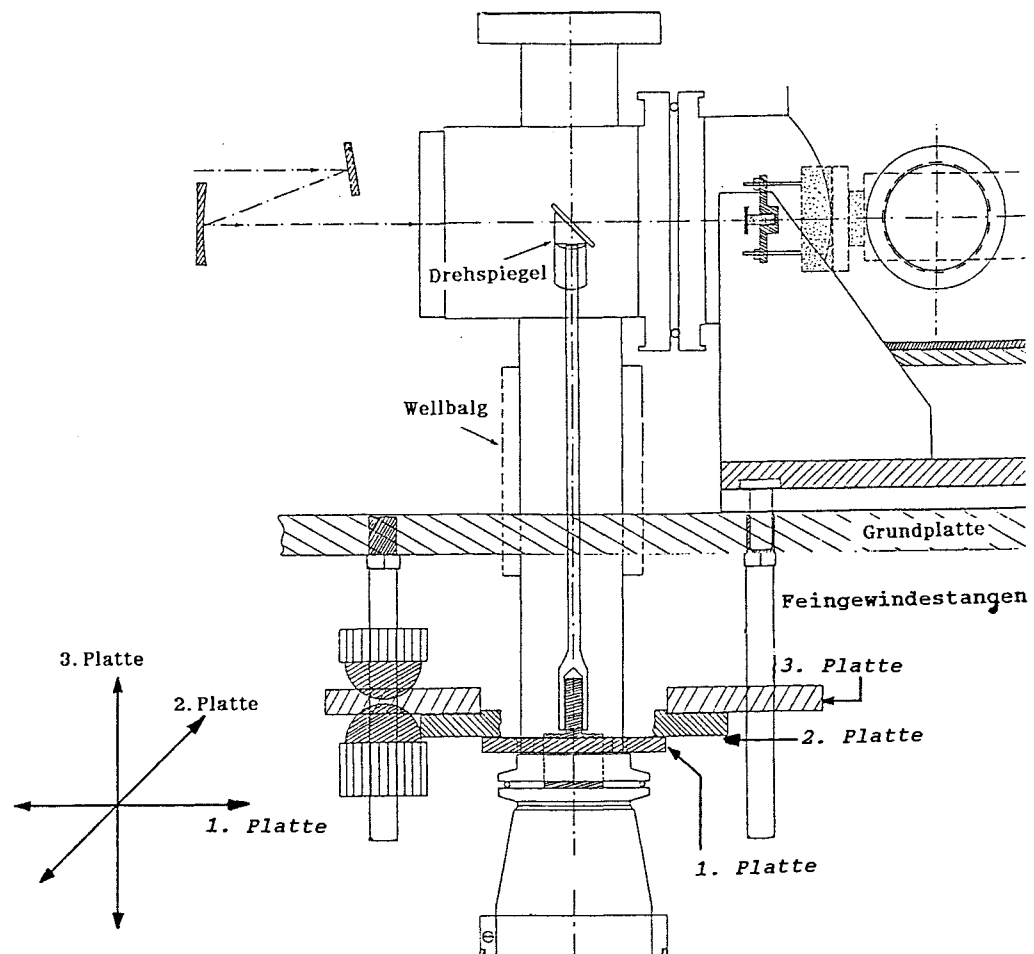


Fig. 2.1.8.a: Schematischer Aufbau der Drehspiegeljustiereinheit

2.2 Elektronischer Aufbau

2.2.1 Monochromatoransteuerung

Die Monochromatoransteuerung erfolgt über einen 5-Phasen-Schrittmotor. Die elektrische Ansteuereinheit sowie die Steuerprogramme für den Meßplatzrechner 'PSI-80' wurden in meiner Studienarbeit /Die85/ beschrieben. In die manuelle Steuerungseinheit wurde noch eine ergänzende Anfahr- und Stoplogik integriert, um abrupte Bewegungen des Schrittmotors zu verhindern. Im Rahmen einer Lehrausbildung wurden die einzelnen Platinen als gedruckte Schaltungen ausgearbeitet. Die einzelnen Erweiterungen und Änderungen sind im Anhang Teil c) zusammengefaßt. Fig. 2.2.1.a zeigt die manuelle Impulssteuerungs- und Impulszähleinheit der Schrittmotoransteuerung.

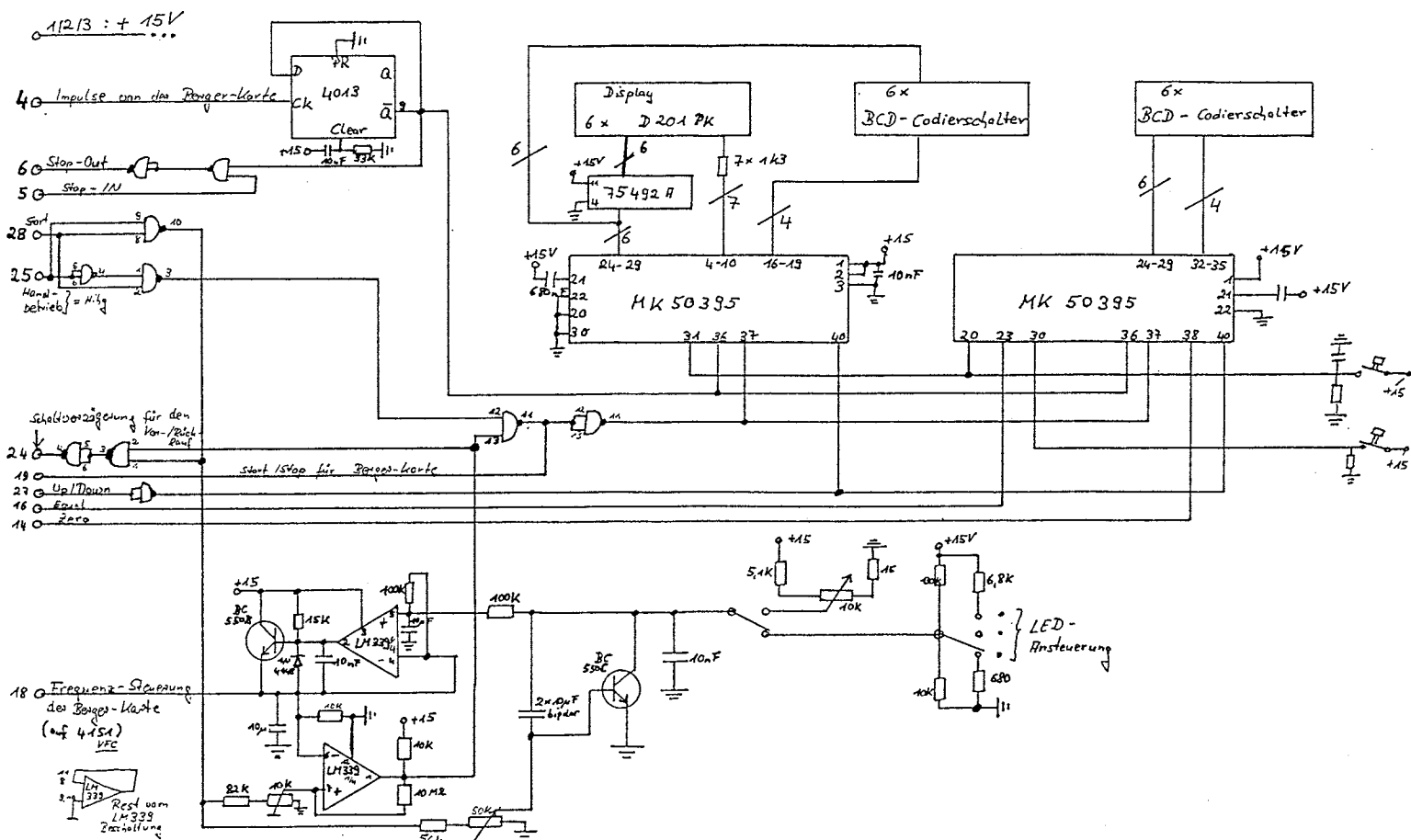


Fig. 2.2.1.a: Impulssteuer- und Zähleinheit in der Schrittmotoransteuerung

Prinzip der Steuerung durch den Rechner:

Zur Ansteuerung über den Rechner werden 2 Parallel-Schnittstellen mit je 8 Datenleitungen verwendet. Alle Leitungen werden am Eingang über

Optokoppler galvanisch entkoppelt. 7 Leitungen werden zur Ansteuerung des 5-Phasen-Schrittmotors verwendet. 2 weitere Leitungen werden auf 24 Volt umgesetzt und dienen zum Öffnen und Schließen des Spaltes. 4 Leitungen werden auf 15 Volt umgesetzt, wobei 2 für die Modulatoransteuerung und 2 Leitungen für die Drehspiegelsteuerung benötigt werden. Durch eine logische Verknüpfung wird bei gleichzeitigem Setzen der beiden Leitungen für die Spaltansteuerung ein akustischer Signalgeber aktiviert.

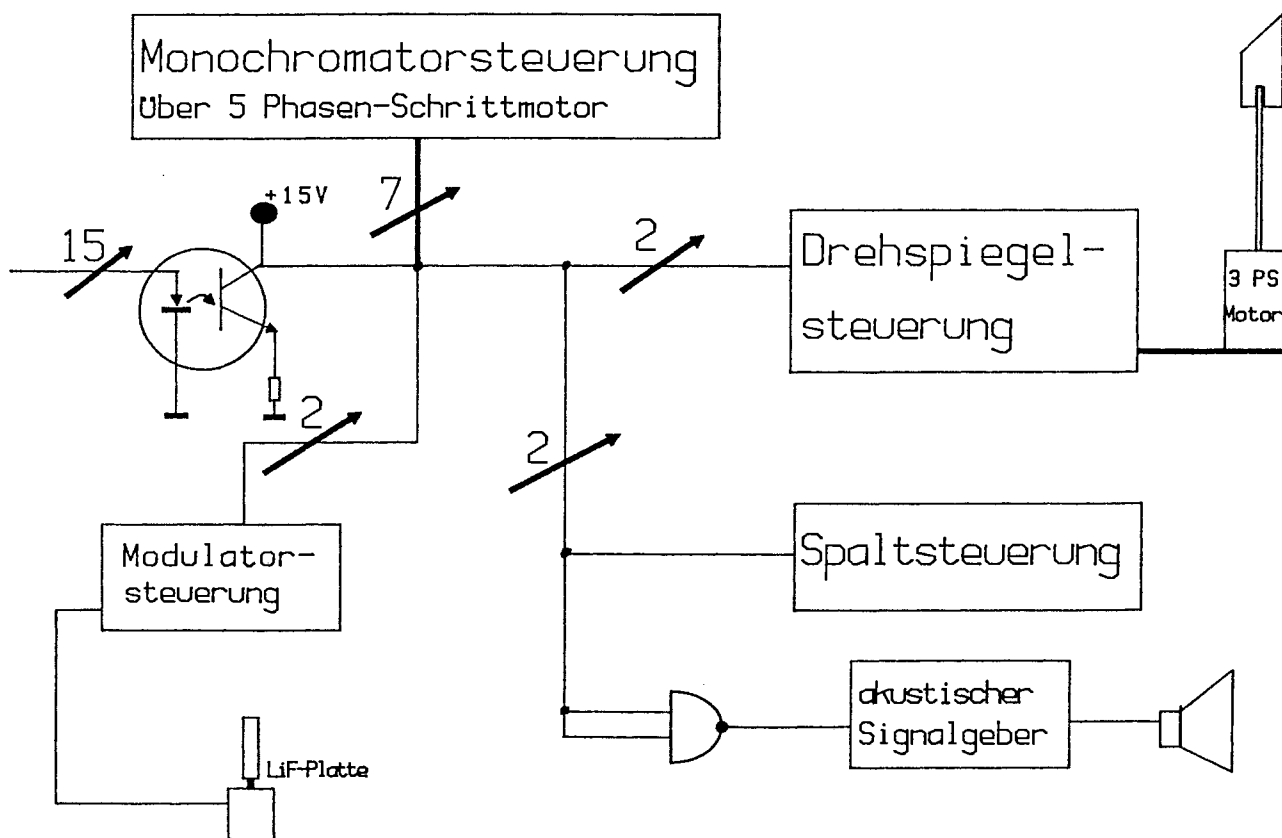


Fig. 2.2.1.b: Blockschaltbild der Steuerkomponenten

Die Steuerungskomponenten sind so konstruiert, daß ein manueller Eingriff auch bei Rechnerbetrieb jederzeit möglich ist.

2.2.2 Drehspiegelansteuerung

Die Drehspiegelsteuereinheit (Fig. 2.2.2.a) für den 3-Phasen-Schrittmotor (Typ: KS 042.3.12; 24V, 1.3A) enthält eine Motorsteuerungskarte (Kinex) und eine Logikkarte, die die notwendigen Steuerimpulse generiert.

Der Schrittmotor benötigt 12 Impulse für eine vollständige Umdrehung. Für je eine halbe Umdrehung existiert eine Resetstellung, in der der Motor fixiert werden kann.

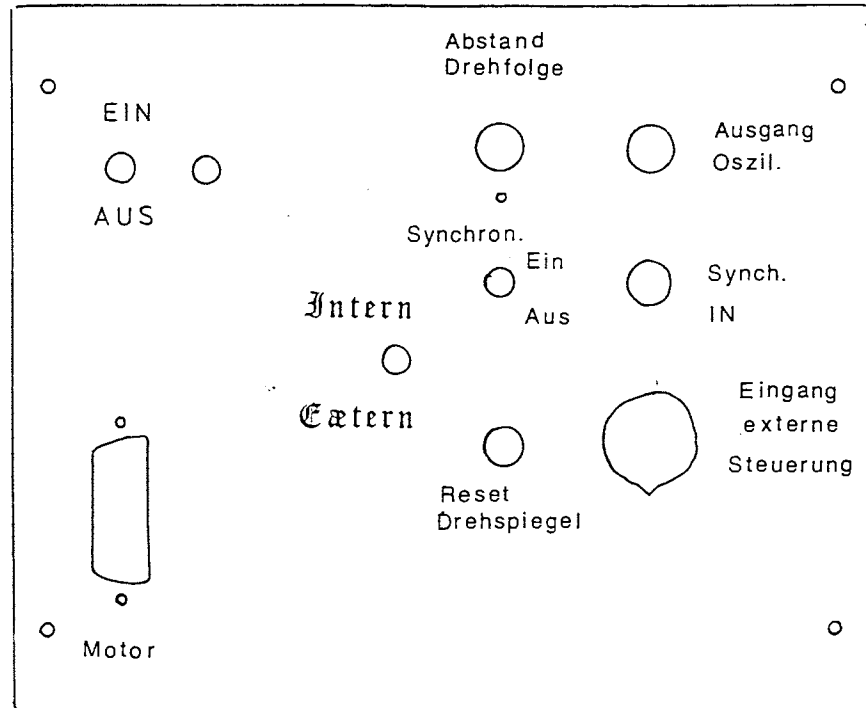


Fig. 2.2.2.a: Frontseite mit den Bedienelementen für die Drehspiegelsteuereinheit.

Die Logikkarte (Fig. 2.2.2.b) erzeugt über 2 astabile Oszillatoren die notwendigen Impulsgruppen für jeweils eine halbe Umdrehung mit anschließendem Resetsignal. Ausgelöst werden kann eine solche Impulsgruppe durch eine externe fallende Flanke (z.B. durch den Rechner), oder auch im manuellen Betrieb durch einen internen monostabilen Oszillator, der Impulse mit kontinuierlich einstellbarer Frequenz generiert. Bei externer Ansteuerung kann explizit eine der beiden Motorstellungen (Null- bzw. Reflexionsstellung) angesprochen werden. Steht der Motor bereits in der Zielstellung, wird der Impuls ignoriert. Für den gegenwärtigen Aufbau ist die Drehdauer für eine volle Motorumdrehung auf 5 Hz eingestellt, die durch die Spezifikation der wellbalggedichteten Drehdurchführung festgelegt ist. Eine Änderung der Drehfrequenz und der Impulsbreiten ist im kleinen Umfang mit den Potentiometern auf der Logikkarte möglich. Im Anhang c) sind die Belegungen der einzelnen Karten und die Bedienung der Frontelemente zusammengefaßt.

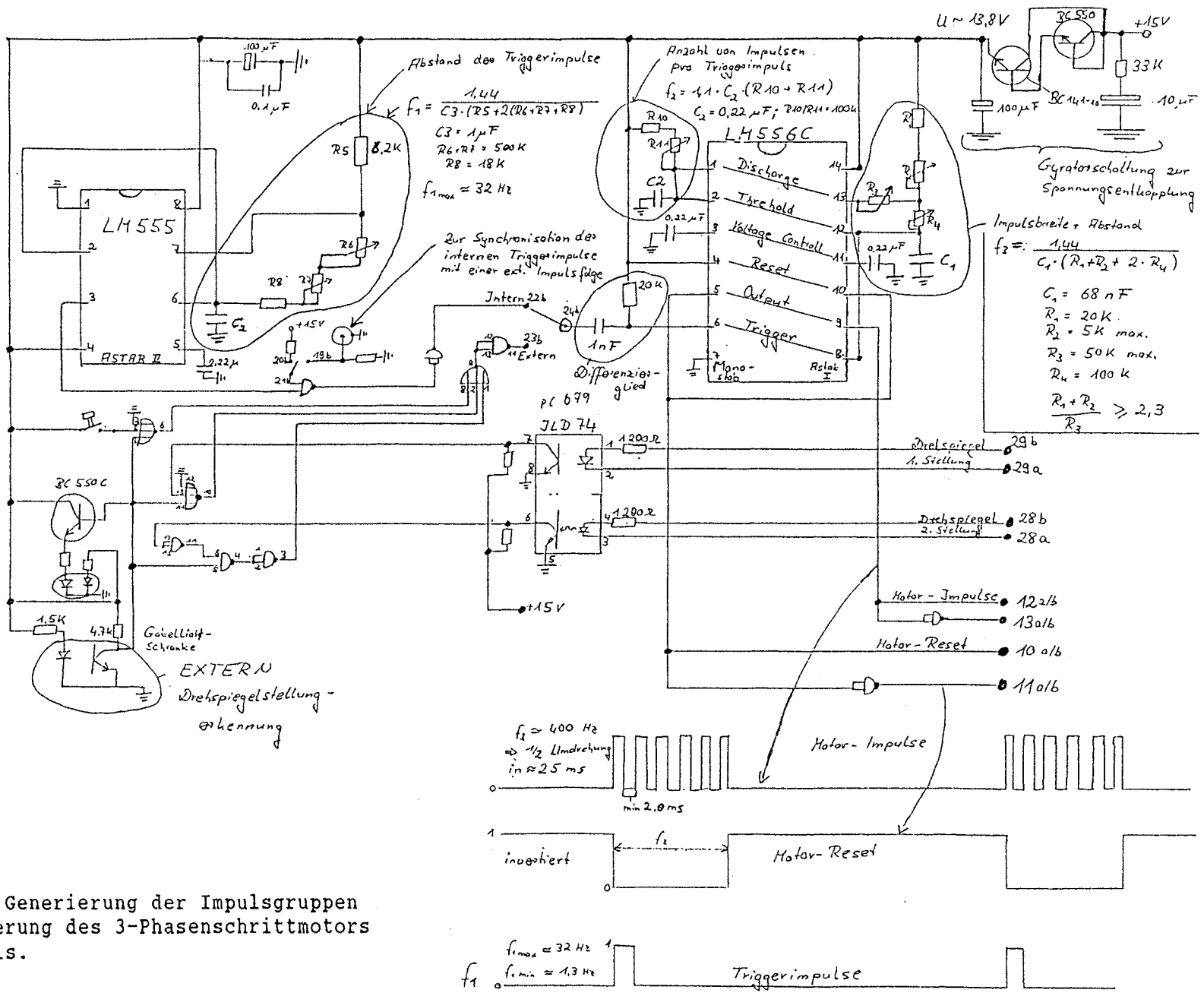


Fig. 2.2.2.b :

Logikkarte zur Generierung der Impulsgruppen für die Ansteuerung des 3-Phasenschrittmotors des Drehspiegels.

2.2.3 Modulator

Für die Tests und Messungen (siehe Anhang a) zur Wellenlängenmodulation wurde eine LiF-Platte senkrecht in den optischen Strahlengang (im Monochromator vor den Austrittsspalt) gebracht. Durch Verkippung der LiF-Platte wird ein Strahlversatz um $\Delta\lambda$ bezüglich λ vor dem Austrittsspalt erreicht. Die Größe des Strahlversatzes kann durch die Amplitude an der Steuereinheit (AE-200) variiert werden. Für die Form der Auslenkung stehen bei interner Steuerung Sinus-, Dreieck- und Rechteckansteuerung zur Verfügung. Der maximale Auslenkungshub ist durch die maximale Spannung von ± 18 Volt vorgegeben.

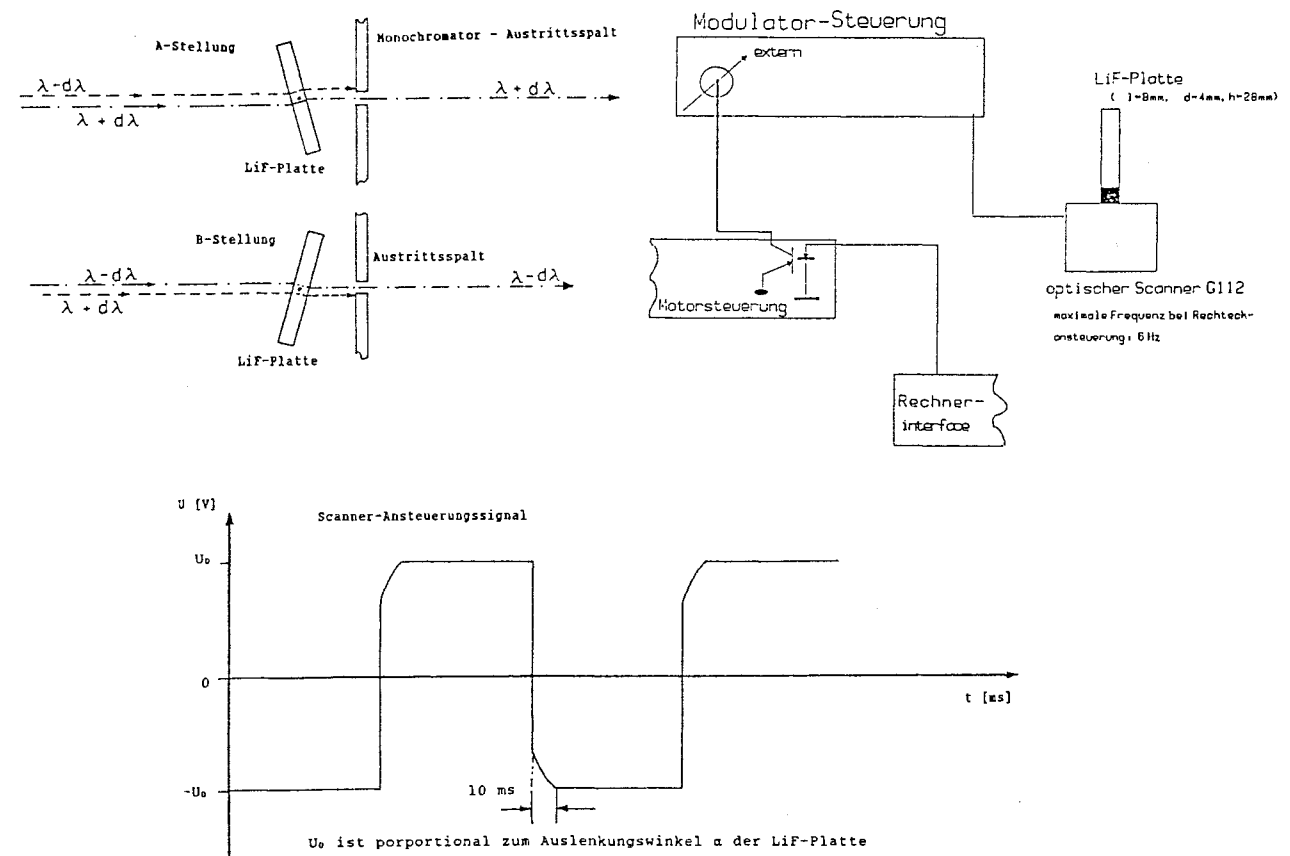


Fig. 2.2.3.a: Modulator (LiF-Platte) mit Steuereinheit für die Wellenlängenmodulation am Monochromatoraustrittsspalt.

Die maximale Modulationsfrequenz liegt bei 6 Hz (Rechteckbetrieb) bzw. 50 Hz (Sinusansteuerung). Die Steuereinheit kennt keine definierte Mittelstellung, sondern nur die beiden Auslenkungen $\lambda_1 < \lambda < \lambda_2$.

2.3 Aufbau für Reflexionsmessungen

2.3.1 Prinzipieller Aufbau

Die Forderung, das Null- und Reflexionssignal über die gleiche Spiegeleinheit auf das Detektionsystem zu lenken, so daß sich alle Gerätefunktionen bei der Division der beiden Signale herausheben, hat einen großen Justieraufwand zur Folge. Die Justierung wurde über 4 voneinander unabhängige Justiereinheiten realisiert:

- a.) Probenvorjustierung über den Probenhalter (s. Kap. 2.1.7),
- b.) Probenkammerjustierung (Konstruktion und Aufbau von
D. Ricken / Ric86 /),
- c.) Drehspiegeljustierung (s. Kap. 2.1.8) und
- d.) Strahljustierung (s. Kap. 2.1.4) .

Die unten beschriebene Reihenfolge erlaubt - trotz des kleinen Verstellbereiches der einzelnen Komponenten - eine schnelle und einfache Justierung:

- Zuerst wird die Probe im Probenhalter auf einer optischen Bank mittels eines Lasers vorjustiert:

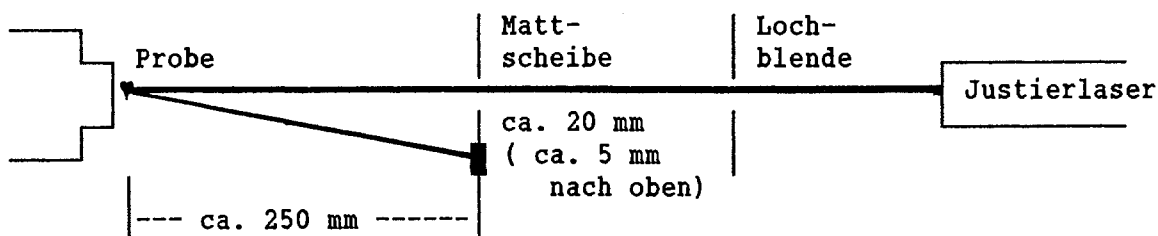


Fig. 2.3.1.a: Vorjustierung der Probe.

- Anschließend erfolgt der Einbau in die Probenkammer.
- Der Drehspiegel wird nun in die Reflexionsstellung (Fig.2.3.1.b) gebracht und mittels der Abbildungsjustierung der Lichtstrahl auf die Probe positioniert.
- In der Nullstellung kann dann mit der Drehspiegeljustierung der Lichtstrahl auf das Austrittsfenster justiert werden.

- Danach wird in der Reflexionsstellung mit der Probenkammerjustierung der reflektierte Lichtstrahl zurück über den Drehspiegel in Richtung auf das Austrittsfenster gelenkt.

Dabei ist darauf zu achten, daß der reflektierte und direkt einfallende Lichtstrahl die gleiche Stelle am Austrittsfenster ausleuchtet, damit sich bei einer Division der beiden gemessenen Intensitäten alle Gerätefunktionen herausheben.

Drehspiegelstellungen

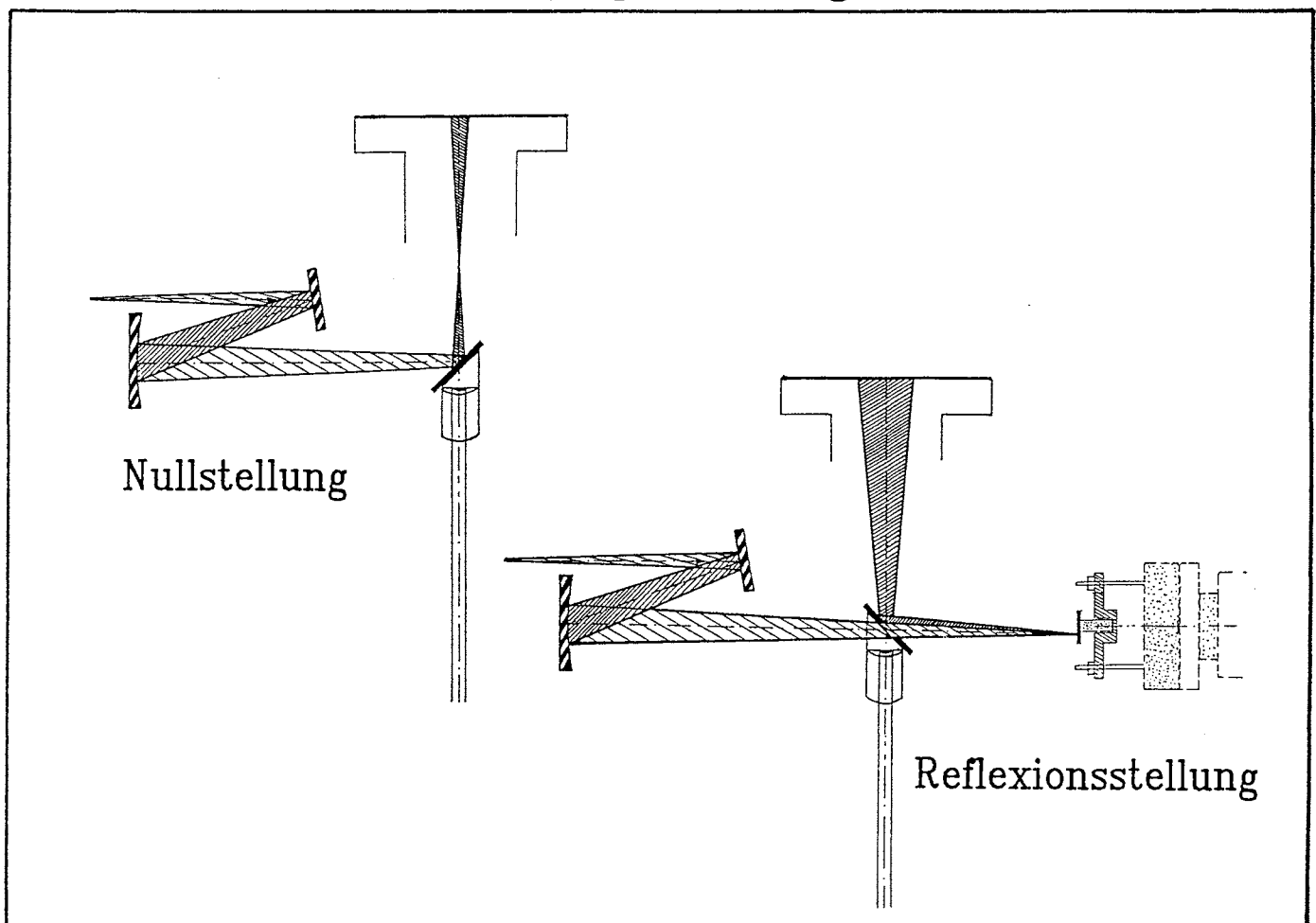


Fig. 2.3.1.b: Null- und Reflexionsstellung

Der Gesamtaufbau (Fig. 2.3.1.c) und der schematische optische Strahlengang (Fig. 2.3.1.d) sind auf den nächsten Seiten dargestellt.

Experimenteller Aufbau (konventionelle Lichtquelle)

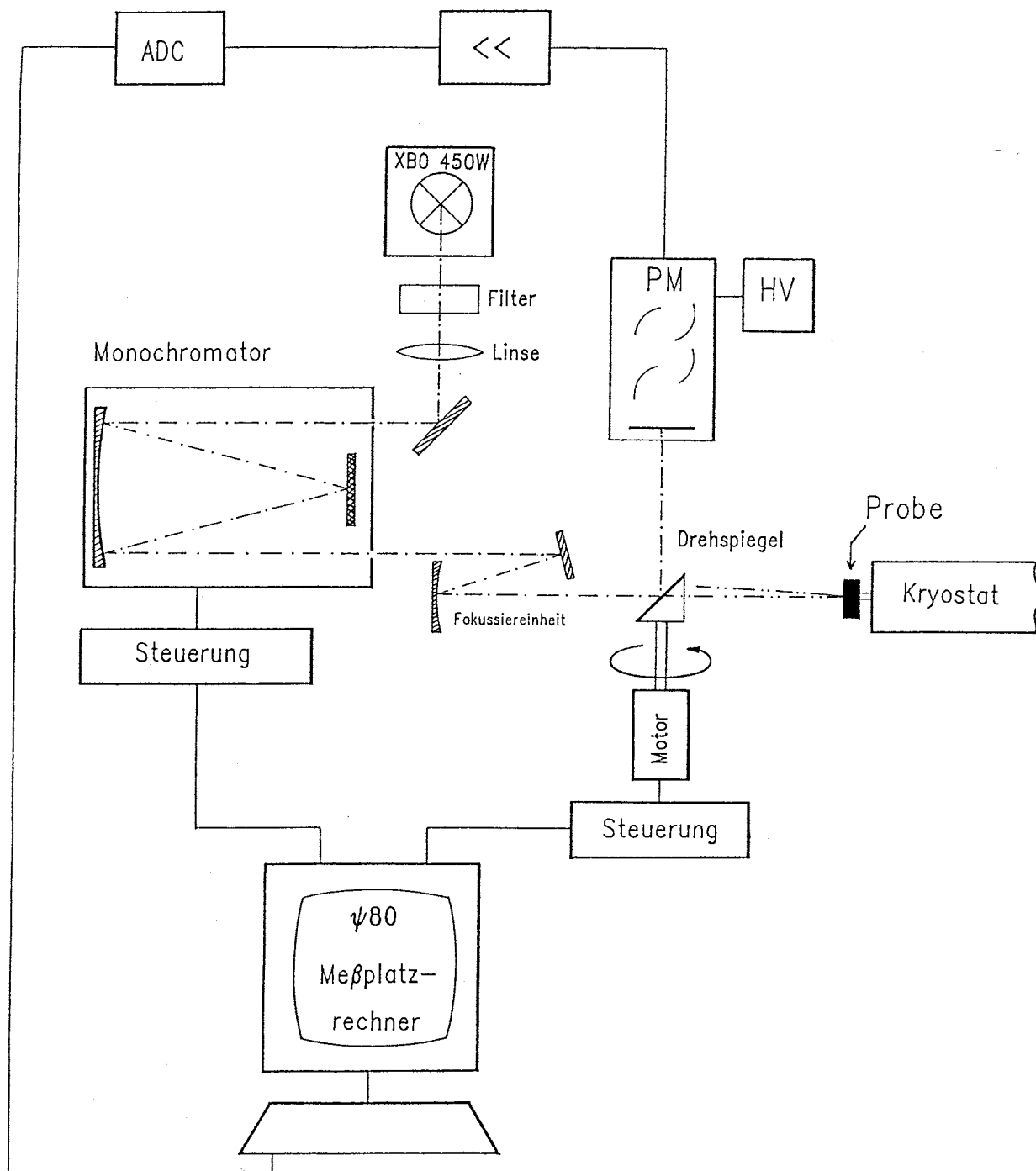


Fig. 2.3.1.c: Schematische Darstellung des Gesamtaufbaus für Reflexionsmessungen.

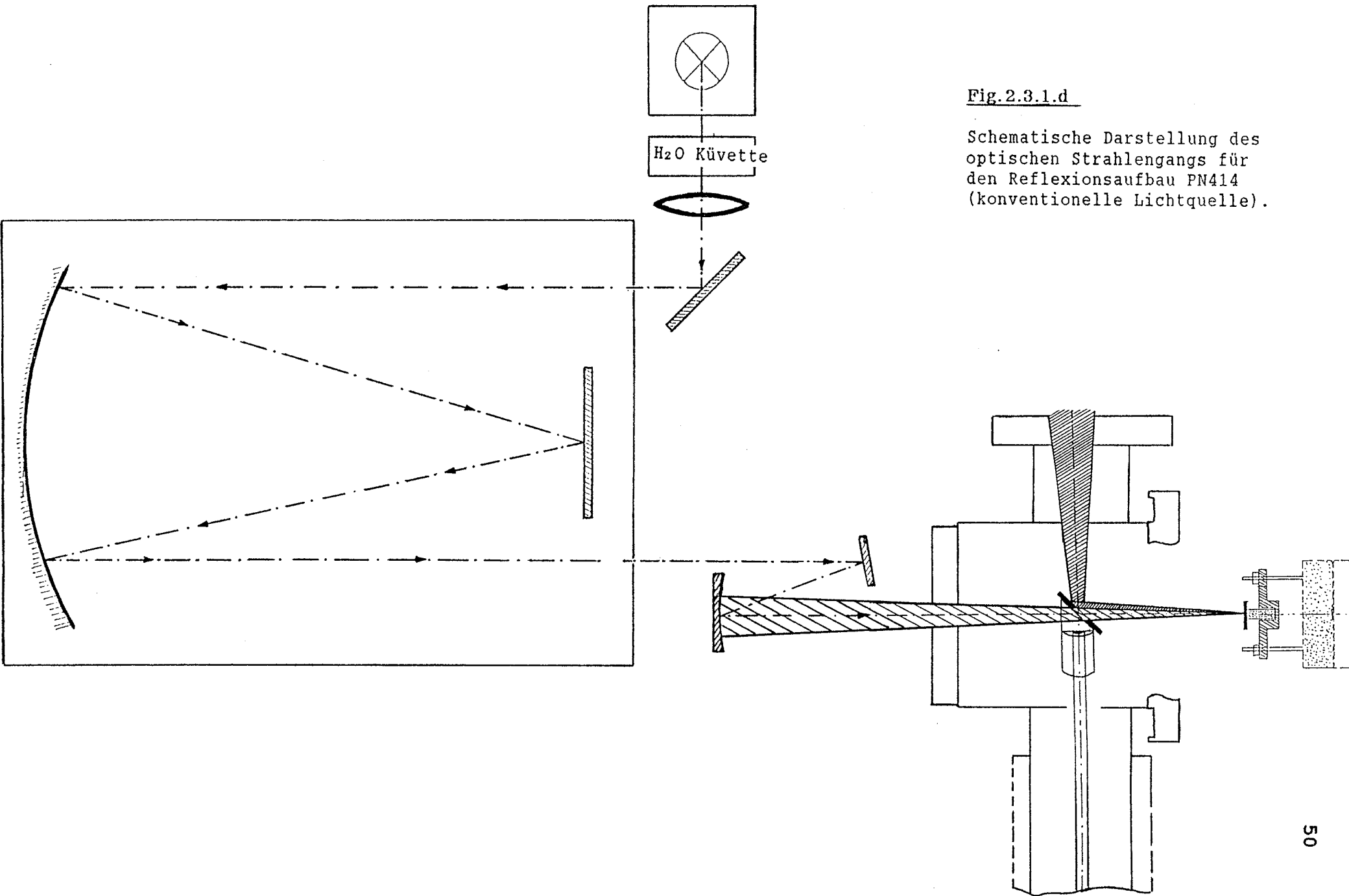


Fig. 2.3.1.d

Schematische Darstellung des optischen Strahlengangs für den Reflexionsaufbau PN414 (konventionelle Lichtquelle).

2.3.2 Meßwerterfassung

Die Steuerung der einzelnen Komponenten (Fig.2.3.2.b) und die Meßdatenaufnahme erfolgt mit dem Kleinrechner PSI-80 der Firma Kontron. Der 'PSI-80' ist ein 8-bit Rechner auf der Basis eines Z80-Mikroprozessors mit folgender Ausstattung:

- 2 serielle Schnittstellen (für Plotter und Datenübertragung),
- 2 parallele Schnittstellen (1 * für Gerätesteuerung; 1 * frei),
- 1 A/D-Karte: Analog/Digital-Wandler mit einer Auflösung von 12 Bit für 0-10Volt. (Auflösungsgrenze: bei 2.4 mV).

Das Meßwerterfassungsprogramm wurde mit Ausnahme der Schrittmotorsteuerung und der Meßwertaufnahme - die aus Zeitoptimierungsgründen in Assemblersprache verfaßt wurden - in FORTRAN geschrieben. Die Beschreibung der einzelnen Routinen, die Bedienung, sowie die Programmstruktur sind im Anhang Teil b) zusammengefaßt.

Der Programmaufbau wurde so gestaltet, daß die eigentliche Steuerung der Geräte für einen **Meßzyklus**, sowie die Meßwertaufnahme in eine Routine zusammengefaßt wurde. Fig 2.3.2.a stellt den **Meßzyklus** dar, wie er für die Reflexionsmessung benutzt wurde.

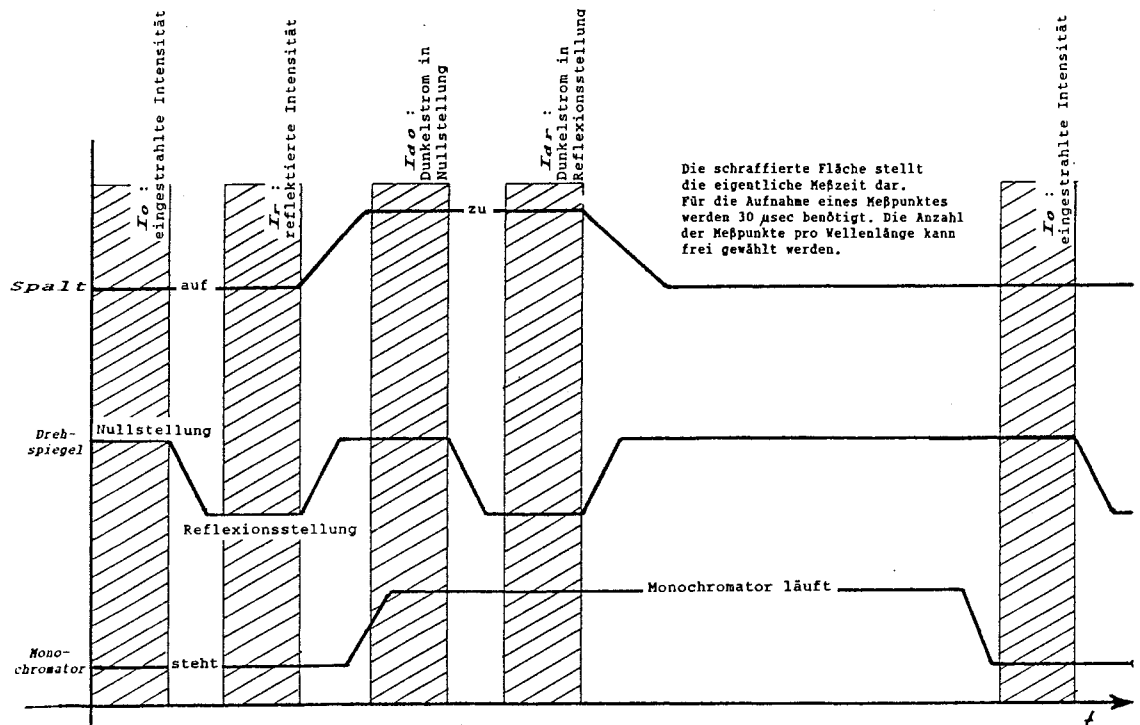


Fig.2.3.2.a: Meßzyklus für Reflexionsmessung mit Dunkelstromabgleich.

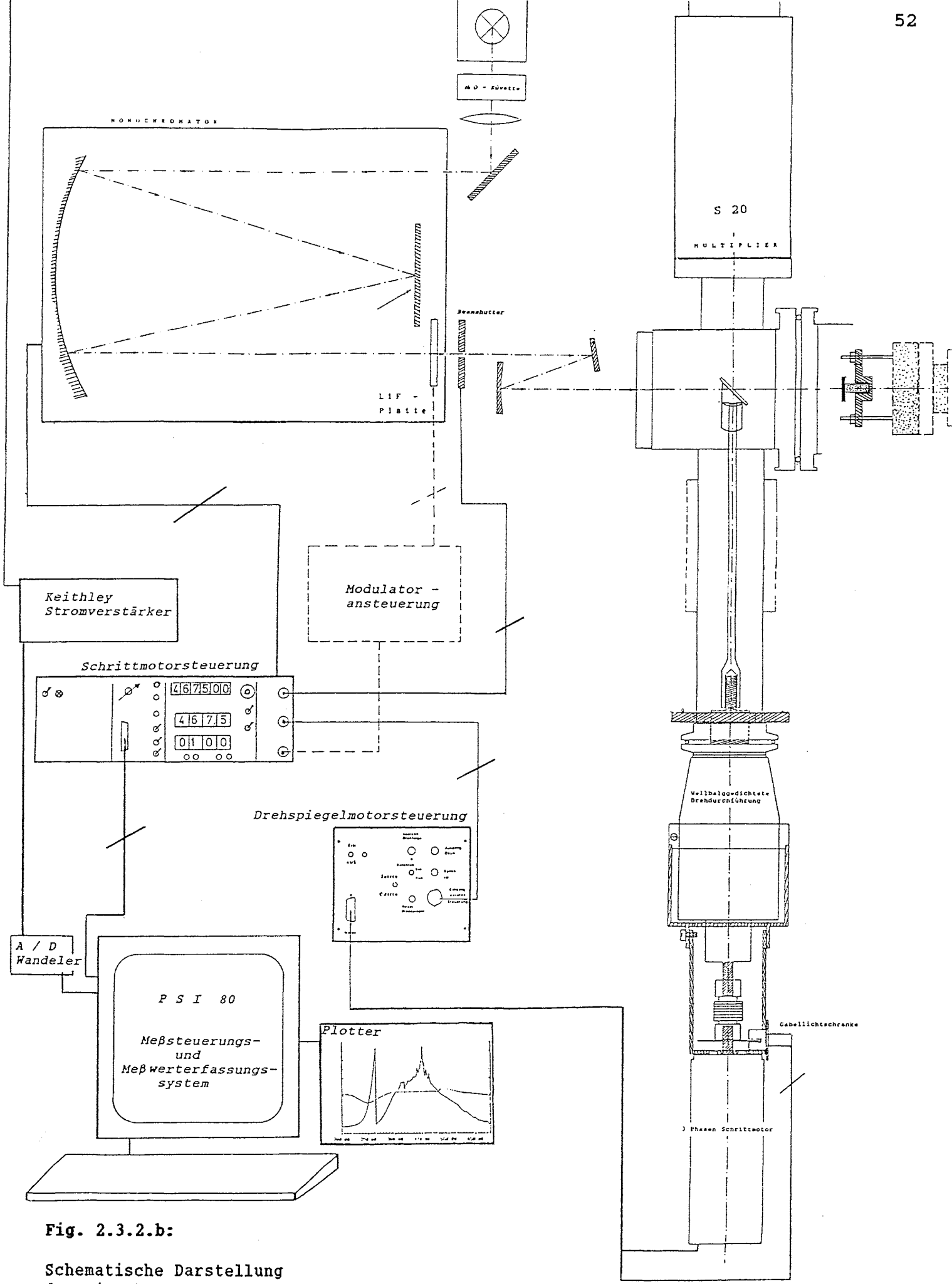


Fig. 2.3.2.b:

Schematische Darstellung der einzelnen Ansteuerungskomponenten.

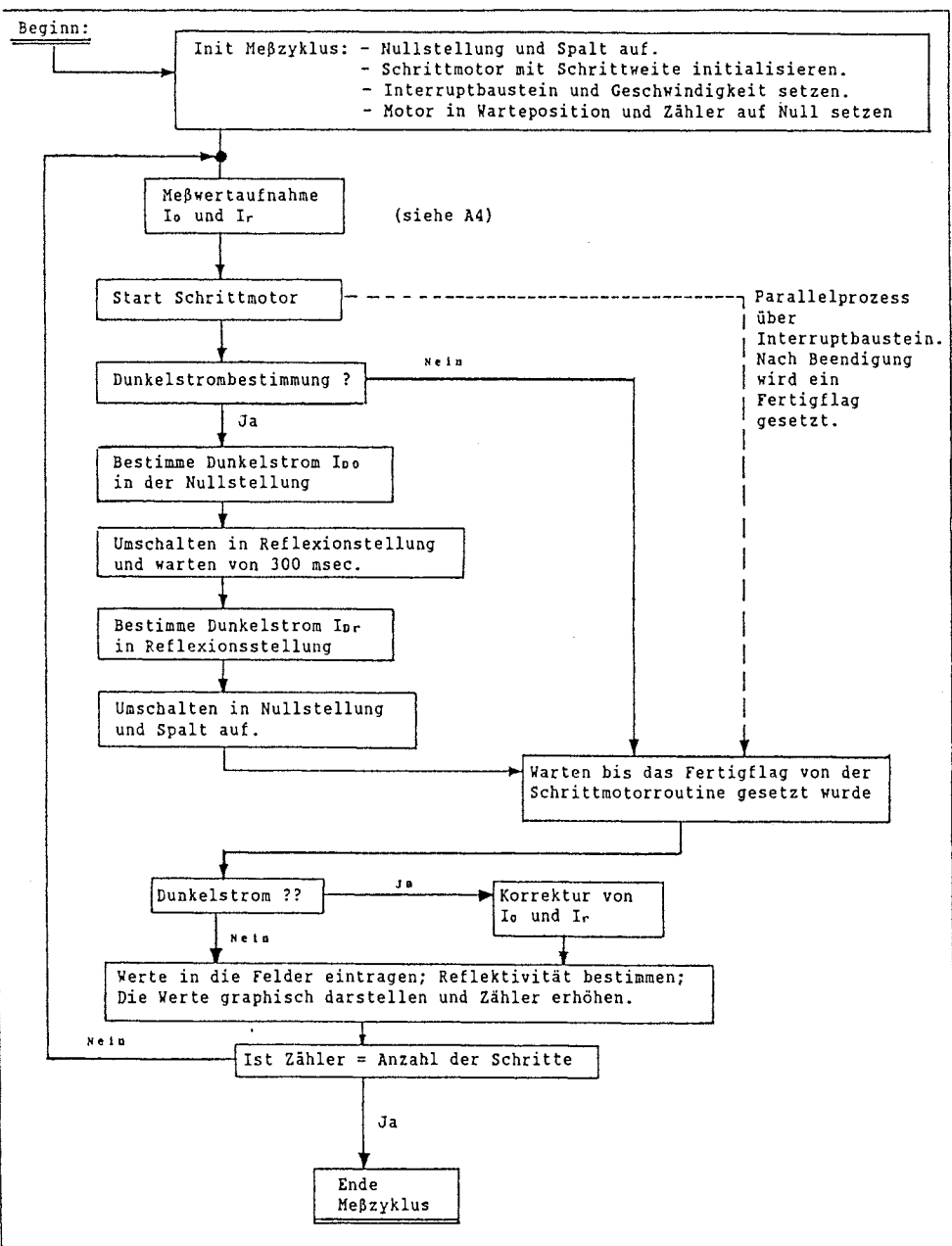
Eine Veränderung des Meßablaufs und/oder der Einbau/Ausbau von zusätzlichen Komponenten (z.B. Wellenlängenmodulation) beschränkt sich daher auf die Änderung dieser Meßsteuerungs- und Meßwerterfassungs-routine (Fig. 2.3.2.c). Nach Beendigung des Meßzyklus können die Daten mit einem Kommentar (2 Zeilen zu 60 Zeichen) versehen unter einem frei wählbaren Namen (maximal 8 Zeichen) abgespeichert und anschließend auf einem Plotter ausgedruckt werden.

Format der Abspeicherung:

1. Zeile: Startwert [F10.3] / Schrittweite [F10.3] / Anzahl der Werte [F8.2]
2. - 3. Zeile: Kommentar [60A1]
4. - N. Zeile: 5 Spalten [F8.2, ' ,4*F8.2]
 1. Spalte = Wellenlänge in [nm]
 2. Spalte = Intensität in Reflexionsstellung I_r
 3. Spalte = Dunkelstrom I_{Dr}
oder Intensität in Reflexionsstellung I_r
 4. Spalte = Intensität in Nullstellung I_o
 5. Spalte = Dunkelstrom I_{Do}
oder Intensität in Nullstellung I_o

Zur weiteren Auswertung der Spektren werden die Daten vom Meßplatzrechner 'PSI-80' auf eine 'VAX780' bei 'BESSY' übertragen, wo sie mit den dort aufgenommenen Spektren zu einem Gesamtspektrum zusammengebunden und ausgewertet werden.

A3 -- Meßzyklus



A4 -- Meßwertaufnahme I0 und I_r

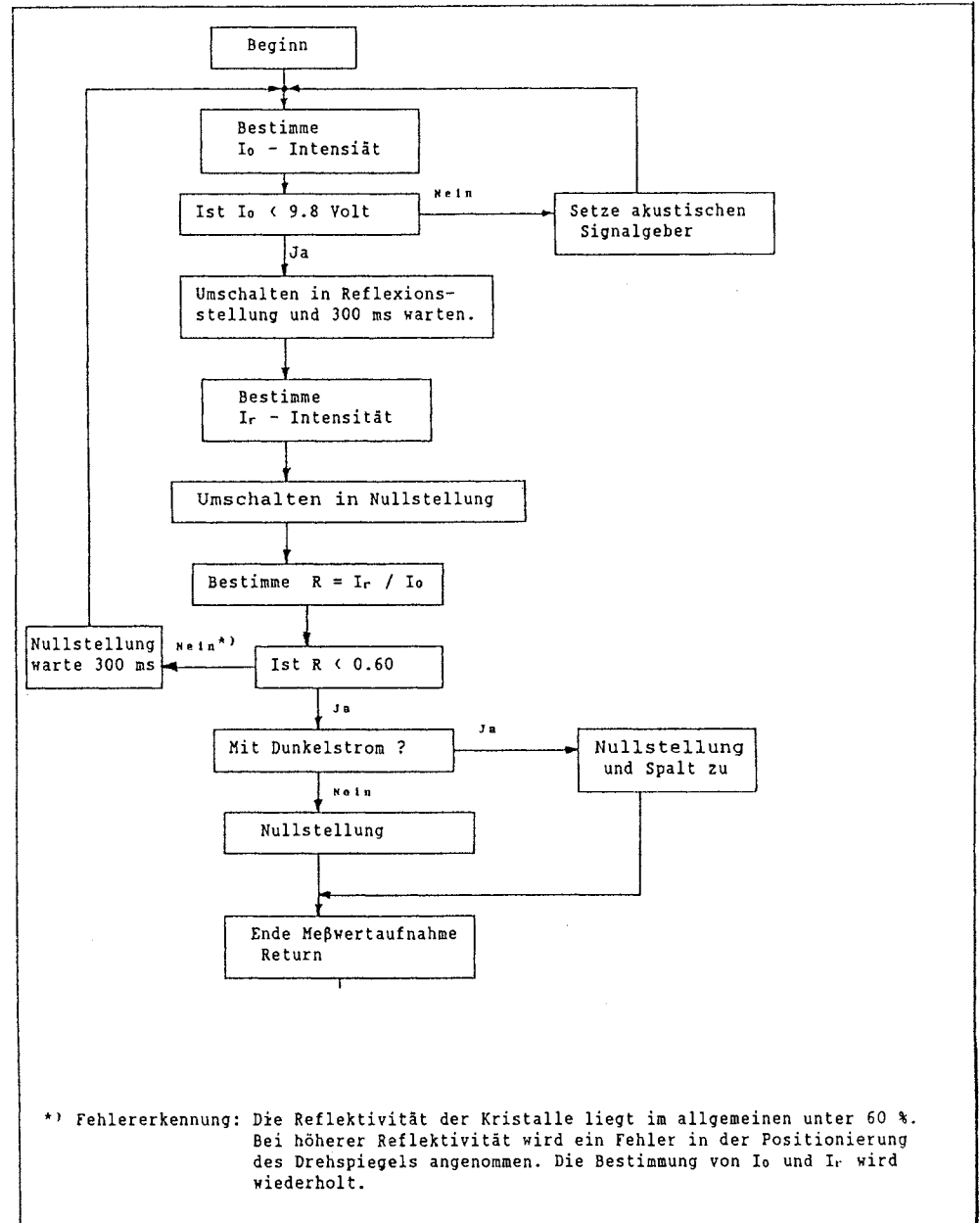


Fig. 2.3.2.c: Darstellung des Meßzykluses und der Meßwertaufnahme

III. Experimenteller Aufbau 'BESSY'

3.1 Synchrotronstrahlung als Lichtquelle

Der höherenergetische Teil der Messungen (4 bis 25 eV) wurde am Elektronenspeicherring 'BESSY' durchgeführt. Die Synchrotronstrahlung wird durch Elektronen, die sich mit relativistischer Geschwindigkeit auf einer Kreisbahn bewegen, erzeugt. Zur Erzeugung dieser hochenergetischen Elektronen verwendet 'BESSY' ein dreistufiges Beschleunigersystem. In einem Linearbeschleuniger werden die Elektronen vorbeschleunigt. Die zweite und dritte Stufe sind Kreisbeschleuniger, in denen ein Hochfrequenzresonator (3 GHz bzw. 500GHz) mehrfach durchlaufen wird. Bei einer Endenergie von 700 bis 800 MeV werden die beschleunigten Elektronen über einen Transferkanal in den Speicherring injiziert. Durch Ablenkmagnete werden die Elektronen auf einer Kreisbahn gehalten. Im Normalbetrieb erzeugen die Elektronen im Ring einen Ringstrom von 100 bis ca. 300 mA. Der Abfall des Ringstroms ist u. a. bestimmt durch Geschwindigkeit und die mittlere freie Weglänge der umlaufenden Elektronen. Das Strahlungsspektrum (Fig. 3.1.a), das durch die im Magnetfeld abgelenkten Elektronen erzeugt wird, reicht vom Infraroten bis zum Röntgenbereich. Die Synchrotronstrahlung ist linear polarisiert mit dem elektrischen Feldvektor parallel zur Kreisbahnebene der Elektronen.

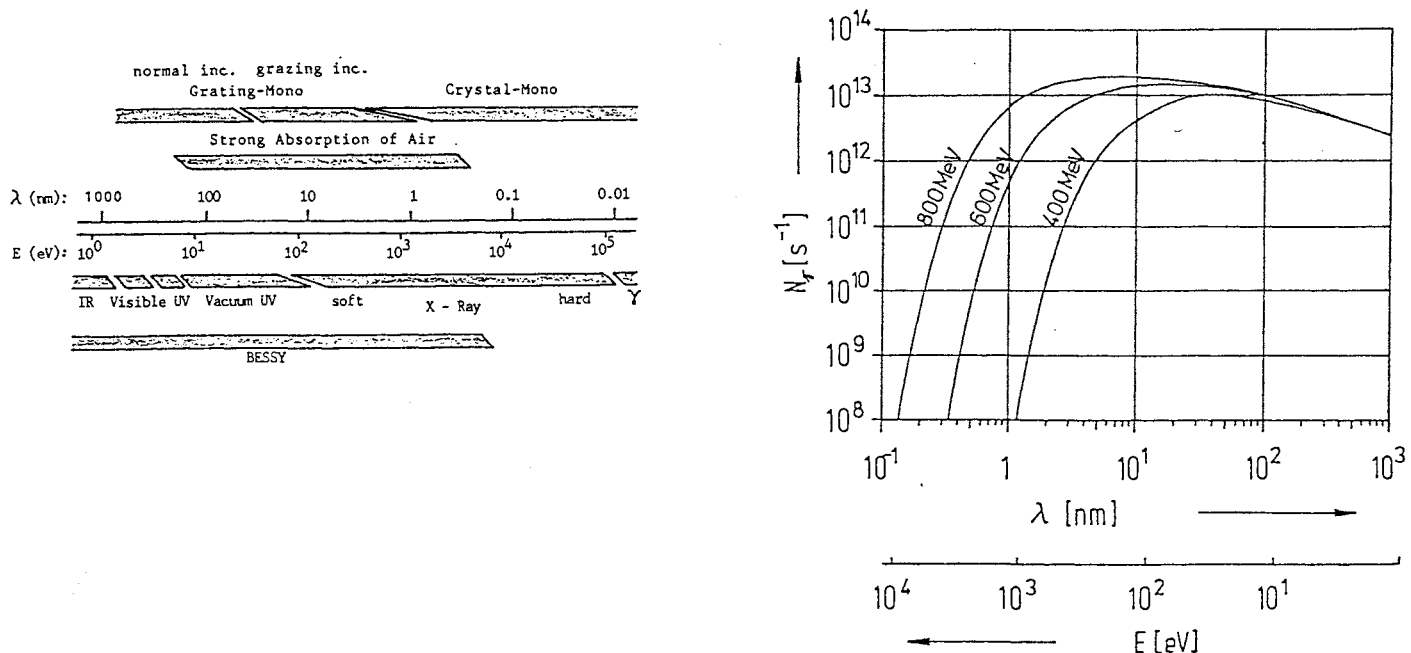


Fig. 3.1.a.: rechts: Spektrale Photonenflüsse N_γ durch beschleunigte e^- im Abstand von 7.5 mm vom Quellpunkt bei einem Ringstrom von 200 mA. (Blende 40 * 40 mm) /BES79/.

links: Spektraler Bereich der Synchrotronstrahlung / Luftabsorption / Monochromatoren /Fla86/.

3.2 Monochromator 3 m-NIM-1

Zur Energieselektion im Wellenlängenbereich von 320 bis 50 nm steht ein hochauflösender Monochromator 3 m-NIM-1 (Fig. 3.2.a) zur Verfügung. Die Einschränkung des verfügbaren Energiebereiches liegt an der verschwindend kleinen Reflektivität (bei senkrechtem Einfall) der verwendeten Vor- und Nachspiegel im hochenergetischen Bereich. Eine ausführliche Beschreibung des Auflösungsvermögens und der Konstruktion ist im BESSY-Jahresbericht 1983 /Bes83/ zusammengefaßt. Der Monochromator verfügt über 2 Gitter, die mittels eines Drehmechanismus im Vakuum auswechselbar sind. Die beiden Gitter unterscheiden sich in ihrer Intensitätsverteilung.

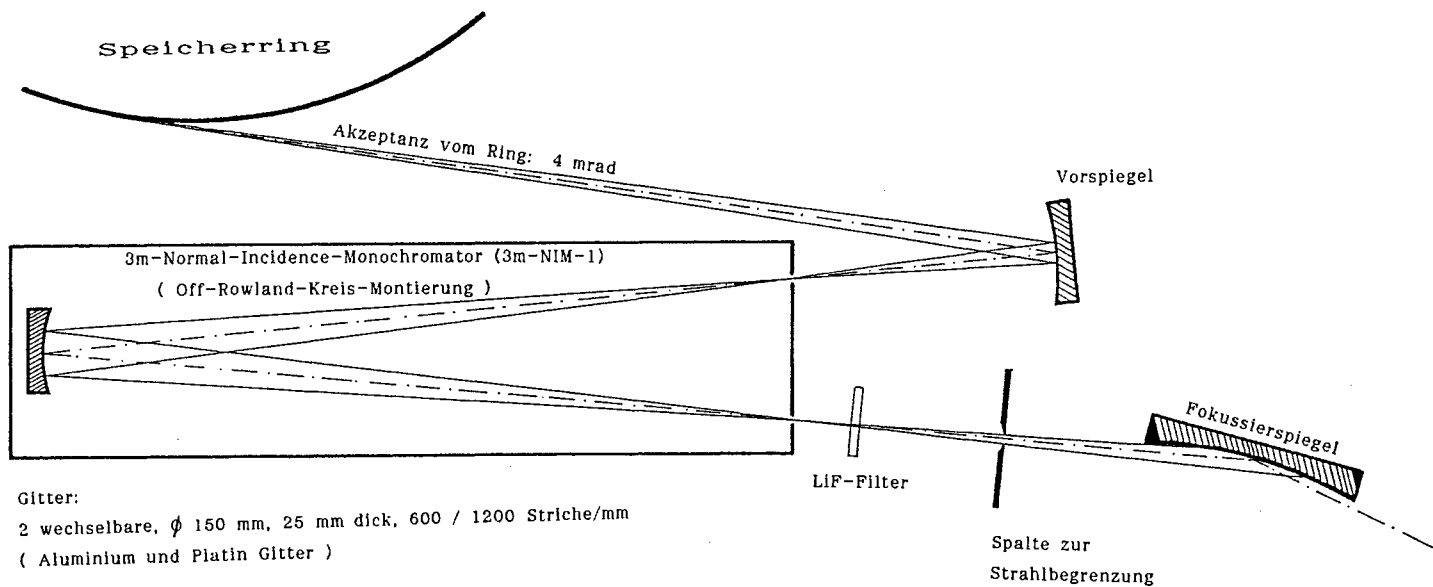


Fig. 3.2.a. Schematische Darstellung des 3 m-Normal-Incidence-Monochromators mit Vor- und Nachfokussierspiegel.

Platin-Gitter:

Mit dem Platin-Gitter steht im gesamten verwendeten Energiebereich (3 - 25 eV) eine ausreichend große Strahlungsintensität zur Verfügung (Fig. 3.2.b). Die Intensität hat bei ca. 63 nm (19eV) ihr Maximum und fällt danach bis 50 nm sehr schnell ab.

Höhere Beugungsordnungen machen sich im gesamten Energiebereich bemerkbar. Im niederenergetischen Bereich können durch konventionelle optische Filter bis 110 nm (LiF) höhere Ordnungen unterdrückt werden. Für den höherenergetischen Bereich standen keine Filter (z. B. dünne Metallfolien) zur Verfügung, so daß der Einfluß der zweiten Ordnung im Bereich von 110 bis 100 nm nicht beurteilt werden kann.

(siehe hierzu Kap. 4.2.).

Strahlungscharakteristik am 3 m-NIM-1

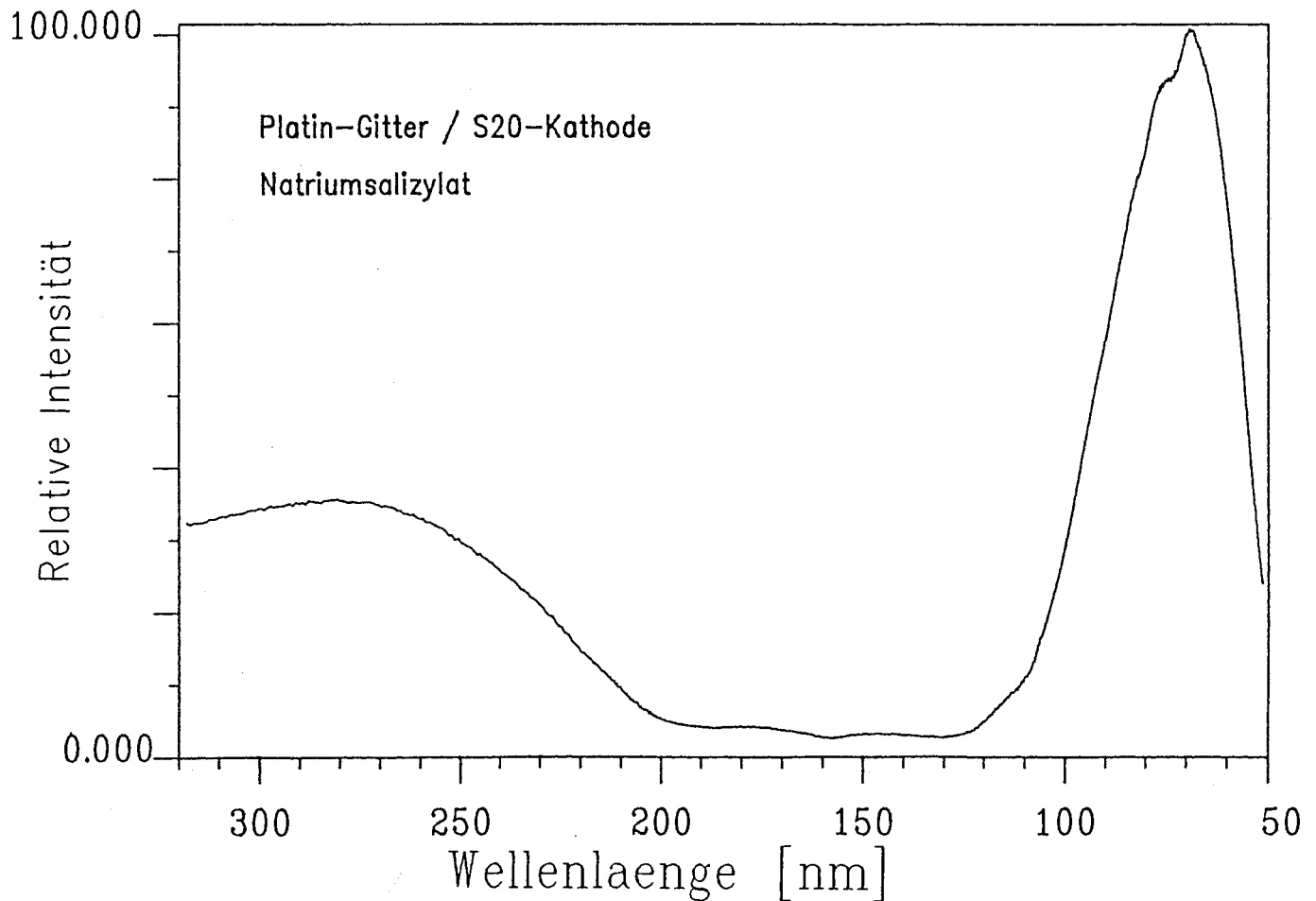


Fig. 3.2.b: Strahlungscharakteristik (320 bis 50 nm) bei dem verwendeten Platin-Gitter am 3 m-NIM-1. Die Strahlungscharakteristik enthält noch die Faltungsfunktionen für das Suprasil- (320 bis 200 nm) und LiF-Filter (200 bis 110 nm).

Aluminium-Gitter:

Im Gegensatz zum Platin-Gitter steht bei dem Aluminium-Gitter ab 110 nm keine ausreichende Intensität mehr zur Verfügung, so daß die Reflexionsmessungen zwischen 120 bis 50 nm mit einem großen Fehler behaftet sind. Im Bereich von 320 bis 120 nm besitzt das Aluminium-Gitter gegenüber dem Pt-Gitter eine höhere Strahlungsintensität (Fig. 3.2.b). Diese ist zudem ohne optische Filter im Bereich von 220 bis 100 nm detektierbar, da keine Effekte durch 2. Ordnung auftreten.

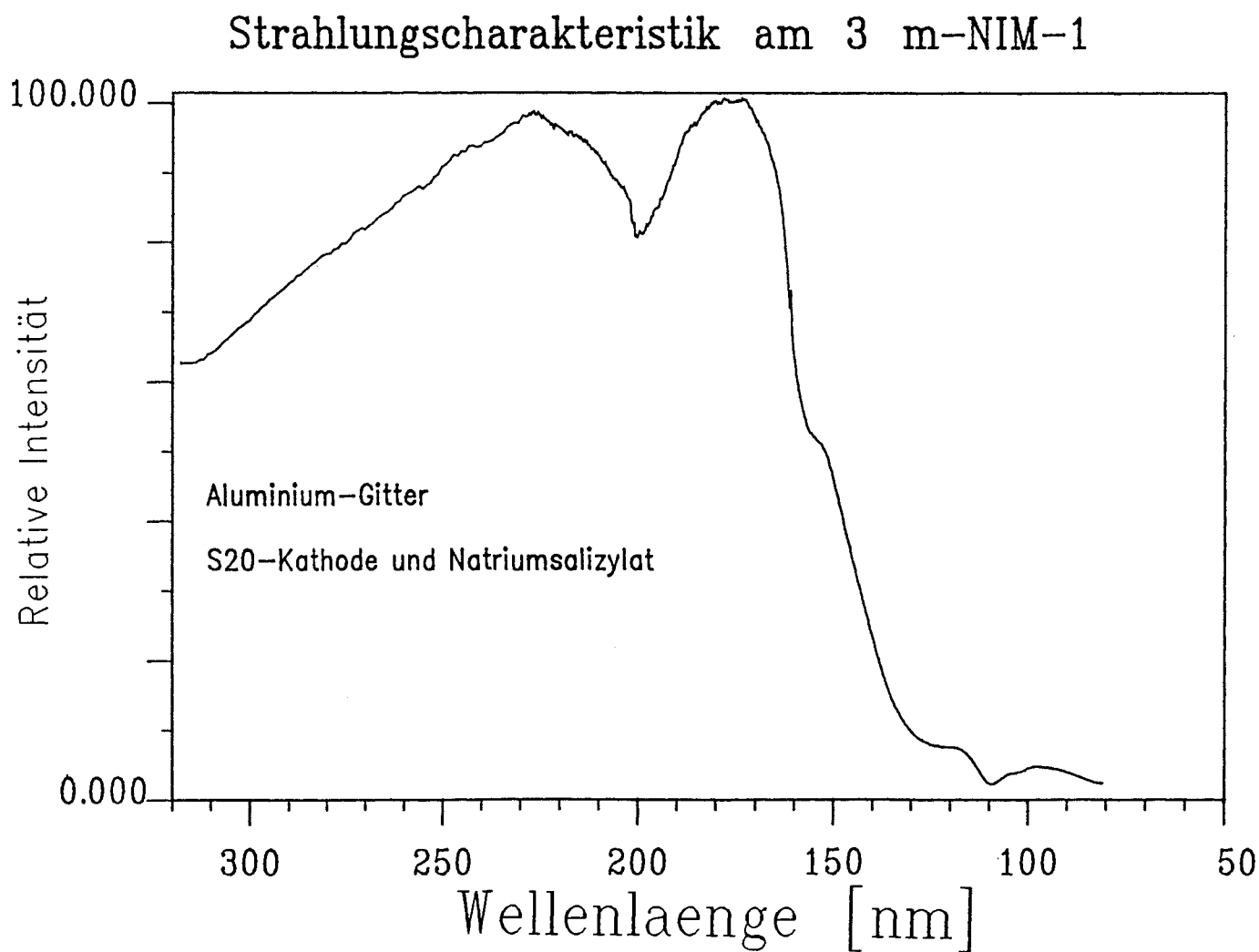


Fig. 3.2.c: Strahlungscharakteristik (320 bis 80 nm) bei dem verwendeten Aluminium-Gitter am 3 m-NIM-1. Gefaltet mit der Suprasil - WG360-Filter - Charakteristik im Bereich von 320 bis 180 nm.

3.3 Detektionssystem

Die Strahlungsdetektion erfolgt wie beim konventionellen Aufbau (PN 414) mit einer S20-Kathode. Da die Empfindlichkeit der S20-Kathode (Kap. 2.1.5) im hochenergetischen Bereich stark abnimmt und zudem durch das Suprasilfenster auf 160 nm beschränkt ist, wird die Intensität nur indirekt über die Lumineszenz einer Natriumsalizylatschicht ($\text{NaSa C}_6\text{H}_4\text{COONa}$) nachgewiesen. Das Lumineszenzmaximum liegt bei 420 nm, wo sich auch die größte Empfindlichkeit der S20-Kathode befindet. Durch die nahezu konstante Quanteneffizienz im Bereich von 340 bis 40 nm von ca. 65% (/Sam67/, /Fla86/) steht mit dem Natriumsalizylat für den gesamten Meßbereich ein empfindliches VUV-Detektionssystem zur Verfügung. In der Meßanordnung am 3 m-NIM-1 (Fig. 3.3.a) wurde eine dicke Natriumsalizylatschicht auf ein Aluminiumbeschichtetes Prisma aufgesprüht. Das Prisma ist auf einer Drehspiegelhalterung angeordnet, das in den Strahlengang eingebracht wird.

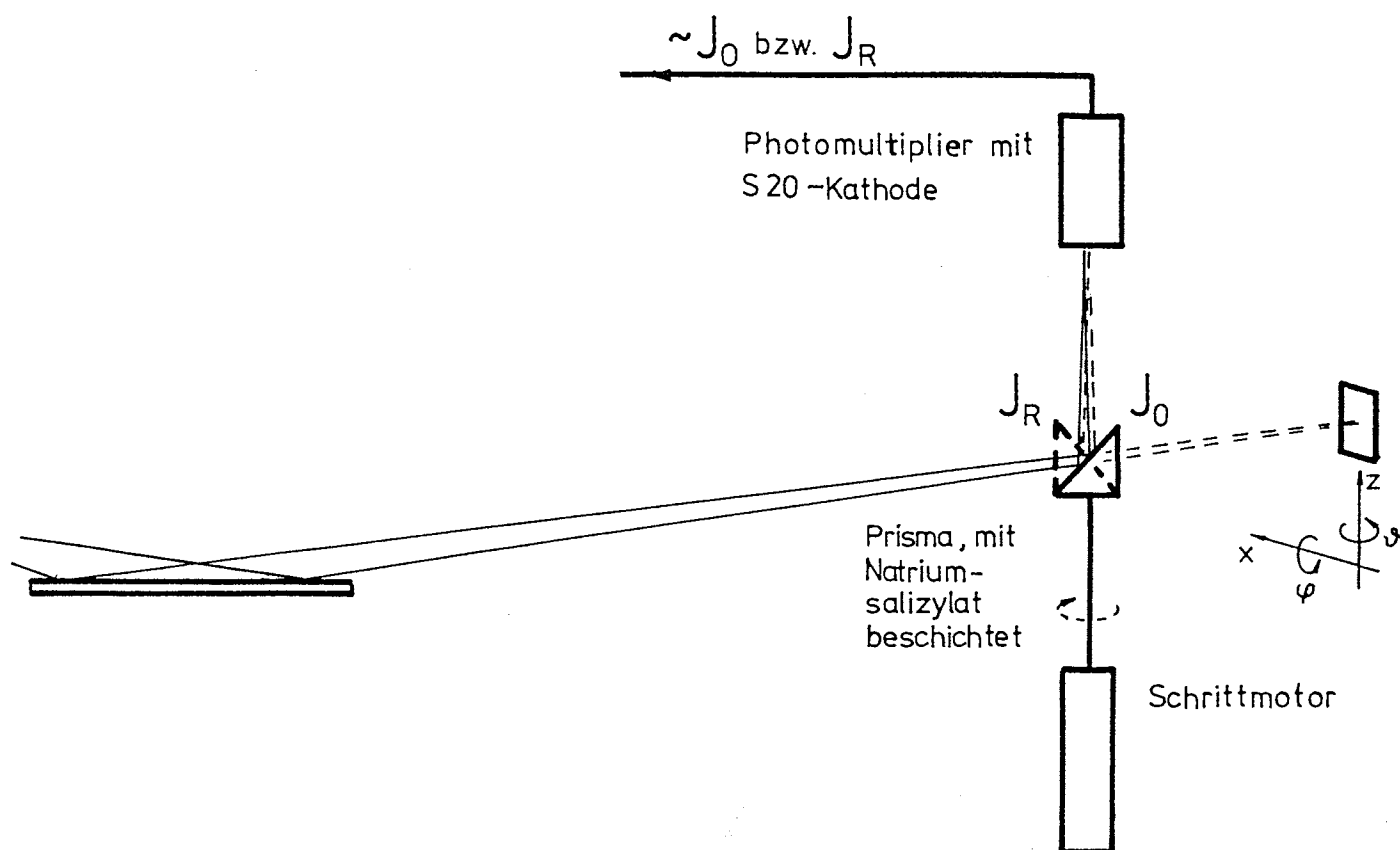


Fig. 3.3.a. Schematische Darstellung des Detektionssystems am 3 m-NIM-1, das in den Meßzeiten Juli und August 1987 verwendet wurde.

Da die Lumineszenzabstrahlung senkrecht zur Natriumsalicylat-schicht erfolgt, kann mit dieser Anordnung nur ein geringer Anteil der abgestrahlten Lumineszenz detektiert werden. Zudem zeigt sich eine Nicht-linearität der detektierten Strahlung (siehe Kap. 4.4) im Bereich von 320 bis 250 nm, die u. a. durch die polarisierte Synchrotronstrahlung oder die 45-Grad-Anordnung des Al-Prismas verursacht sein könnte. Um das Maximum der Lumineszenzstrahlung detektieren zu können und die Nichtlinearität zu vermeiden, wurde eine neue Anordnung (Fig. 3.3.b) konstruiert /Bit88/. Ein Kantenfilter WG360, das mit einer dünnen Schicht Natriumsalicylat beschichtet wurde, ist senkrecht zum Strahlengang vor dem Glasprisma angeordnet.

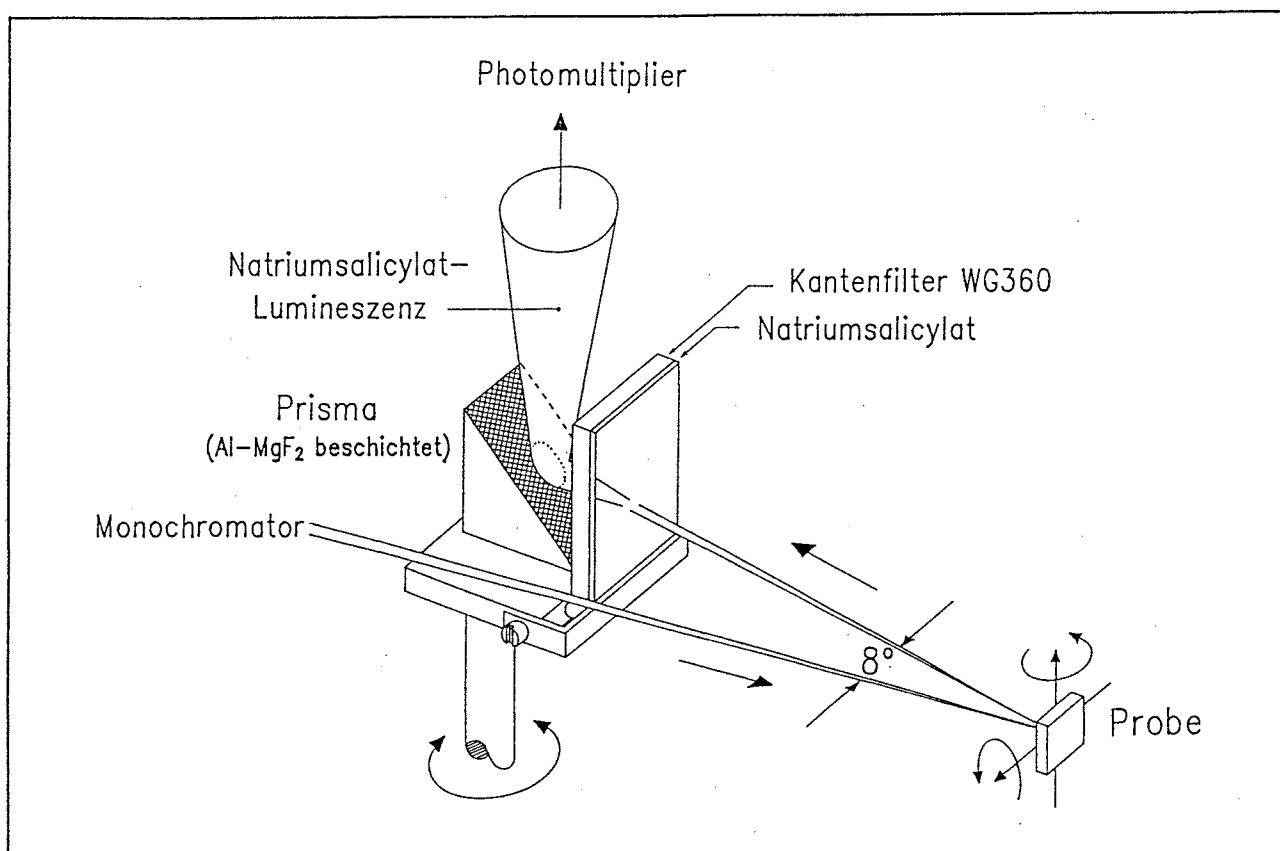


Fig. 3.3.b. Neue Anordnung zur Detektion der Synchrotronstrahlung mittels Natriumsalicylatlumineszenz /Bit88/.

Die durch das Kantenfilter hindurchtretende Lumineszenzstrahlung wird durch das dahinter befindliche Aluminium-Prisma zur S20-Kathode umgelenkt. Messungen mit dieser Anordnung im Januar 1988 zeigten durch die erhöhte Nachweisrate ein deutlich besseres Signal- Rauschverhältnis. Die vorher aufgetretene Nichtlinearität war mit dieser Anordnung nicht mehr zu beobachten.

Der Photostrom der S20-Kathode wird mit einem Stromverstärker (siehe Kap. 2.1.5) verstärkt und in ein, dem Strom proportionales, Spannungssignal umgesetzt. Über einen Spannungs/Frequenzwandler werden die Signale in den Meßwerterfassungsrechner (PDP 11/23) eingelesen und weiter verarbeitet.

3.4 Prinzipieller Aufbau

Der experimentelle Aufbau (Fig 3.4.a) für die Bestimmung relativer Reflektivitäten wurde in der Arbeit von E. Flach /Fla86/ ausführlich dargestellt. Für Messungen absoluter Reflektivitäten wurde die Anordnung durch eine Drehspiegeleinheit erweitert. Diese erlaubt es, die direkt einfallende und reflektierte Strahlung durch einfaches Drehen des Drehspiegel zu bestimmen und somit die absolute Reflektivität der Probe zu messen. Die verwendeten Elemente wie Probenkühlung, Kryostat, S20-Kathode und Stromverstärker sind im Kapitel II beschrieben.

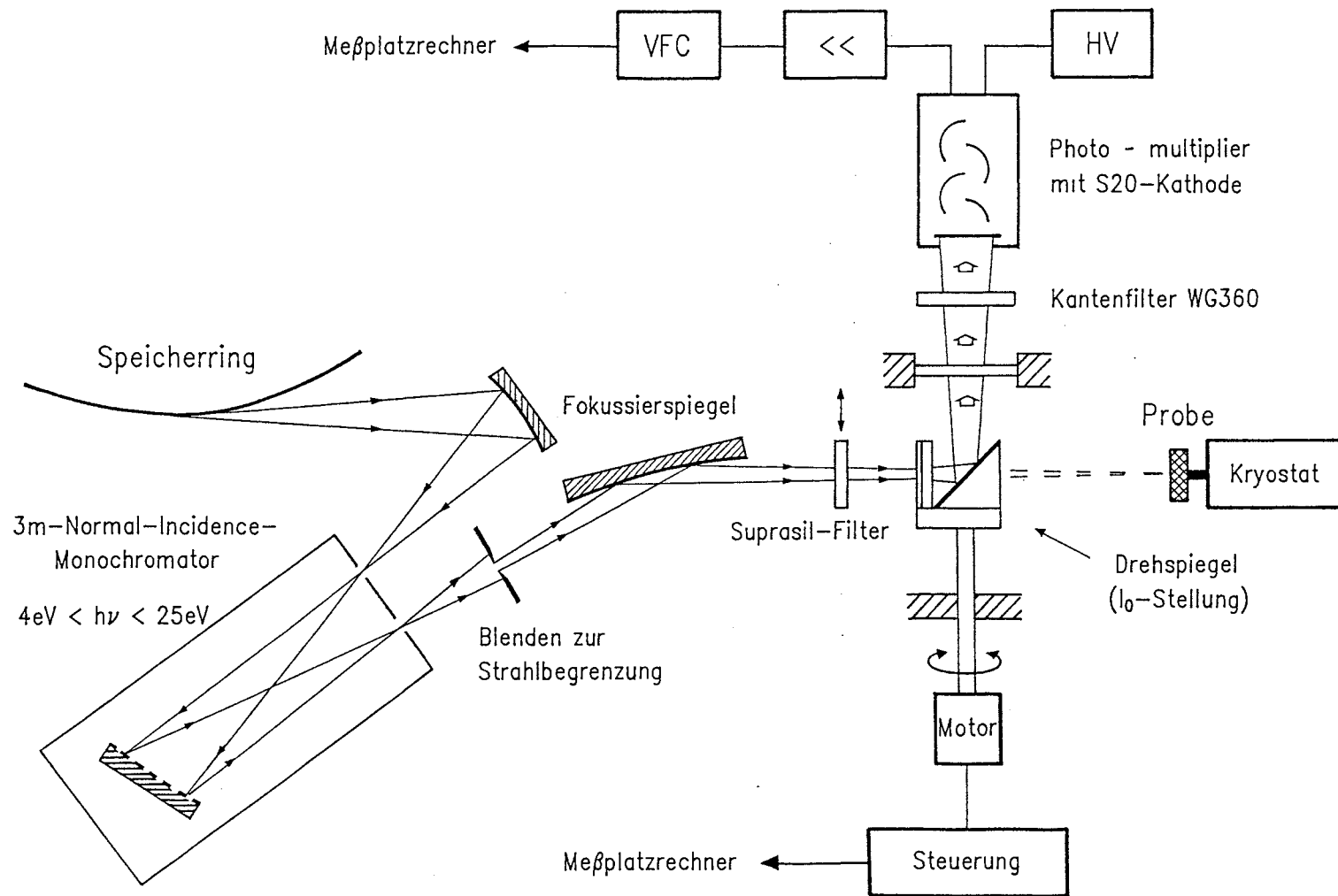


Fig. 3.4.a. Gesamtaufbau für die Reflexionsmessungen am 3 m-NIM-1 bei 'BESSY' im Energiebereich von 4 bis 25 eV /Bit88/.

IV. Meßbereiche und deren Gültigkeit

4.1 Meßbereiche

Die in dieser Arbeit vorgestellten Reflexionsspektren im Energiebereich von 1.5 bis 25 eV setzen sich, bedingt durch die verwendeten Apparaturen, Lichtquellen und Meßdatenaufnahmesysteme, aus 5 Meßbereichen zusammen.

Meßbereich von bis [nm]	Schrittweite in [nm]	benutztes Filtersystem im Strahlengang	verwendetes Detektionssystem	Lichtquelle
400 bis 850	1.0 nm Bandkante mit 0.5 nm	WG 390 ab 400 nm (Kantenfilter)	Aluminium-Drehspiegel. Direkte	konventionelle Lichtquelle Xenon-
190 bis 450	1.0 nm	kein Filtersystem	Detektion der Lichtstrahlung mit einer S20-Kathode.	Kurzbogenlampe (XBO 450W)
320 bis 180	0.5 nm teilweise auch 0.8 nm	Suprasil-Filter	dicke NaSa-Schicht auf Al-Drehspiegel. Detektion der	Synchrotronstrahlung
220 bis 100	0.3 nm	ohne Filter CdTe und Osmium mit LiF-Filter	NaSa-Lumineszenz mit der S20-Kathode. WG 360 Kanten-	
140 bis 50	0.2 nm	ohne Filtersystem	filter zur Abschirmung der direkten Strahlung.	

Tabelle 4.1.a: Übersicht über die Meßbereiche

Die Messungen mit konventioneller Lichtquelle werden im Gegensatz zu den Messungen mit Synchrotronstrahlung mit wachsender Wellenlänge durchgeführt. Lag die Bandkante über 2 eV, so wurden die Meßbereiche von 400 bis 850 nm und von 190 bis 450 nm teilweise zu einem Meßbereich von 190 bis 700 nm zusammengefaßt. In diesem Meßbereich wurde dann ab 410 nm die Messung mit einem WG390 Kantenfilter fortgeführt. Die Raumtemperaturmessungen erfolgten jedoch immer über den gesamten Bereich von 190 bis 850 nm, um eine Übersichtsdarstellung zu erhalten.

4.2 2. Ordnung im Meßbereich von 220 bis 100 nm

Die Messungen im Juli und August 1987 am 3 m-NIM-1 im Wellenlängenbereich 220 bis 100 nm wurden mit dem Pt-Gitter durchgeführt (Kap. 3.2). Beim Vergleich der Spektren mit Literaturdarstellungen (/Fre73/,/Sai72/) zeigten sich erhebliche Abweichungen der Maximagewichtungen in den Reflexionsstrukturen, die durch die 2. Ordnung verursacht wurden (Fig.4.2.a). Um für die schon gemessenen Spektren eine Korrekturfunktion zu finden, wurden an dem CdTe-Kristall und an einem Osmiumspiegel (an dem gleichzeitig Adsorbatuntersuchungen durchgeführt wurden) folgende Messungen durchgeführt:

- | | |
|--|-------------------|
| - Pt-Gitter : 320 - 180 nm | Suprasil - Filter |
| - Pt-Gitter : 220 - 100 nm und 120 - 50 nm | ohne Filter |
| - Pt-Gitter : 220 - 105 nm | mit LiF - Filter |
| - Al-Gitter: 320 - 180 nm | Suprasil - Filter |
| - Al-Gitter: 220 - 100 nm und 120 - 50 nm | ohne Filter |
| - Al-Gitter: 220 - 105 nm | mit LiF - Filter |

CdTe (36K): mit und ohne LiF-Filter

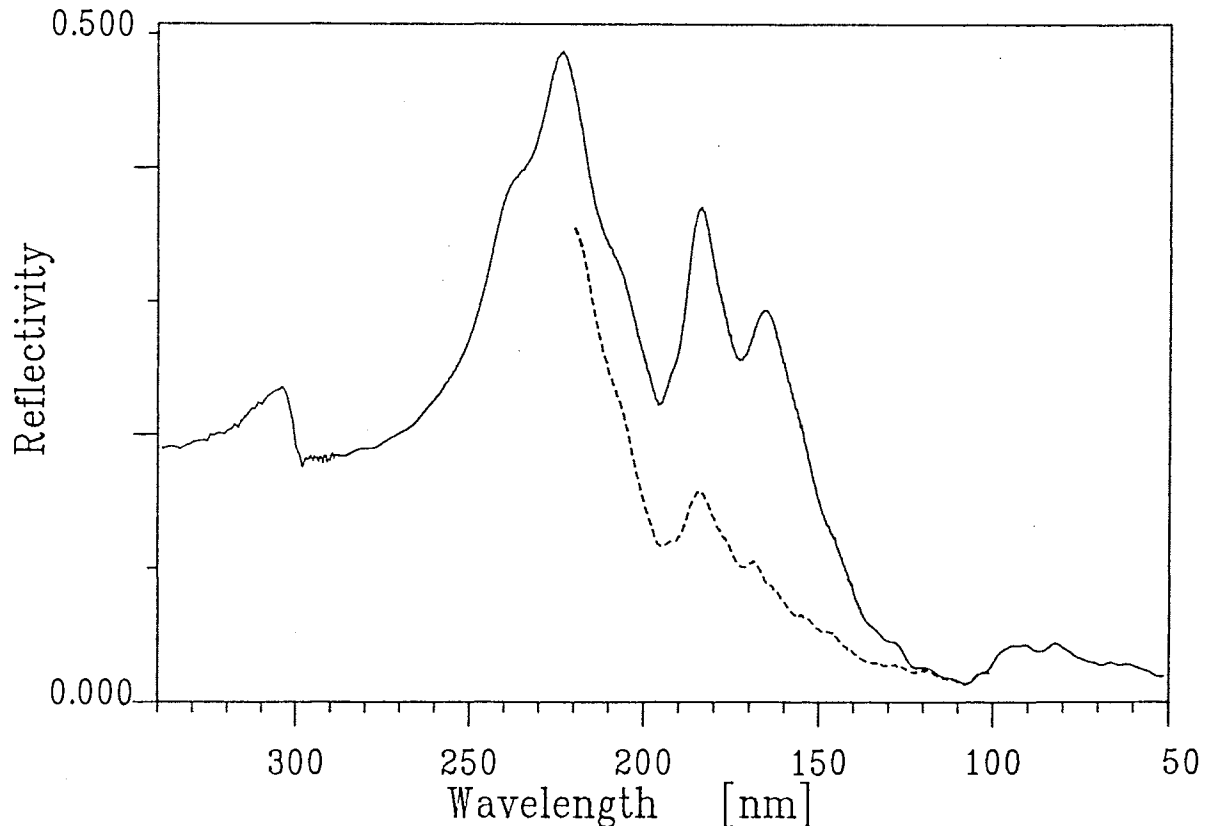


Fig. 4.2.a: Reflexionsspektren CdTe (36K) im Bereich von 340 bis 50 nm.
 --- mit 2. Ordnung im Bereich von 220 bis 100 nm (5 bis 12 eV).

Bestimmung der Korrekturfunktion F_{kor} :

Benutzte Größen:

I_o	:	einfallende Lichtintensität ohne 2. Ordnung
I_r	:	reflektierte Lichtintensität ohne 2. Ordnung
$R_o = \frac{I_r}{I_o}$:	echte Reflektivität
$I_o' = I_o * F_{LiF}$:	einfallendes Licht mit LiF-Filtercharakteristik gefaltet
I_r'	:	reflektiertes " " " "
$R' = \frac{I_r'}{I_o'}$:	$R' = R_o$; da F_{LiF} sich bei der Division heraushebt.
$I_o'' = I_o * F_{falt}$:	einfallende Lichtintensität mit 2. Ordnung ohne LiF-Filter
I_r''	:	reflektierte " " " " "
$R'' = \frac{I_r''}{I_o''}$:	Reflektivität mit 2. Ordnung

Ansatz:

$$(4.1) \quad R_o = \frac{I_r}{I_o} = \frac{(I_r'' - R(\lambda/2) * F_o(\lambda/2))}{(I_o'' - F_o(\lambda/2))}$$

mit : $R(\lambda/2)$ = Reflektivität bei der halben Wellenlänge
 $F_o(\lambda/2)$ = Intensitätsbeitrag der halben Wellenlänge

Messungen mit Aluminium (Al) -Gitter mit und ohne LiF-Filter zeigen keine erheblichen Abweichungen, so daß für den Bereich 200 bis 105 nm 2. Ordnungs-Anteile ausgeschlossen werden können. Aus den Messungen kann dann die relative Filtercharakteristik F_{LiF}' bestimmt werden:

$$(4.2) \quad F_{LiF} = F_{LiF}' * A ; \text{ mit } F_{LiF}' = \frac{I_o}{I_o'} ;$$

wobei angenommen ^{wird}, daß bei $\lambda=220$ nm $I_o = I_o'$ *ist* (Fig.4.2.b).

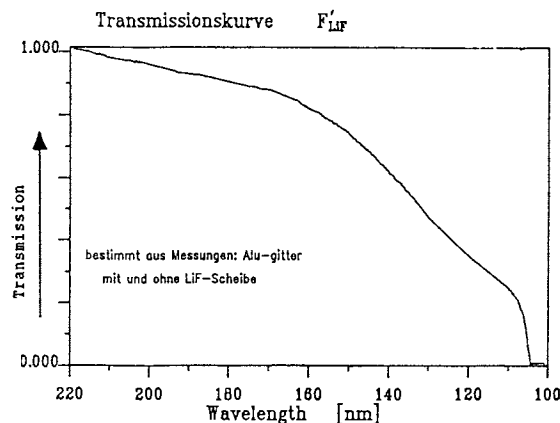


Fig. 4.2.b: Auf 1. normierte LiF-Filtercharakteristik F_{LiF}' , bestimmt aus Messungen mit dem Aluminium-Gitter (MgF_2 -beschichtet).

Der qualitative Verlauf der so gewonnenen Kurve zeigte im Bereich von 220 bis 130 nm eine sehr gute Übereinstimmung mit der über Gleichung (4.3) bestimmten Korrekturfunktion F'_{kor} . Durch Vergleich der absoluten Größen kann die unbekannte Konstante A aus Gleichung (4.3) bestimmt werden, so daß eine Korrekturfunktion F_{kor} für die 2. Ordnung im Bereich von 220 bis 105 nm vorliegt (Fig. 4.2.c). Die 2. Ordnung im Teilbereich von 105 bis 100 nm kann nicht explizit bestimmt werden, da keine optischen Filter für diesen Bereich zur Verfügung stehen. Die Korrekturfunktion F_{kor} wurde in diesem Bereich linear auf 0 fortgesetzt. Die dadurch entstandene Unsicherheit im Verlauf der Spektren muß bei der Auswertung und der Zuordnung der Linien berücksichtigt werden.

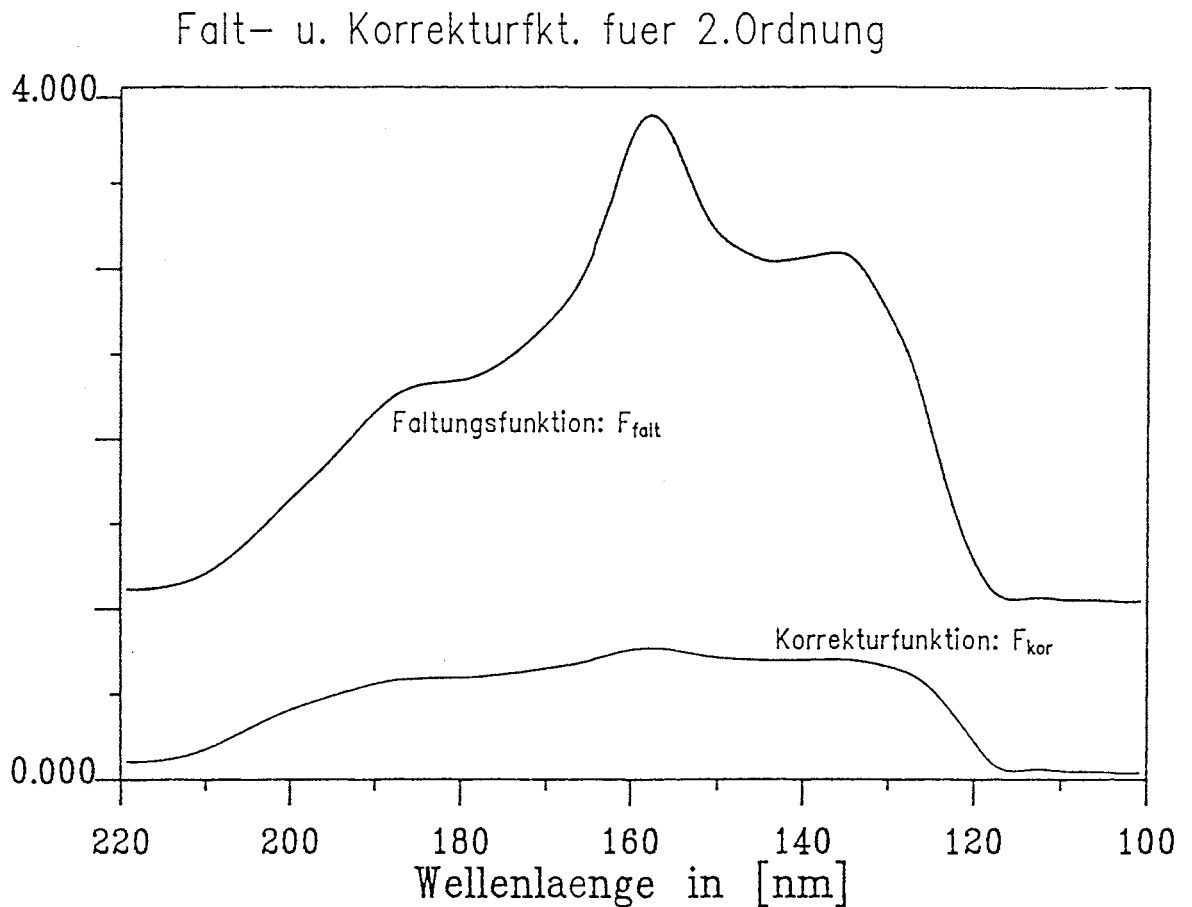


Fig. 4.2.c : Korrektur- und Faltungsfunktion für die 2. Ordnung im Meßbereich von 220 bis 100 nm.

Die Zulässigkeit der Korrekturfunktion und des Korrekturalgorithmus wurde an den Spektren von CdTe und Osmium überprüft. Wird die Reflektivität bei halber Wellenlänge statt des echten Verlaufs mit einem konstanten Wert berücksichtigt, so ändert dies den Kurvenverlauf

Der qualitative Verlauf der so gewonnenen Kurve zeigte im Bereich von 220 bis 130 nm eine sehr gute Übereinstimmung mit der über Gleichung (4.3) bestimmten Korrekturfunktion F'_{kor} . Durch Vergleich der absoluten Größen kann die unbekannte Konstante A aus Gleichung (4.3) bestimmt werden, so daß eine Korrekturfunktion F_{kor} für die 2. Ordnung im Bereich von 220 bis 105 nm vorliegt (Fig. 4.2.c). Die 2. Ordnung im Teilbereich von 105 bis 100 nm kann nicht explizit bestimmt werden, da keine optischen Filter für diesen Bereich zur Verfügung stehen. Die Korrekturfunktion F_{kor} wurde in diesem Bereich linear auf 0 fortgesetzt. Die dadurch entstandene Unsicherheit im Verlauf der Spektren muß bei der Auswertung und der Zuordnung der Linien berücksichtigt werden.

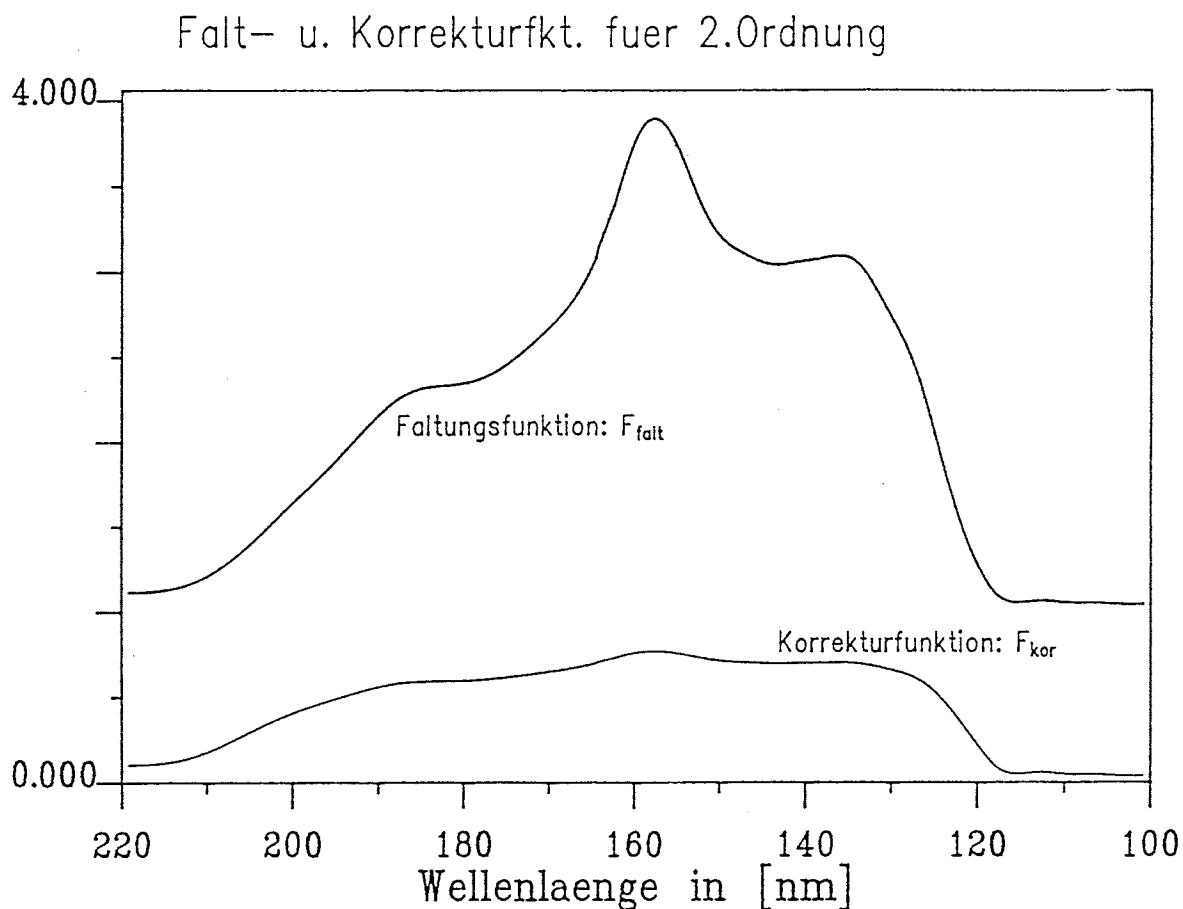


Fig. 4.2.c : Korrektur- und Faltungsfunktion für die 2. Ordnung im Meßbereich von 220 bis 100 nm.

Die Zulässigkeit der Korrekturfunktion und des Korrekturalgorithmus wurde an den Spektren von CdTe und Osmium überprüft. Wird die Reflektivität bei halber Wellenlänge statt des echten Verlaufs mit einem konstanten Wert berücksichtigt, so ändert dies den Kurvenverlauf

unwesentlich. Der Schwerpunkt der Korrektur liegt im direkt detektierten Intensitätsanteil $F_{0(1/2)}$. Im reflektierten Lichtstrahl geht der 2. Ordnungsanteil nur noch mit dem Faktor $R_{(1/2)}$ ein. Die Reflektivität liegt jedoch im Bereich von 100 bis 50 nm unter 0.1 und besitzt keine ausgeprägten Strukturen. In Fig. 4.2.d ist ein CdTe-Spektrum dargestellt, das mit und ohne 2. Ordnung aufgenommen wurde. Das mit F_{kor} korrigierte Spektrum gibt der gepunktete Kurvenverlauf wieder. Das Ergebnis wird durch die neuen Messungen im Feb. 1988 bestätigt.

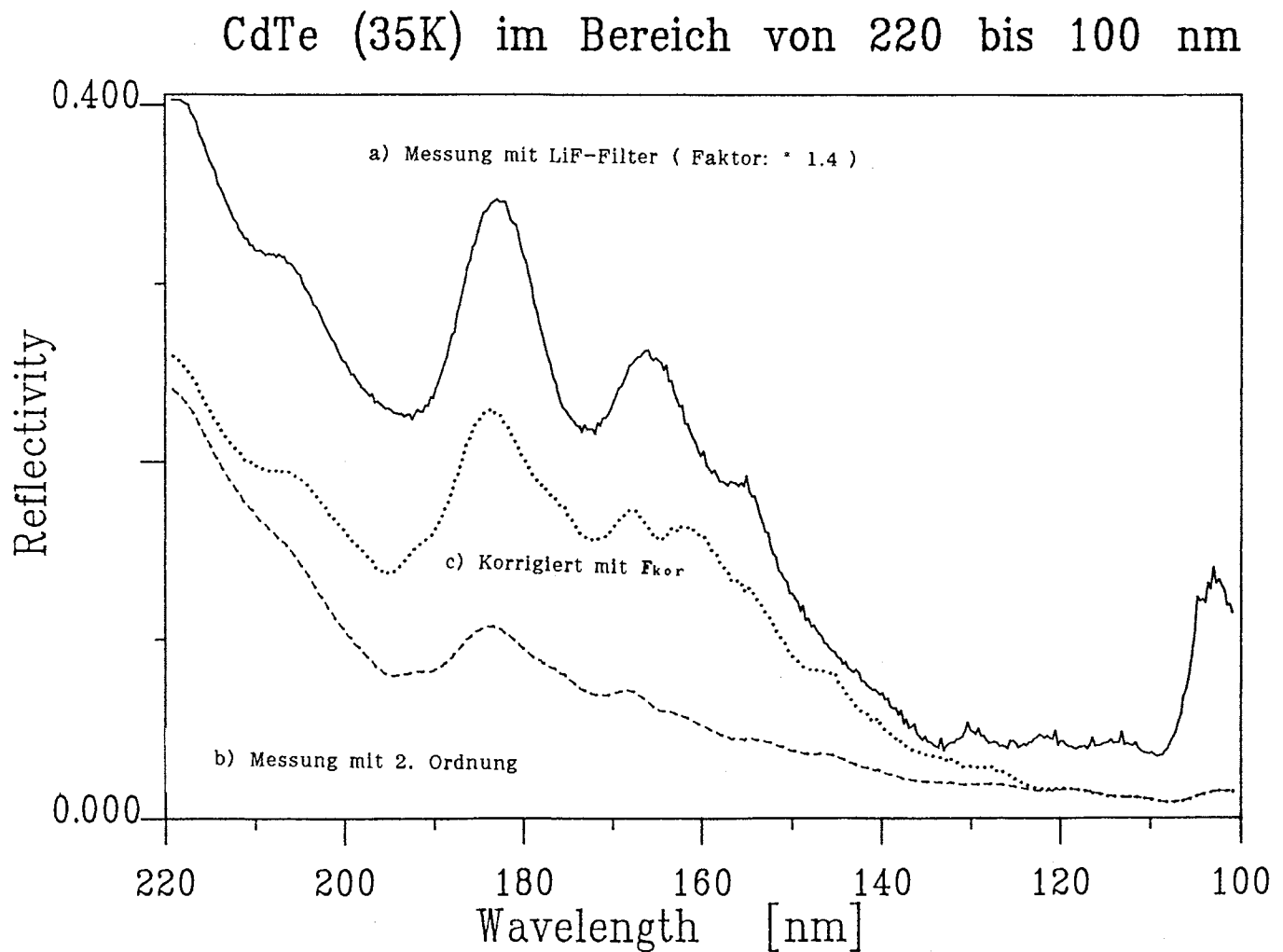


Fig. 4.2.d : CdTe im Bereich von 220 bis 100 nm.
 a.) Reflektivität ohne 2. Ordnung b.) Reflektivität mit 2. Ordnung
 c.) Mit F_{kor} korrigiertes Spektrum

4.3 Abschätzung von Meßfehlern

Zur Abschätzung der Meßfehler in den verwendeten Meßanordnungen wurde in jeder Meßzeit die Reflektivität eines Osmiumspiegels bestimmt. Da die Reflektivität des Osmiumspiegel im gesamten Energiebereich bekannt ist, kann so die Richtigkeit der bestimmten Kristallreflektivität überprüft werden.

In Abbildung Fig. 4.3.a ist die bestimmte Osmiumreflektivität für die beiden benutzten Meßapparaturen dargestellt. Die gepunktete Kurve wurde an der Meßapparatur "PN414" (konventionelle Lichtquelle) bestimmt. Die zweite Kurve zeigt die gemessene Reflektivität, wie sie mit dem verwendeten Detektionssystem im Okt. 1987 bei "BESSY" (Synchrotronstrahlung) bestimmt wurde.

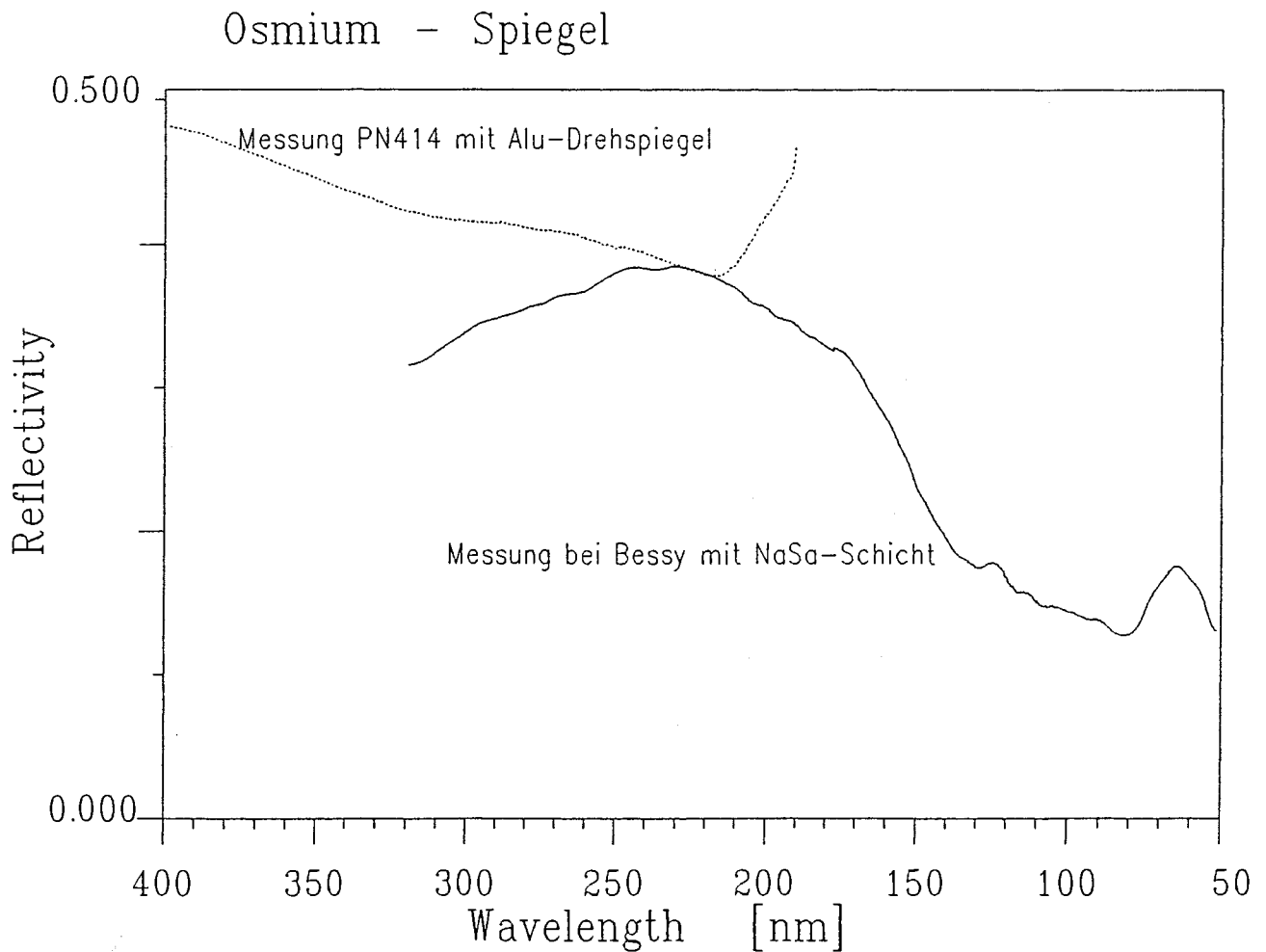


Fig. 4.3.a: Vergleich der bestimmten Osmiumreflektivitäten für die beiden verwendeten Meßapparaturen (siehe Text).

Die bei "BESSY" bestimmte Reflektivität zeigt bei einem Vergleich mit der von J.T. Cox et al. /Chr73/ bestimmten Reflektivität für Osmium im Bereich von 320 bis 250 nm zu kleine Werte. Durch eine Veränderung des Detektionssystems (siehe Kap. 3.3) und durch Einengung des Lichtstrahls konnte der Fehler beseitigt werden.

Messungen an der Apparatur im "PN414" zeigen, daß die zu hoch bestimmte Reflektivität im Energiebereich von 220 bis 190 nm durch weißes Streulicht im Monochromator verursacht ist. Abbildung Fig. 4.3.b zeigt die gemessenen Intensitäten bei unterschiedlichen optischen Filtern. Das auftretende weiße Streulicht konnte trotz Nachjustierung des Gitters nicht vollständig beseitigt werden, so daß eine Einschränkung im verwendbaren Energiebereich bleibt.

Streulichtmessungen (PN414)

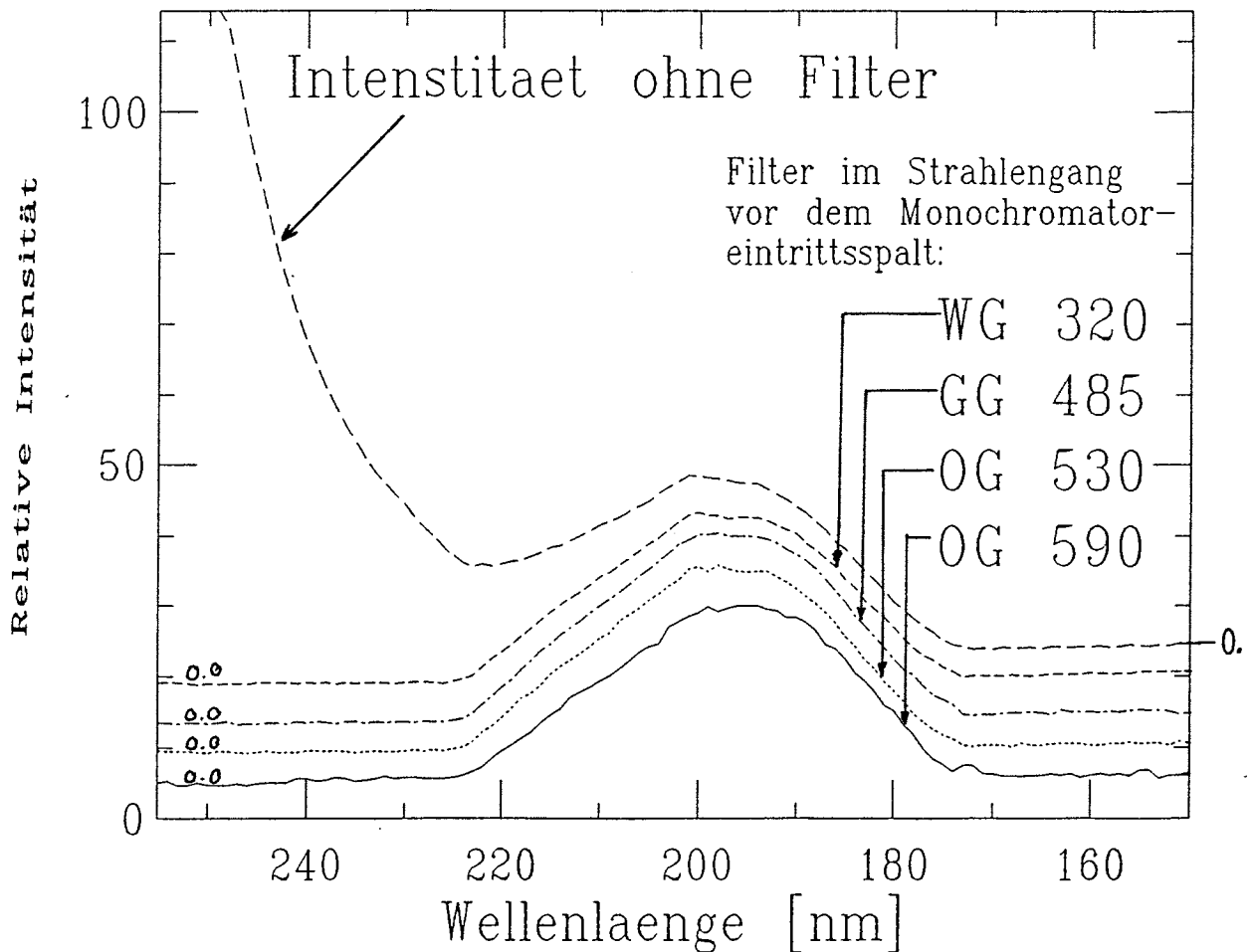


Fig. 4.3.b: Gemessene Intensität bei verschiedenen optischen Filtern, zur Bestimmung der Zusammensetzung des im Monochromator auftretenden Streulichts.

V. Experimentelle Ergebnisse und Diskussion

5.1 *Kristalle*

Die im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Mischkristalle sind alle im Materiallabor des Instituts für Festkörperphysik von Herrn Krost und Herrn Broschat nach dem Hochdruck Bridgman Verfahren hergestellt worden.

Die Ausgangssubstanzen werden durchmischt in einen verschlossenen Graphittiegel in eine Hochdruckkammer gebracht. Die Hochdruckkammer wird anschließend mit Argon gefüllt, bis ein Druck von 90 bar erreicht ist. Mittels einer HF-Spule wird der Graphittiegel bis über den Schmelzpunkt der Ausgangssubstanzen hochgeheizt. Der Graphittiegel bleibt dabei stationär zum HF-Feld. Durch Herunterregeln des HF-Feldes wird die Temperatur langsam abgesenkt. Dabei liegt die Abkühldauer von der Schmelz- bis zur Raumtemperatur bei ca. 24 h. Die Kristalle wurden keiner weiteren Behandlung unterzogen (/Bro87/).

Aus den so entstandenen Kristallen wurde versucht, möglichst einkristalline Spaltflächen zu erhalten. Teile von jeder Probe wurden zur Atomabsorptionsanalyse und zur Mikrosondenuntersuchung gegeben. Die Ergebnisse der einzelnen Untersuchungen sowie die nominelle Einwaage sind in der Tabelle 5.1.1 zusammengefaßt.

Oberflächenbeschaffenheit:

Die Untersuchungsergebnisse aus der Atomabsorptionsspektroskopie und der Mikrosondenuntersuchung weichen teilweise erheblich voneinander ab. Dies liegt an der unterschiedlichen Untersuchungsgenauigkeit, jedoch auch an der Inhomogenität in der Probenzusammensetzung. Die Oberflächen zeigen kleine aneinanderhängende einkristalline Bereiche (ca. 1-2 mm²) mit Stufen und Versetzungen. Mikrosondenuntersuchungen zeigen, daß unterschiedliche Konzentrationsverteilungen in den verschiedenen Bereichen vorliegen. Die Kristalle HD40 und HD41 (Tab. 5.1.1) zeigen Te-Ausscheidungen mit über 90% Te-Anteil. Die Atomabsorptionsspektroskopie kann über solche Inhomogenitäten keine Aussagen treffen, da es sich um eine über das gesamte Probenvolumen integrierende Meßmethode handelt.

Diese kleinen kristallinen Bereiche können mit der Reflexionsapparatur im PN414 noch ausreichend gut untersucht werden, da der Fokus auf der Probe bei hinreichend guter Justierung kleiner als 1 mm² ist. Die in dieser Arbeit untersuchten Kristalle sind in Fig. 5.1.a zu einem Mischungsdiagramm zusammengefaßt. Zusätzlich zu den quaternären Proben wird in dieser Arbeit ein CdTe - Kristall untersucht. Der untersuchte Kristall besitzt eine große einkristalline Spaltfläche. An einem CdTe - Kristall der gleichen Charge wurde bereits von Martin Krause /Kra86/ Reflexionsmessungen bei Zimmertemperatur und bei 110 K im hochenergetischen Bereich (5-25eV) vorgenommen.

Kristall bezeich.	nominelle Einwaage	Konzentration nach AAS* (Cd / Zn / Mn)	Konzentration nach MS ** (Cd / Zn / Mn)
HD 23	0.20 / 0.79 / 0.01	0.119 / 0.914 / 0.064	0.143 / 0.848 / 0.009
CQ 05	0.20 / 0.75 / 0.05	---	0.235 / 0.747 / 0.018
HD 24	0.18 / 0.72 / 0.10	0.150 / 0.840 / 0.115	0.139 / 0.788 / 0.072
HD 25	0.14 / 0.56 / 0.30	0.121 / 0.573 / 0.378	0.100 / 0.558 / 0.338
HD 26	0.10 / 0.40 / 0.50	0.086 / 0.318 / 0.594	0.120 / 0.350 / 0.529
HD 27	0.06 / 0.24 / 0.70	0.043 / 0.191 / 0.824	0.060 / 0.239 / 0.701
HD 36	0.495/ 0.495/ 0.01	0.635 / 0.445 / 0.009	0.490 / 0.500 / 0.01
HD 37	0.475/ 0.475/ 0.05	0.450 / 0.489 / 0.059	0.475 / 0.48 / 0.05
HD 38	0.45 / 0.45 / 0.10	0.493 / 0.502 / 0.089	0.45 / 0.47 / 0.1
HD 39	0.35 / 0.35 / 0.30	0.248 / 0.589 / 0.225	0.23 / 0.57 / 0.20
HD 40	0.25 / 0.25 / 0.50	0.249 / 0.245 / 0.487	0.25 / 0.25 / 0.5 ¹
HD 41	0.15 / 0.15 / 0.70	0.144 / 0.139 / 0.752	0.14 / 0.15 / 0.7 ¹

AAS: = Atomabsorptionsspektroskopie

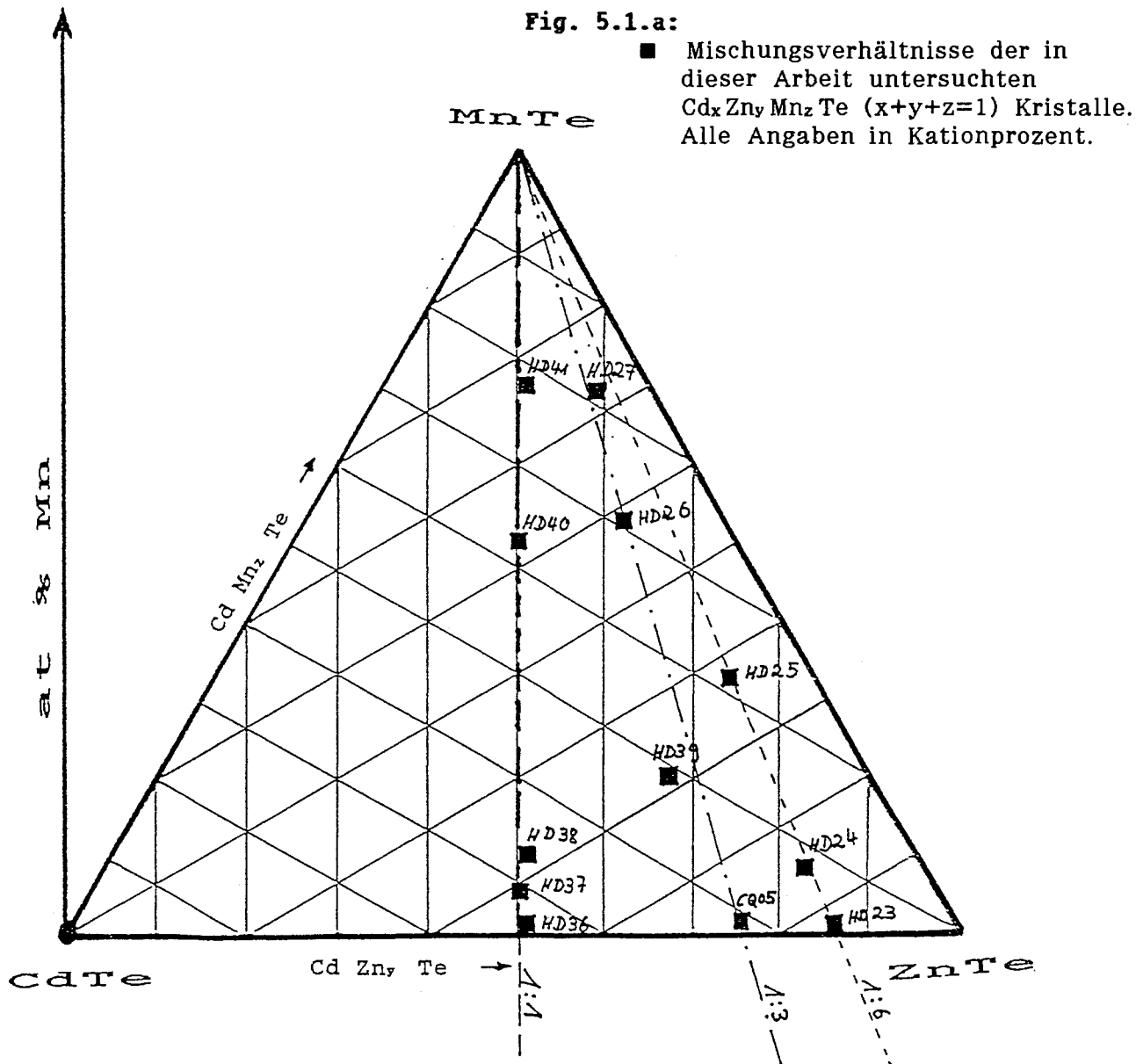
MS: = Mikrosondenuntersuchung

* : Ergebnisse aus der AAS nach /Jua87/

** : Ergebnisse aus der MS (nach Anregung mit hochenergetischen Elektronen { ca. 20 kV }), untersucht wurden jeweils mehrere Punkte auf der Kristalloberfläche .

¹ : Te - Ausscheidungen an einzelnen Punkten gemessen .

Tab. 5.1.1: Tabelle der untersuchten Kristalle:



Die weitere zukünftige Kristallbezeichnung wird im folgenden nach den Konzentrationsangaben, wie sie aus dem Ergebnissen der Mikrosondenuntersuchung hervorgingen (Die Werte werden auf 2-Stellen gerundet), erfolgen. Für die Verwendung der Ergebnisse der Mikrosondenuntersuchung spricht, daß diese Methode genau wie die Reflexionsspektroskopie ein Oberflächenanalysenverfahren darstellt und deshalb der Konzentrationsverteilung, wie sie bei der Reflexionsmessung vorliegen, am nächsten kommt. Da jedoch Reflexionsmessungen über eine größere Oberfläche mitteln (ca. $1\text{-}2\text{mm}^2$) als die Mikrosondenuntersuchungen ($1\text{-}2\ \mu\text{m}^2$), kann als mittlere Konzentration der Mittelwert aus den Mikrosondenuntersuchungsergebnissen angenommen werden.

Für die Darstellung der Ergebnisse werden die untersuchten Kristalle zu festen Mischungsverhältnissen Cd zu Zn zusammengefaßt. Die neuen Bezeichnungen der Kristallkonzentration, sowie die nach Brun del Re et al /Bru83/ berechneten Gitterkonstanten und Bandkanten, sind in der Tabelle 5.1.2 . Alle Angaben beziehen sich auf Raumtemperatur.

Kristall $Cd_xZn_yMn_zTe$ ($x+y+z=1$)	Kristall- bezeichnung	Konzentrations- angabe	Gitterkonstante nach /Bru83/ in [nm]	Bandkante E_0 nach /Bru83/ in [eV]
x:y=1:1				
z = 0.01	HD 36	.495/ .495/ .01	0.6287	1.828
= 0.05	HD 37	.475/ .475/ .05	0.629	1.869
= 0.10	HD 38	.45/ .47/ .10	0.6286	1.932
= 0.50	HD 40	.25/ .25/ .50	0.6311	2.3305
= 0.70	HD 41	.14/ .15/ .70	0.632	2.5371
x:y=1:3				
z = 0.02	CQ 05	.24/ .75/ .02	0.619	2.039
= 0.20	HD 39	.23/ .57/ .20	0.6232	2.152
= 0.53	HD 26	.12/ .35/ .53	0.6267	2.446
= 0.70	HD 27	.06/ .24/ .70	0.6285	2.604
x:y=1:6				
z = 0.01	HD 23	.14/ .85/ .01	0.615	2.119
= 0.07	HD 24	.14/ .79/ .07	0.6166	2.154
= 0.34	HD 25	.10/ .56/ .34	0.6215	2.339
CdTe				
			0.6483	1.523
ZnTe				
			0.610	2.254
hypoth. MnTe				
			0.633	2.847

Tab. 5.1.2: Neue Kristallkonzentrationsangaben für die untersuchten Kristalle $Cd_xZn_yMn_zTe$, sowie eine Zuordnung zu festen Mischungsverhältnissen.

5.2 Experimentelle Ergebnisse

Der CdTe-Kristall wurde im Feb. 1988 mit einer neuen Detektionsanordnung nochmals gemessen.

Damit konnten die aus der Literatur bekannten Ergebnisse bestätigt werden, d. h., die vorher aufgetretenen meßtechnischen Probleme wurden gelöst. Zudem bestätigt sich die Richtigkeit der ermittelten Korrekturfunktion (Kap. 4.2) im Energiebereich von 200 bis 110 nm.

In den Bereichen von 110 bis 90 nm und 320 bis 250 nm zeigen sich Unterschiede in den Peakgewichtungen zu den Messungen im Juli und Aug. 1987, die nicht durch die 2. Ordnung verursacht waren.

Ein Grund für die Abweichungen liegt in der starken Wellenlängenabhängigkeit der Fokuslage des 3 m-NIM 1 Monochromators und in der im Juli und Aug. 1987 verwendeten Detektionsanordnung.

Für den Bereich von 320 bis 250 nm können die Messungen, die mit der konventionellen Lichtquelle (XBO 450) durchgeführt wurden, verwendet werden. Die Messungen im Bereich von 110 bis 90 nm im Zeitraum Juli und Aug. 1987 sind meines Erachtens nach quantitativ nicht auswertbar.

Die Fokuswanderung von über 3 mm im Bereich von 300 bis 140 nm und die kleinen polykristallinen Proben der Mischungreihe $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ sind die Ursache vieler rätselhafter Strukturen in den Reflexionspektren.

Eine sichere Zuordnung für alle Kristalle kann für die Messungen im Bereich von 800 bis 230 nm (1 bis 5 eV - konventionelle Lichtquelle) getroffen werden. Für die Messungen im Bereich von 6 bis 25 eV kann eine Auswertung nur für die Messungen, die im Feb. 1988 durchgeführt wurden, erfolgen. Für die übrigen Kristalle müßte bei der Zuordnung ein großer Fehler angenommen werden, so daß eine Aussage über die temperaturabhängige Verschiebung von Reflexionsmaxima nicht möglich ist.

Die quantitativen Angaben der Zuordnungen werden über die 2. Ableitung der Spektren ermittelt. Hierzu wird jeder Meßpunkt X_n mit seinen Nachbarpunkten: $X_{n-k}, \dots, X_n, \dots, X_{n+k}$ (k:variabel) durch eine analytische kubische Funktion interpoliert. (siehe Anhang Teil b).

Von dieser für jeden Meßpunkt zu bestimmenden Funktion wird die 1.- und 2. Ableitung ermittelt. Aus den Extremalwerten der Ableitungen und Vergleich mit den Meßwerten kann eine Zuordnung getroffen werden. Fig. 5.2.a zeigt als Beispiel die erhaltene 1.- und 2. Ableitung eines CdTe-Reflexionsspektrums in Energiebereich von 4.5 bis 8 eV bei einer Interpolation über 9 Punkte.

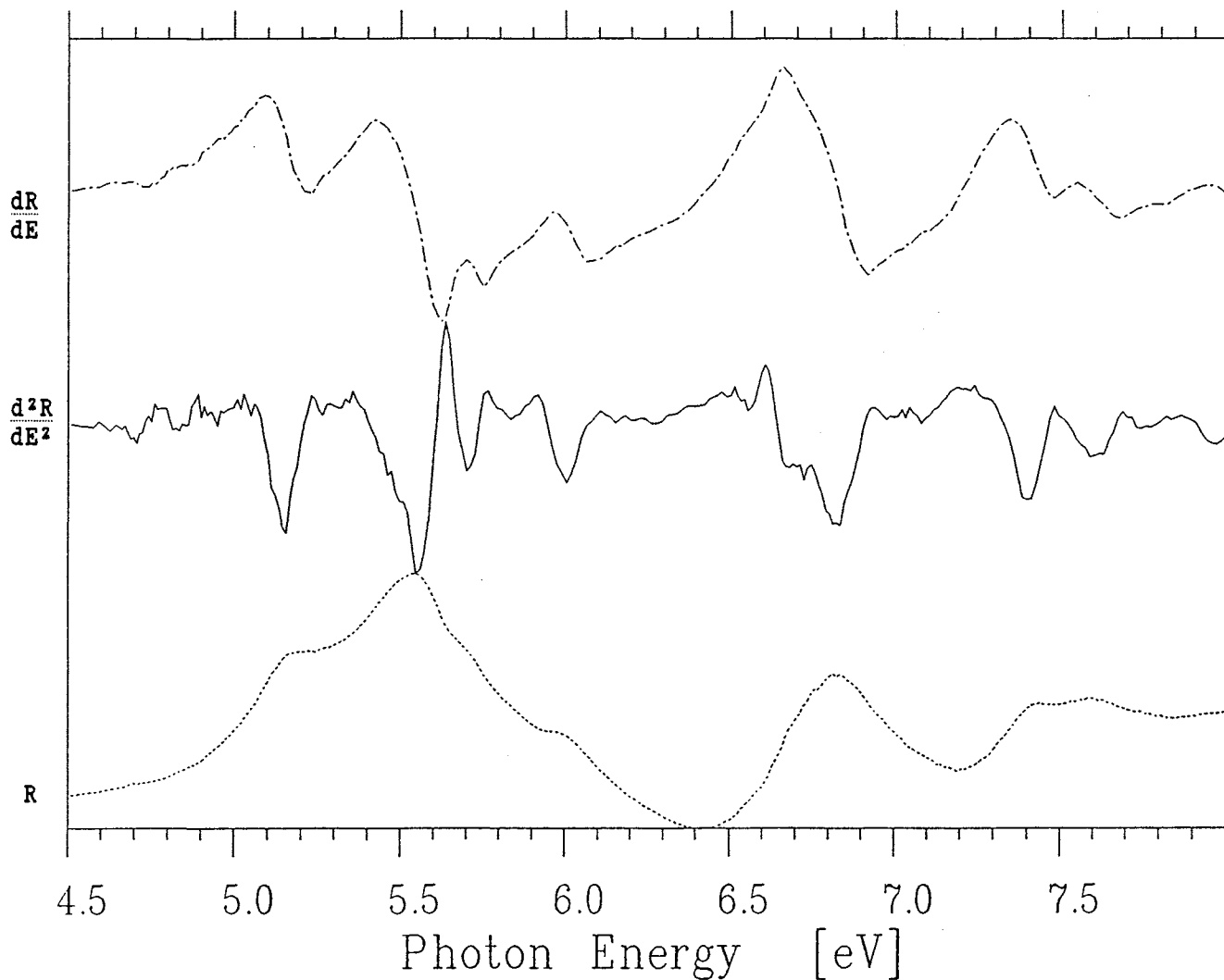


Fig. 5.2.a: Reflexionsspektrum von CdTe (.....) mit 1. Ableitung (-.-.-) und 2. Ableitung (———) bei 20 K

5.3. Reflexionsspektren von CdTe

Abbildung Fig. 5.3.a zeigt das Reflexionsspektrum für CdTe im gesamten gemessenen Energiebereich. Die energetischen Lagen sowie die Feinstruktur der Reflexionsmaxima stimmen mit Messungen überein, die von M. Cardona /Car63/ (1 bis 4 eV) und Chadi et al. /Cha72/ (1 bis 8 eV) durchgeführt wurden.

Im Interbandbereich (1 bis 8 eV) sind die Zuordnungen übereinstimmend mit der von Chelikowsky und Cohen /Che76/ angegebenen Notation gewählt. Die Zuordnungen E_3 bis E_5 und L_1 bis L_5 wurden aus der Arbeit von M. Krause /Kra86/ entnommen. Die weiteren Zuordnungen werden neu vorgenommen.

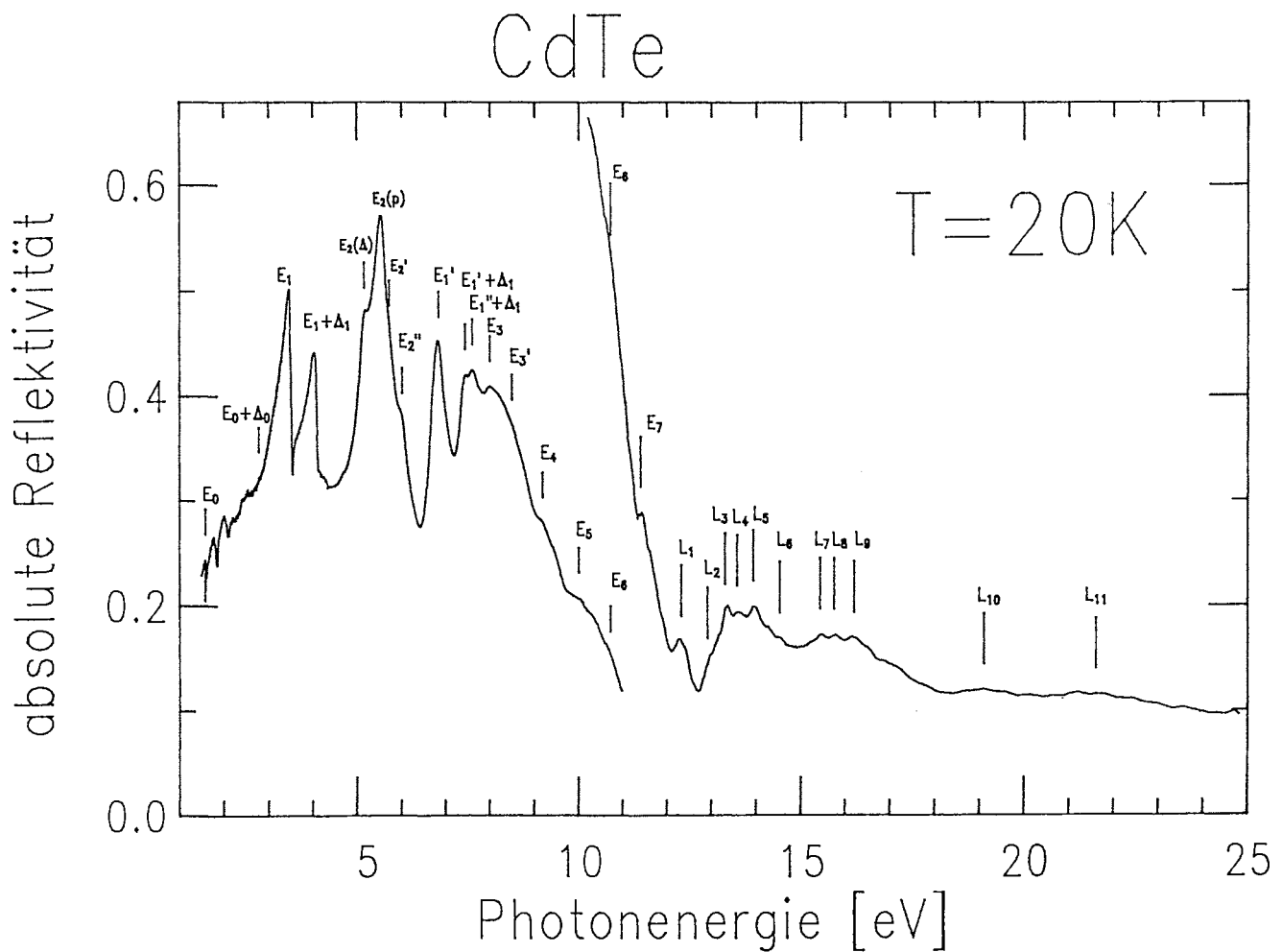


Fig. 5.3.a: Reflexionsspektrum von CdTe im Energiebereich von 1 bis 25 eV bei 20 K. Der Bereich von 10 bis 25 eV ist um den Faktor 5 vergrößert dargestellt.

In den Abbildungen Fig. 5.3.b und Fig. 5.3.c ist die Reflektivität von CdTe bei verschiedenen Temperaturen dargestellt. Die Beschriftung der y-Achse bezieht sich dabei auf die untere Kurve (Raumtemperaturmessung $T=300\text{K}$). Die weiteren Kurven sind um einen konstanten Faktor verschoben dargestellt, mit der jeweils rechts angegebenen neuen Nulllinie.

Eine Diskussion der einzelnen Extrema erfolgt mit einem Vergleich der berechneten ϵ_2 -Spektren im nächsten Abschnitt.

Das temperaturabhängige Verhalten der Reflexionsstrukturen faßt die Abbildung Fig. 5.3.d zusammen.

Für den niederenergetischen Bereich liegen umfangreiche Untersuchungen /Car63, Ken80, Büc84/ über die Temperaturabhängigkeit der Reflexionsstrukturen vor, die aus der Tabelle Tab. 5.3.1 zu entnehmen sind. In den höherenergetischen Bereich liegen keine Messungen vor, die Aussagen über das Temperaturverhalten der Reflexionsstrukturen machen.

Bezeichnung des Übergangs	Lage in eV bei $T=300\text{K}$	Temperaturgradient in 10^{-4} eV / K	Zitat
E_0	1.513	-3.31 ± 0.05	/Büc84/
$E_0 + \Delta_0$	2.4	≈ 0	/Car63/
Δ_0	0.81 (77 K)	≈ 0	/Car63/
E_1	3.32 ± 0.02	-5.5 ± 0.07	/Büc84/
$E_1 + \Delta_1$	3.84 ± 0.03	-2.4	/Büc84/
Δ_1	0.52 ± 0.05	-3.64	/Büc84/

Tab. 5.3.1: Temperaturabhängiges Verhalten der Reflexionsmaxima E_0 , $E_0 + \Delta_0$, E_1 , und $E_1 + \Delta_1$ von CdTe.

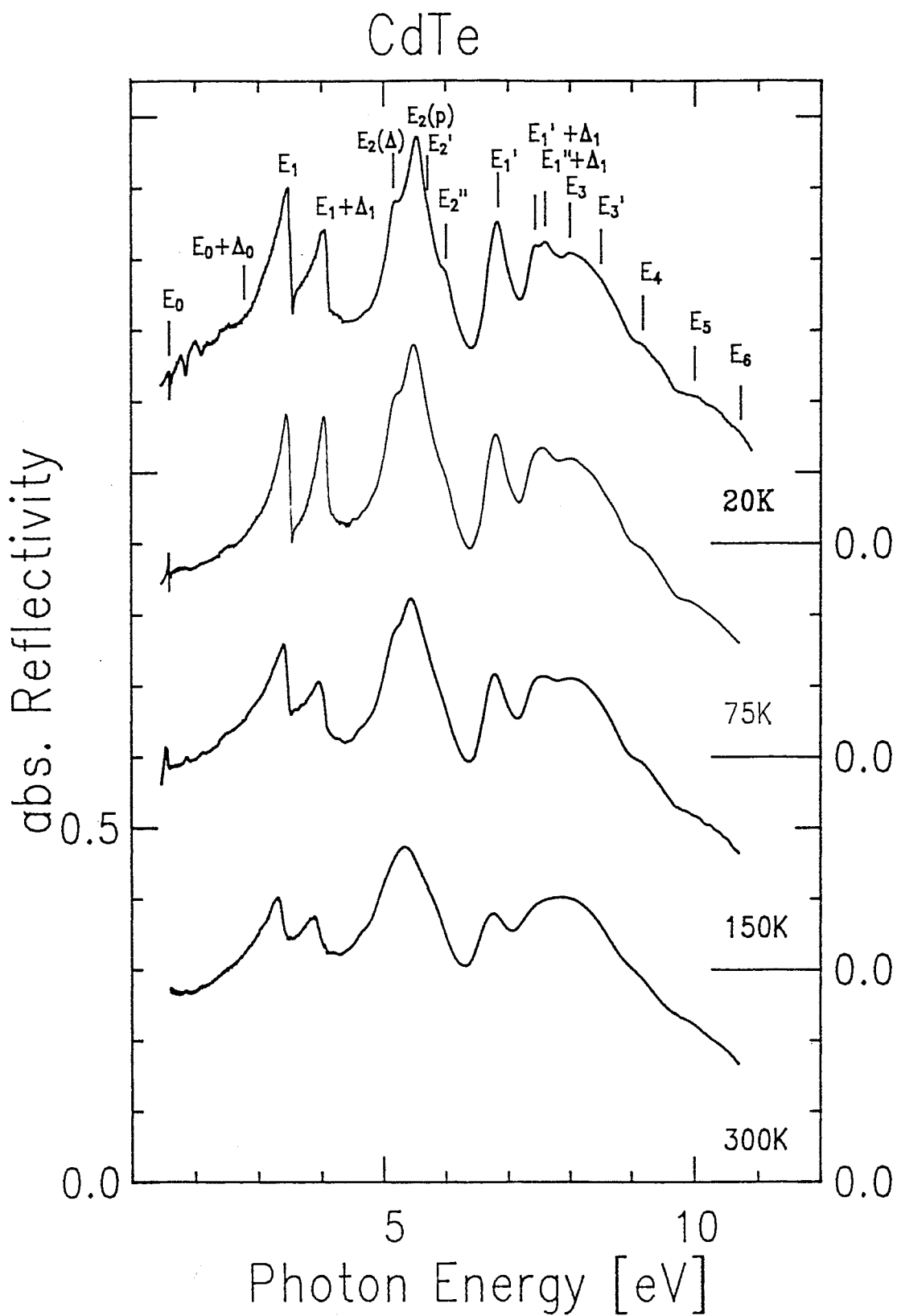


Fig. 5.3.b: Temperaturabhängiges Verhalten der Reflektivität von CdTe im Energiebereich von 1 bis 10 eV.

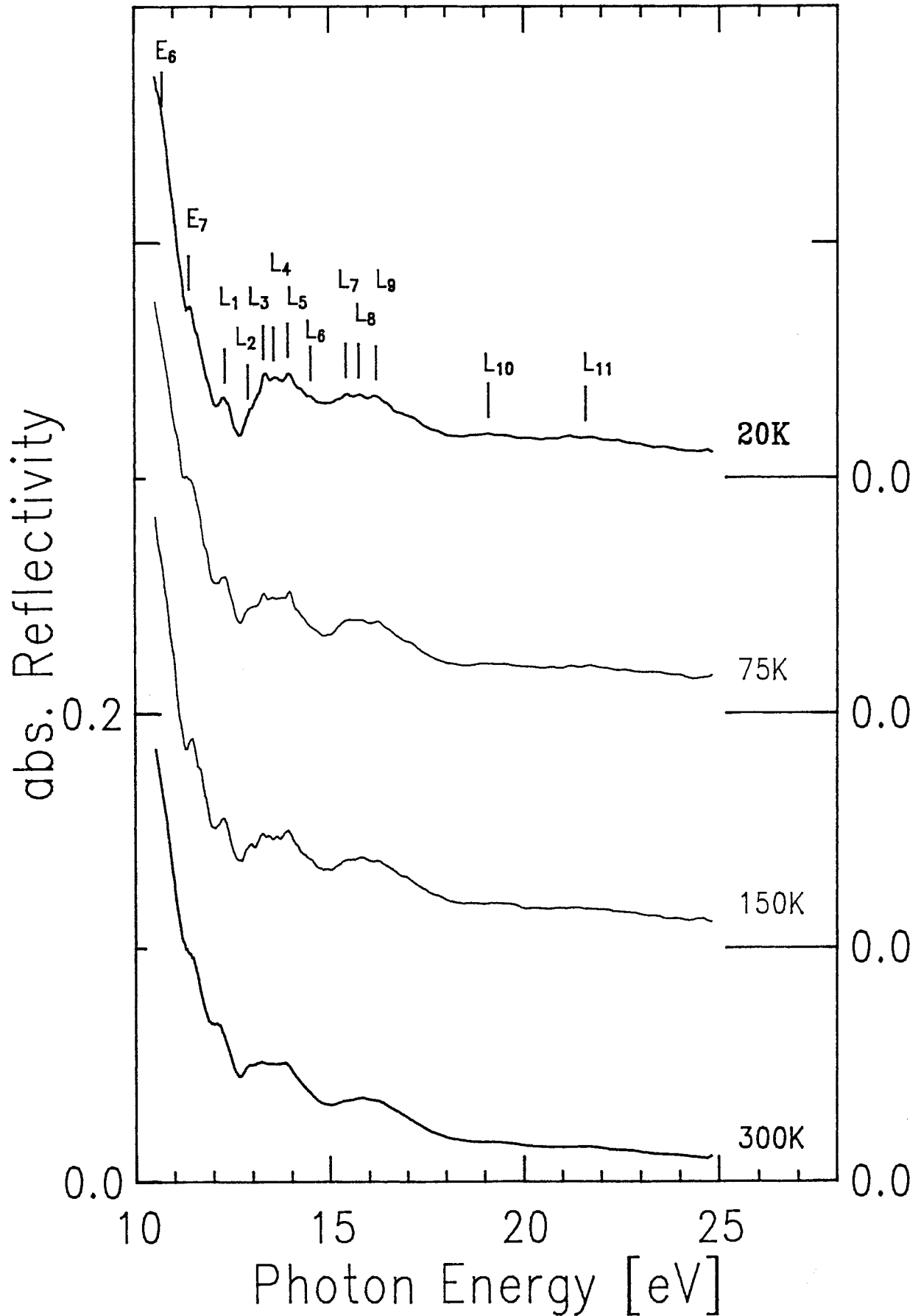
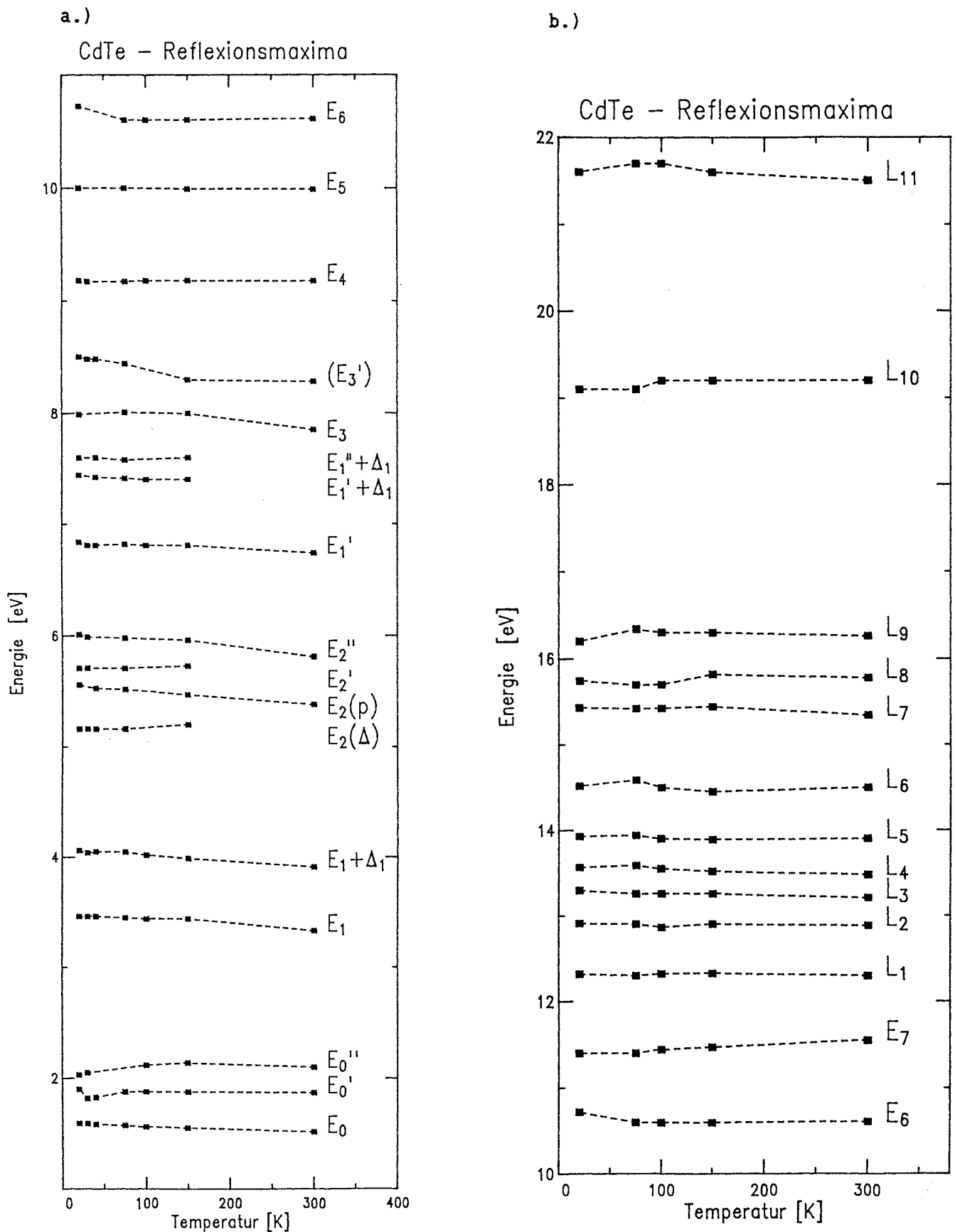


Fig. 5.3.c: Temperaturabhängiges Verhalten der Reflektivität von CdTe im Energiebereich von 10 bis 25 eV.



5.4 ϵ_2 -Spektren von CdTe

Bei einer quantenmechanischen Betrachtung der elektronischen Struktur eines Festkörpers findet sich ein direkter Zusammenhang zwischen den Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Valenz- und Leitungsbandzuständen und dem - optisch zugänglichen - Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten ϵ_2 . Bei Kenntnis der absoluten Reflektivität in einem sehr großen Energiebereich und der richtigen Extrapolation in den nicht bekannten Bereich kann über eine Kramers-Kronig-Transformation der Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten ϵ_2 bestimmt werden. In Kap. 1.2. ist dies am Beispiel des CdTe Reflexionsspektrum ($T = 300\text{K}$) gezeigt. Die hier vorgestellten ϵ_2 -Spektren werden alle in gleicher Weise mit dem Exponenten $n = 4$ extrapoliert und anschließend transformiert (siehe Kap. 1.2).

5.4.1 Interbandübergänge im Energiebereich 1 bis 10 eV

Abbildung Fig.5.4.1.a zeigt das temperaturabhängige Verhalten der ϵ_2 -Spektren für CdTe in Energiebereich von 1 bis 10 eV. Für den Vergleich der ermittelten Übergänge können die ellipsometrischen Messungen an CdTe von Lautenschlager et al. /Lau86/ in Energiebereich von 1 bis 6 eV bei 300K herangezogen werden, wobei über die ellipsometrisch gemessene E_2 -Region keine Aussage getroffen wurde /Lau85/. Tabelle 5.4.1.1 zeigt die aus den unterschiedlichen Meßverfahren gewonnenen Ergebnisse.

Übergang	C_p in eV /Lau85/	C_p in eV /diese Arbeit/	Temperaturgradient * 10^{-4} eV/K /diese Arbeit/
E_0	1.53	1.50	-3.14
E_1	3.36	3.32	-3.5
$E_1 + \Delta_1$	3.95	3.88	-5.3
Δ_1	0.59	0.56	≈ 0

C_p : Übergangsenergie an kritischen Punkten

Tab. 5.4.1.1: Vergleich der Energielagen von kritischen Punkten für CdTe bei 300K

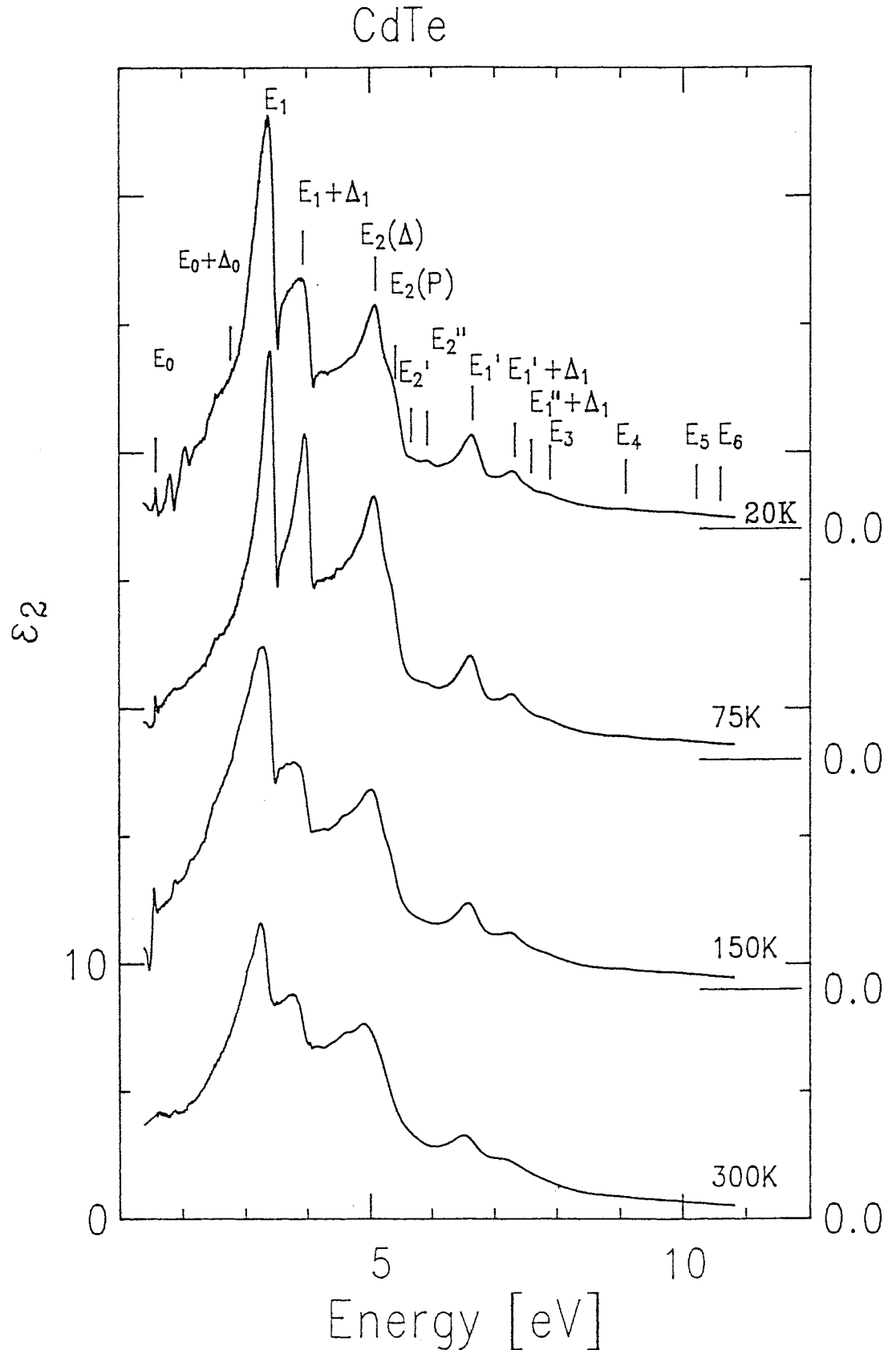


Fig 5.4.1.a: Temperaturabhängiges Verhalten der ϵ_2 -Spektren für CdTe im Energiebereich von 1 bis 10 eV. Die temperaturabhängige Verschiebung der aus diesen Spektren ermittelten Extrema ist in Abbildung Fig. 5.5.b (Bild a) zusammengefaßt.

E_2 - Region (4 bis 6 eV)

Die E_2 - Region zeigt bei $T = 300\text{K}$ ein breites großes Reflexionsmaximum. Bei abnehmender Temperatur wird deutlich, daß diese Struktur aus mindertens 4 Übergängen aufgebaut wird. In der Arbeit von M. Krause konnten die einzelnen Schultern bereits bei 115K beobachtet werden.

Bei der Berechnung des ϵ_2 -Spektrums aus den Reflexionsdaten zeigt sich eine große energetische Differenz des E_2 -Maximus im Reflexions- zum ϵ_2 -Spektrum, die nicht mit der Theorie im Einklang steht. Mit Hilfe des - im Kap. 1.2.2 beschriebenen - theoretisch mit Lorentzlinien aufgebauten ϵ_2 -Spektrums kann gezeigt werden, daß die Ursache der Differenz nur in einer falschen Zuordnung der Extrema liegt. Werden aus dem Satz der Lorentzlinien (siehe Fig 1.2.2.b) die Oszillatoren um 5.0 eV ($E_2(\Delta)$) entfernt und die Reflektivität mit dem reduzierten Parametersystem berechnet, so verschwindet das mit $E_2(p)$ bezeichnete Reflexionsmaximum.

Damit läßt sich zeigen, daß:

- der Hauptübergang dem $E_2(\Delta)$ der Übergang $\Delta_5 - \Delta_5$ ($k = (0.5, 0.5, 0.5)$) zugeordnet werden muß,
- das Hauptmaximum in der Reflexionsstruktur $E_2(p)$ einen schwächeren Übergang darstellt und im ϵ_2 -Spektrum nur als Schulter erkennbar ist
- die Maxima in der Reflektivität nicht mit einem Maxima im ϵ_2 -Spektrum korreliert sein müssen aber können.

Deutlich wird dieser Zusammenhang auch, wenn - wie in Fig. 5.4.1.b dargestellt - der temperaturabhängige Verlauf des Reflexions- und ϵ_2 -Spektrums direkt gegenübergestellt wird.

Mit den oben angegebenen Zuordnung ergibt sich eine energetische Differenz zwischen Reflexions- und ϵ_2 -Maxima von kleiner 0.1 eV . Dies ist in guter Übereinstimmung mit den in theoretischen Berechnungen /Che76/ und experimentell ermittelten energetischen Abweichungen zwischen Reflexions- und ϵ_2 -Strukturen /Lau85/.

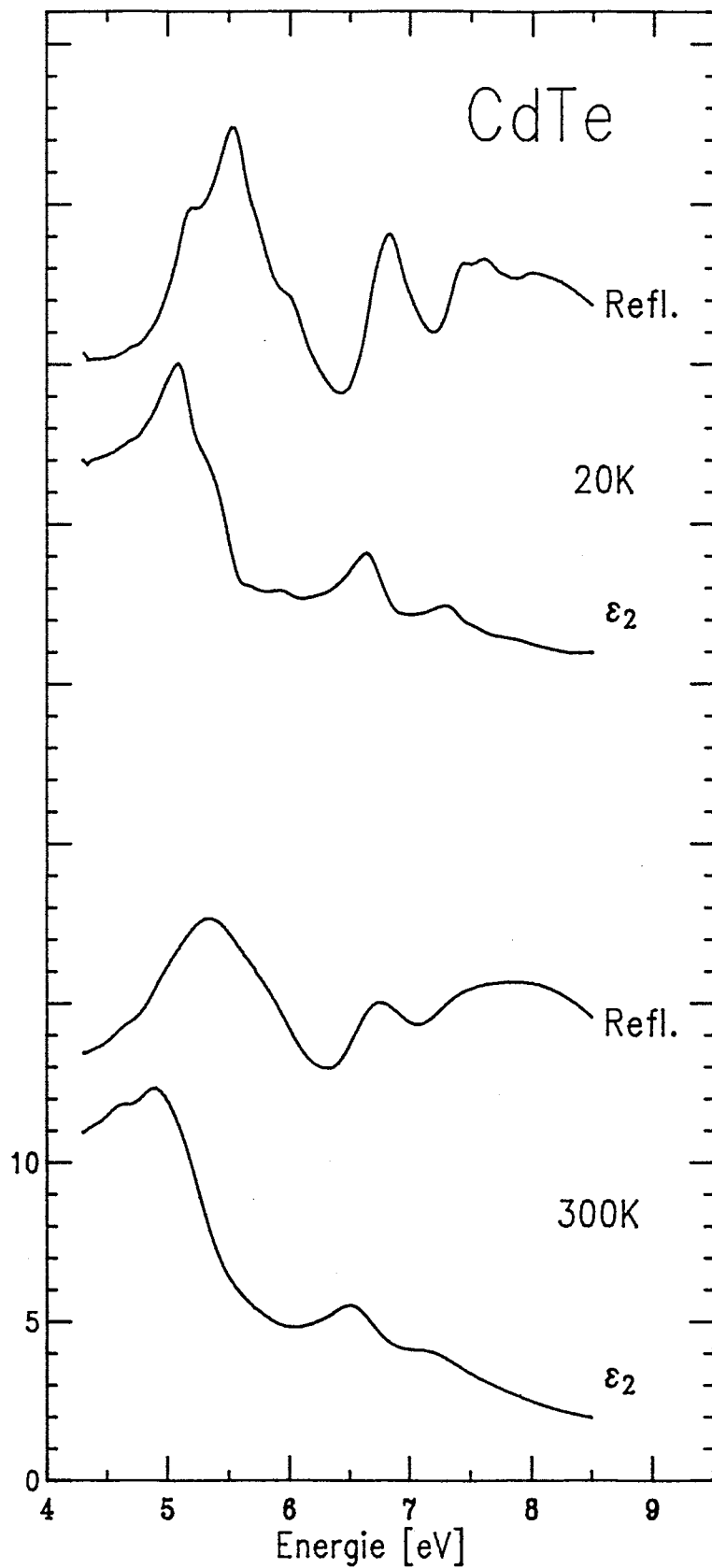
ϵ_2 und Reflektivität

Fig 5.4.1.b: Vergleich des Reflexions- und ϵ_2 -Spektrums in der ϵ_2 -Region bei unterschiedlichen Temperaturen.

Die 4 beobachteten Übergänge sind in Tabelle Tab. 5.4.1.2 zusammengefaßt. Die Zuordnung erfolgte über die zweite Ableitung (siehe Fig. 5.5.c). Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der energetischen Lagen mit den Messungen von M. Krause /Kra86/. Die Angaben beziehen sich auf $T=20\text{K}$.

Bezeichnung	Cp exp. /diese Arbeit/	Cp Theor. /Che76/	R theor. /Che76/	R exp. /diese Arbeit/	R exp. /Kra86/
$E_2(\Delta)$	5.10	5.14	5.16	5.16	5.20
$E_2(p)$	5.42	--	5.50	5.56	5.50
E_2'	5.68	5.58	5.68	5.71	5.75
E_2''	5.94	5.96	6.00	6.01	6.00

Cp: Übergangsenergie der kritischen Punkte \approx Imaginärteil der Dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$.

Tab. 5.4.1.2: Vergleich der experimentell bestimmten Werte mit den Daten nach /Che76/. Alle Angaben in eV.
(/Kra86/: $T=115\text{K}$, /Che76/: $T \approx 0\text{K}$, diese Arbeit: $T=20\text{K}$).

Die Lagen der einzelnen Übergänge im Energiebereich von 1 bis 10 eV sind in die Bandstruktur Abbildung Fig. 5.4.1.c eingezeichnet.

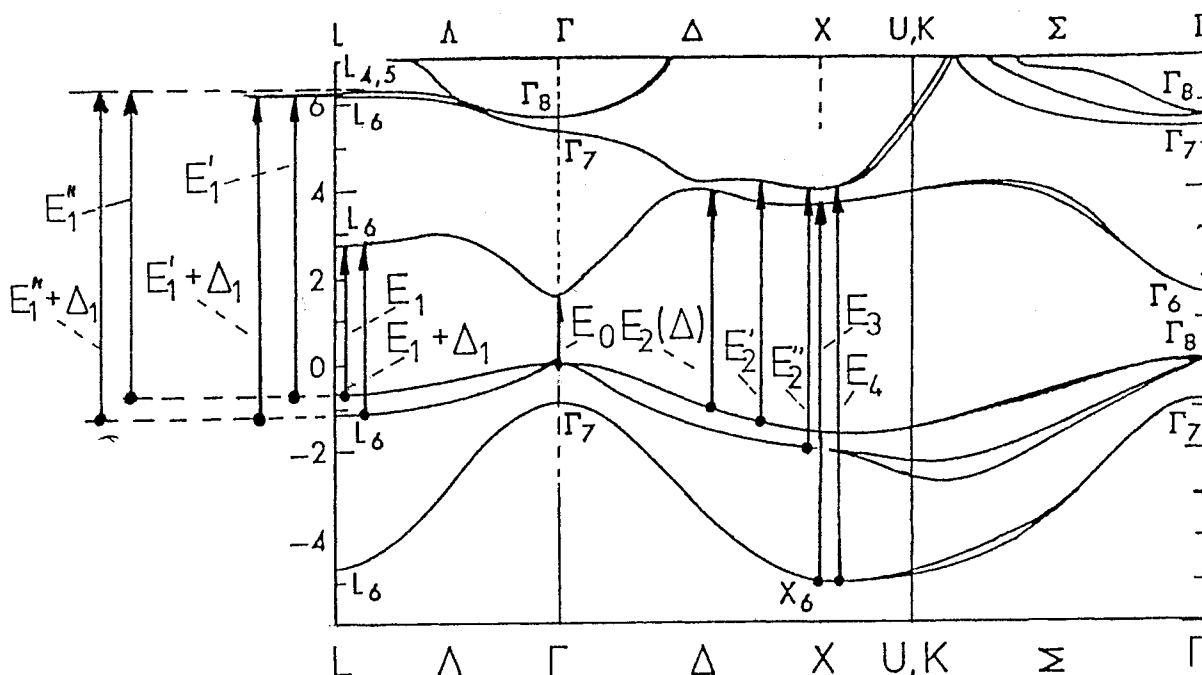


Fig 5.4.1.c: Bandstruktur von CdTe /Che76/ mit den eingezeichneten Interbandübergängen im Energiebereich bis 10 eV. $E_2(p)$ kann als Volumenübergang hier nicht eingezeichnet werden.

E_1' - Region (6 bis 8 eV)

Die E_1' -Region setzt sich aus den 3 experimentell gefundenen Strukturen:

$$\begin{aligned} E_1' & : L_{4,5} \rightarrow L_6, \\ E_1' + \Delta_1 & : L_6 \rightarrow L_6, \\ E_1'' + \Delta_1 & : L_6 \rightarrow L_{4,5} \end{aligned}$$

und dem nicht aufgelösten - jedoch vermuteten - Übergang

$$E_1'' : L_{4,5} \rightarrow L_{4,5}$$

zusammen.

Die 2. Ableitung (siehe Fig. 5.5.c, bild 2) zeigt, daß in der E_1' -Struktur der nicht aufgelöste Übergang E_1'' als Schulter angedeutet ist. Die energetischen Lagen sowie die Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_1 sind in der Tabelle 5.4.1.3 dargestellt.

Übergang	C_p in eV /diese Arbeit/	C_p in eV /Che76/	$R_{exp.}$ in eV /diese Arbeit/	$R_{theor.}$ in eV /Che76/
E_1'	6.66	6.83	6.84	6.91
$E_1' + \Delta_1$	7.32	7.36	7.44	--
$E_1'' + \Delta_1$	7.54	7.53	7.60	7.79
Δ_1	0.66	0.53	0.60	0.88
$\delta_d : L_6 \rightarrow L_{4,5}$	0.22	0.17	0.14	--

Tab. 5.4.1.3: Vergleich der theoretischen Werte /Che76/ mit den in dieser Arbeit ermittelten Werte in der E_1' -Region für CdTe.
(Experimentelle Werte: $T=20K$; Theoretische Werte: $T \approx 0K$).

Über die energetische Lage des vermuteten Übergang E_1'' kann keine genaue Aussage erfolgen.

Den Temperatureinfluß auf die energetischen Lagen der Übergänge in der E_2 - und E_1' - Region zeigt Fig. 5.4.1.d. Durch die Gegenüberstellung der Reflexions- und ε_2 -Maxima wird das unterschiedliche Temperaturverhalten der Reflexions- und ε_2 -Strukturen deutlich.

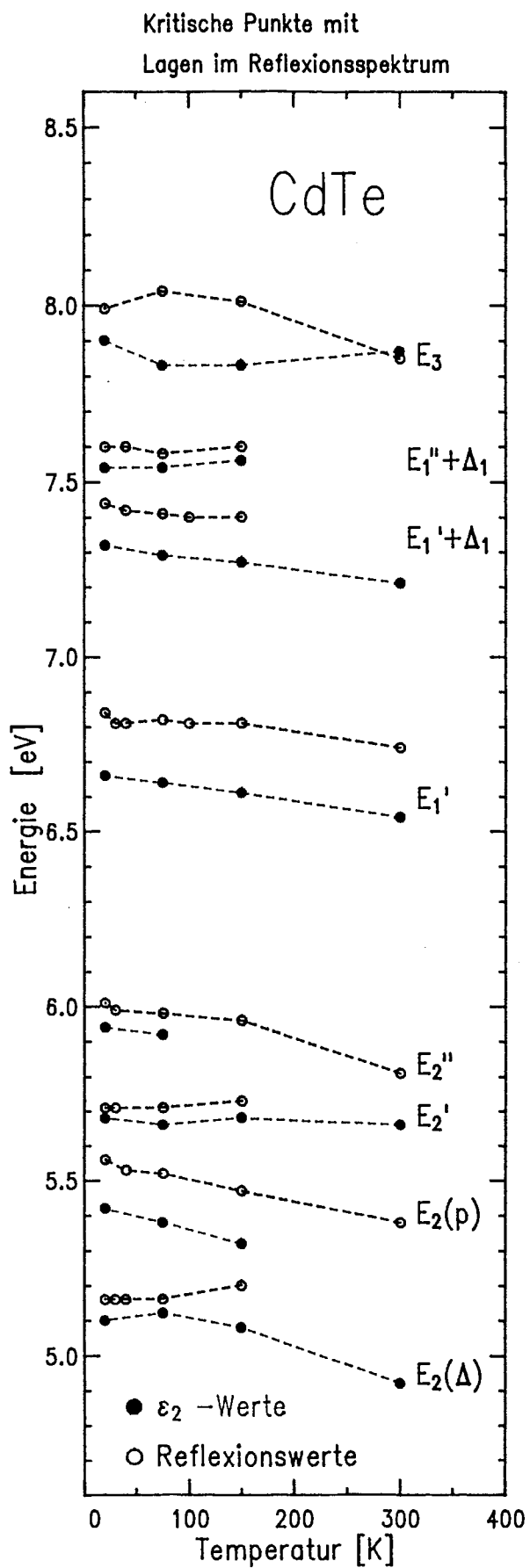


Fig 5.4.1.d: Vergleich des temperaturabhängigen Verhaltens von Reflexions- und ϵ_2 -Strukturen in der E_2 - und E_1' - Region.

E_3 bis E_7 - Strukturen (8 bis 11 eV)

E_3 bildet ein relatives Reflexionsmaximum, in dessen höherenergetischen Abfall die Schultern E_4 bis E_7 liegen.

Im ϵ_2 -Spektrum sind, mit Ausnahme von E_7 , alle Strukturen nur extrem schwach ausgebildet, und nur mittels der 2. Ableitung zu erkennen.

Die Zuordnung der Strukturen

E_3 (Übergang: $X_6 \rightarrow X_6$: $k=(1,0,0)$) und

E_4 (Übergang: $X_6 \rightarrow X_7$: $k=(1,0,0)$)

wurde aus der Arbeit von M. Krause /Kra86/ übernommen, wobei sich eine gute Übereinstimmung der energetischen Lagen ergab. Für die E_3 -Struktur wird ein Punkt allgemeiner Lage angenommen /Kra86/. Die von M. Krause angegebene energetische Lage liegt jedoch um etwa 0.2 eV über der hier ermittelten Lage. Die Strukturen E_6 und E_7 konnten bei M. Krause, bedingt durch eine Meßlücke, nicht nachgewiesen werden.

Die Schwierigkeit die genaue energetische Lage von Schultern zu ermitteln und ihre Verschiebung mit der Temperatur zu verfolgen, erfordert eine genaue Linienformuntersuchung, damit genauere Aussagen über Lage und Form der Übergänge gemacht werden können. Eine Linienformanalyse befindet sich gerade im Aufbau, so daß eine Zusammenfassung von Ergebnissen der hier angedeuteten Übergänge in der Arbeit von T. Bitzer /Bit88/ erfolgen wird.

Die vorläufige Zuordnung ist in Fig. 5.5.a dargestellt.

5.4.2 Interband- und Rumpfniveauübergänge im Energiebereich von 10 bis 25 eV.

In Fig. 5.4.2.a ist der temperaturabhängige Verlauf des ϵ_2 -Spektrums im Energiebereich ab 10 eV dargestellt. Für die ermittelten Übergänge wurde die von M. Krause eingeführte Notation (L_1 bis L_5) übernommen und weitergeführt.

Die Zuordnungen sowie die energetischen Lagen der Reflexions- und ϵ_2 -Werte sind in Abbildung Fig. 5.5.a (unterer Teil) zusammengefaßt. Den Temperaturverlauf der einzelnen Extrema zeigt Abbildung Fig. 5.5.b (Bild b).

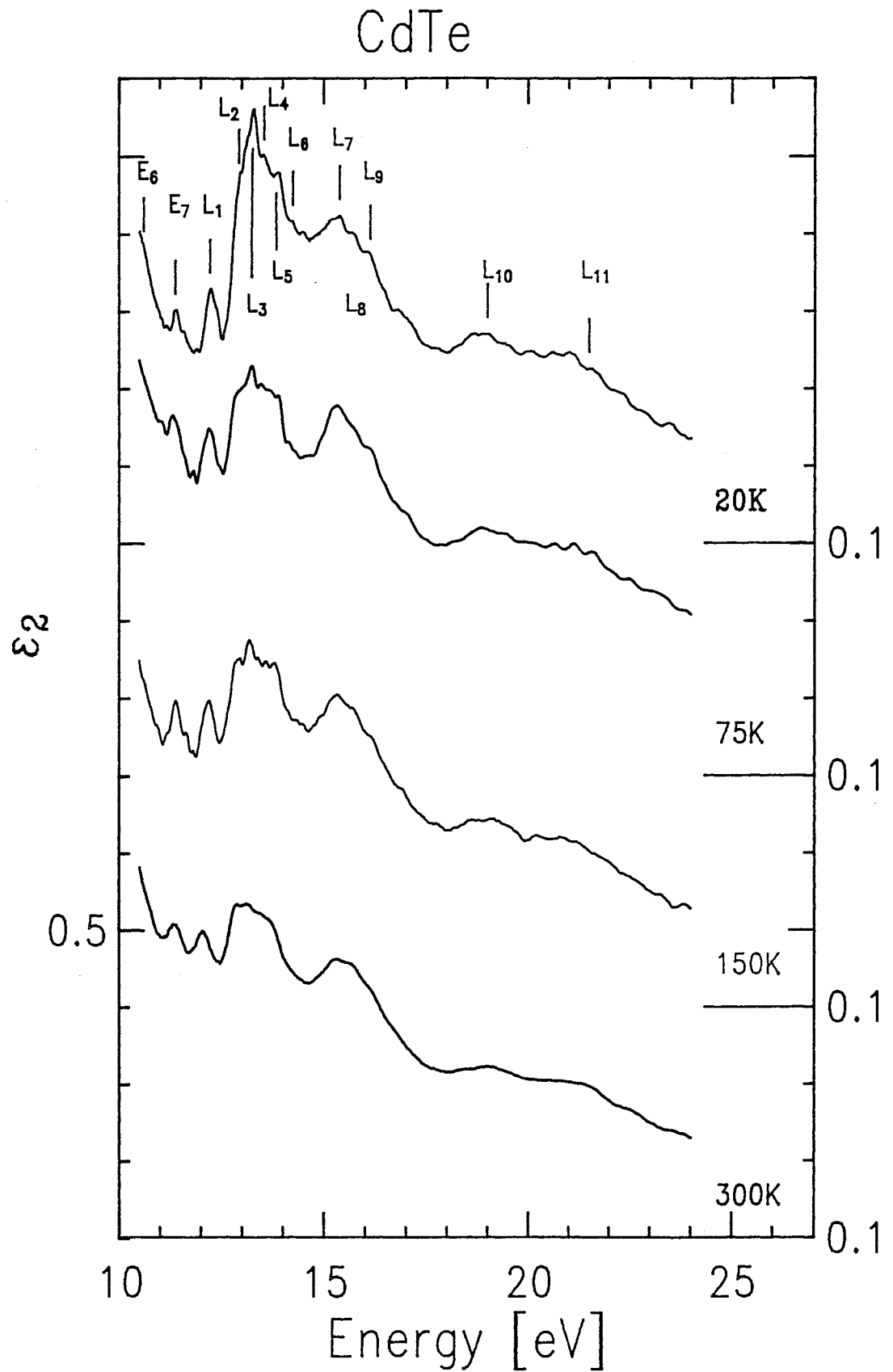


Fig 5.4.2.a: Temperaturabhängigkeit der ϵ_2 -Spektren für CdTe im Energiebereich von 10 bis 25 eV.

Als Interbandübergänge werden die Strukturen

L_1 : (L_6 -- L_6) und

L_8 : (L_6 -- $L_{4,5}$) geordnet.

Allen anderen Strukturen werden Übergängen vom Cd 4d Niveau ins Leitungsband zugeordnet. Für die Lage des Cd 4d Niveaus werden die von Taniguchi et al. /Tan86/ mittels Photoemission bestimmten Werte angenommen:

Cd $4d_{5/2}$: 10.0 eV; Cd $4d_{3/2}$: 10.65 eV

Die Zuordnung der Struktur L_2 zum Übergang von X_6 nach X_6 /Kra86/ würde für die hier ermittelten Werte zu einem tiefer liegenden X_6 -Leitungsband führen, so daß der Übergang vom Cd $4d_{5/2}$ nach L_6 besser für L_2 zutrifft. Die Zuordnungen von L_3 und L_4 zu Übergängen vom Cd 4d Niveau nach Δ_5 /Kra86/ wurde nicht übernommen. Eine Zuordnung zu Übergängen von den Cd 4d Niveaus an die L- und X-Punkte in der Leitungsbandstruktur ergibt eine bessere energetische Übereinstimmung der gemessenen Maxima mit Übergängen in der Bandstruktur.

Aus der Zuordnung L_2 und L_4 zu den Übergängen:

L_2 : Cd $4d_{5/2}$ -- L_6 : 12.95 eV

L_4 : Cd $4d_{3/2}$ -- L_6 : 13.55 eV

ergibt sich eine Spin Bahn Aufspaltung des Cd 4d Niveaus von 0.60 eV.

Zu erwähnen ist hier die Arbeit von Kisiel et al. /Kis86/ an CdTe im Energiebereich von 4 bis 25 eV (Raumtemperaturmessungen). Die Cd 4d-Niveaus werden auch bei 10.00 eV (Cd $4d_{5/2}$) unterhalb des Valenzbandmaximums angenommen. Für die Zuordnungen der erhaltenen Reflexionsstrukturen wird eine Bandstrukturberechnung nach der lokalen Pseudopotential Methode /Che73/ verwendet, die keine Spin-Bahn-Wechselwirkung berücksichtigt. Für die gemessenen Strukturen ergeben sich dadurch andere Zuordnungen, sodaß in dieser Arbeit nicht darauf zurückgegriffen wird.

5.5 Zusammenfassende Darstellungen der Ergebnisse für CdTe

In den nachfolgenden Seiten werden die erhaltenen Ergebnisse zusammenfassend für den CdTe - Kristall im Energiebereich von 1 bis 25 eV dargestellt.

Fig. 5.5.a: Zuordnungstabelle der Übergänge mit den gemessenen Reflexions- und bestimmten ϵ_2 - Werten. Für die hochenergetischen Strukturen ergeben sich teilweise mehrere mögliche Zuordnung. Die in Klammern angegeben Übergangsenergie beziehen sich auf die Berechnung nach /Che76/.

Fig. 5.5.b: Temperaturabhängiges Verhalten der ϵ_2 -Strukturen:
 a.) im Energiebereich bis 10 eV;
 b.) Energiebereich 10 bis 25 eV

Fig. 5.5.c: Bestimmung der energetische Lage von Übergängen mittels der 2. Ableitung. In den vier Bilder ist jeweils ein Ausschnitt des ϵ_2 -Spektrums für CdTe bei 20K mit der 2. Ableitung dargestellt.

Übersichtsdarstellung der optischen Konstanten für CdTe bei 300K im Energiebereich von 1 bis 20 eV:

Fig. 5.5.d: a.) absolute Reflektivität $R(\omega)$ -- gemessen.
 b.) Phase $\Theta(\omega)$, bestimmt über eine Kramers-Kronig-Transformation.

Fig. 5.5.e: a.) Imaginärteil der Dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$.
 b.) Realteil der Dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$.

Fig. 5.5.f: a.) Brechungsindex $n(\omega)$.
 b.) Extinktionskoeffizient $k(\omega)$.

Benennung	Theorie ¹⁾					Experiment				Anmerkungen		
	Band - übergang	k-Koordinaten	Typ	R	ϵ_2	R_{max}		ϵ_2				
						300K	20K	300K	20K			
E_0	$\Gamma_7^v \text{ --- } \Gamma_7^c$	0.0 ; 0.0 ; 0.0	M_0	1.65	1.59	1.52	1.594	1.50	1.59	¹⁾ Angaben nach Chelikowsky /Che76/. Zuordnung von $E_3 - E_5$ nach M. Krause /Kra86/. Neben den $E_1'+\Delta_1$ wird der Übergang $E_1''+\Delta_1$ neu zugeordnet. Bei 8.3 eV (20K) wird eine weitere Schulter vermutet.		
E_0'							1.87	1.83	1.88		1.82	
E_0''								2.10	2.03		2.12	2.07
$E_0+\Delta_0$	$\Gamma_8^v \text{ --- } \Gamma_7^c$	---						2.84	2.78		-	2.85
E_1	$L_{4,5}^v \text{ --- } L_6^c$	0.5 ; 0.5 ; 0.5	M_1	3.49	3.47	3.33	3.46	3.32	3.42			
$E_1+\Delta_1$	$L_6^v \text{ --- } L_6^c$	---	M_1	4.04	4.00	3.91	4.06	3.88	4.03			
$E_2(\Delta)$	$\Delta_5^v \text{ --- } \Delta_5^c$	0.5 ; 0.0 ; 0.0	M_0	5.16	5.14	-	5.16	4.92	5.10			
$E_2(p)$	Volumen	0.75;0.25;0.25	-	5.50	-	5.38	5.56	-	5.42			
E_2'	$\Delta_5^v \text{ --- } \Delta_5^c$	0.75;0.0 ; 0.0	-	5.68	5.58	-	5.71	5.66	5.68			
E_2''	$\Delta_5^v \text{ --- } \Delta_5^c$	1.0 ; 0.0 ; 0.0	M_1	6.00	5.96	5.81	6.01	-	5.94			
E_1'	$L_{4,5}^v \text{ --- } L_6^{2c}$	0.5 ; 0.5 ; 0.5	M_1	6.91	6.83	6.74	6.84	6.54	6.66			
$E_1'+\Delta_1$	$L_6^{3v} \text{ --- } L_6^{2c}$	---	-	-	7.36	-	7.44	7.21	7.32			
$E_1''+\Delta_1$	$L_6^{3v} \text{ --- } L_{4,5}^c$	0.5 ; 0.5 ; 0.5	M_1	7.79	7.53	-	7.60	-	7.54			
E_3	$X_6^{2v} \text{ --- } X_6^c$	1.0 ; 0.0 ; 0.0	-	-	8.53	7.85	7.99	7.87	7.90			
E_4	$X_6^{2v} \text{ --- } X_7^c$	1.0 ; 0.0 ; 0.0	-	-	9.00	9.18	9.18	8.94	9.09			
E_5						9.99	10.00	-	10.22			
E_6	$L_6^{2v} \text{ --- } L_6^{2c}$			-	10.91	10.61	10.72	10.76	10.60			
E_7	$L_6^{2v} \text{ --- } L_{4,5}^c$			-	11.08	11.55	11.40	11.35	11.37			
L_1	$L_6^v \text{ --- } L_6^c$	(12.46 eV)				12.30	12.32	12.07	12.22	Benennung $L_1 - L_5$ nach /Kra86/, jedoch mit erweiterter Zuordnung für $L_3 - L_5$. Die Werte in Klammern nach /Che76/. Cd 4d-Niveaus nach /Tan86/.		
L_2	$X_6^v \text{ --- } X_6^c$	(12.60 eV)	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } L_6^c$	(12.82 eV)		12.88	12.91	12.81	12.95			
L_3	$X_6^v \text{ --- } X_7^c$	(13.07 eV)	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } \Delta_5^c$	(13.70 eV)		13.21	13.30	13.16	13.30			
L_4	Cd $4d_{3/2} \text{ --- } L_6^c$	(13.47 eV)	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } X_6^c$	(13.48 eV)		13.48	13.57	-	13.55			
L_5	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } X_7^c$	(13.95 eV)	Cd $4d_{3/2} \text{ --- } X_6^c$	(14.13 eV)		13.90	13.93	13.80	13.92			
L_6	Cd $4d_{3/2} \text{ --- } X_7^c$	(14.60 eV)	Cd $4d_{3/2} \text{ --- } \Delta_5^c$	(14.30 eV)		14.50	14.52	-	14.24			
L_7	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } \Gamma_7^c$	(15.36 eV)	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } \Gamma_8^c$	(15.61 eV)		15.34	15.43	15.29	15.38			
L_8	$L_6^v \text{ --- } L_{4,5}^c$	(15.99 eV)	$L_6^v \text{ --- } L_6^{2c}$	(15.82 eV)		15.78	15.75	15.72	15.72			
L_9	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } L_6^c$	(16.18 eV)	Cd $4d_{5/2} \text{ --- } L_{4,5}^c$	(16.35 eV)		16.26	16.20	16.20	16.12			
L_{10}						19.20	19.10	19.10	19.00			
								-	19.47			
L_{11}						21.50	21.60	21.50	21.50			

Zuordnungstabelle der Übergänge für CdTe.
/Experimentelle Werte aus dieser Arbeit/

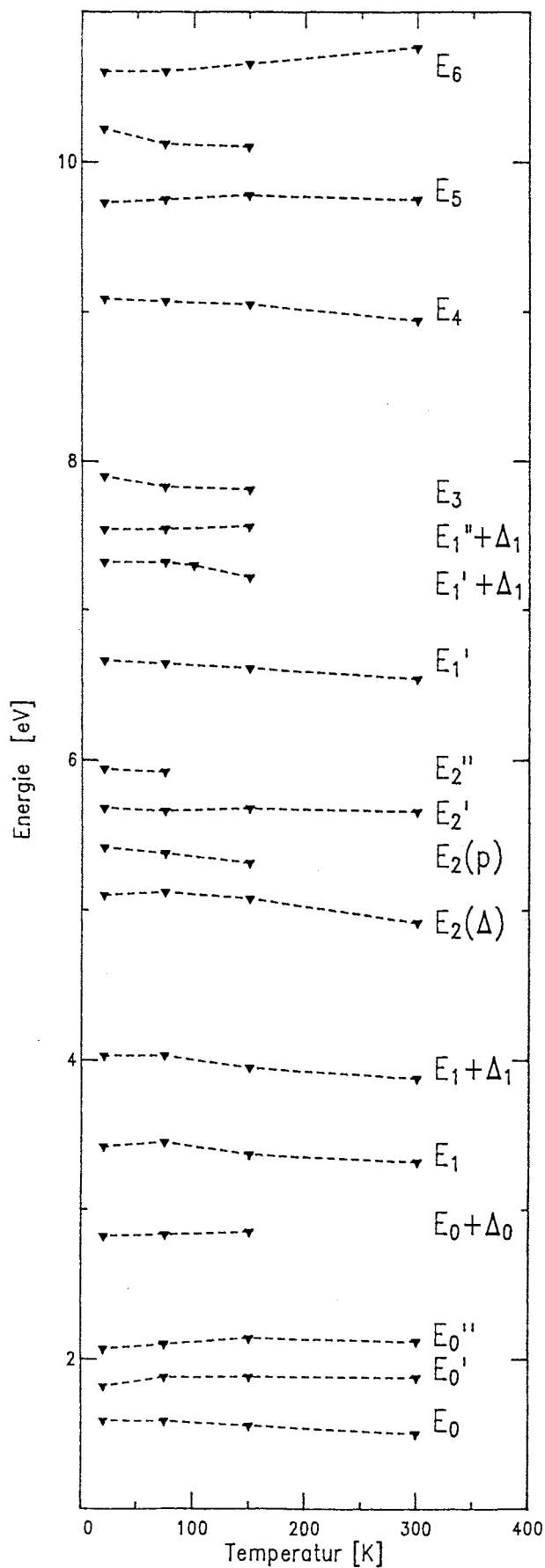
Fig. 5.5.a:

Fig. 5.5.b:

Temperaturabhängiges Verhalten der ϵ_2 -Strukturen

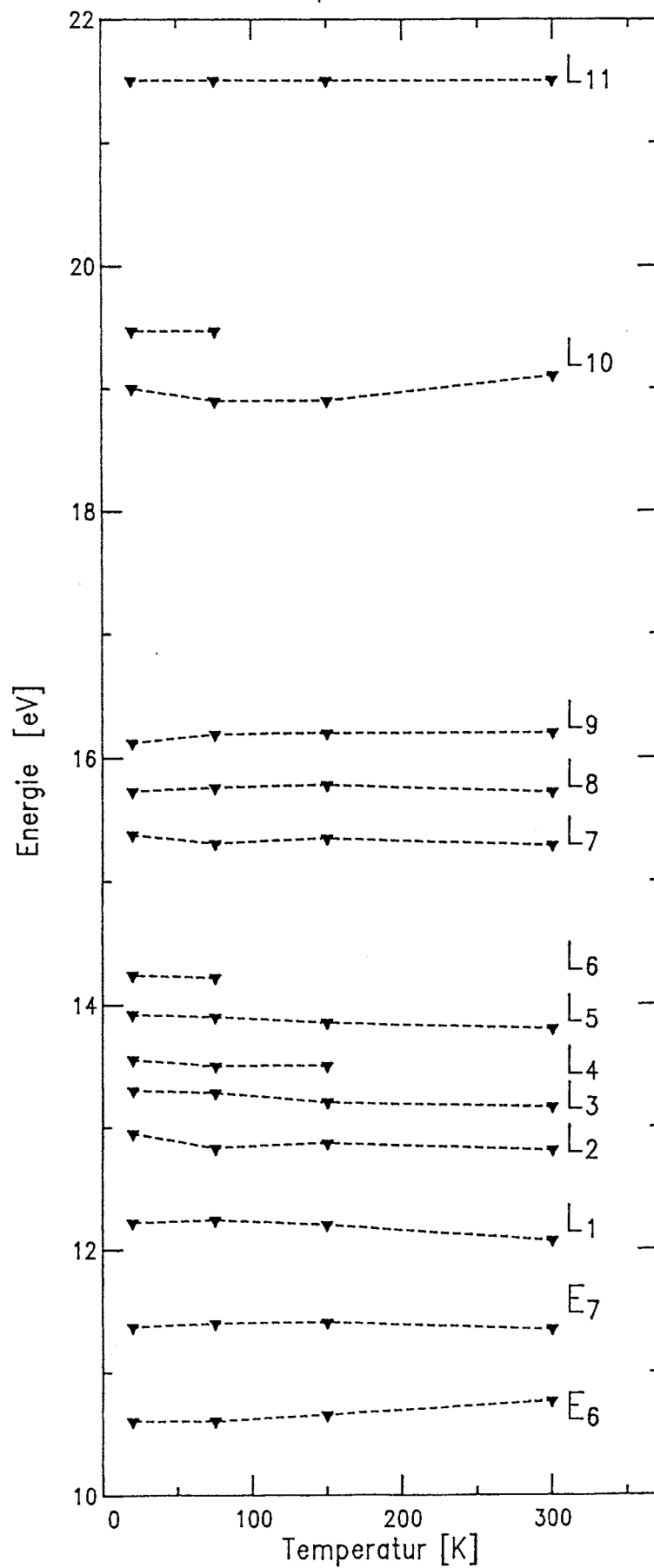
a.) Energiebereich bis 10 eV

CdTe - Epsilon2



b.) Energiebereich 10 bis 25 eV

CdTe - Epsilon2



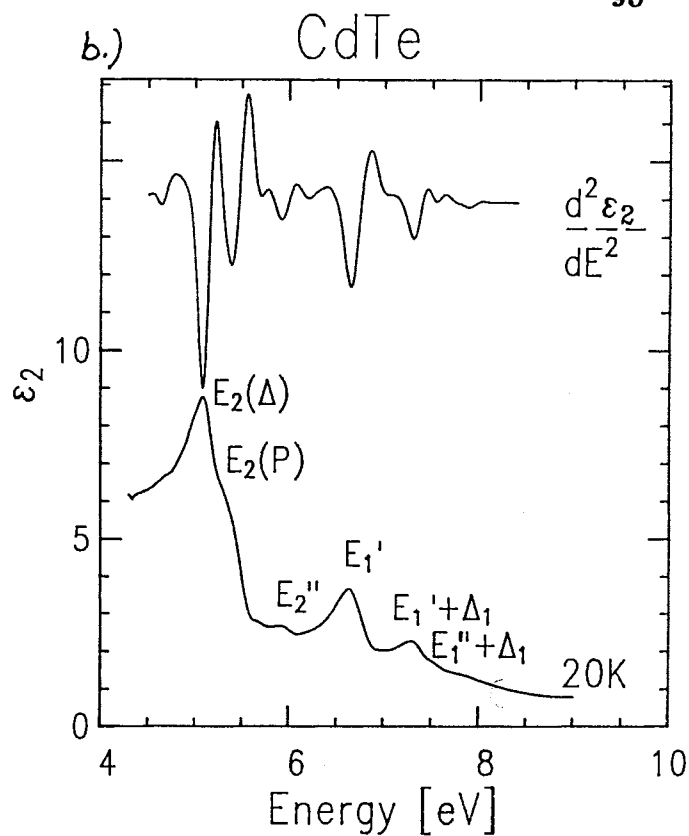
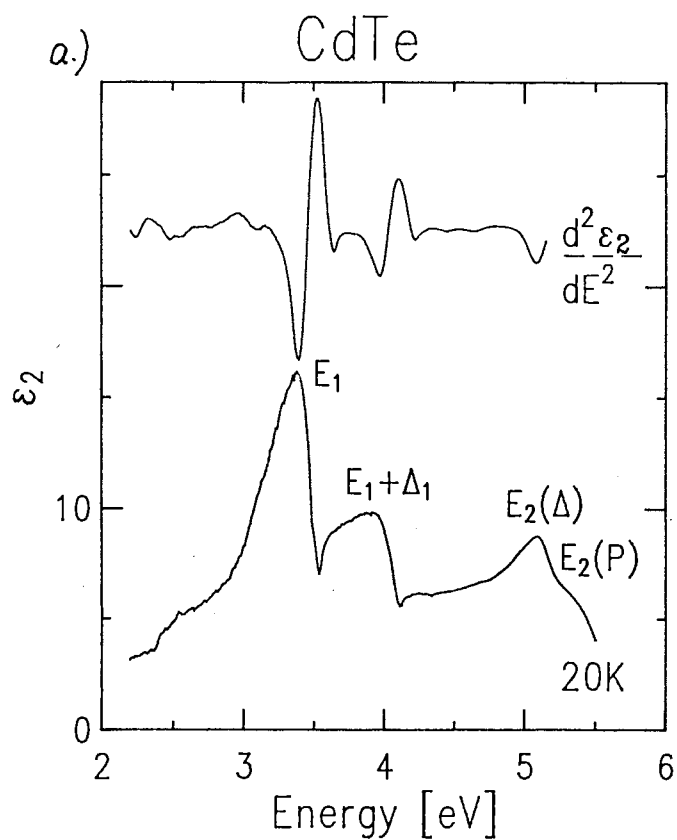
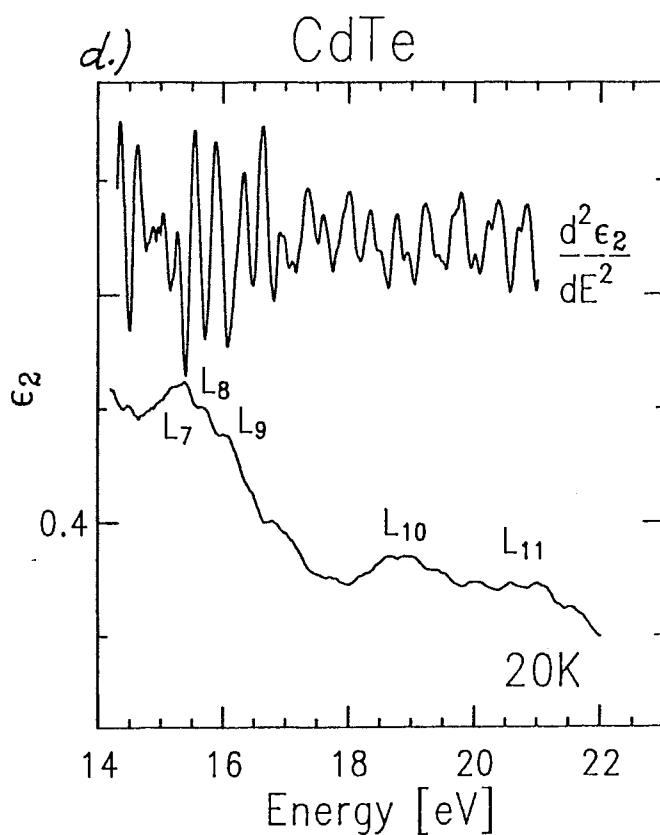
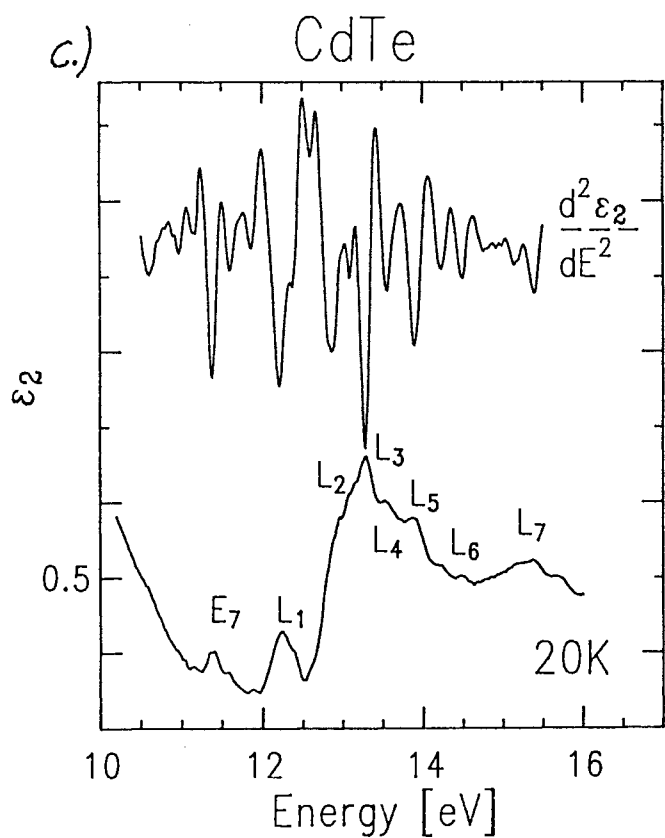


Fig. 5.5.c: Bestimmung der energetische Lage von Übergängen mittels der 2. Ableitung. In den vier Bilder ist jeweils ein Ausschnitt des ϵ_2 -Spektrums für CdTe bei 20K mit der 2. Ableitung dargestellt.



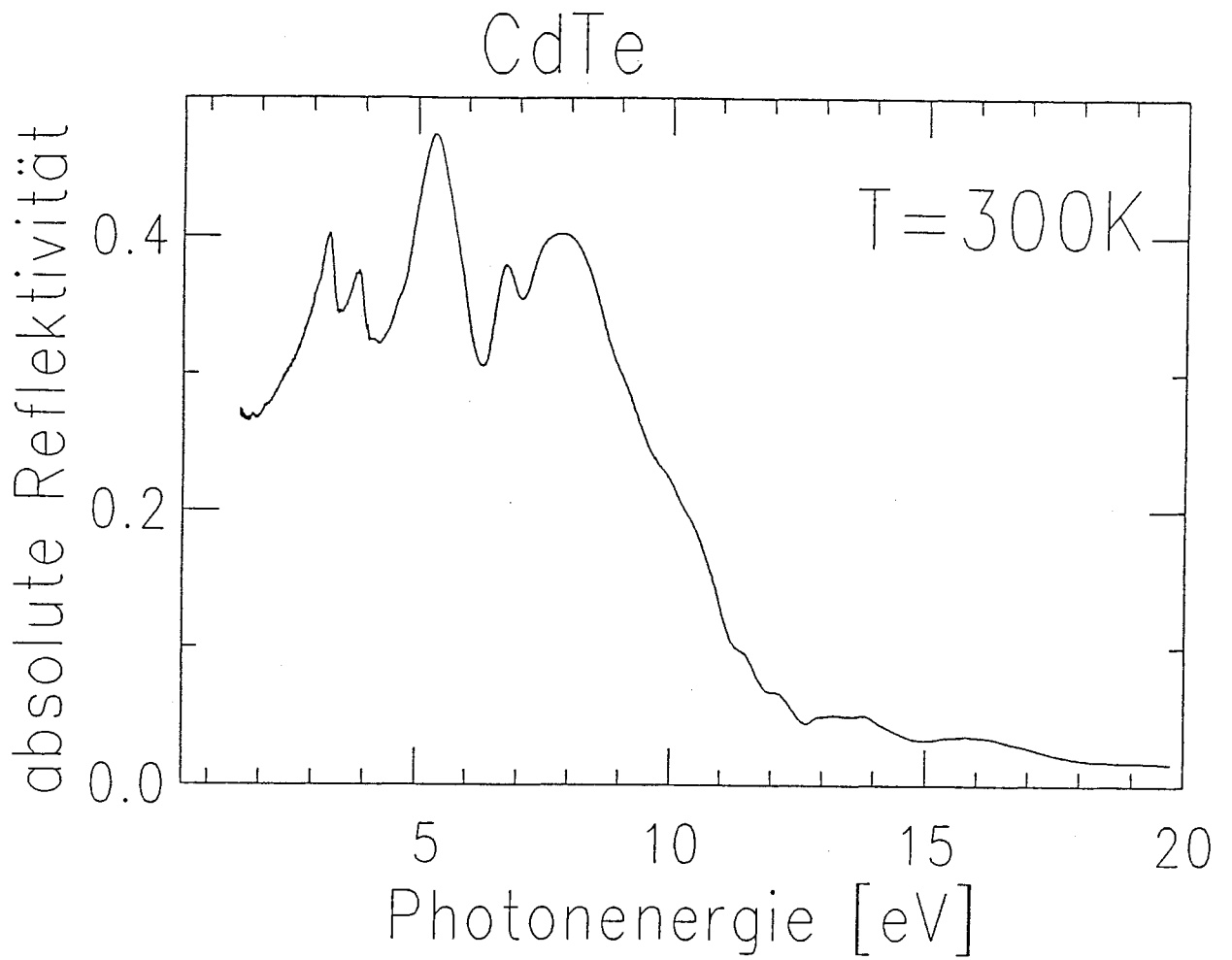
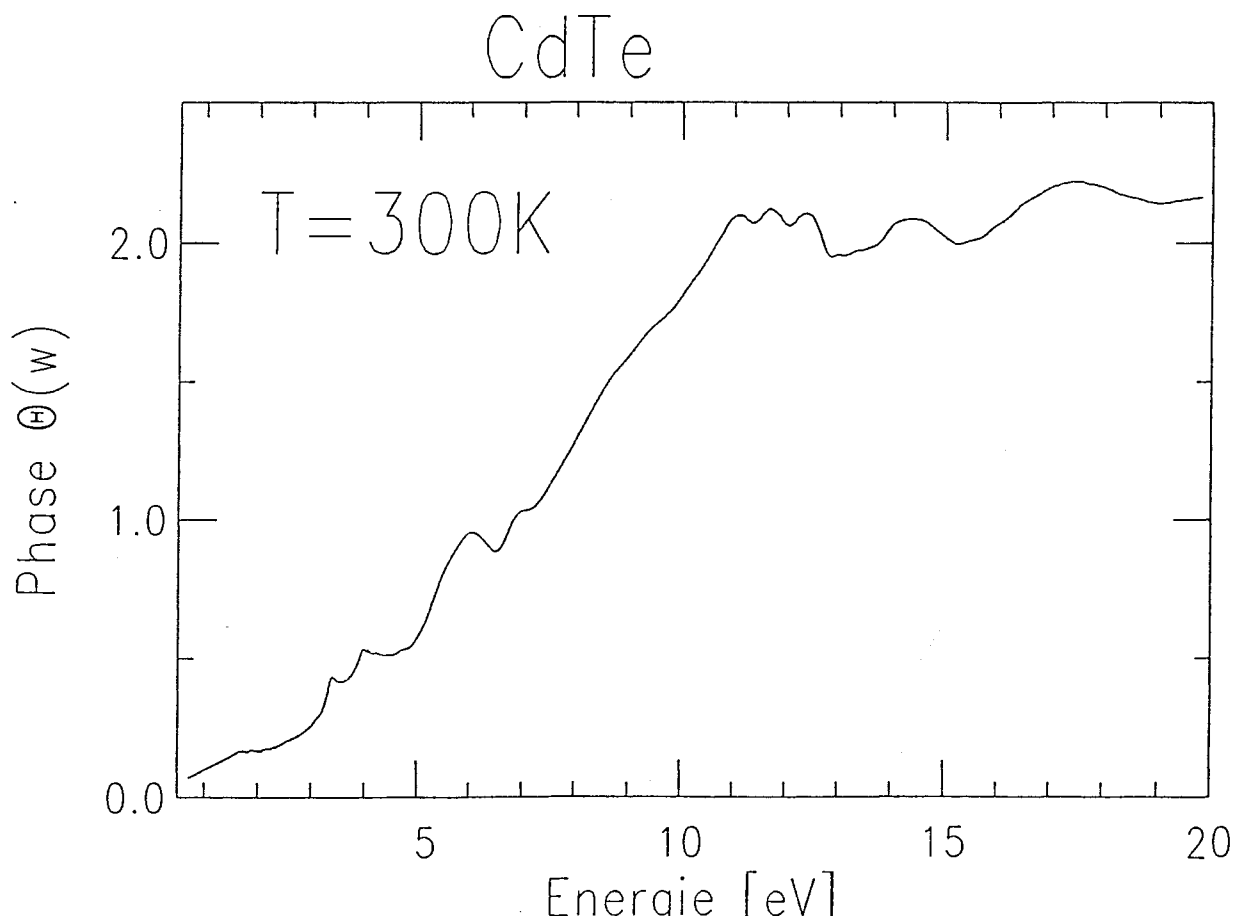


Fig. 5.5.d: a.) absolute Reflektivität $R(\omega)$ — gemessen.
 b.) Phase $\Theta(\omega)$, bestimmt über eine Kramers-Kronig-Transformation.



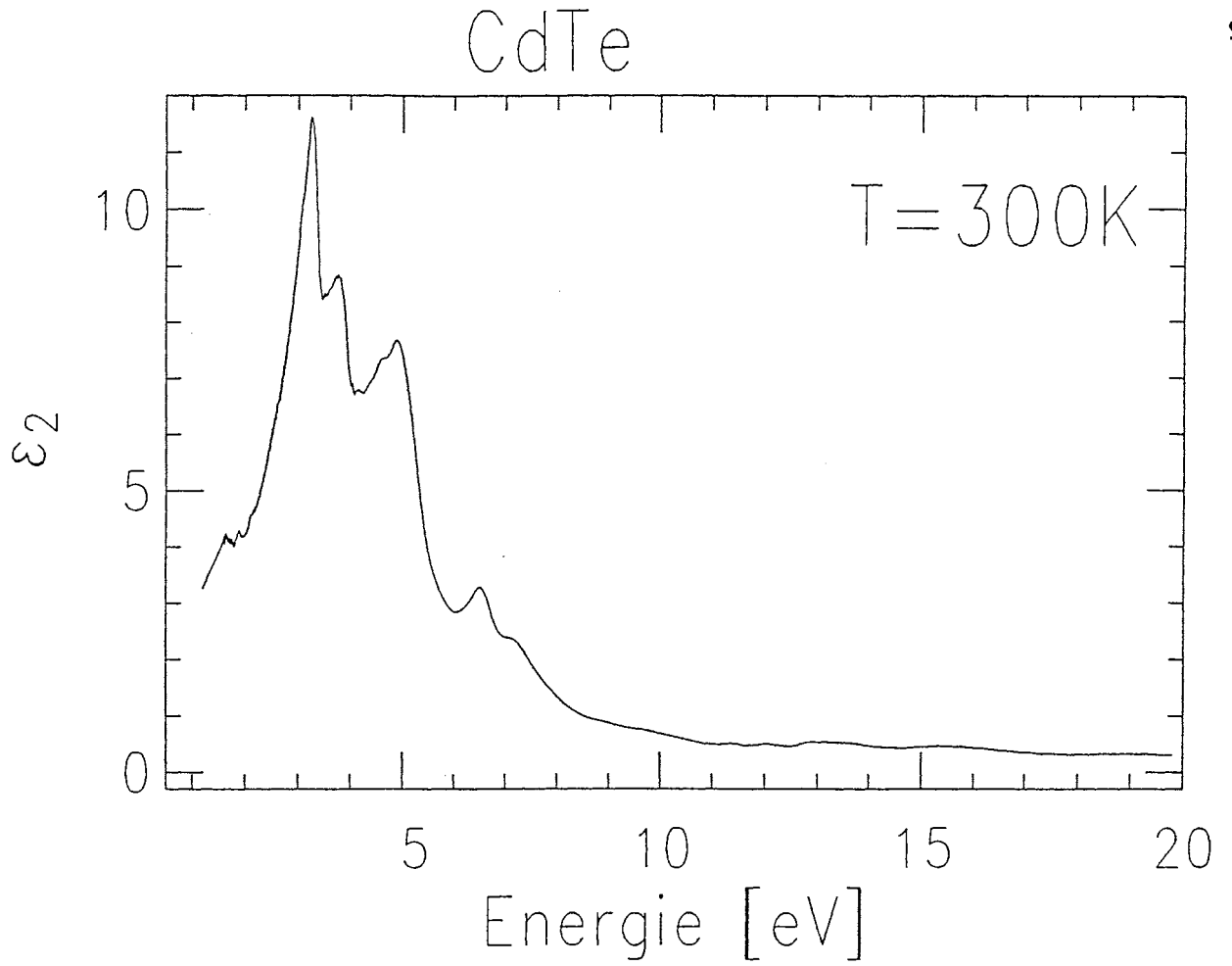
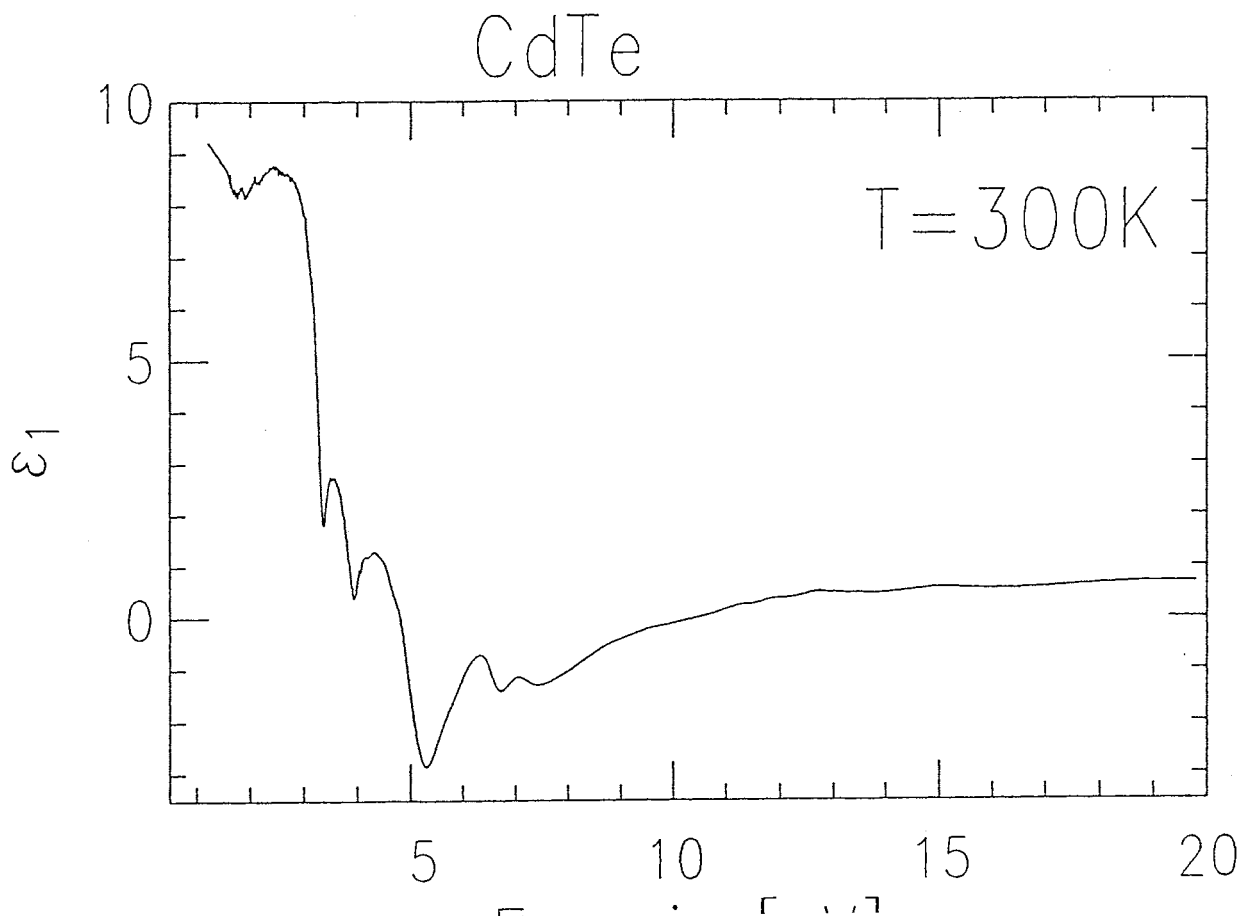


Fig. 5.5.e: a.) Imaginärteil der Dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$.
b.) Realteil der Dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$.



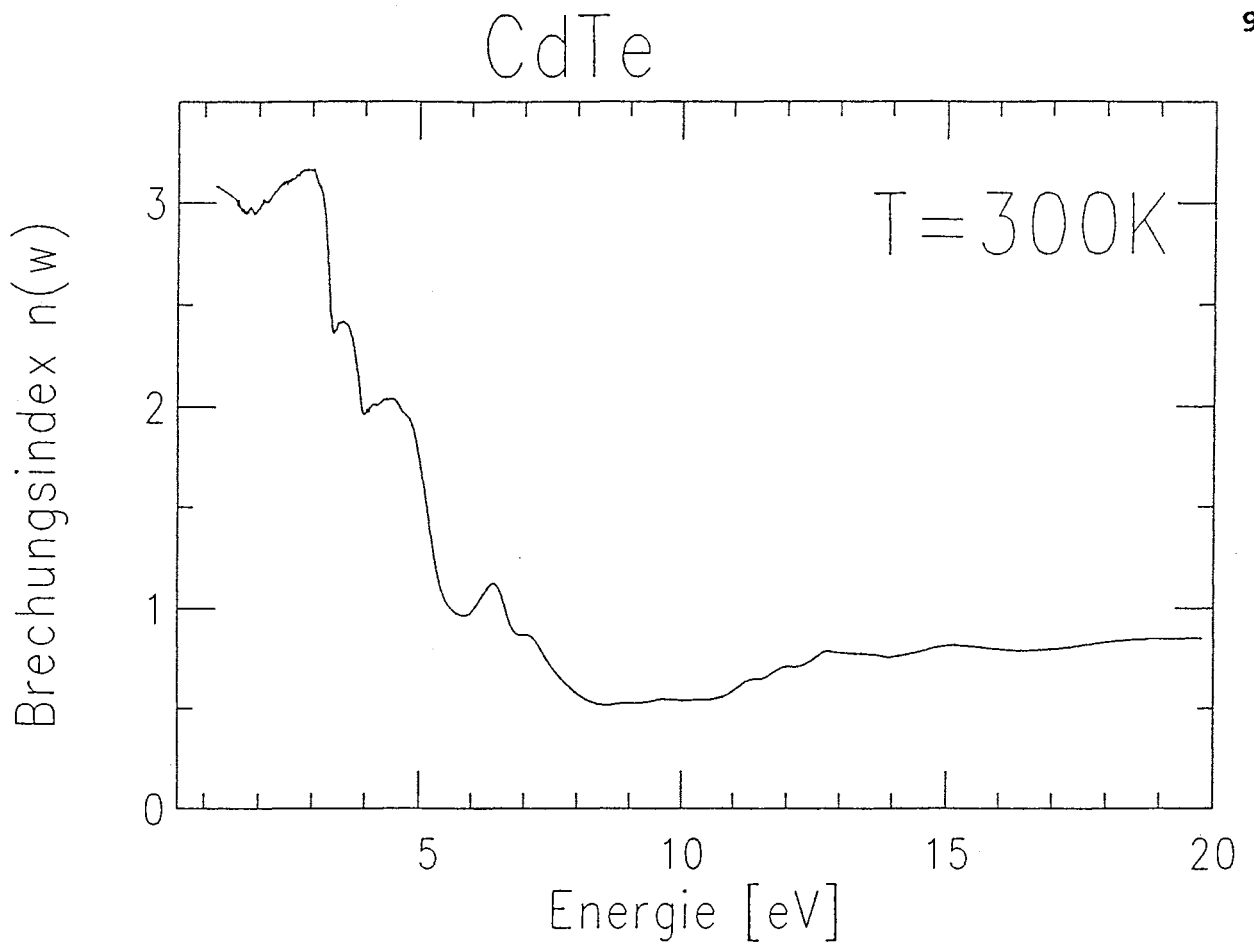
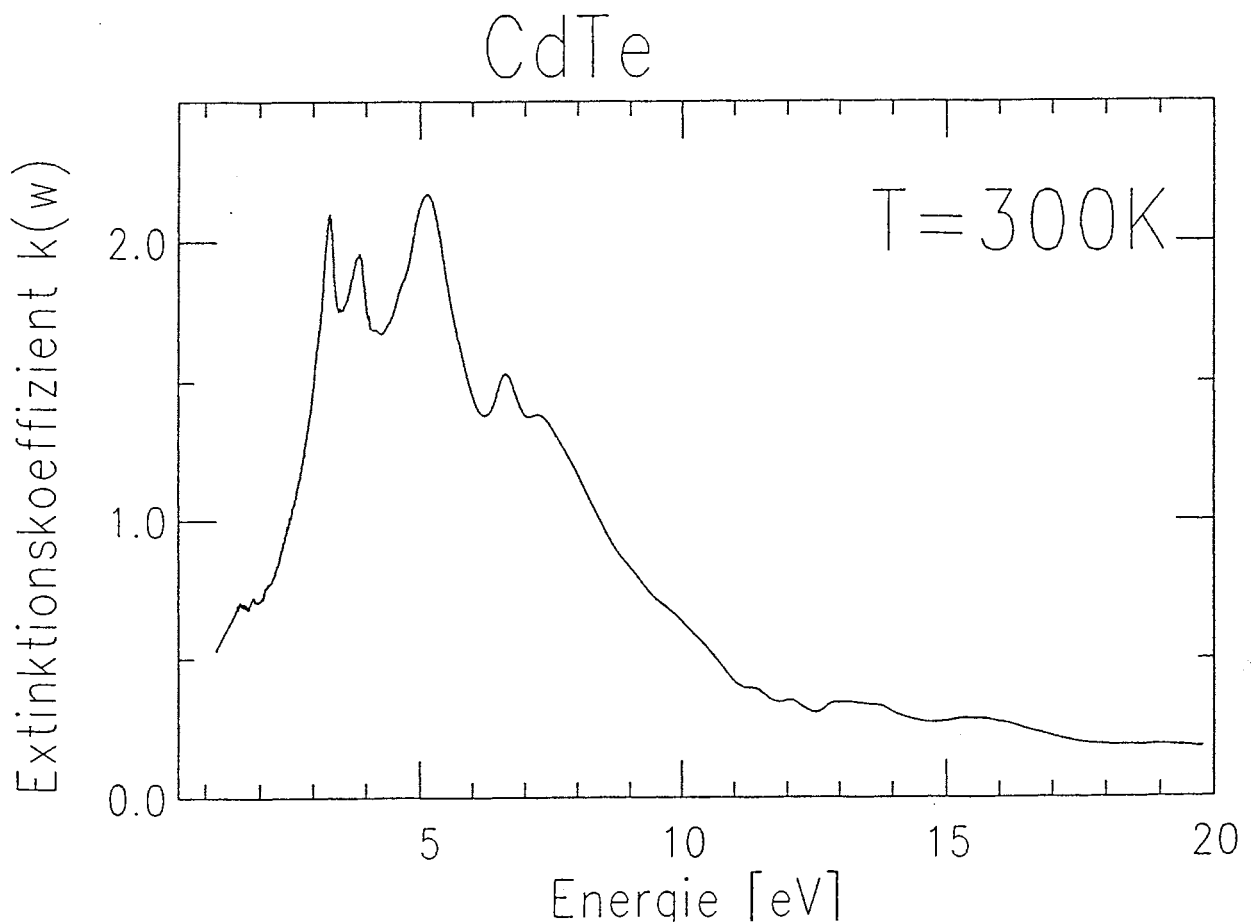


Fig. 5.5.e: a.) Brechungsindex $n(\omega)$ für CdTe ($T=300\text{K}$).
 b.) Extinktionskoeffizient $k(\omega)$ für CdTe ($T=300\text{K}$).



5.6 Reflexionsspektren von $Cd_x Zn_y Mn_z Te$

Der Einfluß des Mangans auf die Bandstruktur der binären Systeme CdTe bzw. ZnTe wird am Mischungssystem $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x+y+z=1$) mit den festen Mischungsverhältnissen $x:y=1:1$, $x:y=1:3$ und $x:y=1:6$ in Abhängigkeit des Mischungsparameters z untersucht.

5.6.1 Untersuchung der Bandkantenverschiebung in Abhängigkeit der Mangankonzentration

Für die drei festen Mischungsverhältnisse Cd zu Zn werden temperaturlaufgelöste Messungen über den Einfluß des Mangans auf die Bandkante vorgestellt. In Abbildungen Fig. 5.6.1.a/b/c sind die ermittelten Lagen der Bandkante für jeweils ein festes Mischungsverhältnis dargestellt. Die temperaturlaufgelösten Messungen zeigen, daß bei zunehmender Mangankonzentration die thermische Verschiebung der Bandkante wächst. Die ermittelten Temperaturgradienten sowie die energetischen Lagen der Bandkanten sind in Tabelle Tab. 5.6.1.1 zusammengefaßt.

$Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x+y+z=1$)	Bandkante E_0 in eV			Temperaturgradient in 10^{-4} eV / K /diese Arbeit/
	300K /diese Arbeit/	300K /Bru83/	20K /diese Arbeit/	
$x:y = 1:1$				
$z = 0.01$	1.81	1.828	1.93	- 4.4
$z = 0.05$	1.93	1.869	2.04	- 4.6
$z = 0.10$	1.88	1.932	2.08	- 3.6
$z = 0.50$	2.36	2.330	2.56	- 7.2
$z = 0.70$	2.67	2.537	2.89	- 7.8
$x:y = 1:3$				
$z = 0.02$	2.21	2.039	2.45	- 8.5
$z = 0.20$	2.16	2.152	2.33	- 6.6
$z = 0.53$	2.38	2.446	2.57	- 7.04
$z = 0.70$	2.62	2.604	2.90	- 10.1
$x:y = 1:6$				
$z = 0.01$	2.14	2.119	2.26	- 4.2
$z = 0.07$	2.19	2.154	2.31	- 3.9
$z = 0.34$	2.29	2.339	2.45	- 6.4

Tab. 5.6.1.1: Energetische Lage und Temperaturabhängigkeit der Bandkante für die Mischungsreihe $Cd_x Zn_y Mn_z Te$.

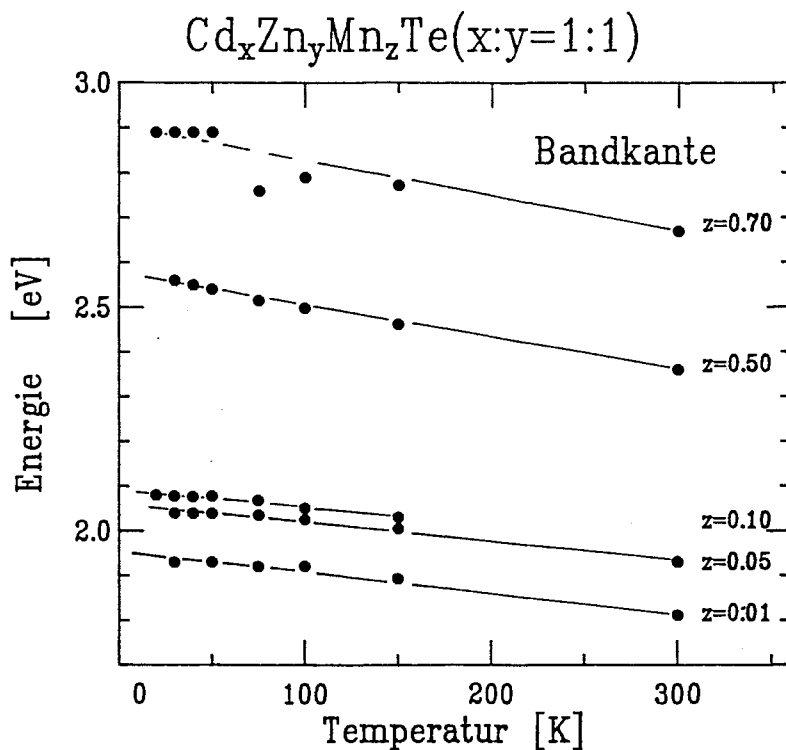


Fig. 5.6.1.a: Temperaturabhängige Bandkantenlagen für die Mischungsreihe $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x+y+z=1$) mit dem festen Mischungsverhältnis $\text{Cd}:\text{Zn} = 1:1$.

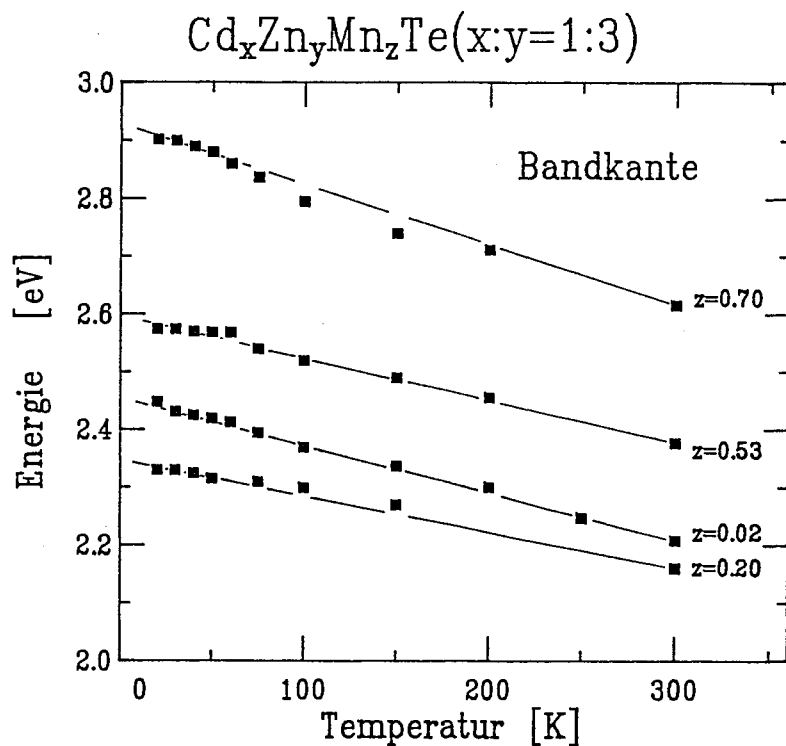


Fig. 5.6.1.b: Temperaturabhängige Bandkantenlagen für die Mischungsreihe $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x+y+z=1$) mit dem festen Mischungsverhältnis $\text{Cd}:\text{Zn} = 1:3$.

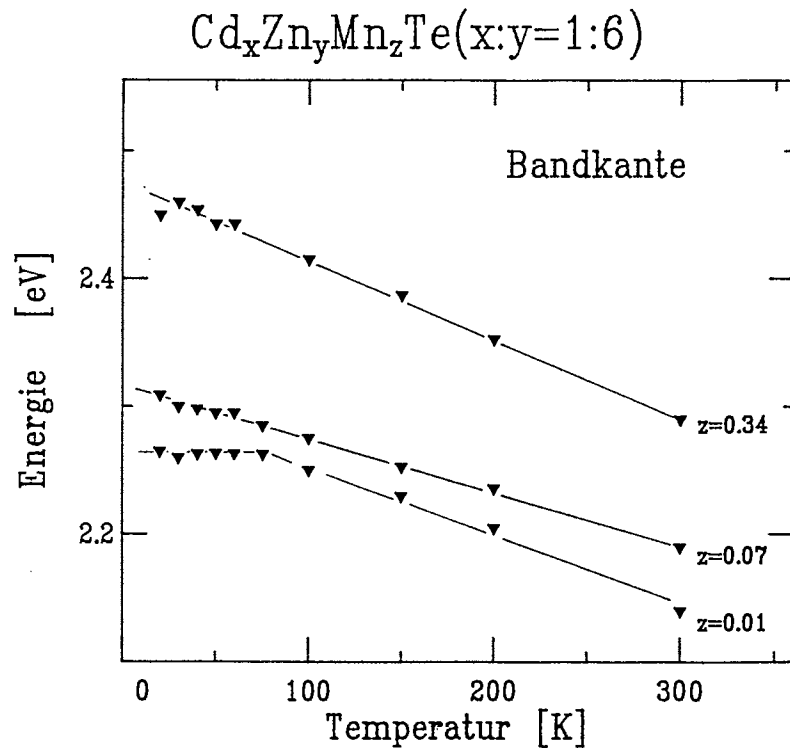


Fig. 5.6.1.c: Temperaturabhängige Bandkantenlagen für die Mischungsreihe $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x+y+z=1$) mit dem festen Mischungsverhältnis $\text{Cd}:\text{Zn} = 1:6$.

Ein Vergleich der Bandkantenlagen mit den von Brun del Re et al. /Bru83/ ermittelten Werten zeigt für einige Kristalle erhebliche Abweichungen. In Abbildung 5.6.1.d sind in Abhängigkeit der Mangankonzentration die Bandkantenlagen zusammengefaßt. Die ausgefüllten Markierungen stellen die in dieser Arbeit gemessenen Bandkanten bei $T=300\text{K}$ dar. Die sich aus der Arbeit von Brun del Re /Bru83/ ergebene Bandkantenlagen wurden mit offenen Markierungen eingetragen.

Große Abweichungen vom linearen Verlauf der Bandkante mit zunehmender Mangankonzentration zeigen die drei Kristalle

$\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x:y = 1:1$) $z = 0.70$,

$\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x:y = 1:3$) $z = 0.02$

und ($x:y = 1:3$) $z = 0.53$.

Im Rahmen der Meßgenauigkeit und des Fehlers bei den Konzentrationsbestimmung kann die erwartete lineare Abhängigkeit der Bandkantelage von der Mangankonzentration bestätigt werden.

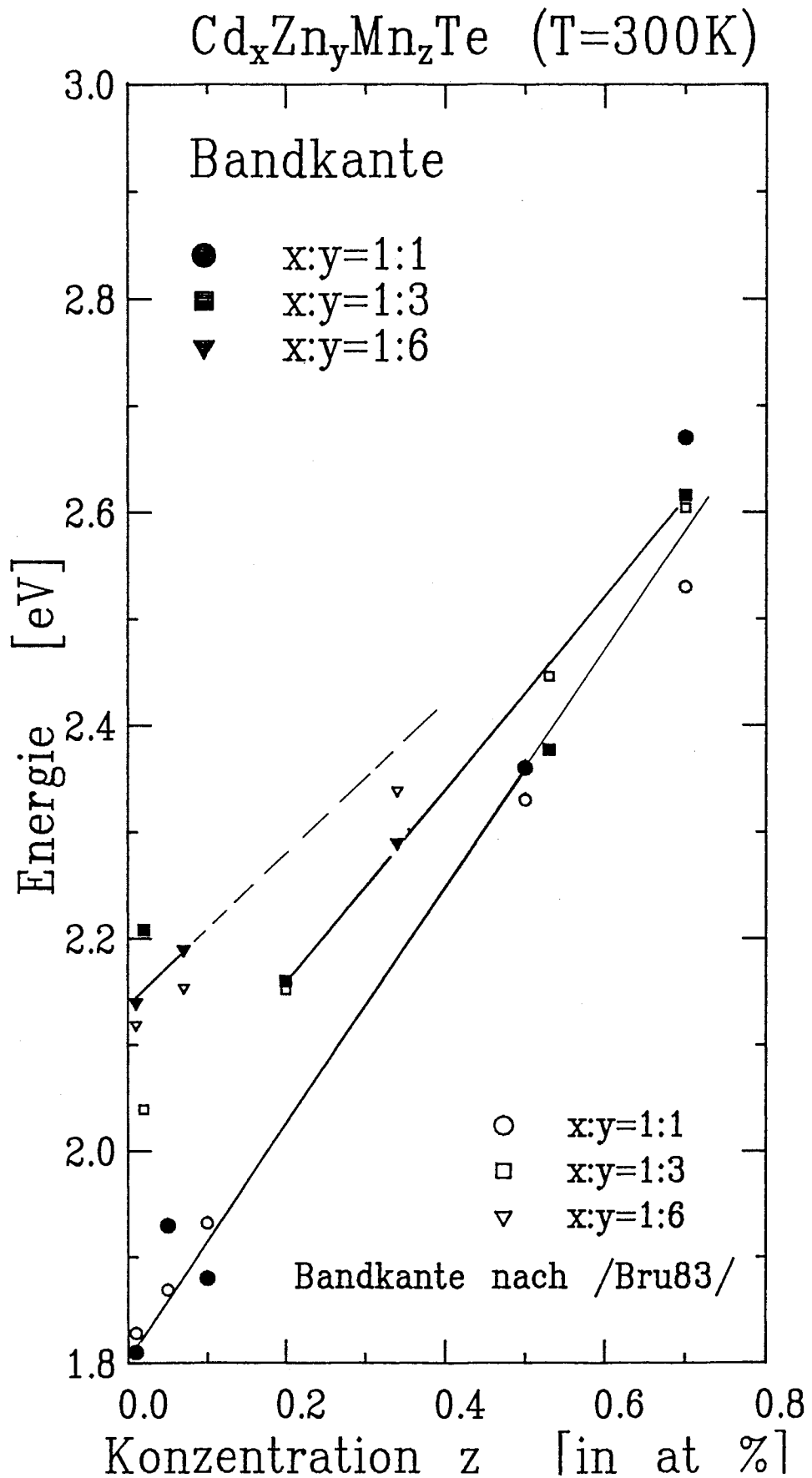


Fig. 5.6.1.d: Bandkantenlagen für die Mischungsreihe $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x+y+z=1$) in Abhängigkeit des Mischungsparameters z . (Angaben für $T = 300\text{K}$)

Vorgenommene Mikrosondenuntersuchungen zeigten für die $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ Kristalle mit $x:y=1:1$, $z=0.70$ und $x:y=1:3$, $z=0.53$ starke Inhomogenitäten sowie Gebiete mit Te-Ausscheidungen. Der $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ -Kristall mit $x:y=1:3$, $z=0.02$ stammt aus einer früheren Züchtungsreihe.

5.6.2 Einfluß der Mangankonzentration z auf die Reflexionsmaxima E_1 und $E_1 + \Delta_1$

Die im Energiebereich von 3 bis 4 eV auftretenden Reflexionslinien E_1 und $E_1 + \Delta_1$ zeigen mit zunehmender Mangankonzentration z eine stark wachsende Verbreiterung (Fig. 5.6.2.a). Dieser ebenfalls am ternären System CdMnTe beobachtete Effekt /Ken81, Büc84, Zim84/ ermöglicht eine direkte Auflösung der beiden Strukturen lediglich unterhalb von $z \leq 0.40$. Die beobachteten energetischen Lagen der beiden Maxima sind für $T = 300\text{K}$ und $T = 50\text{K}$ in Tabelle 5.6.2.1 zusammengefaßt.

$\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ ($x+y+z=1$)	Lage von E_1 in eV		Temperatur- gradient in 10^{-4} eV/K	Lage von $E_1 + \Delta_1$ in eV		Temperatur- gradient in 10^{-4} eV/K
	300K	20K		300K	20K	
$x:y = 1:1$						
$z = 0.01$	3.32	3.52	-8.0	3.86	4.093	-9.2
$z = 0.05$	3.36	3.53	-7.1	3.95	4.05	-4.0
$z = 0.10$	3.38	3.51	-5.2	3.96	4.09	-6.4
$z = 0.50$	(3.24)	(3.35)	-4.4	--	--	--
$z = 0.70$	3.36	3.54	-7.2	3.90 ^s	4.08 ^s	-7.2
$x:y = 1:3$						
$z = 0.02$	3.35	3.50	-6.0	--	--	--
$z = 0.20$	3.45	3.58	-5.2	3.97	4.15	-7.2
$z = 0.53$	3.542	3.60	-2.4	4.04 ^s	4.19 ^s	-6.0
$z = 0.70$	3.55	3.60	-2.0	--	--	--
$x:y = 1:6$						
$z = 0.01$	3.437	3.600	-6.4	3.93	4.20	-10.8
$z = 0.07$	3.481	3.632	-6.0	4.023	4.196	-6.8
$z = 0.34$	3.498	3.581	-3.6	4.05	4.150	-4.0

^s: nur als Schulter erkennbar

Tab. 5.6.2.1: Energetische Lagen und Temperaturgradienten der Reflexionsmaxima E_1 und $E_1 + \Delta_1$.

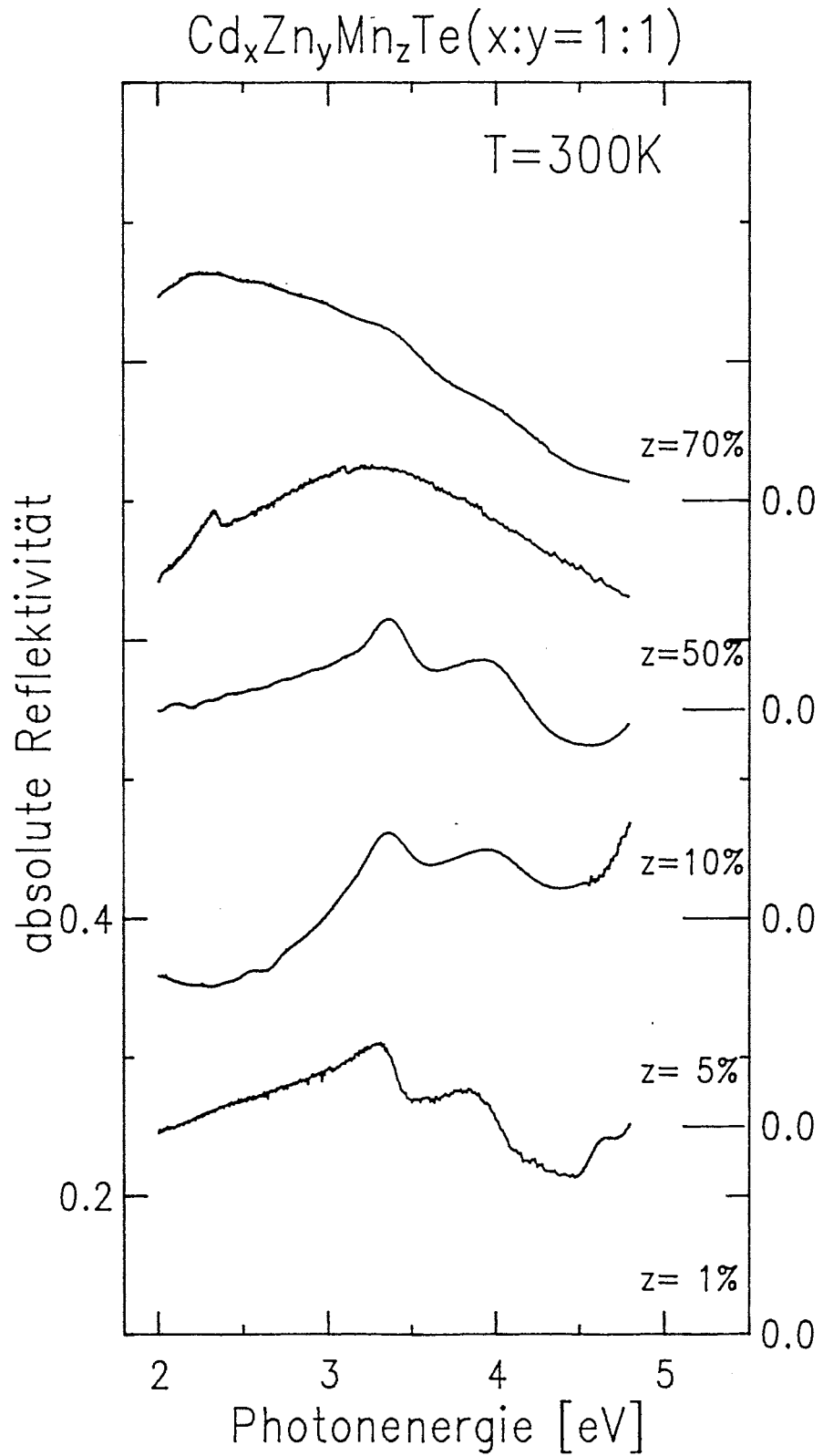


Fig. 5.6.2.a: Einfluß der Mangankonzentration z auf die Reflexionsmaxima E_1 und $E_1 + \Delta_1$ von $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ (für $x:y = 1:1$ und $T = 300\text{K}$).

5.7 Höherenergetische Reflexionsmessungen an $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x:y = 1:1$) mit Synchrotronstrahlung

Für das Mischkristallsystem $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ wurden für das feste Mischungsverhältnis $Cd:Zn = 1:1$ Messungen im höherenergetischen Bereich mit Synchrotronstrahlung durchgeführt. Die Messungen erfolgten während der Aufbauphase mit den anfangs aufgetretenen Schwierigkeiten, die in den vorangehenden Kapiteln beschrieben wurden. Die Auswirkungen der apparativen Probleme werden exemplarisch an der temperaturlösten Messung von $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x:y=1:1$) für $z=0.10$ in Fig. 5.7.a gezeigt. Die dargestellten Spektren für $T=300K$ und $T=75K$ wurden mit Hilfe einer "Fast-Fourier-Transformation" geglättet. Zudem wurde durch Vergleich mit anderen temperaturlösten Messungen versucht, durch die Fokusschwankung bewirkte Einbrüche in der Reflektivität zu korrigieren. Die Ergebnisse im Energiebereich von 3 bis 10 eV sind in Fig. 5.7.b ($T=300K$) und Fig. 5.7.c ($T=75K$) zusammengefaßt.

Die im folgenden beschriebene Zuordnung der Reflexionsmaxima wird in Anlehnung an die Zuordnungen für CdTe (Kap. 5.4) vorgenommen. Für den Energiebereich bis 10 eV müssen dabei keine neuen Linien, die dem Zn-Anteil zuzuordnen wären, berücksichtigt werden /Kra86, Sai72, Jun86/. Erst ab einer Zn-Konzentration größer 90 % werden von M. Krause zwei neue Zuordnungen E_2 und E_2' eingeführt. Übergänge von den Zn 3d Zuständen ins Leitungsband werden erst über 11 eV erwartet /Kra86, Jun86/.

Die energetischen Reflexionsmaxima in den Kristallen $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x+y+z=1$, $x:y=1:1$) mit $z=0.01$, $z=0.05$ und $z=0.10$ sind in der Tabelle 5.7.1 zusammengefaßt und in die Bandstruktur nach /Wal70/ (Fig 5.7.d) eingetragen.

Der Reflexionsstruktur E_2 , die im wesentlichen dem Übergang an der Symmetrielinie $\Delta_5 \rightarrow \Delta_5$ (Kap. 5.4) zuzuordnen ist, kann hier bis zu der Mangankonzentration $z=0.10$ verfolgt werden. Dabei ist eine zunehmende Verschiebung zu höherer Energie mit wachsender Mangankonzentration z zu beobachten. Bei $z=0.50$ und $z=0.70$ sind die E_2 -Übergänge im Reflexionsspektrum nur noch als Schulter wahrnehmbar. Dabei bleibt offen, ob die Übergänge, die die E_2 -Struktur bilden, verbreitern und damit einen breiten Untergrund bilden, oder ob durch eine Veränderung der Valenzbandstruktur die Übergangswahrscheinlichkeit und somit die Oszillatorstärke sinkt.

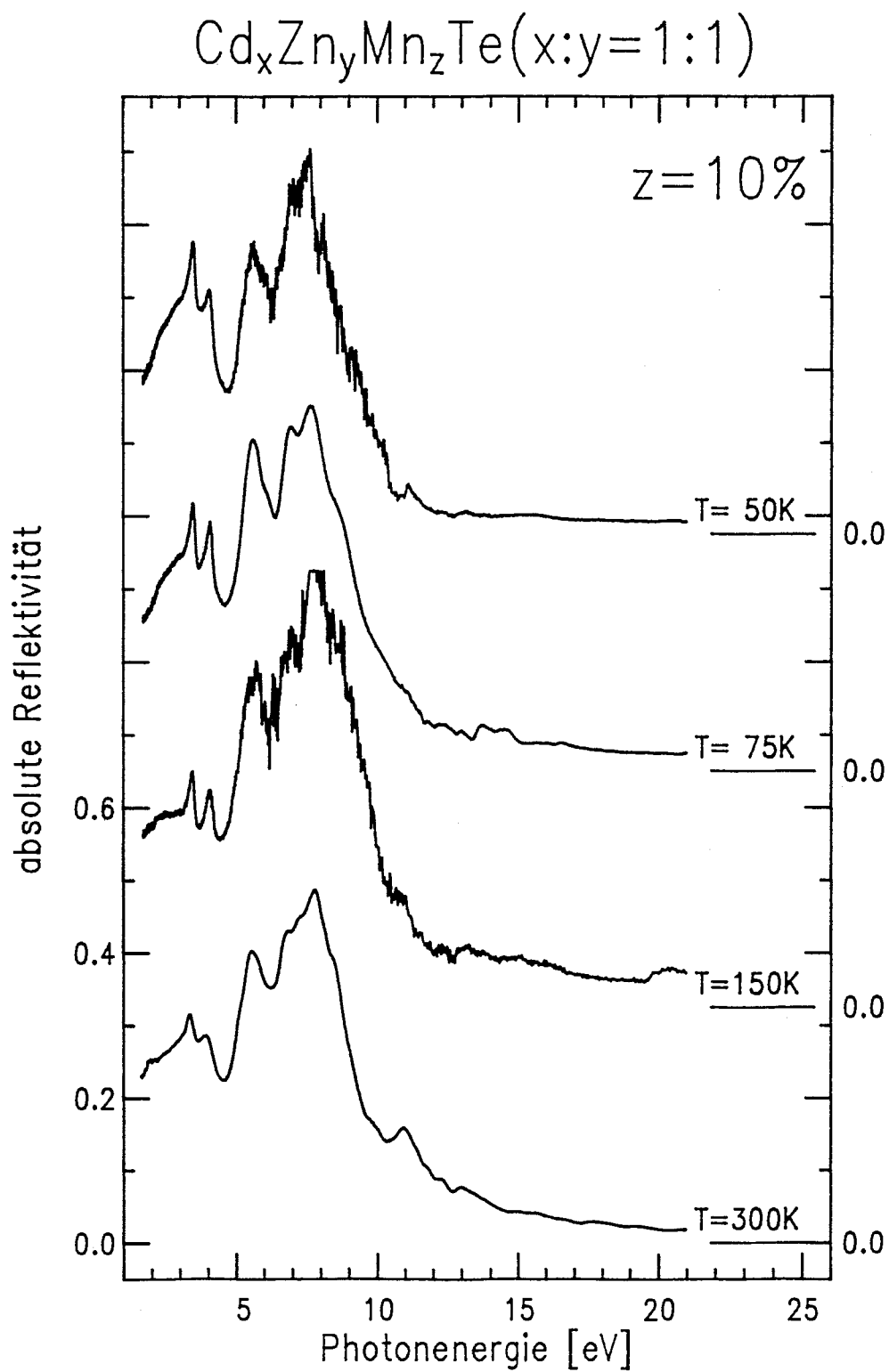


Fig. 5.7.a: Temperaturabhängiges Verhalten der Reflektivität im Energiebereich von 2 bis 10 eV für den Kristall $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te} (x:y=1:1)$ $z=0.10$ (siehe Text).

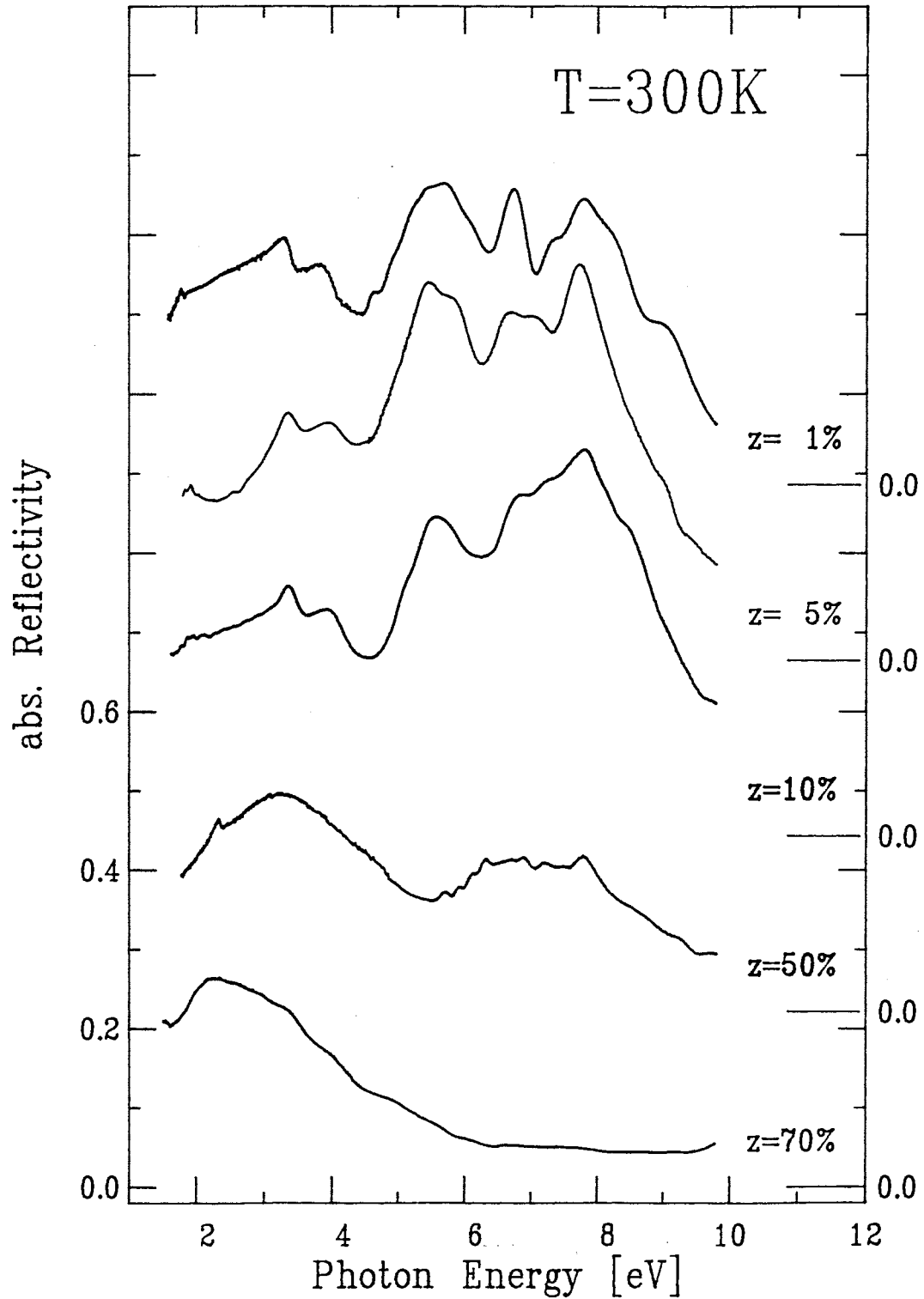
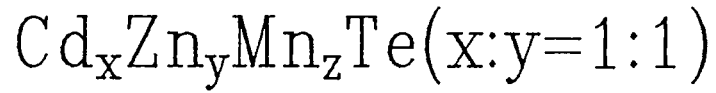


Fig. 5.7.b: Reflexionsspektren des Mischkristallsystems $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ mit dem festen Mischungsverhältnis $\text{Cd}:\text{Zn}=1:1$ für $T=300\text{K}$.

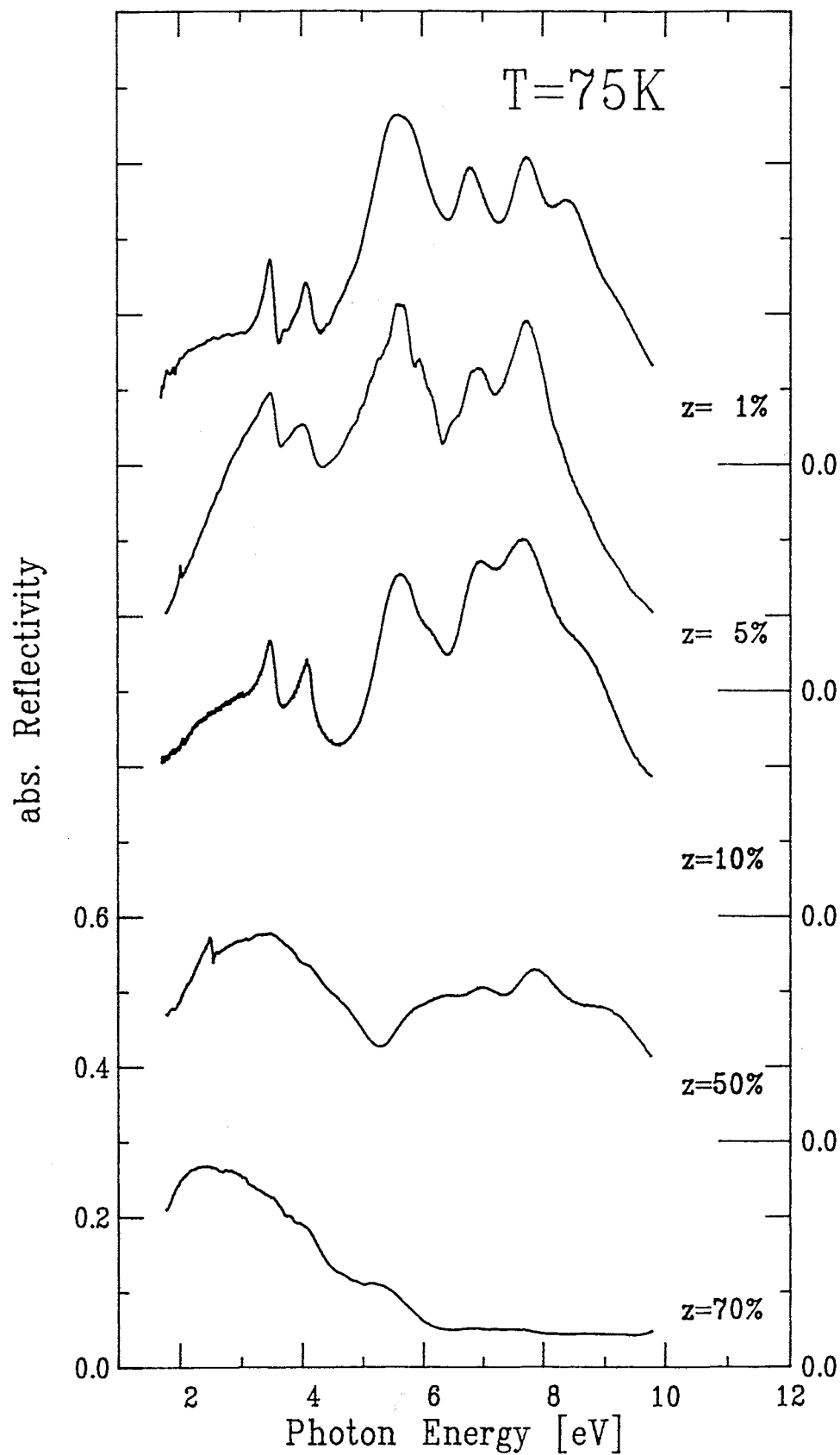
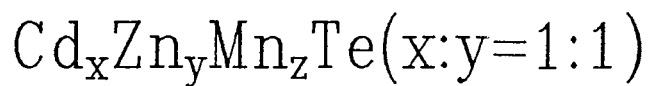


Fig. 5.7.c: Reflexionsspektren des Mischkristallsystems $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ mit dem festen Mischungsverhältnis $\text{Cd}:\text{Zn}=1:1$ für $T=75\text{K}$.

Die E_1' - und $E_1'+\Delta_1$ -Strukturen, die beim CdTe den Übergängen am L-Punkt zugeordnet wurden, bleiben bis zur Mangankonzentration $z=0.10$ unbeeinflusst (siehe Tabelle 5.7.1). Sie sind bei $z=0.50$ als eigenständige Maxima in einem stark verbreiterten Untergrund nachzuweisen, wogegen die E_1 - und $E_1+\Delta_1$ -Strukturen im niederenergetischen Bereich bei $z=0.50$ ein gemeinsames breites Maxima bilden. Dies deutet darauf hin, daß die höheren Leitungsbänder durch den Manganeinbau weniger stark gestört werden als die Valenzbänder. Die Aufspaltung der Leitungsbandes L_6 und $L_{4,5}$, wie sie beim CdTe (Kap.5.4) beobachtet wurde, kann hier nicht nachgewiesen werden.

Bezeichnung	CdTe in 300K	ZnTe eV 300K	$Cd_xZn_yMn_zTe$ ($x+y+z=1$) $x:y=1:1$					
			$z=0.01$ 300K	$z=0.01$ 75K	$z=0.05$ 300K	$z=0.05$ 75K	$z=0.10$ 300K	$z=0.10$ 75K
$E_2(\Delta)$	5.10	--	5.23	5.45	5.4 ⁴	--	5.25	5.30
$E_2(p)$	5.38	5.45 ^{1,2}	5.41	5.62	5.72	5.67	5.67	5.67
E_2''	5.81	5.9 ²	6.02	5.92	6.04	6.11	6.00	5.8 ⁴
E_1'	6.74	6.87 ²	6.85	6.82	6.7 ⁴	6.82	6.68	6.82
$E_1'+\Delta_1$	7.4 ³	7.58 ²						
E_3	7.85	--	7.64	7.76	7.72	7.77	7.76	7.70
E_Σ	--	8.65 ¹	8.36	8.35	8.37	8.60	8.39	8.44
E_4	9.18	--	9.32					
E_Σ'	--	9.60 ¹	--	9.45	9.3 ⁴	9.35	9.25	9.20
E_5	9.99	--	--	--	--	--	9.82	9.7
E_6	10.61	--	--	--	--	--	10.80	10.85

- ¹ Reflexionsmaxima nach /Kra86/; ² Reflexionsmaxima nach /Wal70/
³ Reflexionsmaxima bei 75K
⁴ Einbruch im Reflexionsspektrum durch Strahlwanderung

Tab. 5.7.1: Energetische Lagen der Reflexionsmaxima im Energiebereich von 5 bis 10 eV für das Mischkristallsystem $Cd_xZn_yMn_zTe$. (Werte für CdTe aus dieser Arbeit; alle Angaben in [eV])

Die E_3 - Struktur (CdTe, Kap.5.4) bildet zusammen mit $E_1' + \Delta_1$ ein breites Maximum, das hier nicht als eigenständiger Übergang aufgelöst werden konnte. Die in CdTe-Spektren gefundenen Schultern E_4 bis E_6 finden sich nur teilweise wieder. Die hier ermittelten energetischen Lagen liegen zwischen denen im CdTe gefundenen und denen von M. Krause dem E_Σ und $E_{\Sigma'}$ zugeordneten Werten. Eine genauere Aussage läßt sich wegen der großen Unsicherheit der gemessenen Reflexionsspektren in diesem Bereich nicht machen.

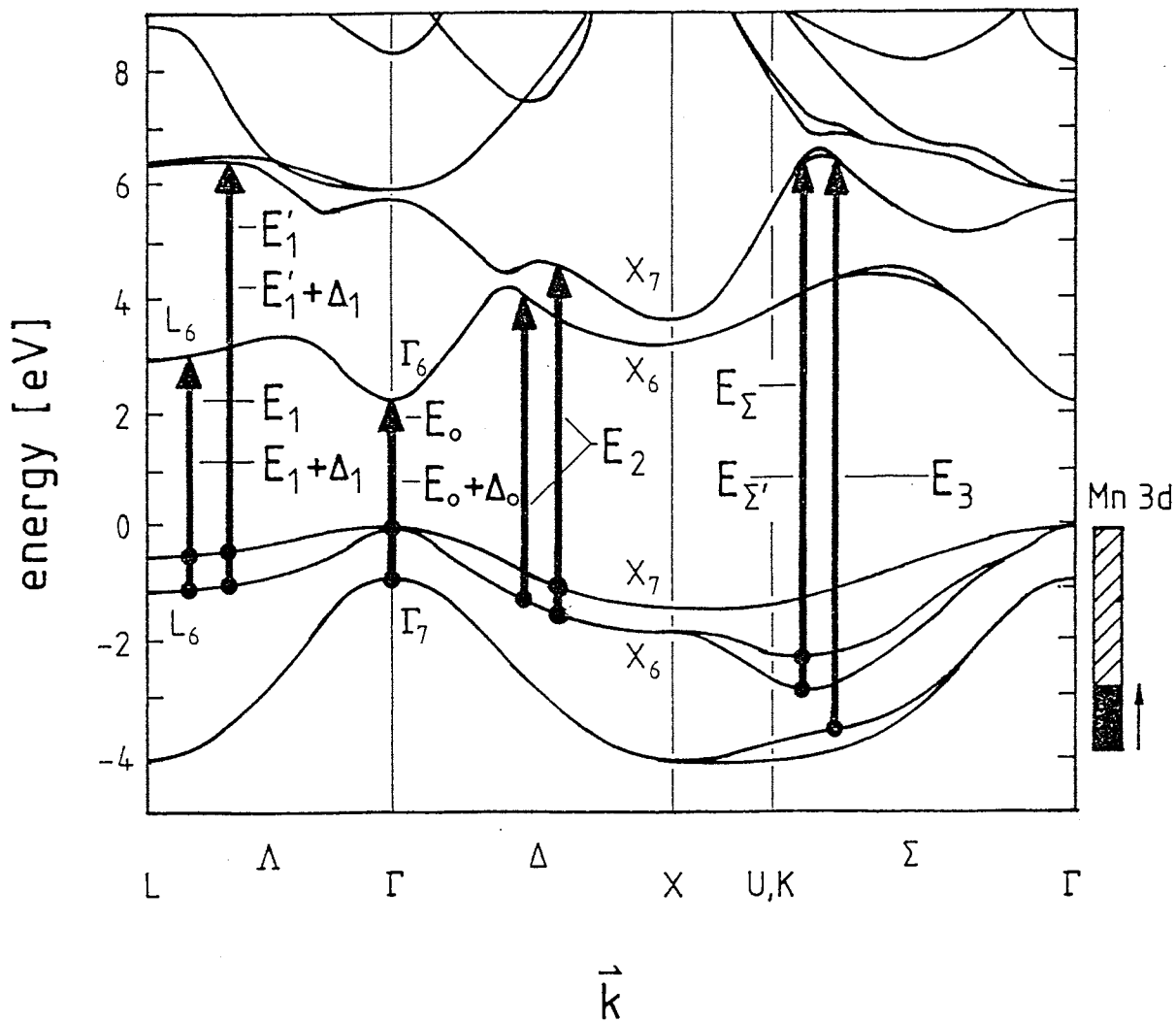


Fig. 5.7.d: Bandstruktur von ZnTe /Wal70/ mit den eingetragenen Interbandübergängen im Energiebereich von 1 bis 10 eV nach /Jun86/.

IV. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden temperaturlaufgelöste Reflexionsmessungen an dem Mischkristallsystem $\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_z\text{Te}$ vorgestellt, wobei der binäre Halbleiter CdTe einen Schwerpunkt der Auswertung darstellt. Hierzu wurde ein Reflexionsmeßstand für Photonenenergien von 1 bis 6 eV aufgebaut, der es erlaubt, die absolute Reflektivität der untersuchten Kristalle zu bestimmen. Die Reflexionsmessungen für den anschließenden höherenergetischen Bereich (6 bis 25 eV) erfolgten mit Synchrotronstrahlung bei BESSY. Für einige der erhaltenen Gesamtspektren (1 bis 25 eV) wird eine Kramers-Kronig-Transformation durchgeführt.

Am Beispiel der Reflexionsmessung an CdTe bei $T=300\text{K}$ kann erstmals durch einen analytischen Vergleich die Richtigkeit einer durchgeführten Kramers-Kronig-Transformation gezeigt werden (Kap.1.2). Hierzu wird ein theoretisches ϵ_2 -Spektrum für CdTe ($T=300\text{K}$) auf der Grundlage der "Theorie des gedämpften harmonischen Oszillators" aufgebaut. Über dieses "Modellspektrum" können Zuordnungen plausibel gemacht werden, ohne daß es einer physikalischen Interpretation des "Modellspektrums" bedarf.

Die Ergebnisse lassen sich in drei Schwerpunkte aufteilen:

- 1.) Allgemeine Aussagen über die stark nichtlineare Beziehung zwischen Reflexions- und ϵ_2 -Spektren, die an Messungen des CdTe-Kristalls im Kapitel 5.4 verdeutlicht wurden:

- Bei einer hochenergetischen Extrapolation mit dem Exponenten $n = 4$ wird eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den berechneten und den gemessenen Reflexionsspektren festgestellt.

- Eine Lorentzlinie im ϵ_2 -Spektrum führt im Reflexionsspektrum zu einer Absenkung der Reflektivität im niederenergetischen und zu einer Erhöhung der Reflektivität im höherenergetischen Bereich der Lorentzlinie. Besitzt eine Lorentzlinie nur eine kleine Halbwertsbreite (lokalisiert), so ist dieses Verhalten im Reflexionsspektrum offensichtlich.

- Ist ein Oszillator im ϵ_2 -Spektrum lokalisiert, so weichen die Maximalagen im ϵ_2 - und Reflexionspektrum nur geringfügig voneinander ab ($\leq 0.1\text{eV}$). Oszillatoren mit großer Halbwertsbreite sind jedoch im ϵ_2 - und Reflexionsspektrum in ihren Maximalagen stark zueinander verschoben.

- Ein Maximum im Reflektionsspektrum kann durch eine Schulter im ϵ_2 -Spektrum verursacht werden - und umgekehrt. Als typisches Beispiel ist hierfür die E_2 -Region und die E_7 -Struktur beim CdTe-Kristall zu nennen (siehe Kap. 5.4).

2.) Manganeinfluß auf die quaternären Mischkristalle $Cd_x Zn_y Mn_z Te$:

- Der Einfluß der Mangankonzentration z auf die Bandkantenlage in den Mischkristallen $Cd_x Zn_y Mn_z Te$ ($x+y+z=1$) wurde an den festen Mischungsverhältnissen $x:y=1:1$, $x:y=1:3$ und $x:y=1:6$ untersucht. Es bestätigt sich die von Brun del Re /Bru83/ angegebene lineare Abhängigkeit der Bandkantenlage mit zunehmender Mangankonzentration. Einige Kristalle zeigen große Abweichungen von diesem Verhalten, dessen Ursache jedoch in der inhomogenen Zusammensetzung der Kristalle selbst zu suchen ist.

- Mit zunehmender Mangankonzentration wächst die thermische Abhängigkeit der Bandkantenlage, was in guter Übereinstimmung mit den Beobachtungen an den ternären Mischkristallen $Cd_{1-x} Mn_x Te$ /Büc85/ steht.

- Die große Reflexionsstruktur E_2 in den Spektren zeigt eine starke energetische Verschiebung zu höheren Energien mit wachsender Mangankonzentration z und kann bei $z=0.50$ und $z=0.70$ nicht mehr als eigenständige Struktur nachgewiesen werden.

- Der Manganeinfluß auf die höheren Leitungsbänder bleibt bis $z \leq 0.50$ gering, so daß die E_1^- - und $E_1^+ \Delta_1$ -Strukturen bei $z=0.50$ als eigenständige Maxima erhalten bleiben.

3.) Ergebnisse für den binären Halbleiter CdTe:

- Es wird gezeigt, daß das Maximum des E_2 -Struktur im ϵ_2 -Spektrum dem Übergang $\Delta_5 \rightarrow \Delta_5$ an der Symmetrielinie Δ zugeordnet werden muß. Die bisherige Vermutung anderer Autoren /Che76/, den Hauptübergang der E_2 -Struktur einem kritischen Punkt in der Brillouin Zone mit $k=(0.75,0.25,0.25)$ zuzuordnen, kann nicht bestätigt werden.

- Durch die temperaturlösten Reflexionsmessungen an CdTe kann erstmals die theoretisch berechnete Aufspaltung /Che76/ des Leitungsbandes am L-Punkt nachgewiesen werden. Mit den neu eingeführten Zuordnungen E_1'' und $E_1'' + \Delta_1$ ergibt sich eine Aufspaltung δ_d der Leitungsbänder L_6 und $L_{4,5}$ am L-Punkt zu $\delta_d = 0.22$ eV.
- Im Energiebereich von 8 bis 10 eV werden zwei bisher nicht bekannte Reflexionsstrukturen beobachtet. Für eine genaue Zuordnung ist jedoch das Ergebnis einer Linienformanalyse abzuwarten, die sich gerade im Aufbau befindet /Bit88/.
- Im höheren Energiebereich ab 10 eV wird die von M. Krause /Kra86/ eingeführte Notation weitergeführt und um die Strukturen L_7 bis L_{11} ergänzt. Für die Mehrzahl der Zuordnungen ergeben sich Übergänge von den Cd 4d-Niveaus in die Leitungsbänder (Kap.5.5).
- Mit der Kenntnis der Phasenbeziehung $\Theta(\omega)$ aus der Kramers-Kronig-Transformation werden folgende optischen Funktionen bestimmt (Kap 5.5): Die komplexe dielektrische Funktion $\epsilon(\omega)$, der Brechungsindex $n(\omega)$ und der Extinktionskoeffizient $k(\omega)$.

Anhang Teil a.)

Tests zur Wellenlängenmodulation:

Zur Wellenlängenmodulation wird eine LiF-Platte in den optischen Strahlengang vor den Monochromatoraustrittsspalt gebracht (siehe Kap.2 Seite 46). Der Brechungsindex n von LiF ist im Wellenlängenbereich von 300 nm bis 800 nm nahezu konstant (mit $n \approx 1.4$). Die Transmission in diesem Bereich beträgt über 90 Prozent.

Mit einem Scanner wird die LiF-Platte um einen Winkel ausgelenkt, der proportional zur angelegten Spannung ist. Dadurch wird ein Strahlversatz am Monochromatoraustrittsspalt und somit eine Wellenlängenmodulation erreicht.

Die Fragestellung dieser Testmessungen war, ob es möglich ist, eine Wellenlängenmodulation mit gleichzeitiger computergesteuerter Meßwert-erfassung zu realisieren.

Hierzu wurde der in Kap. 2 (Seite 51) dargestellte Meßzyklus durch den in Fig. A1 dargestellten Meßablauf ersetzt. Das dem Meßzyklus entsprechende Flußdiagramm ist in Fig. A2 dargestellt.

Verwendete Größen:

- I_{0-8} : Intensität in Nullstellung und Modulator in A-Stellung
 I_{0+8} : " " " " in B-Stellung
 I_{R-8} : Intensität in Reflexionsstellung und Modulator in A-Stellung
 I_{R+8} : " " " " in B-Stellung
 $D_R = I_{R+8} - I_{R-8}$: Modulationsdifferenz in Reflexionsstellung
 $D_0 = I_{0+8} - I_{0-8}$: Modulationsdifferenz in Nullstellung
 $R = (\frac{1}{2}[I_{R+8} + I_{R-8}]) / (\frac{1}{2}[I_{0+8} + I_{0-8}])$: Reflektivität
 $dR = D_R / D_0$: Änderung der Reflektivität, wobei nur das lineare Glied bei einer Reihenentwicklung von R bezüglich l betrachtet wird.

Die ersten Messungen zeigten keine signifikanten Änderungen im ermittelten "dR"-Spektrum, wenn im Reflexionsspektrum deutliche Linien erkennbar waren. Die Änderungen von "dR" lagen alle innerhalb eines "Rauschbandes", so daß keine Aussagen möglich waren.

Um das Signal-Rauschverhältnis zu verbessern, wurde im nächsten Schritt über mehrere Modulationen in jeder Drehspiegelstellung gemittelt. (siehe "Schleife" in Fig. A2).

Für die einzelnen Differenzen D_R und D_0 ergibt sich durch diese Mittellung über mehrere Modulationen ein verbessertes Signal-/Rauschverhältnis. Das durch Division der beiden Differenzen D_R und D_0 erhaltene dR zeigte jedoch keine Verbesserung des Signal-/Rauschverhältnisses. Hierbei sind zwei Ursachen unterscheidbar:

- a.) Wird über mehrere Modulationen gemittelt, so wird der zeitliche Abstand zwischen den beiden Differenzen D_R und D_0 größer, so daß sich die Zeitstruktur der verwendeten XBO-Lampe als zusätzlicher Fehler bemerkbar macht.
- b.) Wird hingegen nur eine Modulation durchgeführt, bleibt als Fehler die Auflösungsgenauigkeit des A/D-Wandlers (mit 20 mV) und die Ungenauigkeit bei der Positionierung der Drehspiegels mittels des 3-Phasenschrittmotors (± 1 Grad).

In Fig. A3 sind 2 Modulationsspektren mit unterschiedlichen Auslenkungswinkeln der LiF-Platte dargestellt, wobei nur die Lampenspektren $I_{0+\delta}/I_{0-\delta}$ sowie die Differenz $D_0 (= I_{0+\delta} - I_{0-\delta})$ betrachtet werden.

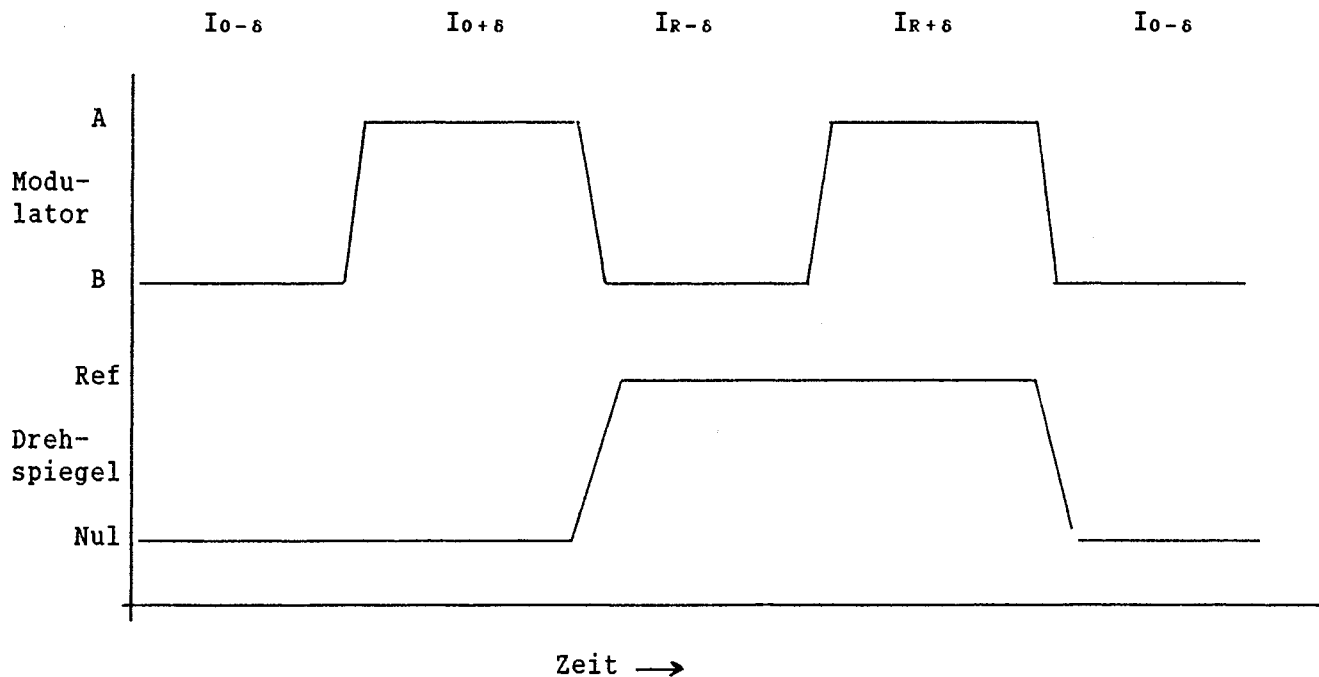


Fig. A1: Meßzyklus für Reflexionsmessung mit Wellenlängenmodulation (ohne Streulichtbestimmung).

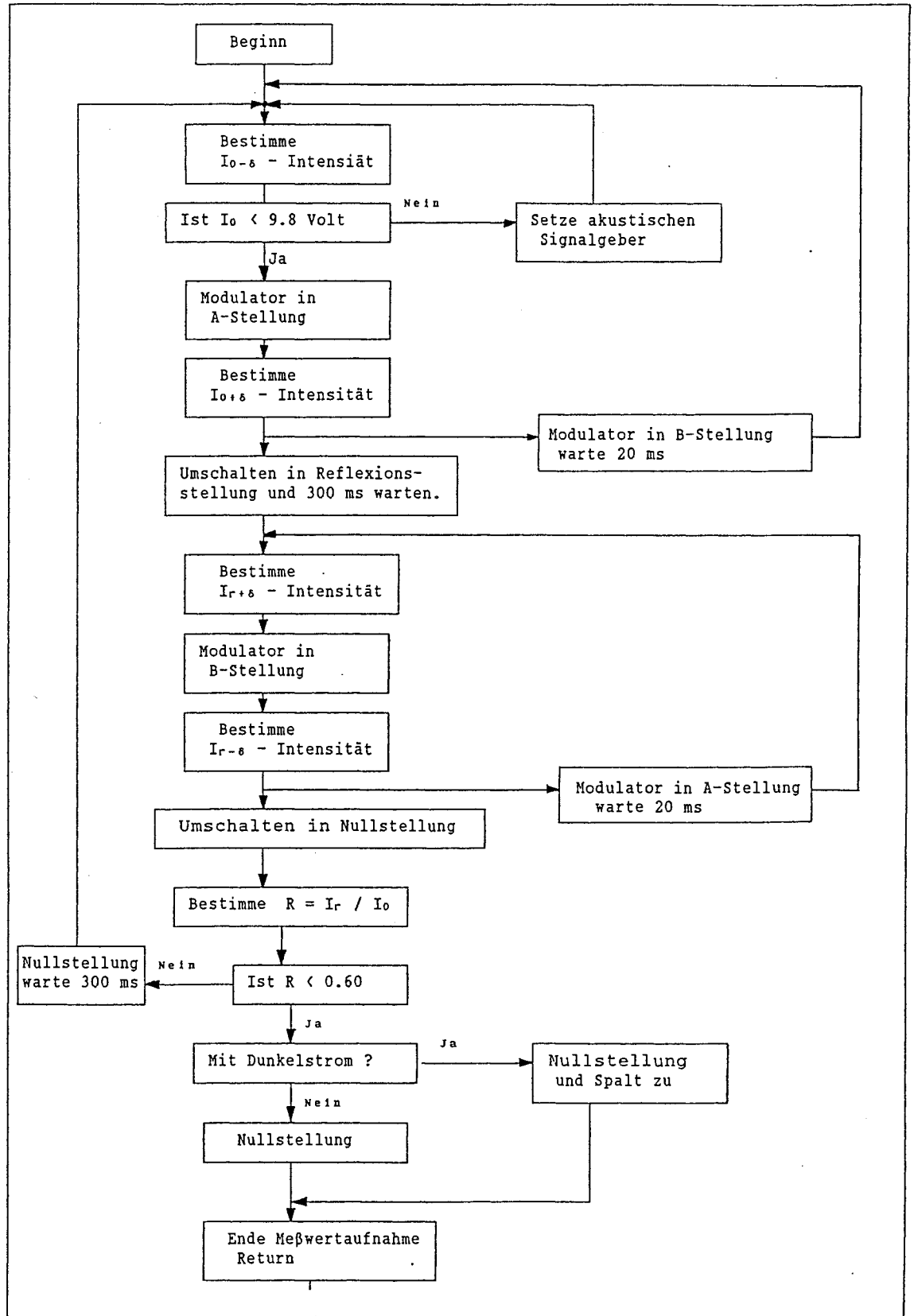
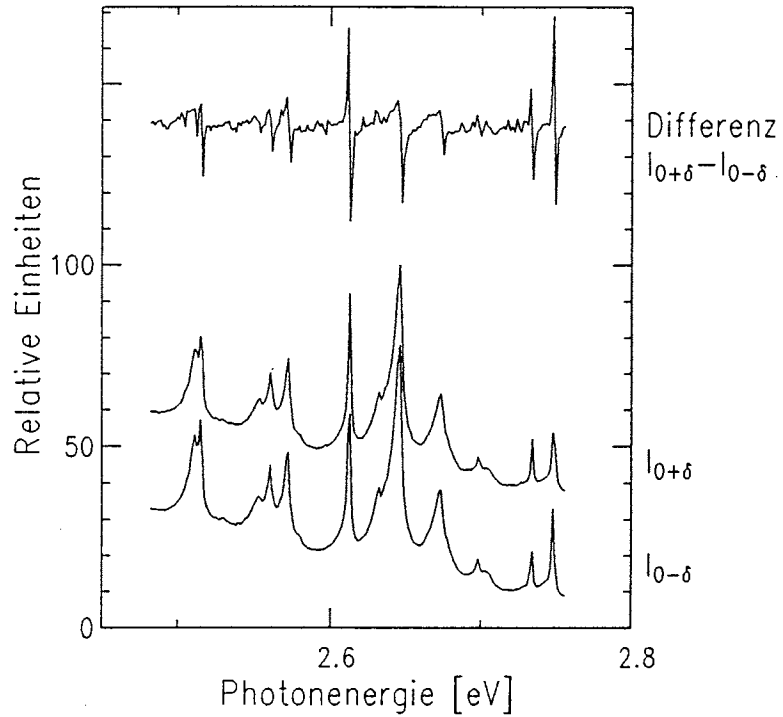


Fig. A2: Flußdiagramm des verwendeten Meßzyklus für wellenlängenmodulierte Reflexionsmessungen.

a.) Auslenkung der LiF-Platte: $U_0 = 2.5 \text{ V}$;
 Über 10 Modulationen pro Meßpunkt gemittelt.



b.) Auslenkung der LiF-Platte: $U_0 = 1.0 \text{ V}$;
 Über 10 Modulationen pro Meßpunkt gemittelt.

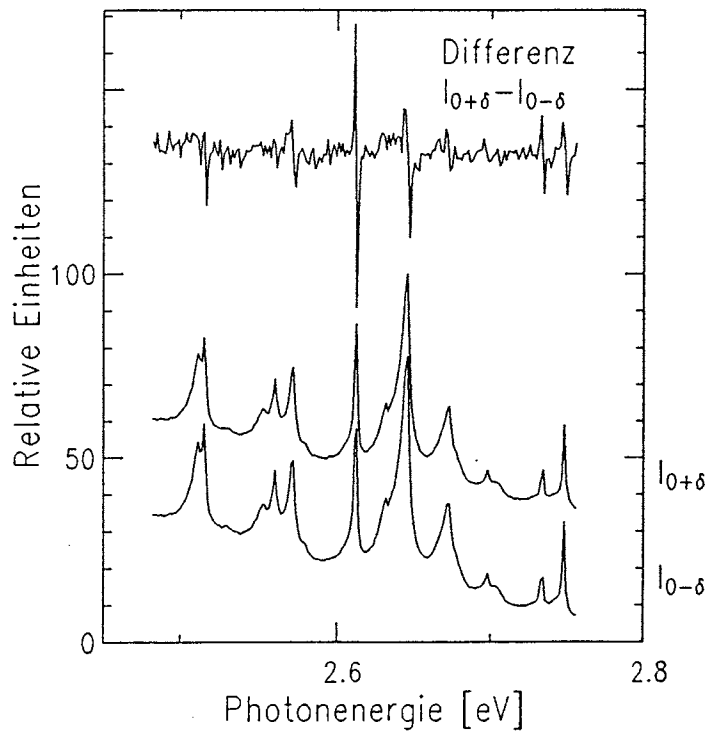


Fig. A3: Moduliertes Lampenspektrum mit unterschiedlichen Auslenkungen der LiF-Platte.

Fehlerabschätzung:

Bei der Annahme, daß die Bestimmung der einzelnen Intensitäten I_{x+s} mit einer Genauigkeit von etwa 0.5 Prozent bestimmbar sind, ergibt sich folgende Fehlerabschätzung:

Für die Reflektivität $R = (I_{R+s} \pm 0.005 I_{R+s}) / (I_{0+s} \pm 0.005 I_{0+s})$ folgt ein Fehler von 1%.

Wird für die Differenzbildung unterstellt, daß sich I_{0+s} und I_{0-s} um etwa 10% unterscheiden:

$$I_{0+s} = 1.1 I_{0-s}$$

$$I_{R+s} = 1.1 I_{R-s}$$

und alle Signale auf 0.5 Prozent genau bestimmt werden können, so ergibt sich für die Änderung der Reflektivität dR :

$$\begin{aligned} dR &= \frac{(I_{R+s} \pm 0.005 I_{R+s}) - (I_{R-s} \pm 0.005 I_{R-s})}{(I_{0+s} \pm 0.005 I_{0+s}) - (I_{0-s} \pm 0.005 I_{0-s})} \\ &= \frac{I_{R-s} [1.1 \pm 0.005 - 1.0 \pm 0.005]}{I_{0-s} [1.1 \pm 0.005 - 1.0 \pm 0.005]} \\ &= \frac{I_{R-s} [0.1 \pm 0.01]}{I_{0-s} [0.1 \pm 0.01]} = dR \pm 0.1dR \end{aligned}$$

ein Fehler von 10 Prozent. In einigen Wellenlängenbereichen liegt die Differenz zwischen I_{0+s} und I_{0-s} jedoch weit unter 10 Prozent, so daß der wahre Fehler daher als viel größer angenommen werden muß.

Diese Abschätzung zeigt, daß eine Wellenlängenmodulation auf den oben beschriebenen Weg nicht realisierbar ist. Um die Änderung der Reflektivität dR bestimmen zu können, müssen die einzelnen Differenzen D_R und D_0 mit einem Fehler kleiner ein Prozent bestimmt werden.

Eine Möglichkeit, rauschärmere Differenzen zu erhalten, ist die Verwendung von Lockin-Verstärkern (Fig. A4). Der Lockin-Verstärker verstärkt die Differenz D_x des modulierten Eingangssignals. Als Referenz zur Rauschunterdrückung geht zusätzlich die Modulationsfrequenz ein. Das Ausgangssignal des Lockin-Verstärkers kann dann in den Rechner eingelesen und weiterverarbeitet werden. Eine Änderung des Meßzykluses wäre hierzu nicht erforderlich. Zum Einlesen der unterschiedlichen Signal sind jeweils die verschiedenen Kanalnummern des A/D-Wandler anzusprechen. Zur Signalmodulation würde sich der vorhandene "IEC-Bus"-gesteuerte Frequenzgenerator anbieten.

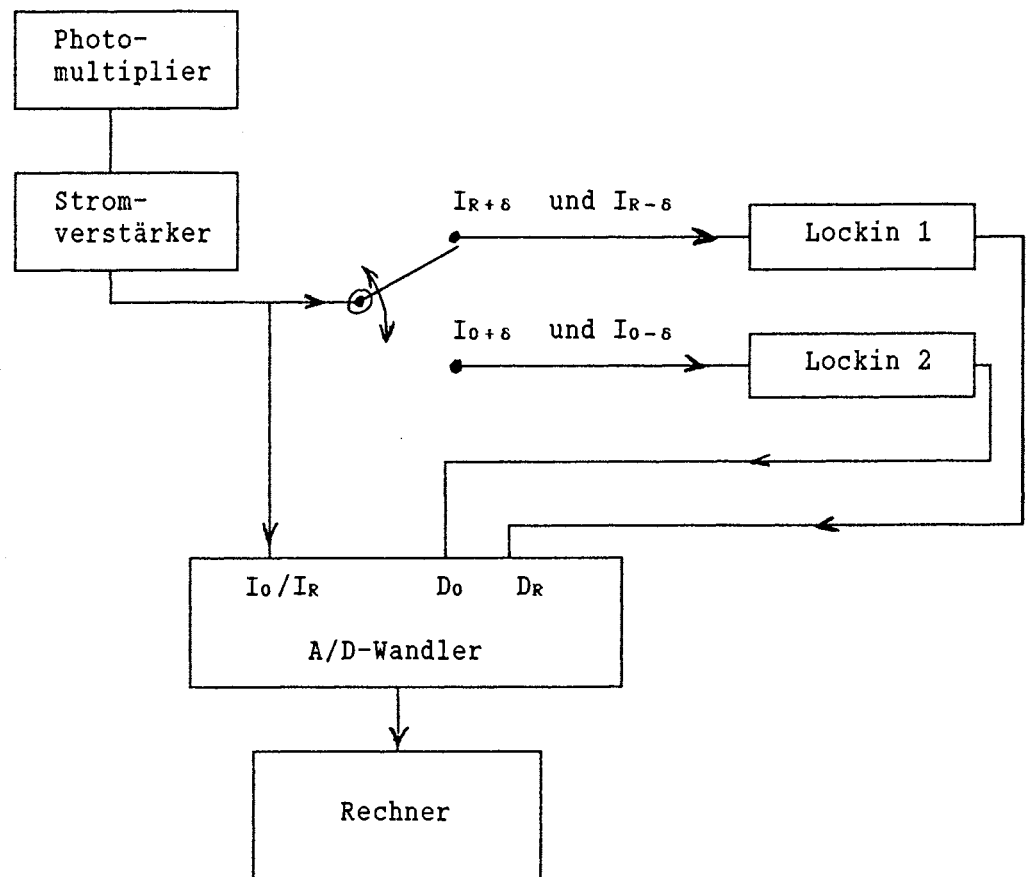


Fig. A4: Schematische Darstellung einer möglichen rechnergesteuerten Meßwertaufnahme für wellenlängenmodulierte Reflexionsmessungen.

Anhang Teil b.)Meßwerterfassungs- und Meßdatenauswertungssysteme:

1. Meßsteuerungs- und Meßwerterfassungssystem "PN414"

2. Auswertungssysteme bei 'BESSY':

2.1. Programmpaket "Monic" (Rechner: 'PDP11')

2.2. Programmpaket "Noelle" (Rechner: 'VAX')

2.3. Programmpaket "Nicole" (Rechner: 'VAX')

2.4. Programmpaket "Otto" (Rechner: 'VAX')

1. Meßsteuerungs- und Meßwerterfassungssystem "PN414"

Das Meßwertsteuerungs- und -erfassungssystem für Reflexionsmessungen mit einer konventionellen Lichtquelle (1 bis 6 eV) ist auf einen Kleinrechner 'PSI80' der Firma Kontron implementiert. Da das Programm (30 KByte) den gesamten zur Verfügung stehenden Speicher belegt, muß folgender Ablauf bei der Initialisierung des Rechners eingehalten werden:

- Nach dem Einschalten des Rechners ist der automatische Systemstart (mit der 'Systemdiskette') nach der akustischen Meldung ('Piepston') mit [ESC] zu unterbrechen.
- Anschließend erfolgt die Initialisierung der Halbleiterfloppy (HLF) und der benötigten Treiber mit:

\$DXX1=aktiv M-2=\$DXX1 \$PLOT=aktiv A-7=\$PLOT \$CPM=aktiv [Return]

Bei der Initialisierung der HLF sind die Eingaben 'J' zur Neuformatierung und '2' für die Zuweisung der Mediennummer nötig. Auf der Programmdiskette 'Meßwerterfassung' befinden sich die Quellcodes sowie ein ausführbares Programm zur Meßdatenerfassung. Mit der Eingabe "DO INIT01" werden die notwendigen Betriebssystemfunktionen auf die HLF übertragen. Nach dem Kopieren des Meßwerterfassungsprogramms "SS.COM" kann es von der HLF aus durch Aufruf des Namens "SS" gestartet werden.

Für Reflexionsmessungen existiert die aktuelle kompilierte Version: 'SS.COM'. Erzeugt werden kann die Version mit dem Linkbefehl:

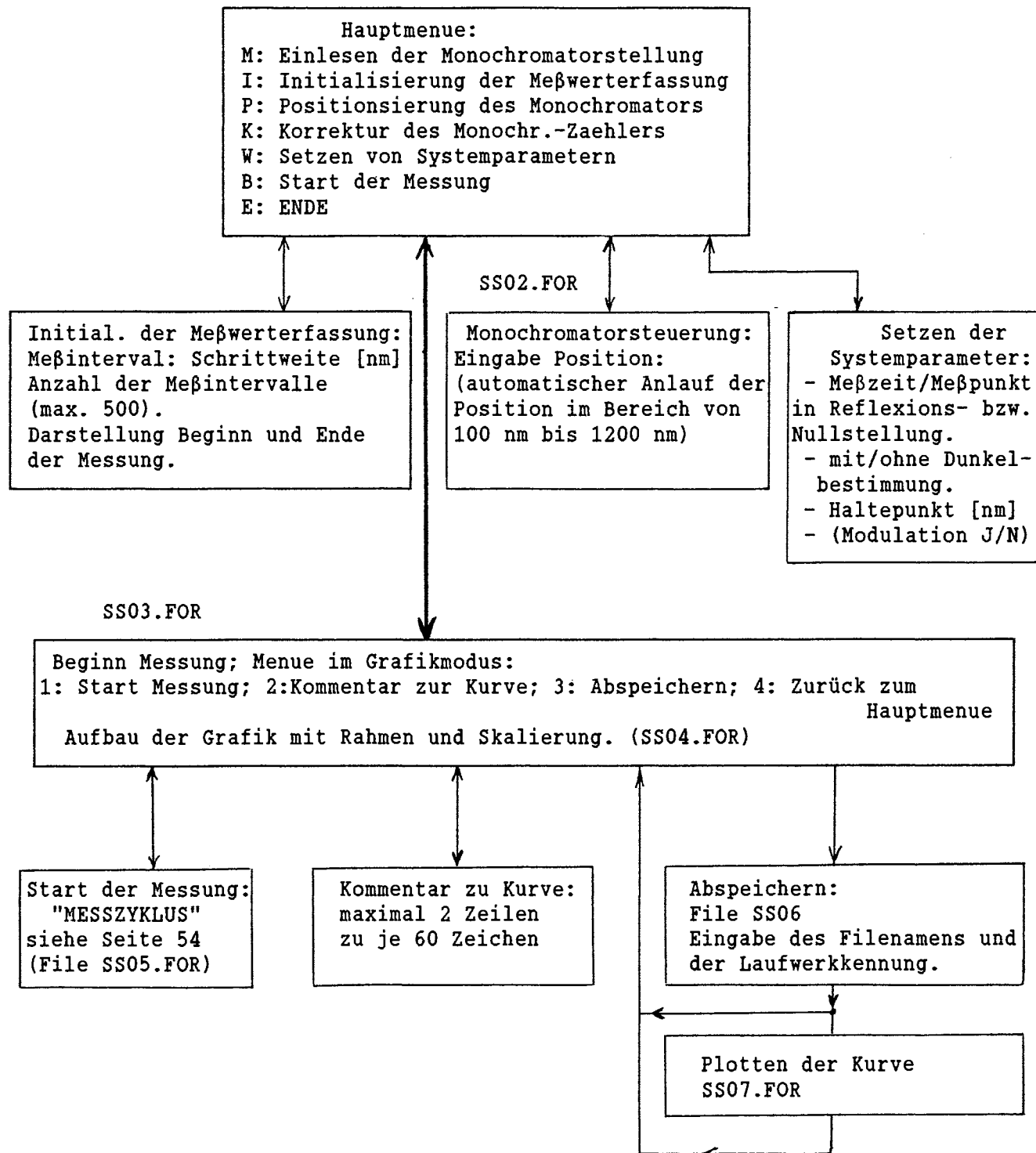
Link SS/N,SS01,SS02,SS03,SS04,SS05,SS06,SS07,MOT01/E [Enter]

wobei "SS01.OBJ" bis "SS07.OBJ" die übersetzten Fortran-Objektcodes und "MOT01.OBJ" den Objektcode des Assemblerfiles darstellen. "MOT01.OBJ" ist eine Bibliothek, die alle Ansteuerungsfunktionen des 5-Phasenschrittmotors zur Monochromatorsteuerung enthält. Die einzelnen Unterprogramme hierfür sind in meiner Studienarbeit beschrieben.

In den Fortranfiles "SS01" bis "SS07" sind die einzelnen Routinen zusammengefaßt, die im folgenden Diagramm schematisch skizziert werden.

Programmstruktur : Meßwertsteuerung und -erfassung ("PN414"):

File SS01.FOR



Meßdatenübertragung vom PSI80 auf ein IBM-Rechner (AT/XT)

Zur Auswertung werden die Meßdaten auf ein IBM/AT-kompatiblen Rechner überspielt und im IBM-Format abgespeichert. Von Dem IBM-Rechner können die Daten mit den Programmen 'KERMIT' bzw. 'NFT' auf die VAX-Anlage bei 'BESSY' zur weiteren Auswertung übertragen werden.

Datenübertragung PSI80 -> IBM:

- PSI80: -- serielle Schnittstelle A (Plotter)
- IBM: -- serielle Schnittstelle COM1

Übertragungsart: 9.6 KBaud; 7 Bitword; 1 Stopbit; even parit;

half duplex; CR; -- Kein Protokoll -

Für die Übertragung gibt es eine 'Rechnerkopplungsdiskette' auf der sich folgende Programme befinden:

- IBM.OBJ: Treiber für die serielle Schnittstelle. Beim Rechnerstart muß die Zuweisung *EAK \$IBM=aktiv E-4=\$IBM A-4=\$IBM \$CPM=aktiv* erfolgen.
- Inhalt.com: erzeugt ein Inhaltsverzeichnis einer Diskette
(z.B. Der Aufruf *Inhalt 1:*.DAT* erzeugt ein File INHALT.TXT das alle Filenamen vom Typ *.dat auf dem Laufwerk 1 enthält.)
- COPPSIAT: Basic-Programm zur Datenübertragung.

Auf der 'IBM-Seite' muß die serielle Schnittstelle in der 'AUTOEXEC.BAK' entsprechend initialisiert werden. Anschließend kann das Basic-Programm 'COPPSIAT' aufgerufen werden. Dabei ist darauf zu achten, daß zuerst das Programm auf der 'IBM-Seite' gestartet wird, da kein Handshake benutzt wird.

Da die ASCII-Codes der beiden Rechner nicht vollständig übereinstimmen, werden im Treiber 'IBM.OBJ' Escape-Sequenzen unterdrückt. Das Komma wird in ein Doppelkreuz (#) umgesetzt.

Für die Datenübertragung zur 'CD' und zur 'UNIVAX' gibt es ein modifiziertes Terminalemulationprogramm:

- "DIA" und "DIASUB" mit dem Treiber "CDNM" (nach A. Lucas)

PROGRAM monic

Version 0.0 Sept.87 N. Dietz

*** Auswertungsprogramm auf der PdP ***

Aufgebaut auf der Grundlage von Dianna nach Th. Bitzer.
 Es steht ein X-Speicher sowie 3 Y-Speicher zu je 500 Punkten zur
 Verfuegung. Jeder Y-Speicher kann seperat beschrieben und gelesen
 werden. Alle Y-Daten beziehen sich jedoch auf die gemeinsamen
 X-Koordinaten.

Befehlsliste:

=====

RE: Einlesen von verschiedenen Datenformaten:
 A: Alle Daten im Modulformat (Y1-,Y2-,Y3-Speicher)
 N: Nemoformat (Y1-Speicher)
 M: Moduldatenformat (nur Y1-Speicher=Reflektivitaet)
 D: UNI-Datenformat. Benutzt werden alle Y-Speicher. Die
 eingelesenen Daten werden gestuertzt.
 Y1: Reflektivitaet; Y2: Lampenspektrum auf 100 normiert

WR: Schreiben der X- und Y1-Daten auf ein File
 (Nemoformat, X-werte fallend sortiert in nm)

WW: Schreiben der Daten: X, Y1, Y2 auf ein anzugebendes File
 (Nemoformat, X-werte fallend sortiert in nm)

EV: X-Datenspeicher in eV bzw. nm umrechnen

DI: Dividieren von Y-Speicher 1 durch Y-Speicher 2

CO: Umkopieren von Y-Speicher nach Y-Speicher

PL: Plotten eines der Y-Speicher

PF: Plotten eines beliebigen Files

NO: Normierung eines Datenfelds

CU: Aufruf des Cursors. Die Cursorkoordinaten beziehen sich
 auf die definierten X- und Y-Datenbereiche.

BE: Schneiden eines Datenbereichs in einen markierten
 Intervall

AP: Korrektur eines Bereiches mit einer anzugebenden
 Funktion

PK: Einzelne Punkte des Spektrums korrigieren (Cursor-Modus)

ID: Identifizieren fuer Grafikausgabe auf den Linieprinter

CC: Loeschen des Alphanumerischen Bildschirms

CL: Loeschen des Grafikbildschirms

VT: Hardcopy des Grafikbildschirms auf den Linieprinter

EX: Ende des Programms

PROGRAMM "noelle"

```
*****
Vers. 0.0    22.10.87  dietz
Vers. 1.0    Dez.87   dietz
*****
```

Auswertungsprogramm mit 3 getrennten Filespeichern
 Ein Filespeicher besteht aus einem X- und zwei Y-Datenfelder
 zu je 2000 Punkten. Bei mathematischen Operationen auf unterschiedlichen
 Filespeichern werden unterschiedliche X-Datenfelder beruecksichtigt.

```
*****
```

```
RE:   Lesen von Daten im Nemoformat
WR:   Schreiben eines kompleteten Filespeichers
KF:   Bestimmung der Korrekturfunktion fuer die 2. Ordnung im Bereich
      von 220 bis 100 nm.
KO:   Korrektur einer Datenfeldes mit einer anzugebenden
      Korrekturfunktion unter Beruecksichtigung der echten
      Reflektivitaet bei halber Wellenlaenge
KR:   Korrektur eines Datenfeldes mit einer Korrekturfunktion. Der
      Wert bei halber Wellenlaenge wird mit einer Konstanten
      abgeschaezt.
BE:   Loeschen eines markierten Datenbereichs
AP:   Korrektur eines markierten Datenbereich mit einer
      anzugebenden Funktion.
PK:   Korrektur einzelner Datenpunkte
MU:   Multiplizieren von zwei beliebigen, jedoch
      unterschiedlichen Y-Datenspeicher
DI:   Teilen von zwei beliebigen, jedoch unterschiedlichen
      Y-Datenspeicher
CD:   Loeschen eines Y-Datenfeldes
AD:   Addition zweier Y-Datenfelder
AB:   Ableitung eines Y-Datenfeldes
FI:   Schreiben einer Konstanten in ein Y-Datenfeld
CO:   Kopieren eines Datenfeldes in ein anders
SU:   Subtraieren von zwei Y-Datenfelder
NO:   Normierung von Daten
EV:   Umrechnung eines X-Datenfeldes in eV oder nm
```

HP: Ausgabe auf den HP-Plotter
LA: Ausgabe auf den Laser-Drucker
VT: Zurueckschalten der Grafikausgabe auf den Bildschirm
FT: Glaettungsroutine ueber eine Fast-Fourier-Transformation
PL: Plotten eines Filespeicher (nur Y1-Datenfeld)
PF: Plotten eines beliebigen Files
UB: Beschriftung einer Kurve (Grafikmodus)
RA: Zeichnen eines Rahmens
CU: Aufruf des Cursor
AN: Aneinanderbinden von zwei Filespeichern
TX: Ausgabe des Grafiktextes
CC: Loeschen des Bildschirms
CL: Loeschen des Bildschirms
EX: --- Ende ----

Programm: "Nicole"

Vers. 2.0 Jan.88 dietz/Bitzer

*** Auswertungspaket fuer die Kramers-Kronig-Analyse ***

Befehlsatz:

=====

KK: Start Kramers-Kronig-Transformation

EP: Ausgabe von Refl., Eps2, und Phase Theta auf eine
Ausgabeeinheit

AB: Ableitungsfunktion

LO: Fitalgorithmus: Fit eines einzugebenden Epsilon2-Spektrums
(Die Anfangsfitdaten muessen in einen File vorliegen)

LL: Aufbau der optischen Konstanten: Reflek., Epsilon,...
aus einen Satz von theor. Lorentzlinien

PL: Ausgabe einer Kurve auf eine Ausgabeeinheit (ohne Rahmen)

RA: Rahmenausgabe auf eine Einheit

RE: Lesen von Reflexions- oder Epsilonsdaten

WR: Schreiben von Daten: 1: eps2(w); 2: 2. Ableitung
 3: Reflexion: 4: Theta
 5: eps1(w); 6: K(w)
 7: n(w)

HP: Ausgabe von Daten auf den HP-Plotter

LA: Ausgabe der Daten auf den LASER-Drucker

VV: Oeffnen eines neuen Grafikwindows auf den Bildschirm

VT: Grafikausgabe auf den Bildschirm zurueckschalten

CU: Aufruf des Cursors (nur fuer VT100-Bildschirm,
Kein Return, Abschluss mit 'S')

CC: Loeschen des Bildschirms (nur Alphanumerischer Teil)

CL: Loeschen der gesamten Bildschirm

EX: Exit

Kurzbeschreibung der einzelnen Routinen:

=====

Ableitungsfunktion:

Dietz/bitzer

06.02.88 version 1.0

nach der Methode der kleinsten Quadrate

Bronstein Seite 826 ff

mit einem Ausgleichspolynom 2. Grades ueber

N = nanz = 7 Punkte (variabel)

$f(x) = \text{con} + \text{lin} * x + \text{quad} * x^{**2}$

$[x1] = \text{SUM} (Xi) \quad i = 1 \text{ bis } N$

$[x2] = \text{SUM} (Xi^{**2}) \quad i = 1 \text{ bis } N$

...

$[x2y] = \text{SUM} (Xi^{**2} * Yi) \quad i = 1 \text{ bis } N$

...

Loesung des linearen Gleichungssystems

$\text{con} * N + \text{lin} * [x1] + \text{quad} * [x2] = [y1]$

$\text{con} * [x1] + \text{lin} * [x2] + \text{quad} * [x3] = [x1y]$

$\text{con} * [x2] + \text{lin} * [x3] + \text{quad} * [x4] = [x2y]$

Determinante: det

$$\det = \begin{vmatrix} N & [x1] & [x2] \\ [x1] & [x2] & [x3] \\ [x2] & [x3] & [x4] \end{vmatrix}$$

$$\text{con} = 1 / \det * \begin{vmatrix} [y1] & [x1] & [x2] \\ [x1y] & [x2] & [x3] \\ [x2y] & [x3] & [x4] \end{vmatrix}$$

$$\text{lin} = 1 / \det * \begin{vmatrix} N & [y1] & [x2] \\ [x1] & [x1y] & [x3] \\ [x2] & [x2y] & [x4] \end{vmatrix}$$

$$\text{quad} = 1 / \det * \begin{vmatrix} N & [x1] & [y1] \\ [x1] & [x2] & [x1y] \\ [x2] & [x3] & [x2y] \end{vmatrix}$$

-- IN --

X-Werte : energie (i)

Y-Werte : Ableit (i)

-- OUT --

X-Werte unveraendert

Y-Werte unveraendert

0. Ableitung in Ablei0

= Y=Werte korrigiert mit Ausgleichspolynom 2. Grades

1. Ableitung in Ablei1 (i)

2. Ableitung in Ablei2 (i)

ids = returncode

=====

```
=====
subroutine lorenfit ()
```

```
----- fit eines epsilon2 spektrums auf der Grundlage von
          klassischen gedampfen harmonischen Oszillatoren
          mit Lorentzkurven
```

```
          dietz
          20.01.88 Version 1.0
          28.01.88 Version 2.0
```

Auf Grund der eingegebenen Fitanfangswerte wird ein epsilon2-Spektrum berechnet und mit dem experimentellen Spektrum verglichen.

Eingangsparameter :

energiewerte in energie (x: max 2500)

experim. Epsilon2spektrum in eps2 (x)

Fitalgorithmus:

Das Variationsprinzip zur Minimierung des Abstandsquadrats geschieht mittels einer Evolutionsstrategie.

- maximale Anzahl der Kinder: 100
- Maximale Anzahl der Kurven: 50

Prinzip:

Es wird eine Anzahl (Anzkin) von Nachfolgern aus den Elternparametersatz ueber Zufallszahlen generiert. Das Kriterium, ob ein Nachfolger besser ist als die Eltern, wird ueber das Abstandquadrat (Chiquadrat) entschieden.

Die Eltern sterben in dieser Version auf jeden Fall aus, egal ob einer der Kinder besser ist oder nicht.

Die Variation der Schrittweite geschieht fuer die Lage, die Halbwertsbreite und der Oszillatorstaerke unabhaengig. Somit wird eine schnellere Konvergenz nach einpendeln der Schrittweiten erreicht.

Der Nachteil ist eine moegliche Oszillation des Chiquadr., wenn es bei verrauschten Spektren mehrere lokale Minima gibt. Am Anfang koennen auch groessere Oszillation auftreten, bis die richtige Schrittweite gefunden wurde.

Felder:

Eltern: Elt (6,50)

```
          ! ! _____ Anzahl der Fitkurven
          ! _____ 1. Wi - Energielage
          2. Ga - Halbwertsbreite
          3. Si - Oszillatorstaerke
          4. Fehwi = Fehlerbreite fuer die Energielage
          5. Fehga = Fehlerbreite fuer die Halbwertsbreite
          6. Fehos = Fehlerbreite fuer die Oszillator-
                    staerke
```

Parelt(6) : parameter der Eltern
 ! ___ 1. Anzahl der Oszillatoren
 ! ___ 2. Schrittweite fuer Wi (Anfang 1.0)
 ! ___ 3. Chiquadrat der Eltern
 ! ___ 4. Plasmafrequenz
 ! ___ 5. Schrittweite fuer Ga (Anfang 1.0)
 ! ___ 6. Schrittweite fuer Si (Anfang 1.0)

Kinder: Kind (100,6,50)
 ! ! ! ___ N-Oszillatoren (Fitkurven)
 ! ! ___ 1. Wi - Energielage
 ! ___ 2. Ga - Halbwertsbreite
 ! ___ 3. Si - Oszillatorstaerke
 ! ___ 4. RND Wi = Zufallszahlen (normalverteilt
 ! ___ 5. RND Ga zwischen
 ! ___ 6. RND Si -1 und +1)
 !
 ! ___ Anzahl der Kinder (i-te Kind)

Parkin (100,4) = Parameter der Kinder
 ! ___ 1. RND Wi = konstante Zufallszahl fuer
 ! ___ 3. RND Ga eine Generation fest.
 ! ___ 4. RND Si
 ! ___ 2. Chiquadrat des Kindes

Konstanten:

Kon = 1.4 : Konstante bei der Schrittweitenvariation
 kon1 = 1.3 : erhoehung der schrittweite , wenn Eltern
 besser waren als die Kinder

=====

subroutine lorentz ()

Aufbau der optischen Konstanten R,n,k und der dielektrische Funktion aus einen Satz von Lorentzlinien.

Die Parameter fuer die einzelnen Lorentzlinien werden aus einen anzugebenden Datenfile gelesen.

Aufbau der optischen Konstanten:

Osi: = i.te Oszillatorstaerke

Gami: = Halbwertsbeite des i.ten Oszillators

Ei: = Lage des i.ten Oszillators

Plas: = Konstanter Faktor

N: Anzahl der Oszillatoren (max. 50)

E: Energie

eps1: Realteil der dielektrischen Funktion

eps2: Imaginaerteil der dielektrischen Funktion

Ref: Reflektivitaet

Phas: Phase

n: Brechungsindex

K: Extinktionskoeffizient

$$\text{eps1}[x] = 1 + \text{Plas} * \sum_{i=1,N} \frac{\text{Osi}[x] * (\text{Ei}[x]**2 - E[x]**2)}{(\text{Ei}[x]**2 - E[x]**2)**2 + (E[x] * \text{Gami}[x])**2}$$

$$\text{eps2}(x) = \text{Plas} * \sum_{i=1,N} \frac{\text{Osi}[x] * E[x] * \text{Gami}[x]}{(\text{Ei}[x]**2 - E[x]**2)**2 + (E[x] * \text{Gami}[x])**2}$$

$$n[x] = \text{wurzel} \{ \text{eps1}[x] + \text{wurzel}(\text{eps1}[x]**2 + \text{eps2}[x]**2) \}$$

$$K[x] = \frac{\text{eps2}[x]}{2 * n[x]}$$

$$\text{Ref}[x] = \frac{(\text{n}[x] - 1)**2. + K[x]**2.}{(\text{n}[x] + 1)**2. + K[x]**2.}$$

$$\text{Phas}[x] = -1.0 * \text{atan} \left| \frac{2 * K[x]}{1 - \text{n}[x]**2 - K[x]**2} \right|$$

program Otto

Darstellung von Kurven:

=====

version 2.0

dietz dez. 87 /feb. 88

Kompatibel- / und aufgebaut auf "Splot" von Th. Bitzer

Befehlsliste:

=====

!:	Kommentar
XACHSE (begin,end):	
YACHSE (min,max):	
XLABEL (text):	X-achsenbeschriftung
YLABEL (text):	y-achsenbeschriftung
RAHMEN (anzahl,offset):	
NMARKE (richtung,laenge):	
TEXT (x-position,y-position,text):	
SHOEHE (textgroesse in cm):	Schriftgroesse
SEGMENT (nummer):	aktuelles Segment
FILE (filenamen)	File plotten
STIFT (nummer)	Stift waehlen
PLOTAXI	vollstaendige Beschriftung der y-Achse bei mehreren Segmenten
NOTIME	keine Datum und Zeit-Beschriftung
PLOTFKT (nummer)	kurvenart waehlen 1-6: verschiedene Linientypen 10-14: volle Markierungen mit Linien 20-24: leere Markierungen mit Linien mit Minus: nur Markierung/keine Linien
PLOTFIL (x-beginn,x-end)	Einschraenkung des Plot-bereiches auf einen kleiner x-Bereich
PLOTGRO (wert in cm)	Groesse der Markierungen
FAKTOR	Groesse der Darstellung (0.2 - 1.)
MARKFLAG	Markierungs-flagzaehler auf Null setzen
MARKLAB (wert in cm)	laenge der Markierungsstriche
MARKIER (wert in eV)	setzen einer Markierung
READDATA (x-wert,ywert)	einlesen von daten
PLOTDATA	plotten der eingelesenen Daten

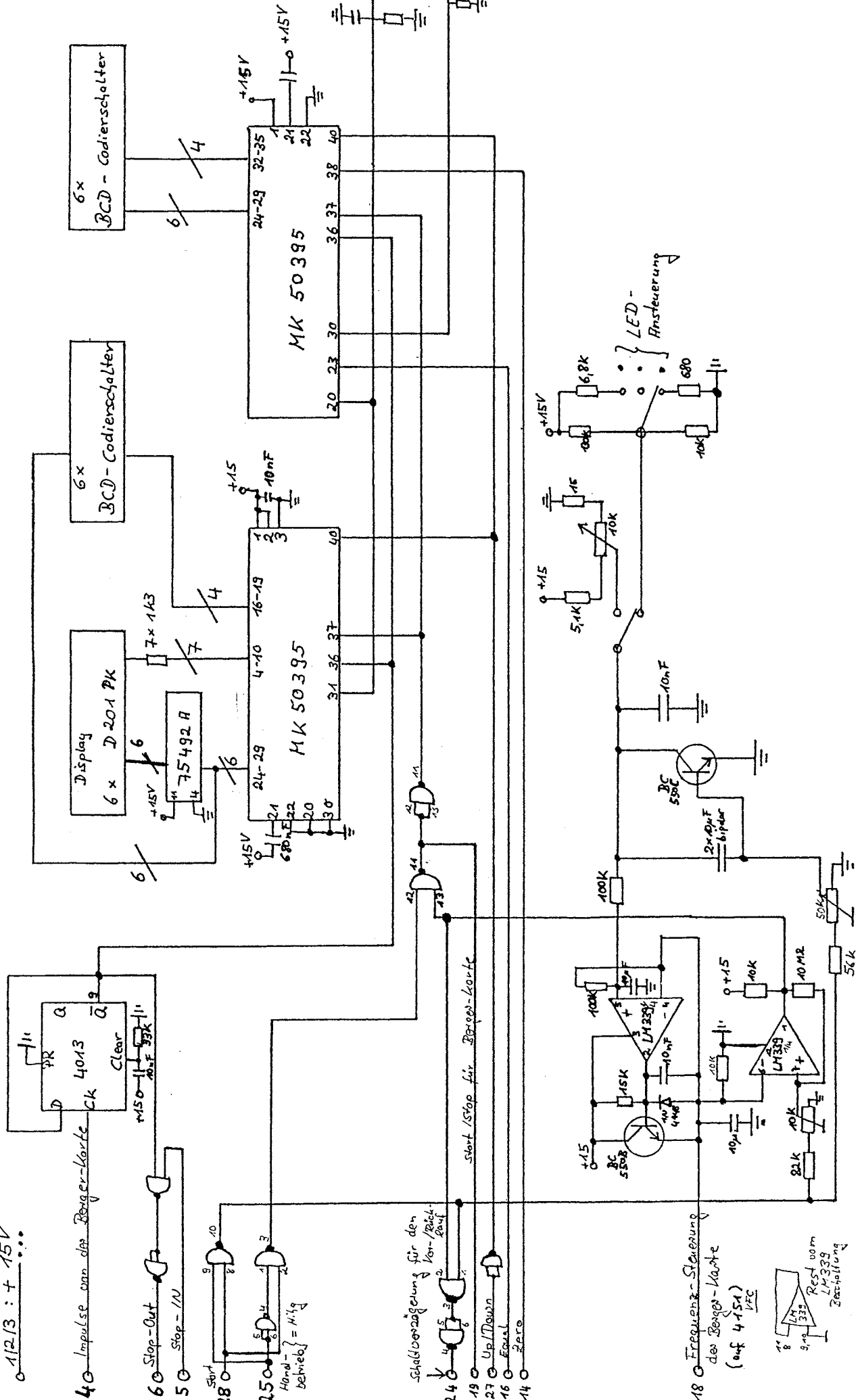
Anhang Teil c.)

Schaltpläne zu den Ansteuerungseinheiten:

- 1.) Erweiterungen der Schrittmotorsteuerung des Monochromators:
(Der Gesamtaufbau ist in meiner Studienarbeit 1985 beschrieben)
 - Erweiterter Schaltplan der Zählerkarte
 - Rückwärtige Pinbelegung der Zählerkarte.

- 2.) Ansteuereinheit des Drehspiegels:
(Schaltplan siehe Seite 45)
 - Rückwärtige Belegung der Ansteuerlogik
 - Rückwärtige Pinbelegung der 3-Phasen-Schrittmotorkarte
 - Anschlußbelegung der Netzkarte

0 1/2 1/3 : + 15V



6x BCD - Codierschalter

6x BCD - Codierschalter

Display 6x D 201 PK

MK 50395

MK 50395

BC 558

BC 558

18 Frequenz-Steuerung des Bogen-Karte (auf 4154) VTC

Rest vom LM339 Zerschaltung

29, 30, 31 GND

Rückwärtige Pinbelegung (31-polige Steckerleiste)

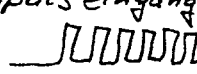
Nr.	Beschreibung	Nr.	Beschreibung
1	} + 15V	17	—
2		18	zur Motorkarte [B 15] Signal: 0-10V zur Frequenzsteuerung
3		19	Start-/Stop signal für die Motorkarte
4	Impulse von der Motor- ansteuerungskarte (v. Berger) [Pin B24]	20	—
5	Stopimpuls von der Verzweigungskarte (von Pin 18c)	21	⊘
6	Stopimpuls aus. (zu Pin 14c)	22	—
7	—	23	—
8	—	24	Vor- / Rücklauf - Ausgangssignal (zu Pin B 20)
9	—	25	Auswahl Hand- oder Rechnerbetrieb
10	—	26	—
11	—	27	up / down Rück- oder Vorlauf- } Eingangssignal
12	—	28	Start-signal für den Motorlauf
13	—	29	} GND
14	Zero-Impuls (zu Pin 15c) [generiert einen Stopimpuls!]	30	
15	—	31	
	Impuls (zu Pin 13c)		

Rückwärtige Pinbelegung (64-polige Steckerleiste)

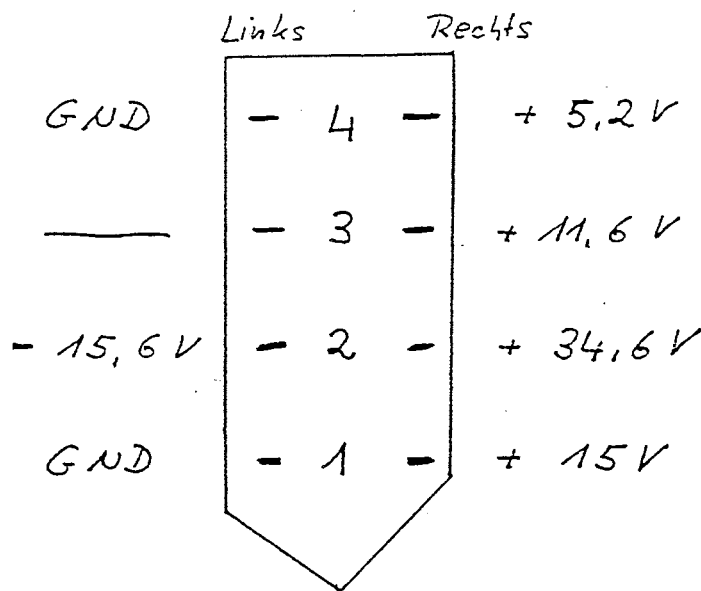
Nr.:	a	b	Nr.:	a	b
1	+ 15V	+ 15V	17	—	Lichtschranke Fotodiode
2			18	—	—
3			19	—	Eingang von ext. Impulsen zur Synchronisation
4			20	—	+ 15V zum Synchro-Schalter
5			21	—	Mittelabgriff Synchr.-Schalter
6			22	—	Ausg. ext./int. auf Schalter
7			23	—	Schalter ext./int. nach NAND
8			24	—	Schalter ext./int. oder Differenzglied
9			25	—	Astab II nach R 5 an Poti
10	Motor Reset nicht invertiert		26	—	Astab II vom Poti über 100k zu Pin 6
11	Motor Reset invertiert		27	—	—
12	Motor Impulse - nicht invertiert		28	GND für Rechner	Drehspiegel 1. Stellung
13	Motor Impulse invertiert		29	GND für Rechner	Drehspiegel 2. Stellung
14	—	Schalter Reset Drehspiegel	30	—	—
15	—	+15V für Resetschalter	31	GND	GND
16		Lichtschranke T. Transistor	32	GND	GND

2w Drehspiegelansteuerung

Rückwärtige Pinbelegung (31-polige Steckerleiste)

Nr.	Beschreibung	Nr.	Beschreibung
1	+5V für interne Logik	17	} M1 Ausgang Motor
2	_____	18	
3	Motor - Reset - Stellung +15V $\hat{=}$ Reset 0V $\hat{=}$ frei	19	
4	Drehrichtung	20	_____
5	Impulseingang +15V  +15V 0V Pulsanstand min. 2ms	21	} M2 Ausgang Motor
6	_____	22	
7	_____	23	
8	_____	24	_____
9	_____	25	} M3 Ausgang Motor
10	} +35V Betriebsstrom	26	
11		27	
12		28	
13	} +11.6V Ruhestrom	29	} Masse Motor
14		30	
15		31	

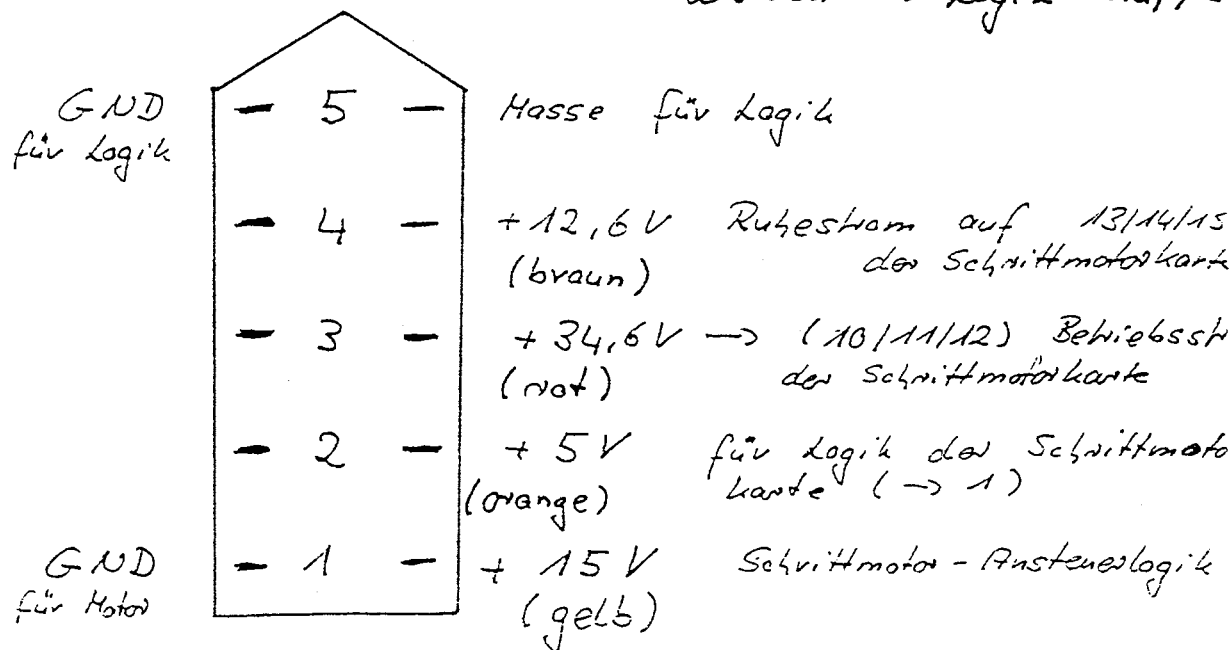
Rückwärtige Pinbelegung



Drehspiegel - Modul - Netzanschluß

Rückwärtige Belegung

⚡ Vorsicht!
Stecker können vertauscht eingesteckt werden => Logik - Kappu



Anhang Teil d.)

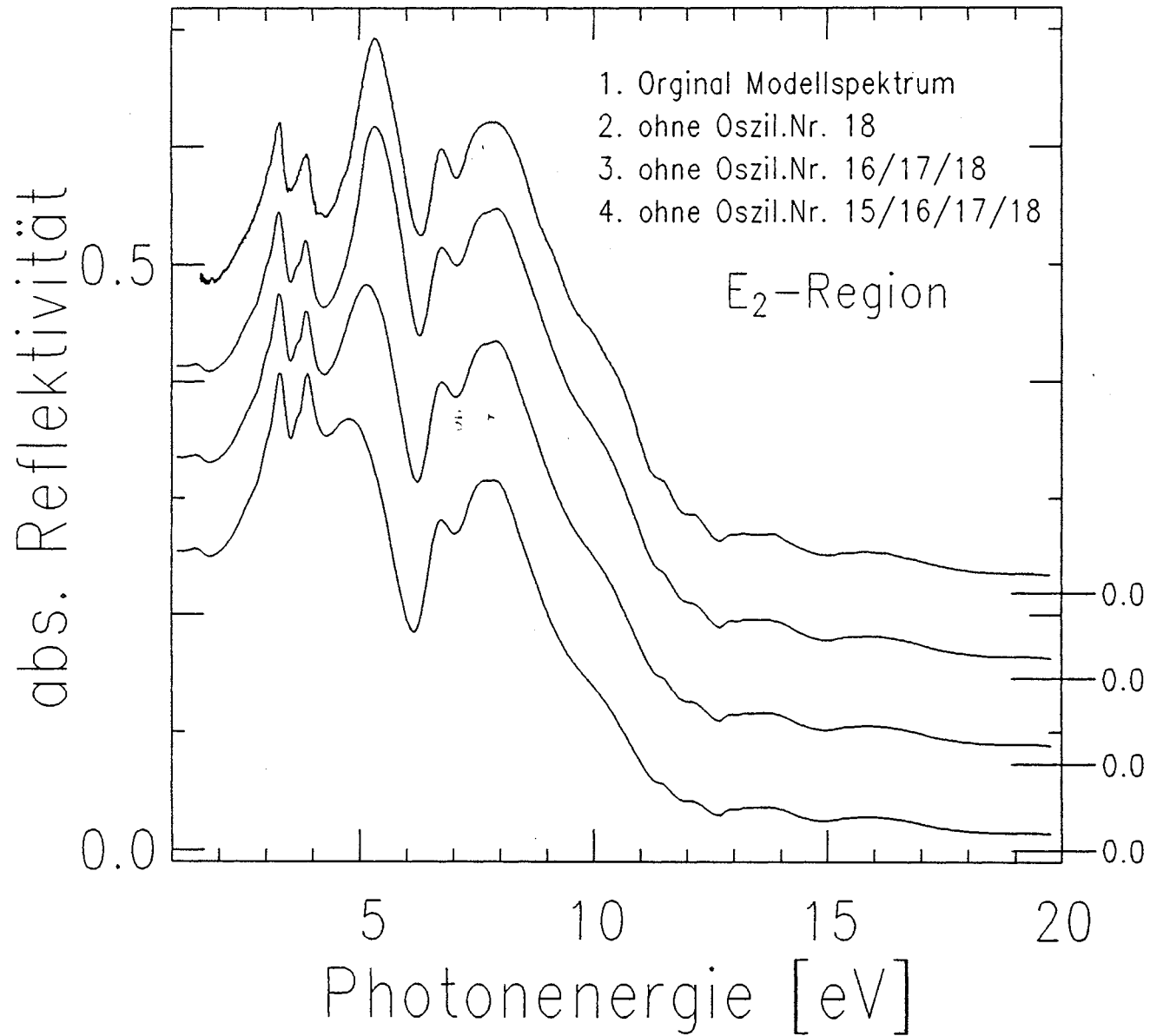
Abbildungen zum Aufbau des
 ϵ_2 -Modellspektrums (CdTe, T=300K)

Der Einfluß der Oszillatoren im ϵ_2 -Spektrum auf die Form des Reflexionsspektrums soll dargestellt werden. Dazu wird ein Modellspektrum für ϵ_2 unter Verwendung von Lorentzlinien so aufgebaut, daß sich aus ihm das Reflexionsspektrum in seinen experimentellen Verlauf ergibt (CdTe, T=300K). Danach werden aus bestimmten Regionen des Modellspektrums Oszillatoren entfernt und die dadurch verursachten Änderungen im Reflexionsspektrum beobachtet:

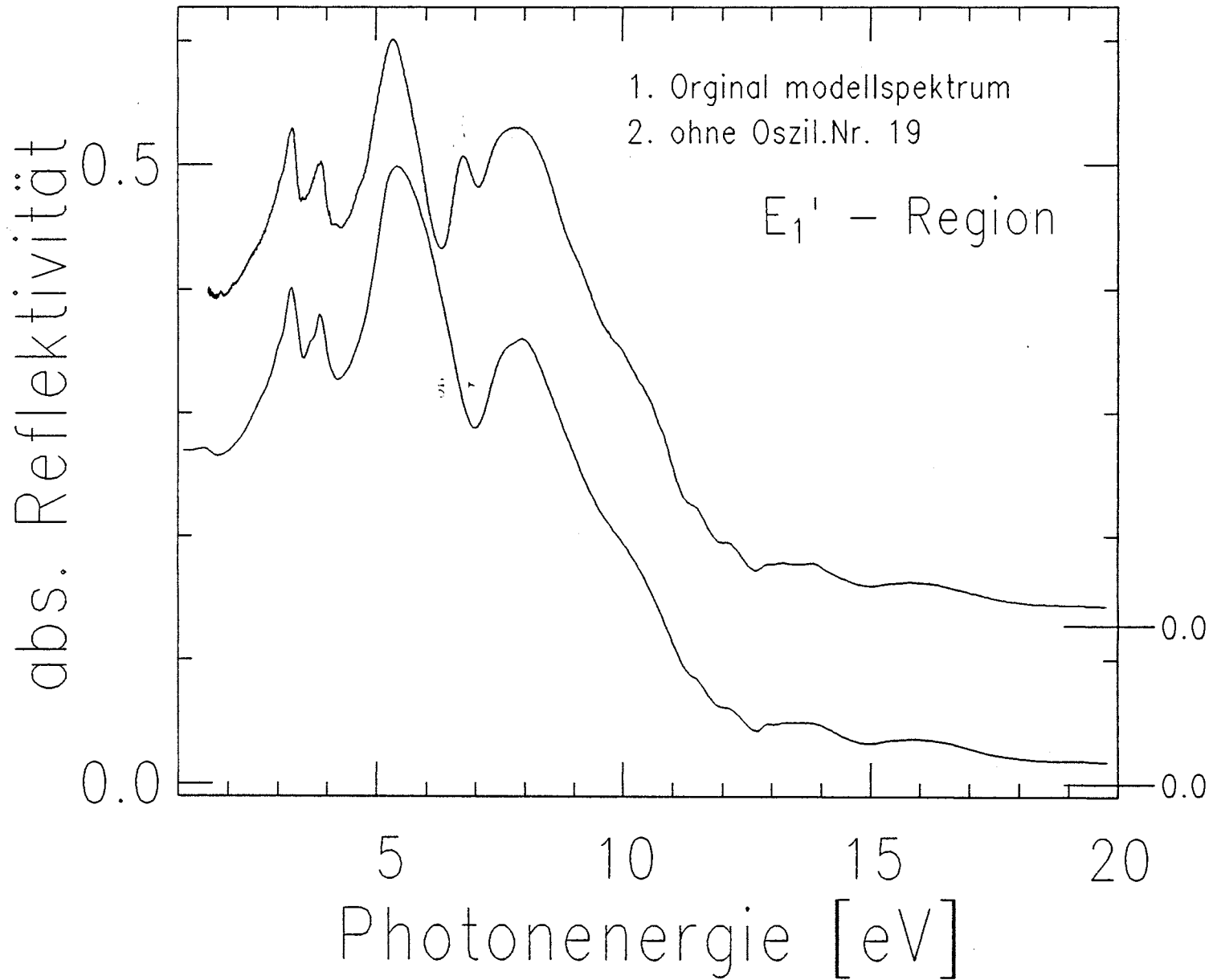
- E_2 -Region
- E_1' -Region
- $E_1' + \Delta_1$ -Region
- E_3 -Region
- Tabelle der Lorentzoszillatoren.

Ähnliche Betrachtungen lassen sich für die Verbreiterung von Lorentzoszillatoren oder die Veränderung von Oszillatorstärken in bestimmten Regionen durchführen. Dies ermöglicht beim Einbau von Fremdatomen (z.B. Mangan) eine qualitative Einschätzung der Auswirkungen auf die Bandstruktur des CdTe-Kristalls.

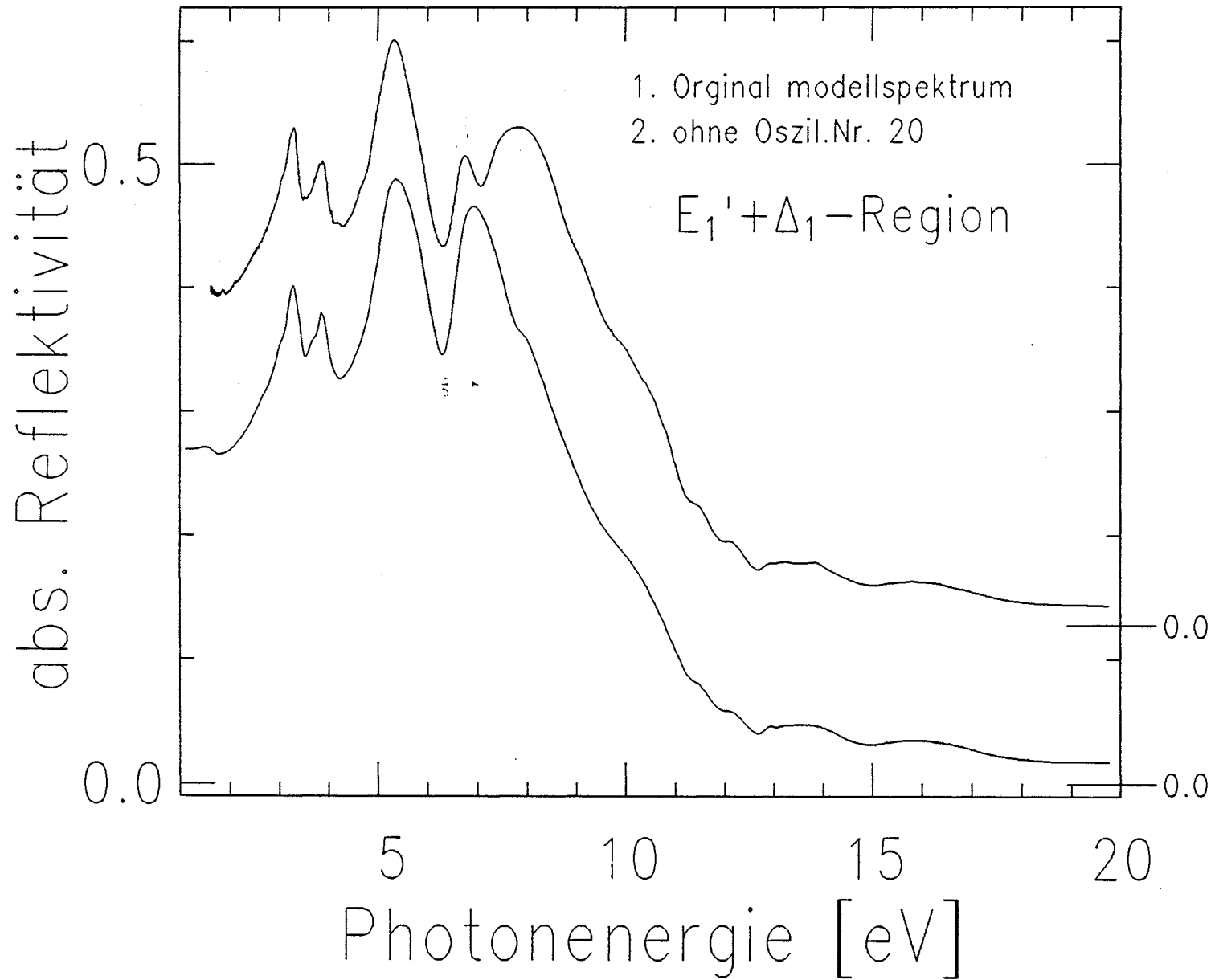
CdTe ($T=300\text{K}$)



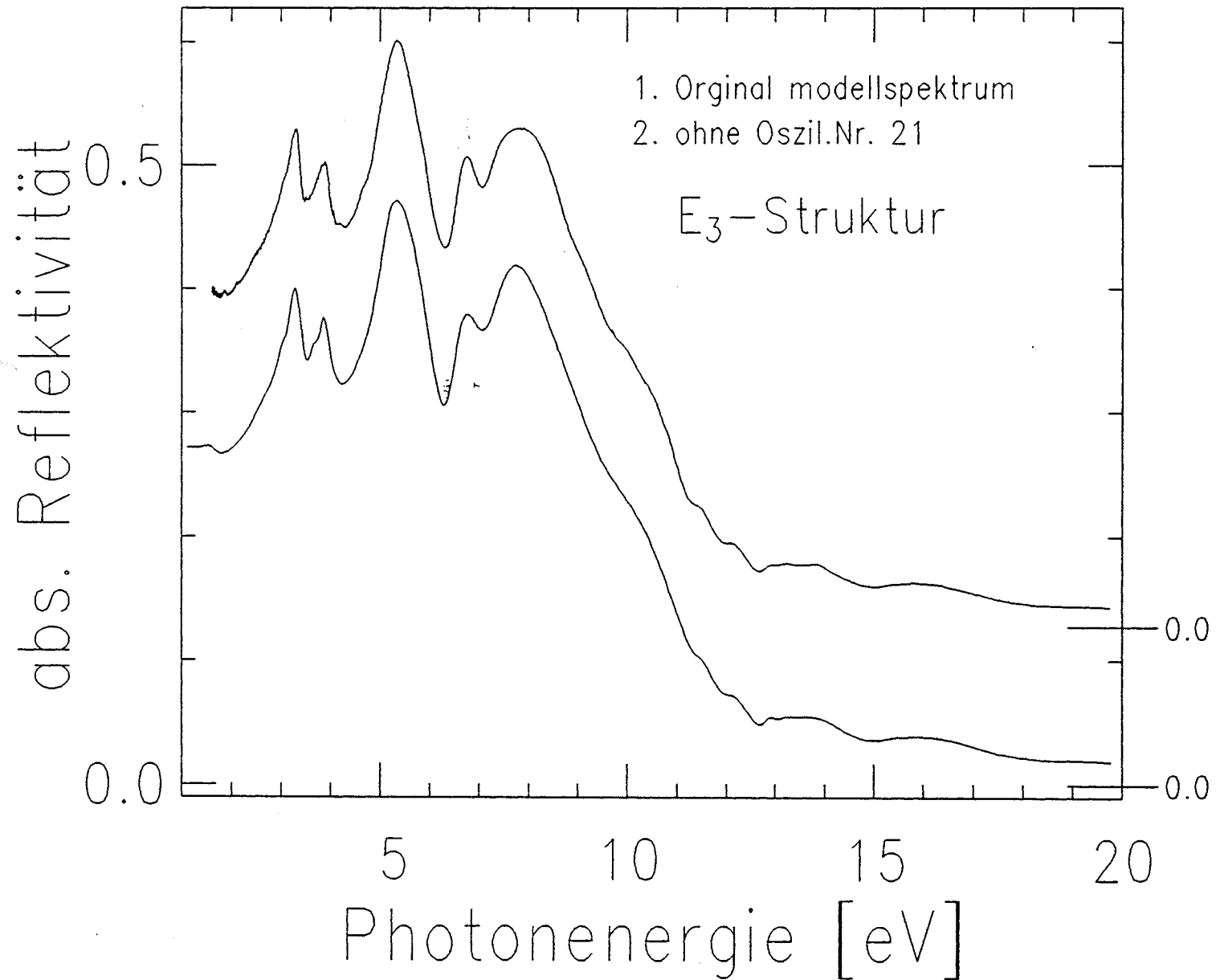
CdTe (T=300K)



CdTe (T=300K)



CdTe ($T=300\text{K}$)



! Nr. !	! Lage !	! Halbwerts- ! breite !	! Oszillator- ! staerke !
! 1. !	! 1.611277 !	! 0.399297 !	! 0.030725 !
! 2. !	! 1.485917 !	! 1.946188 !	! 0.337380 !
! 3. !	! 2.543012 !	! 4.141549 !	! 0.037651 !
! 4. !	! 2.735942 !	! 0.627141 !	! 0.242070 !
! 5. !	! 2.963475 !	! 2.343959 !	! 1.024640 !
! 6. !	! 3.028313 !	! 0.358409 !	! 0.250545 !
! 7. !	! 3.257777 !	! 0.309778 !	! 0.508731 !
! 8. !	! 3.626498 !	! 1.554254 !	! 0.516779 !
! 9. !	! 3.638511 !	! 0.288685 !	! 0.175034 !
! 10. !	! 3.826667 !	! 0.258136 !	! 0.208428 !
! 11. !	! 4.039797 !	! 6.463666 !	! 3.647707 !
! 12. !	! 4.471466 !	! 3.612384 !	! 0.182830 !
! 13. !	! 4.472077 !	! 1.396431 !	! 1.052883 !
! 14. !	! 4.507798 !	! 1.456474 !	! 0.400273 !
! 15. !	! 4.836024 !	! 1.022721 !	! 0.884550 !
! 16. !	! 5.023459 !	! 0.724091 !	! 0.529179 !
! 17. !	! 5.064179 !	! 0.494502 !	! 0.200718 !
! 18. !	! 5.146735 !	! 4.056851 !	! 0.518501 !
! 19. !	! 6.500181 !	! 0.661039 !	! 0.579123 !
! 20. !	! 7.257681 !	! 1.046183 !	! 0.656884 !
! 21. !	! 7.831589 !	! 0.515742 !	! 0.031972 !
! 22. !	! 8.149646 !	! 2.810362 !	! 0.093928 !
! 23. !	! 8.570376 !	! 2.077847 !	! 0.109456 !
! 24. !	! 9.334137 !	! 10.392480 !	! 0.151274 !
! 25. !	! 9.207880 !	! 1.923442 !	! 0.000925 !
! 26. !	! 9.233900 !	! 3.383669 !	! 0.003858 !
! 27. !	! 9.843550 !	! 2.128408 !	! 0.188780 !
! 28. !	! 9.624537 !	! 2.106113 !	! 0.036676 !
! 29. !	! 9.778375 !	! 2.516482 !	! 0.144579 !
! 30. !	! 11.420992 !	! 0.456205 !	! 0.023541 !
! 31. !	! 12.068678 !	! 0.661290 !	! 0.062877 !
! 32. !	! 12.721539 !	! 12.394670 !	! 0.364588 !
! 33. !	! 12.827876 !	! 0.352311 !	! 0.031205 !
! 34. !	! 13.014355 !	! 0.758821 !	! 0.014189 !
! 35. !	! 13.151524 !	! 0.295970 !	! 0.007541 !
! 36. !	! 13.430299 !	! 1.474135 !	! 0.317781 !
! 37. !	! 13.913179 !	! 0.968321 !	! 0.047269 !
! 38. !	! 14.450061 !	! 5.903927 !	! 0.238605 !
! 39. !	! 14.711606 !	! 2.863113 !	! 0.067955 !
! 40. !	! 15.407061 !	! 2.008745 !	! 0.419671 !
! 41. !	! 15.225726 !	! 0.500390 !	! 0.008332 !
! 42. !	! 15.938801 !	! 1.349900 !	! 0.084858 !
! 43. !	! 16.547621 !	! 1.465623 !	! 0.116948 !
! 44. !	! 15.273275 !	! 4.005555 !	! 0.042257 !
! 45. !	! 17.799931 !	! 1.977436 !	! 0.096111 !
! 46. !	! 17.924534 !	! 4.871655 !	! 0.187713 !
! 47. !	! 19.099922 !	! 1.963655 !	! 0.178191 !
! 48. !	! 22.182314 !	! 8.067074 !	! 3.922936 !

Literaturverzeichnis

- /Alo88/** M. Alouani, L. Brey and N.E. Christensen;
Phys. Rev. B. Vol 37,3, 1167 (1988)
- /Asp80/** D.E. Aspnes, in Handbook of Semiconductors
Vol. 2, S. 111-129, (1980)
- /Bal72/** M. Balkanski; S531-570 in Optical Properties of Solids ed. by
F. Abelès 1972; North-Holland: ISBN 0-7204-0204-2
- /Bal84/** A. Balzarotti, N. Motto, A. Kisiel, M. Zimnal-Starnawska,
M.T. Czyzyk, M. Podgorny; Phys. Rev. B Vol. 31 Nr. 12 1984
- /Bal87/** A. Balzarotti, M. De Crescenzi, R. Messi, N. Motto, and F. Patella;
Phys. Rev. B Vol. 36 Nr. 14 1987
- /Bas83/** F. Bassani, A. Altarelli: Interaction of Radiation with Condensed
Matter in: Handbook on Synchrotron Radiation 1, Ed. E.E. Koch,
North Holland, 1983
- /Bes79/** Berliner Elektronenspeicherring Gesellschaft für Synchrotron-
strahlung m.b.H. (BESSY), Jahresbericht 1979 und 1983.
- /Bit88/** T. Bitzer; Diplomarbeit: Institut für Festkörperphysik, TU Berlin
(noch nicht abgeschlossen)
- /BroVL/** Broser; Vorlesungsskript: Festkörperphysik Teil E, am Institut für
Festkörperphysik, TU Berlin,
- /Bro88/** Broschat; Materiallabor der TU Berlin, persönliche Mitteilung (1988)
- /Bru83/** R. Brun del Re, T. Donofrio, J. Avon, J. Majid, and J.C. Woolley;
Il Nuova Cimento Vol 2D, No 6, Nov. 1983
- /Büc84/** R. Bücken; Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, Institut für
Festkörperphysik, 1984
(siehe auch: J. Phys. C: Solid State Phys.(1985) 661-667)
- /Cad85/** N. A. Cade and P.M. Lee; Solid State Communications,
Vol. 56, No. 7, pp.637-641, 1985.
- /Car63/** M. Cardona, D. L. Greenaway; Phys. Rev. B, 131,1, 98-103 (1963)
- /Car64/** M. Cardona, D. L. Greenaway; Phys. Rev. B, 133,6, 98-103 (1964)
- /Car69/** M. Cardona; Modulation Spektroskopie in :
Solid State Physics 11 (1969)
- /Car69/** M. Cardona and R. Haensel; Phys. Rev. B.; 1,6, 2605 (1970)
- /Cha72/** D.J. Chadi, J. Walter, M.L. Cohen, Y. Petroff, M. Balkanski;
Phys. Rev. B. 5, 3058 (1972)
- /Cha88/** V. Chab, G. Paulucci, K.C. Prince, M. Surman and A.M. Bradshaw;
Phys. Rev. B, submitted (1988)

- /Che73/** J. R. Chelikowski und M. L. Cohen;
Phys. Rev. Letters 27 1582 (1973).
- /Che76/** J. R. Chelikowski und M. L. Cohen; Phys. Rev. B.; 14,2 566 (1976).
- /Coh70/** M.L. Cohen und Volker Heine; Solid State Physics,
Vol 24 38-246 (1970)
- /CHR73/** J.T. Cox, G. Has, J.B. Ramsey and W.R. Hunter;
J. Opt. Soc. Am 63, 435 (1973)
- /Coh82/** M.L. Cohen und J.R. Chelikowsky; S.219 in Handbook of
semiconductors Vol 1, ed. by T.S. Moss 1982; ISBN 0-444-85346-4
- /Don84/** T. Donofrio, G. Lamarche, and J.C. Woolley;
J. Appl. Phys. Vol 57,6 March 1985
- /Fla86/** E. Flach; Diplomarbeit, Institut für Festkörperphysik,
TU Berlin (1986)
- /Fre73/** John L. Freeouf; Phys. Rev. B Vol. 7,8 S.3810-3830, (April 1973)
- /Gme76/** Handbuch der anorganischen Chemie; Systemnr. 56, Band C6,
S.311ff (1976)
- /Har72/** G. Harbeke; S22-92 in Optical Properties of Solids ed. by F. Abelès
1972; Norht-Holland: ISBN 0-7204-0204-2
- /Har80/** Walter A. Harrison; Electronic Structure and the Properties of Solid,
(1980); ISBN 0-7167-1000-5
- /Has84/** K.C. Hass; Dissertation: Topics in the Electronic Theorie of
Disordered Semiconductor, Thesis, Havard University Cambridge,
Massachusetts (1984)
- /Him80/** F.J. Himpsel, D.E. Eastman, E.E. Koch and A.R. Williams;
Phys. Rev. B., 22,10 4604 (1980)
- /Jun86/** C. Jung, E. Flach, H.-E. Gumlich, M. Krause, A. Krost; Reprint from
Proc. 18th. Intern. Conf. Physics of Semiconductors, Stockholm 1986,
ed. O. Engström, World Scientific Publ. 1987, Singapoore, p. 1769;
sowie persönliche Mitteilungen
- /Jun88/** C. Jung, Th. Bitzer, N. Dietz, E. Flach; Apparative Erweiterungen
an der Reflexionsapparatur für den Energiebereich von 4 bis 25 eV.
- /Jez83/** Krzysztof Jeziarski; J. Phys. C.: Solid State Phys. 17, 475 (1984)
- /Ken80/** T. Kendelewicz; Solid State Commun., 36, 127-131 (1980)
- /Ken81/** T. Kendelewicz; J. Phys. C., Solid State Phys. 14, 407-411 (1981)
- /Kis86/** A. Kisiel, M. Zimnal-Starnawska, F. Antonangeli, M. Piacentini,
N. Zema; Il Nuova Cimento 1986
- /Ki286/** A. Kisiel, J. Oleszkiewicz, A. Rodzik, F. Antonangeli, M. Piacentini,
N. Zema, A. Balzarotti, and A. Mycielski; Acta Physica Polonica,
Vol. A71, No 2, 1986

- /Kis87/** A. Kisiel, M. Piacentini, F. Antonangeli, J. Oleszkiewicz, A. Rodzik, N. Zema, and A. Mycielski; J. Phys. C 1987
- /Kow85/** B. J. Kowalsky, B. A. Orlowski : Acta Physica Polonica Vol A67 (1985).
- /Kra86/** Martin Krause : Dissertation, Technische Universität Berlin; Institut für Festkörperphysik 1986.
(siehe auch Phys. Rev. B - in Druck - 1988).
- /Lau85/** P. Lautenschlager, S. Logothetidis, L. Vina, M. Cardona; Phys. Rev. B, Vol 32, Nr 6, 3811 ff, (1985)
- /Lar85/** B.E. Larson, K.C. Hass and H.Ehrenreich; Solid State Communications, Vol 56, Nr 4, 347-350, (1985)
- /Lee86/** Y. R. Lee and A.K. Ramdas; Phys. Rev. B Vol. 33 Nr. 10; 1986
- /Ley74/** L. Ley, R. A. Pollak, F.R. McFeely, S.P. Kowalczyk, and D.A. Shirley; Phys. Rev. B Vol. 9,2 S.600-621, (1974)
- /Ley87/** L. Ley, M. Taniguchi, J. Ghijsen and R.L. Johnson; Phys. Rev. B., 35,6 S.2839 (1987)
- /Mag87/** K.O. Magnusson, U.O. Karlsson, D. Straub, S.A. Flodström, and F.J. Himpsel; Phys. Rev. B., Vol 36,12, p. 6566 (1987)
- /Mas86/** J. Masek, B. Velicky and V. Janis; Acta Polonica No. 6 Vol A69 S. 1107 (1986)
- /Mon84/** B. Montegu and A. Laugieer; J. Appl. Phys. 56(11), 3061 (1984)
- /Mot85/** N. Motta, A. Balzarotti, P. Letardi, A. Kisiel, M.T. Czyzyk, M. Zimnal-Starnawska, and M. Podgorny; Solid State Commun. Vol. 53,6 509 (1985)
- /Oel82/** P. Oelhafen, M.P. Vecchi, J.L. Freeouf, V.L. Moruzzi; Sol. State Commun. 44 1547 (1982)
- /Ole87/** J. Oleszkiewicz, A. Kisiel, and A. Rodzik; Solid State Commun. 1987
- /Orl79/** B.A. Orlowski; Phys. Stat. Sol. (b) 95 K31 (1979)
- /Phi70/** J.C. Phillips, J.A. Van Vechten; Phys. Rev. B., 2,6 2147 (1970)
- /Pod83/** M. Podgórny und J. Oleszkiewicz; J. Phys. C, Solid State Phys., Vol 16 (1983) 2547-2557
- /Pod88/** M. Podgórny; Z. Phys. B - Condensed Matter 69, 501-509 (1988)
- /Ric86/** D. Ricken; Studienarbeit, Institut für Festkörperphysik, TU Berlin (1986)
- /Sai72/** K. Saito, A. Ebina, T. Takahashi; Solid State Commun. Vol 11, p 841-843, (1972)
- /Sam67/** J.A.R. Samson; Techniques of Vacuum Ultraviolet Spectroscopy, J. Wiley and Sons, New York 1967

- /San70/** R. Sandrock; in Festkörperprobleme 10; Advances in Solid State Physics, 1979 (S. 283-314). (Pseudopotential in der Theorie der Halbleiter)
- /Tan86/** M. Taniguchi, L. Ley, R.L. Johnson, J. Ghijsen, and M. Cardona; Phys. Rev. B Vol. 33,2 S.1206-1212, (1986)
- /Tan87/** M. Taniguchi, M. Fujimori, M. Fujisawa, T. Mori, I. Souma, and Y. Oka; Solid State Commun. Vol. 62,6 pp.431-434, (1987)
- /The76/** D. Theis; Dissertation: TU Berlin, Fachbereich Physik (1976)
- /Ves71/** C. J. Vesely; Phys. Rev. B Vol 4, Nr. 2, p 451-462 (1971)
- /Ves72/** C. J. Vesely; Phys. Rev. B Vol 5, Nr. 6, p 2296-2301 (1972)
- /Vel68/** Hans W. Verleur: J. of the Optical Society of America Vol 58, No. 10, p 1356 ff; (1968).
- /Wal70/** John P. Walter and Marvin L. Cohen; Phys. Rev. B Vol. 1,6 S.2661-2667, (1970)
- /Web81/** C. Webb, M. Kaminska, M. Lichtensteiger, J. Lagowski; Solid State Commun. 40, 609 (1981)
- /Zun85/** Alex Zunger and S. Wei; Ann. Rev. Mater Sci. S.411-453 (1985)

Diese Arbeit wurde an Institut für Festkörperphysik der TU-Berlin und an der Speicherringanlage der Berliner Elektronenspeicherringgesellschaft für Synchrotronstrahlung GmbH (BESSY) unter der wissenschaftlichen Leitung von Herrn Prof. H.-E. Gumlich durchgeführt.

An dieser Stelle möchte ich all jenen danken, die auf verschiedenste Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Folgenden Personen gilt mein besonderer Dank:

- Herrn Prof. H.-E. Gumlich und Herrn M. Krause für die Themenstellung und ihre Unterstützung und Ermunterung.
- Herrn Prof. I. Broser für die Bereitschaft, die Beurteilung dieser Arbeit zu übernehmen.
- Herrn Busse für die umfangreichen Hilfestellungen beim Aufbau der Reflexionsapparatur am Institut.
- Den Mitarbeitern der TU-Werkstatt unter Leitung von Herrn Fischer für die zügige und präzise Ausfertigung der mechanischen Konstruktionen.
- Herrn B. Schöler für die stets schnelle Anfertigung zahlreicher Bestandteile der Meßanordnung.
- Herrn Ch. Jung für wichtige Diskussionen und Anregungen und seinen wesentlichen Beitrag zum Aufbau der 'BESSY'-Apparatur.
- Herrn H.J. Morus für die stets fachkundigen Ideen beim Aufbau der elektronischen Schaltungen.
- Herrn U. Middelman für die zahlreichen Anregungen, die sich in Form und Inhalt dieser Arbeit widerspiegeln.
- Herrn Th. Bitzer für die Hilfe in den kurzen Meßzeiten bei 'BESSY', sowie den gemeinsamen Diskussionen, die zur Weiterentwicklung der Meßapparaturen und zum gemeinsamen Aufbau der Auswertungsprogramme führten.