

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Untersuchungen zur Wechselwirkung von C_{60} mit Si(111)-Oberflächen und zur Grenzflächendotierung von Metall-Si-Kontakten mit C_{60} durchgeführt. Die wesentlichen experimentellen Ergebnisse lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. Wechselwirkung von C_{60} mit Si(111)-Oberflächen

a) Si(111)- 7×7

Mit AES konnte gezeigt werden, daß C_{60} auf Si(111)- 7×7 -Oberflächen anfänglich Lage für Lage aufwächst. Das bedeutet, daß keine chemische Reaktion zwischen C_{60} und Si auftritt, und ermöglicht zudem die direkte Kalibrierung der Bedeckungsskala an der Probe. Der Wachstumsmodus deutet verglichen mit der intermolekularen Wechselwirkung auf eine stärkere Wechselwirkung zwischen Molekül und Oberfläche. Diese schränkt die Mobilität der Moleküle auf der Oberfläche ein und verhindert das Zusammenwachsen der Moleküle zu Inseln.

Mit der C_{60} -Bedeckung nimmt die Intensität der Reflexe im LEED-Bild ab, bis bei 1 ML C_{60} keine Reflexe mehr zu beobachten sind. Ab 3 ML C_{60} zeigt sich das zweidomänige 1×1 -Muster der unrekonstruierten fcc- C_{60} (111)-Oberfläche. Die Kantenlänge der Oberflächenelementarmasche wurde in Übereinstimmung mit dem Abstand nächster Nachbarn im fcc- C_{60} zu $1,0 \pm 0,05$ nm bestimmt. Die Ausrichtung der um 22° gegeneinander gedrehten Domänen paßt gut zu dem bestehenden Strukturmodell [Che94b], nach dem ein Molekül pro 7×7 -Einheitszelle im Eckloch und sechs weitere zwischen je zwei Adatomen adsorbieren.

Erwärmt man C_{60} -Schichten auf Si(111)- 7×7 -Oberflächen, so setzt ab 250°C die Desorption der Moleküle ein, welche nicht direkt auf der Oberfläche gebunden sind. Im Temperaturbereich von $300 - 550^\circ\text{C}$ ist genau eine Monolage C_{60} auf

Si(111)- 7×7 -Oberflächen stabil, welche in dieser Arbeit als thermisch erzeugte C_{60} -Lage bezeichnet wurde. Oberhalb von 600°C setzt eine Veränderung der C_{60} -Moleküle ein, die in deren Zerfall ab etwa 850°C endet. Ein Teil der C-Atome desorbiert, ein weiterer Teil wird ins Si eingebaut.

Die Ergebnisse der XPS-Untersuchungen zeigen, daß sich die Bandverbiegung der reinen Si(111)- 7×7 -Oberfläche unter C_{60} -Schichten nicht ändert, auch wenn diese auf 400°C erwärmt werden. Bei Bedeckungen unterhalb von 1 ML C_{60} wurde in UP-Spektren eine Aufspaltung der HOMO-Struktur in zwei Niveaus beobachtet. Das Intensitätsverhältnis zwischen diesen beiden Strukturen HOMO*/HOMO ist unterhalb von 1 ML konstant und fällt oberhalb dieser Bedeckung exponentiell ab. Hiermit konnte HOMO* eindeutig als Eigenschaft der Moleküle der ersten Lage — und somit als Bindungsniveau — identifiziert werden, welches durch den Überlapp von freien Bindungsorbitalen des Si mit HOMO-Zuständen entsteht. Demnach sind C_{60} -Moleküle auf Si(111)- 7×7 -Oberflächen kovalent gebunden.

Unklar bleibt, ob diese Bindungen an je einem C-Atom lokalisiert sind, d.h. ob die Orbitale eines C-Atoms aus dem π -System des C_{60} auskoppeln und rehybridisieren, wie es von SAKAMOTO *et al.* [Skm98b] vorgeschlagen wurde. Nimmt man dies an, so kann die Anzahl der Bindungen pro Molekül aus dem HOMO*/HOMO-Intensitätsverhältnis abgeschätzt werden. Hiernach bindet jedes bei Zimmertemperatur aufgebrachte Molekül der ersten Lage einfach bzw. nach dem Erwärmen auf 400°C zweifach an die Si(111)- 7×7 -Oberfläche.

Es bleibt zu hoffen, daß die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse weitere experimentelle und theoretische Arbeiten motivieren, da die bislang publizierten theoretischen Arbeiten lediglich die Adsorption eines Moleküls in der Mitte der dreieckigen Halbzelle der 7×7 -Einheitsmasche betrachten [Yam95, Yam96]. Um die Bindungen von C_{60} mit diesen Oberflächen genauer zu charakterisieren, bieten sich Dispersionsmessungen an der HOMO*-Struktur mit winkelaufgelöster UPS an. Des weiteren könnte die Methode der Photoelektronenbeugung, welche bei C_{60} auf Al- und Cu-Oberflächen eindeutige Aussagen über die Ausrichtung der Moleküle bezüglich der Oberflächen zuließ [Fas96], weitere Informationen über die Adsorptionsgeometrie der Moleküle geben.

b) Si(111):H- 1×1

AES-Untersuchungen zum Wachstum von C_{60} auf Si(111):H- 1×1 -Oberflächen deuten auf Inselbildung schon im Submonolagenbereich. Dies spricht für eine Adsorbat-Substrat-Wechselwirkung, deren Stärke vergleichbar mit der intermolekularen Wechselwirkung ist. Hierdurch wird eine hohe Mobilität der Moleküle

auf der Oberfläche gewährleistet, und es kommt durch die Inselbildung aufgrund der intermolekularen Wechselwirkung zu einem Energiegewinn.

Untersuchungen zum Desorptionsverhalten ergaben bis auf unterschiedliche Sättigungsbedeckungen (0,6 ML bei H-1×1-Oberflächen gegenüber 1 ML bei 7×7-Oberflächen) qualitativ das gleiche Verhalten von C₆₀-Molekülen auf Si(111):H-1×1-Oberflächen wie auf Si(111)-7×7-Oberflächen. Hier scheint ein Übergang der Moleküle vom physi- in den chemisorbierten Zustand aufzutreten. Mit UPS konnte gezeigt werden, daß bereits bei 330°C eine Austauschreaktion stattfindet, bei der die H-Atome desorbieren und C₆₀ chemisch an die Si-Oberfläche bindet.

In den UP-Spektren zeigte sich eine Bedeckungsunabhängigkeit der Form und Linienbreite der HOMO- und (HOMO-1)-Strukturen. Es wurde keine Besetzung von LUMO-Zuständen und mit XPS keine Verbreiterung oder Verschiebung der C(1s)-Linie beobachtet. Bei den PES-Untersuchungen existieren somit keine Merkmale, die auf eine Bindung zum Substrat deuten. Hiermit kann eindeutig auf den gleichen Charakter von Adsorbat-Substrat- und Asorbat-Adsorbat-Wechselwirkung geschlossen werden, d.h. C₆₀-Moleküle sind auf Si(111):H-1×1-Oberflächen VAN DER WAALS-gebunden.

c) Si(111):Ag-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°

Das Wachstum von C₆₀ auf Si(111):Ag-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Oberflächen läuft anfänglich wie bei Si(111)-7×7-Oberflächen Lage für Lage ab. Nach dem Anlassen der C₆₀-bedeckten Si(111):Ag-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Oberflächen bei 400°C beträgt die Bedeckung weniger als 1/2 ML C₆₀, was auf eine zur Si(111)-7×7-Oberfläche unterschiedliche Wechselwirkung zwischen Adsorbat und Substrat deutet. Oberhalb von 650°C desorbiert Ag, wobei das noch auf der Oberfläche befindliche C₆₀ dort verbleibt.

Die mit XPS spektroskopierte C(1s)-Linie ist bei 1 ML C₆₀ auf Si(111):Ag-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Oberflächen gegenüber der C(1s)-Linie einer 5 ML dicken C₆₀-Schicht stark verbreitert. Des Weiteren wurde mit UPS keine Aufspaltung des HOMO-Niveaus, aber eine Zunahme der Intensität am FERMI-Niveau bei 1 ML C₆₀ gegenüber der unbedeckten Oberfläche und dickeren C₆₀-Schichten beobachtet. Die Beobachtungen stimmen mit dem Verhalten von C₆₀ auf Metall-Oberflächen überein [Cha92, Tsu97, Mag97]. Auf Metall-Oberflächen sind C₆₀-Moleküle ionisch, d.h. durch einen Ladungstransfer vom Metall ins C₆₀, gebunden. Da an Si(111):Ag-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Oberflächen keine freien oder delokalisierten Ladungen vorhanden sind, kann die Wechselwirkung von C₆₀ mit Si(111):Ag-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Oberflächen ohne bislang nicht vorhandene theoretische Rech-

nungen nicht erklärt werden. Es bleibt der experimentelle Befund, daß C_{60} an Si(111):Ag- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Oberflächen nicht wie an Si(111)- 7×7 -Oberflächen kovalent bindet. Im Gegensatz zu C_{60} auf Si(111):H- 1×1 -Oberflächen existieren jedoch Anzeichen auf eine stärkere als die VAN DER WAALS-Wechselwirkung der Moleküle der ersten Lage mit der Oberfläche.

d) Si(111)- 1×1

Die Ergebnisse, die mit UPS bezüglich der Adsorption von C_{60} auf Si(111)- 1×1 -Oberflächen gewonnen wurden, stimmen gut mit den Untersuchungen an Si(111)- 7×7 -Oberflächen überein. Dies deutet darauf hin, daß C_{60} -Moleküle auch an Si(111)- 1×1 -Oberflächen kovalent binden.

e) Die Valenzbanddiskontinuität an der C_{60} /Si(111)- 7×7 -Grenzfläche

Mit UPS und XPS wurde die Valenzbanddiskontinuität an der C_{60} /Si(111)- 7×7 -Grenzfläche zu $0,6 \pm 0,2$ eV bestimmt, wobei das Valenzbandmaximum des C_{60} um eben diesen Betrag unter dem Valenzbandmaximum des Si liegt. Hiermit werden die Ergebnisse der Transportmessungen an C_{60} /Si(111):H- 1×1 -Übergängen [KCh95] gestützt. Im Modell der Grenzflächen-induzierten Bandlückenzustände (IfGS) konnte eine theoretische Abschätzung der Valenzbanddiskontinuität vorgestellt werden, die mit $\Delta W_v = 0,54 \pm 0,25$ eV den experimentell bestimmten Wert gut bestätigt.

2. Grenzflächendotierung von SCHOTTKY-Kontakten

a) Ag- und Pb-Kontakte

Die Dotierung der Grenzflächen von Ag/Si-Kontakten mit bei Zimmertemperatur aufgebrachtem C_{60} ohne Anlassen führt zu keiner Veränderung der homogenen Barrierenhöhen. Dagegen zeigt sich bei der Grenzflächendotierung mit thermisch erzeugten C_{60} -Monolagen eine deutliche Barrierenhöhenänderung sowohl auf p - als auch auf n -Si. Dies zeigt in Übereinstimmung mit den UPS-Ergebnissen zur Wechselwirkung von C_{60} mit Si(111)- 7×7 -Oberflächen, daß das Erwärmen die Bindung der Moleküle auf den Oberflächen beeinflusst.

Anhand von XPS-Untersuchungen konnte darauf geschlossen werden, daß bei Ag/ C_{60} /Si- und Pb/ C_{60} /Si-Kontakten keine abrupten Grenzflächen zwischen den Metallen und C_{60} existieren, sondern die Metall-Atome in/unter die C_{60} -Lage diffundieren. Mit UPS wurde schon nach dem Aufbringen von nur 1/3 ML Pb eine erhöhte Zustandsdichte am FERMI-Niveau beobachtet, die auf eine Me-

tallisierung der C_{60} -Lage infolge eines Ladungstransfers vom Pb ins C_{60} deutet.

Aus $I(V)$ -Charakteristiken wurden die Barrierenhöhen von $Ag/C_{60}/Si(111)-7 \times 7$ -Kontakten zu $0,536 \pm 0,035$ eV für n -leitende und $0,563 \pm 0,025$ eV für p -leitende Dioden bestimmt. Die Barrierenhöhe der $Pb/C_{60}/p-Si(111)-7 \times 7$ -Kontakte wurde zu $0,701 \pm 0,06$ eV gemessen. Diese Barrierenhöhen sind gegenüber den undotierten $Ag/Si(111)-7 \times 7$ - bzw. $Pb/Si(111)-7 \times 7$ -Kontakten um 0,17 eV bzw. 0,26 eV verändert, wobei sich eine Erniedrigung der Barrierenhöhen bei n -Si und eine Erhöhung bei p -Si zeigt. Die Änderung der Barrierenhöhen durch die thermisch erzeugte C_{60} -Lage konnte durch das Modell der Grenzflächendipole erklärt werden. Die in dem Dipol-Modell berechnete Barrierenhöhenänderung von $\delta\Phi_B^d = 0,2$ eV gibt gut die experimentellen Ergebnisse wieder.

Hier zeigt sich ein Schnittpunkt zwischen den beiden untersuchten Themenbereichen, da bei der Berechnung zwei kovalente C-Si-Bindungen pro Molekül vorgegeben wurden. Somit sprechen neben den UP-Untersuchungen auch die veränderten Barrierenhöhen bei den thermisch erzeugten C_{60} -Lagen für zwei Bindungen pro Molekül. Die Barrierenhöhenänderung läßt sich allein durch die Grenzflächendipole beschreiben, und es wurde keine Veränderung des Stromtransportmechanismus beobachtet. Daher scheint C_{60} keinen Einfluß auf die Metall-Si-Kontakte zu haben, außer daß durch die Ionizität der kovalenten C-Si-Bindungen positive Ladung ins Si eingebracht wird.

Steigert man die Dicke der C_{60} -Zwischenschicht an der Grenzfläche, in dem man weiteres C_{60} auf der thermisch erzeugten Monolage deponiert, bevor die Pb-Kontakte aufgebracht werden, so ist hier eine Zunahme der Barrierenhöhen mit der Dicke der Zwischenschicht auf n - bzw. eine Abnahme auf p -Si zu verzeichnen. Die Summe der Barrierenhöhen einander entsprechender p - und n -leitender Kontakte ergibt stets die Bandlücke des Si. Dies deutet auf eine Einlagerung von Pb in die C_{60} -Schichten, wodurch ein neues Material mit metallischem Charakter entsteht. Da es sich um ein neues, synthetisches Metall handelt, welches weitestgehend unerforscht ist, sind hier Untersuchungen bezüglich der Struktur, der chemischen Zusammensetzung und der elektronischen Eigenschaften von großem Interesse.

b) Pd-Kontakte

Die Barrierenhöhen der Pd-Kontakte auf $Si(111)$ -Oberflächen lassen sich nicht durch C_{60} beeinflussen. XPS-Messungen konnten zeigen, daß C_{60} nicht an der Pd/Si-Grenzfläche verbleibt, und somit auch die Silizidbildung nicht einschränkt.

Anhang A

Wechselwirkung von C_{60} mit Elektronenstrahlen

Als Nachtrag zu den Untersuchungen mit der AUGER-Elektronenspektroskopie soll im folgenden Abschnitt der Einfluß der Primärelektronen auf C_{60} -Moleküle untersucht werden. Demzugrunde liegt eine Arbeit von MIKUSHKIN und SHNITOV [Mik97], welche von der Verschiebung der energetischen Lage des $C(KLL)$ -Übergangs durch Elektronenbestrahlung auf die Transformation der Moleküle hin zu einer Art graphitischen Kohlenstoffs schlossen. Hierzu habe ich sowohl AES- als auch UPS-Untersuchungen durchgeführt, wobei als Ausgangsfläche die nach Anlassen bei $400^{\circ}C$ C_{60} -terminierte $Si(111)-7 \times 7$ -Oberfläche benutzt wurde.

Mit AES kann der Einfluß der Primärelektronen durch kontinuierliches Messen an einer Probenstelle mit automatischem Speichern der Spektren nach vorgegeben Zeitintervallen durchgeführt werden. Primärenergie und -strom betragen, wie bei allen AES-Messungen, 3 keV und $2 \mu A$. In Abbildung A.1 sind sowohl die absoluten Intensitäten von $C(KLL)$ - und $Si(LVV)$ -Übergang als auch deren Verhältnis gegen die Bestrahlungsdauer aufgetragen. Man erkennt deutlich eine Abnahme beider Intensitäten und — durch die stärkere Abnahme des Si-Signals — eine Zunahme des C/Si -Verhältnisses. Die starke Dämpfung des Si-Signals deutet, wie in Abschnitt 4.3 diskutiert, auf eine stärkere Benetzung der Oberfläche, welche wiederum durch Fragmentierung der Moleküle hervorgerufen wird.

Die Zunahme des C/Si -Verhältnisses beträgt in der ersten Stunde der Bestrahlung etwa 10%. Bei den bislang vorgestellten AES-Ergebnissen wurden die Einzelmessungen pro Probenstelle stets in weniger als 5 Minuten durchgeführt. Wegen der aus Abbildung A.1 hervorgehenden großen Zeitkonstante der Elektronenstrahl-induzierten Veränderung der Moleküle behalten diese Ergebnis-

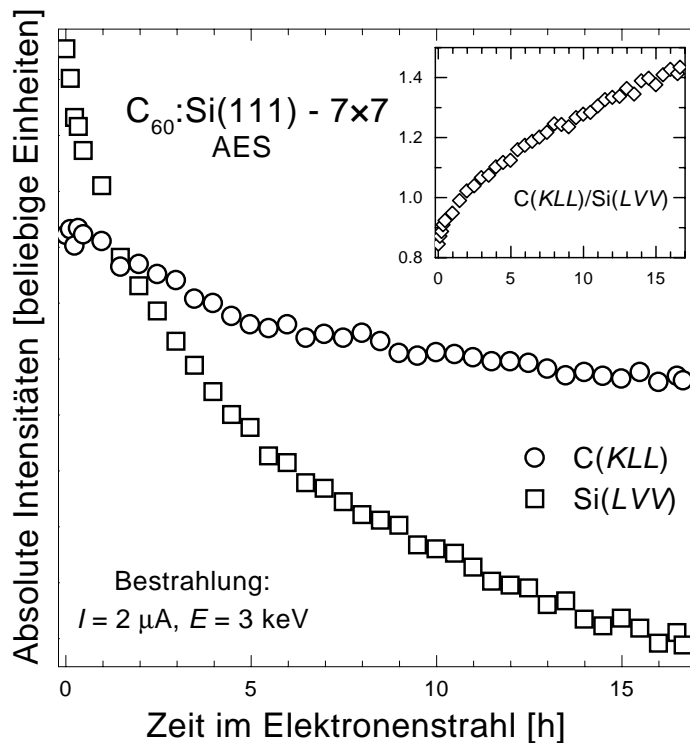


ABBILDUNG A.1:
Änderung der AES-
Intensitäten mit der Zeit
der Elektronenbestrah-
lung. Der Elektronenstrom
betrug $2 \mu\text{A}$ bei einer
Primärenergie von 3 keV .
Das Teilbild zeigt die
Zunahme des C/Si-
Verhältnisses mit der
Bestrahlung.

se ihre Relevanz.

In Übereinstimmung mit oben genannter Arbeit wird eine Verschiebung der $C(KLL)$ -Linie um etwa 3 eV zu höheren kinetischen Energien beobachtet. Da die $C(KLL)$ -Linienform graphitisch gebundenen Kohlenstoffs der des C_{60} sehr ähnlich ist, eignet sich die Analyse dieses AUGER-Übergangs nur schlecht, um die Änderung der C_{60} -Struktur zu erörtern. Eine bessere Basis hierfür bilden die in Abbildung A.2 dargestellten UP-Spektren. Da bei UPS eine Fläche von einigen Quadratmillimetern spektroskopiert wird, wurde die Probe mit dem Elektronenstrahl abgefahren. Dabei mußte die Elektronenenergie auf 1 keV abgesenkt werden, da die Ansteuerelektronik nur dann ausreichende Ablenkpotentiale zur Verfügung stellte, um die gesamte Oberfläche zu bestrahlen.

Mit zunehmender Bestrahlung werden die C_{60} -Strukturen breiter und ihre Intensität nimmt ab. Die Verbreiterung der C_{60} -Strukturen in den Valenzbandspektren kann möglicherweise durch Fragmentierung der Moleküle erklärt werden, da diese zur Reduktion der Symmetrie führt. Auf eine Ausbildung einer Graphit-ähnlichen Struktur kann jedoch nicht geschlossen werden, da auch nach einer Bestrahlung von 115 h noch die C_{60} -Strukturen bei $15,5$ und $17,5 \text{ eV}$ zu beobachten sind. Betrachtet man zum Vergleich die Elektronenenergieverteilungskurve einer

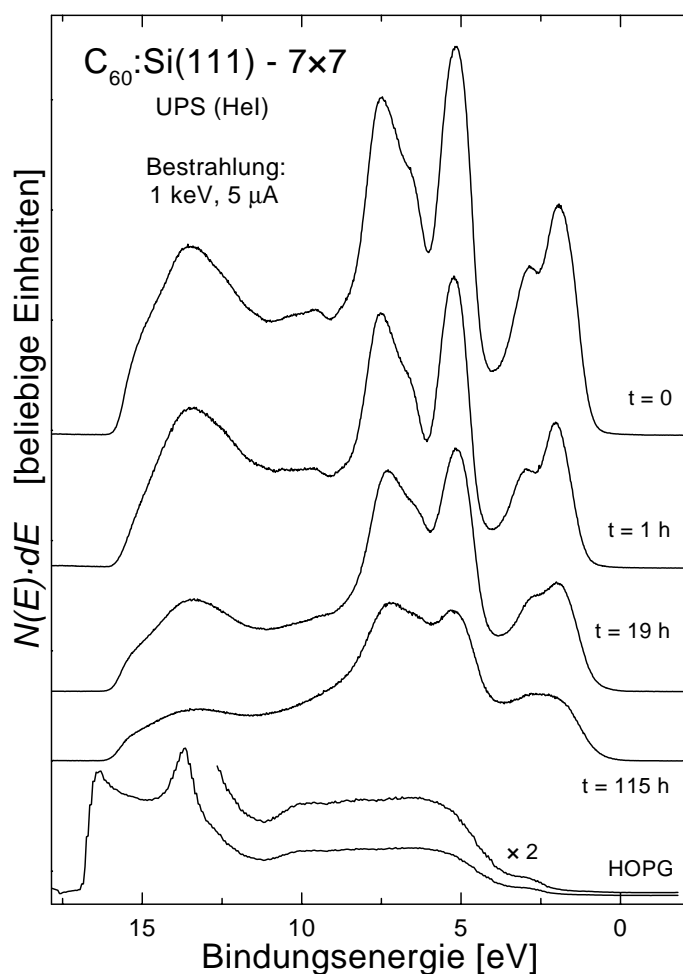


ABBILDUNG A.2:

UP-Spektren nach verschieden langer Elektronenbestrahlung, gemessen mit dem CMA. Die Probe wurde mit dem Elektronenstrahl gleichmäßig gescannt, wobei die Energie 1 keV und der Probenstrom 5 μ A betragen. Das HOPG-Spektrum wurde [Els98] entnommen.

Graphitprobe (*highly oriented pyrolytic graphite*, HOPG) mit der typischen, ausgeprägten Struktur 13,6 eV unterhalb des FERMI-Niveaus¹, so kann auch hieraus nicht auf die Überführung von C_{60} in eine graphitische Phase geschlossen werden.

¹Diese Bindungsenergie wird nur bei HeI-angeregter Photoemission beobachtet. Die Struktur wird durch einen *final state effect* hervorgerufen und daher unter Variation der Anregungsenergie stets bei gleicher kinetischer Energie gemessen [Bae73].

Anhang B

Tabellen

Abkürzung	Wert	Bedeutung
e_0	$1,609 \times 10^{-19}$ C	Elementarladung
m_0	$9,109 \times 10^{-31}$ kg	Masse freier Elektronen
ε_0	$8,854 \times 10^{-12}$ C/Vm	elektrische Feldkonstante
\hbar	$1,055 \times 10^{-34}$ Js	PLANCK-Konstante
k_B	$1,381 \times 10^{-23}$ J/K	BOLTZMANN-Konstante

TABELLE B.1: Wichtige physikalische Konstanten.

Element	Kov. Radius [nm]	$X_{Pauling}$	$X_{Miedema}$
Si	0,117	1,90	4,70
C	0,077	2,55	6,20
O	0,073	3,44	
Ag	0,152	1,93	4,45
Pd	0,128	2,20	5,45
Pb	0,147	2,33	4,10

TABELLE B.2: Kovalente Radien [SaW80] und Elektronegativitäten nach PAULING [Pau39] bzw. MIEDEMA [Mie73, Mie80] einiger ausgewählter Elemente.

AUGER-Übergang	Kin. Energie [eV]	<i>Sensitivity Factor</i>	λ [nm]	ζ [nm ⁻¹]
Si(<i>L_{VV}</i>)	90	1,5419	0,45	3,26
Si(<i>K_{LL}</i>)	1620	0,1278	2,9	0,71
C(<i>K_{LL}</i>)	270	0,6143	0,85	1,84
O(<i>K_{LL}</i>)	505	1,2571	1,3	1,28
Ag(<i>M_{NN}</i>)	360	3,7251	0,9	1,75

TABELLE B.3: *Auger Sensitivity Factors* [Phy95a], kinetische Energien und Dämpfungslängen der Elektronen der verschiedenen in dieser Arbeit spektroskopierten AUGER-Übergänge. Die *Sensitivity Factors* beziehen sich auf Anregung mit 3 keV-Elektronen. Als Referenz wurde der mit 10 keV-Anregung gemessene Cu(*LMM*)-Übergang benutzt. Die Ausdringtiefen λ sind [Som81] für Ag und [Mön95] für die weiteren Elemente entnommen. Zur Berechnung der Dämpfungskonstante ζ nach Gleichung (4.2) auf Seite 50 wurde eine Eindringtiefe der Primärelektronen λ_p von 4,2 nm und ein Detektionswinkel $\beta = 42,7^\circ$ benutzt.

Rumpfniveau	Kin. Energie [eV]	<i>Sensitivity Factor</i>	λ [nm]
Si(<i>2p</i>)	1150	0,283	2,3
C(<i>1s</i>)	965	0,296	1,9
O(<i>1s</i>)	715	0,711	1,65
Ag(<i>3d</i>)	885	5,198	1,3
Pd(<i>3d</i>)	915	4,642	1,35
Pb(<i>4f</i>)	1110	6,968	1,5

TABELLE B.4: *Atomic Sensitivity Factors* [Phy95b], kinetische Energien und Ausdringtiefen λ der Elektronen der verschiedenen in dieser Arbeit spektroskopierten Rumpfniveaulinien. Die angegebenen Werte beziehen sich auf Mg(*K α*)-Anregung und sind bzgl. der F(*1s*)-Linie normiert. Die Ausdringtiefen sind [Som81] für die Metalle und [Mön95] für die weiteren Elemente entnommen. Bei der Photoemissionsspektroskopie ist die Eindringtiefe λ_p in der Größenordnung μm und der Detektionswinkel $\beta = 0^\circ$, sodaß in Gleichung (4.1) $\zeta = 1/\lambda$ benutzt werden kann.

Abk.	Bedeutung
Φ_B^{hom} [eV]	homogene Barrierenhöhe
Φ_B^{eff} [eV]	effektive Barrierenhöhe
Φ_B^{nif} [eV]	idealisierte, durch Bildkraft beeinflusste Barrierenhöhe
Φ_B^{Sim} [eV]	Barrierenhöhe aus Simulation, physikalische Bedeutung wie Φ_B^{nif}
n	Idealitätsfaktor
$\delta\Phi_{if}^0$ [eV]	Bildkraftkorrektur
$\delta\Phi_B^{\text{id}}$ [eV]	Barrierenhöhenänderung durch Grenzflächendipole
$\delta\Phi_B^{\text{C60}}$ [eV]	C ₆₀ -induzierte Barrierenhöhenänderung
W_F [eV]	FERMI-Niveau
W_g [eV]	fundamentale Bandlücke
W_v, W_c [eV]	Valenzbandmaximum, Leitungsbandminimum (ortsabhängig)
W_{vi}, W_{ci} [eV]	W_v, W_c an der Grenzfläche
W_{vb}, W_{cb} [eV]	W_v, W_c im Volumen
$\Delta W_v, \Delta W_c$ [eV]	Valenz- bzw. Leitungsbanddiskontinuität
W_{bp} [eV]	<i>branch point</i> -Energie oder Ladungsneutralniveau
Φ_{bp} [eV]	<i>zero-charge-transfer</i> -Barrierenhöhe $\Phi_{bp} = W_c - W_{bp}$
X	Elektronegativität
S_X [eV]	Steigungsparameter, Proportionalitätsfaktor zwischen Barrierenhöhe und Elektronegativitätsdifferenz
ϵ_b	Dielektrizitätskonstante (DK) im Volumen
ϵ_i	effektive DK der Metall-Halbleiter-Grenzfläche
R_S [Ω]	Serienwiderstand, Summe der Widerstände der Meßleitungen und des Halbleitersubstrates
F [cm^{-2}]	Fläche einer Diode
A^{**} [$\text{Acm}^{-2}\text{K}^{-1}$]	modifizierte, effektive RICHARDSON-Konstante
V_d [V]	Diffusionspotential bzw. Bandverbiegung
V_a [V]	extern an einen SCHOTTKY-Kontakt angelegte Spannung
V_c [V]	Spannung, die über der Raumladungszone abfällt ($V_c = V_a - IR_S$)

TABELLE B.5: In dieser Arbeit häufig verwendete Formelzeichen.

Literaturverzeichnis

- [Abb80] I. Abbati, L. Braicovich, B. DeMichelis, U. Del Pennino und S. Valeri, *Solid State Commun.* **35** (1980) 917.
- [Bae73] A.D. Baer und G.P. Lapeyre, *Phys. Rev. Lett.* **31** (1973) 304.
- [BaH93] M. Balooch und A.V. Hamza, *Appl. Phys. Lett.* **63** (1993) 150.
- [Bal73] A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* **7** (1973) 5212.
- [Bas88] A.I. Bastys, V.B. Bikbaev, J.J. Vaitkus und S.C. Karpinskas, *Litovskii Fizicheskii Sbornik* **28** (1988) 191.
- [Ben93] P.J. Benning, F. Stepniak und J.H. Weaver, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 9086.
- [Bet42] H.A. Bethe, MIT Radiation Laboratory Rep. **43** (1942) 12.
- [Bla94] X. Blase, X. Zhu und S.G. Louie, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 4973.
- [Böt97] A. Böttcher, S. Fichtner–Endruschat und H. Niehus, *Surf. Sci.* **376** (1997) 151.
- [Car71] H.C. Card und E.H. Rhoderick, *J. Phys. D* **4** (1971) 1589.
- [Cau97] Y. Caudano, A. Peremans, P.A. Thiry, P. Dumas und A. Tadjeddine, *Surf. Sci.* **377–379** (1997) 1071.
- [CaL78] M. Cardona und L. Ley, *Photoemission in Solids I* (Springer, Berlin, 1979).
- [CCL85] M.Y. Chou, M.L. Cohen und S.G. Louie, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 7979.
- [Cha92] S.J. Chase, W.S. Basca, M.G. Mitch, L.J. Pilione und J.S. Lannin, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 7873.

- [Chb89] Y.J. Chabal, G.S. Higashi, K. Raghavachari und V.A. Burrows, *J. Vac. Sci. Technol. A* **7** (1989) 2104.
- [ChK96] S. Chand und J. Kumar, *Appl. Phys. A* **63** (1996) 171.
- [Che94a] D. Chen und D. Sarid, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 7612.
- [Che94b] D. Chen, J. Chen und D. Sarid, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 10905.
- [Cho92] P.C. Chow, X. Jiang, G. Reiter, P. Wochner, S.C. Moss, J.D. Axe, J.C. Hanson, R.K. McMullan, R.L. Meng und C.W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992) 2943.
- [ChX94] D.M. Chen, H. Xu, W.N. Creager und P. Burnett, *J. Vac. Sci. Technol. B* **12** (1994) 1910.
- [CRC95] *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 76. Edition, herausgegeben von D.R. Linde (CRC-Press, Boca Raton, 1995).
- [Cro66] C.R. Crowell und S.M. Sze, *Sol. State Electr.* **9** (1966) 1035.
- [Dee98] P.N.K. Deenapanray, F.D. Auret, G. Myburg, K.T. Hillie und C.M. Demanet, *Surf. Interface Anal.* **26** (1998) 748.
- [Dre96] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus und P.C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* (Academic Press, San Diego, 1996).
- [Dum96] P. Dumas, M. Gruyters, P. Rudolf, Y. He, L.-M. Yu, G. Gensterblum, R. Caudano und Y.J. Chabal, *Surf. Sci.* **368** (1996) 330.
- [Dun96a] A.W. Dunn, P. Moriarty, M.D. Upward und P.H. Beton, *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996) 506.
- [Dun96b] A.W. Dunn, P. Moriarty, M.D. Upward, A. Nogaret und P.H. Beton, *Semicond. Sci. Technol.* **11** (1996) 1563.
- [Dur93] J.A. Dura, P.M. Pippenger, N.J. Halas, X.Z. Xiong, P.C. Chow und S.C. Moss, *Appl. Phys. Lett.* **63** (1993) 3443.
- [Eas72] D.E. Eastman und W.D. Grobman, *Phys. Rev. Lett.* **28** (1972) 1378.
- [Eas79] D.E. Eastman in *Proc. 14th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors*, herausgegeben von B.L.H. Wilson (Institute of Physics, Bristol, 1979) 1059.

- [Ehr94] Solid State Physics **48**, herausgegeben von H. Ehrenreich und F. Spaepen (Academic Press, San Diego, 1994).
- [Els98] V. van Elsbergen, Dissertation, Gerhard–Mercator–Universität Duisburg (1998).
- [ErK85] G. Ertl und J. Küppers, *Low Energy Electrons and Surface Chemistry* (VCH, Weinheim, 1985).
- [Fai97] D. Faiman, S. Goren, E.A. Katz, M. Koltun, N. Melnik, A. Shames und S. Shtutina, *Thin Solid Films* **295** (1997) 283.
- [Fas96] R. Fasel, P. Aebi, R.G. Agostino, D. Naumović, J. Osterwalder, A. Santaniello und L. Schlappbach, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 4733.
- [Fir97] L. Firlej, A. Zahab, F. Brocard und N. Kirova, *Synthetic Metals* **86** (1997) 2331.
- [Fis93] J.E. Fischer und P.A. Heiney, *J. Phys. Chem. Solids* **54** (1993) 1725.
- [Fow86] P.W. Fowler und J. Woolrich, *Chem. Phys. Lett.* **127** (1986) 78.
- [Fre82] J.L. Freeouf, T.N. Jackson, S.E. Laux und J.M. Woodall, *J. Vac. Sci. Technol.* **21** (1982) 570.
- [Gen93] G. Gensterblum, L.-M. Yu, J.J. Pireaux, P.A. Thiry, R. Caudano, J.-M. Themlin, S. Bouzidi, F. Coletti und J.-M. Debever, *Appl. Phys. A* **56** (1993) 175.
- [Gir92] L.A. Girifalco, *J. Phys. Chem.* **96** (1992) 858.
- [Gol98] A. Goldoni, C. Cepek, E. Magnano, A.D. Laine, S. Vandrè und M. Sancrotti, *Phys. Rev. B* **58** (1998) 2228.
- [Goo63] A.M. Goodman, *J. Appl. Phys.* **34** (1963) 329.
- [HaB94] A.V. Hamza, M. Balooch und M. Moalem, *Surf. Sci.* **317** (1994) L1129.
- [Had86] R.C. Haddon, L.E. Brus und K. Raghavachari, *Chem. Phys. Lett.* **125** (1986) 459.

- [Had91] R.C. Haddon, A.F. Hebard, M.J. Rosseinsky, D.W. Murphy, S.J. Duclos, K.B. Lyons, B. Miller, J.M. Rosamilia, R.M. Fleming, A.R. Kortan, S.H. Glarum, A.V. Makhija, A.J. Muller, R.H. Eick, S.M. Zahurak, R. Tycko, G. Dabbagh und F.A. Thiel, *Nature* **350** (1991) 320.
- [Had95] R.C. Haddon, A.S. Perel, R.C. Morris, T.T.M. Palstra, A.F. Hebard und R.M. Fleming, *Appl. Phys. Lett.* **67** (1995) 121.
- [Hah98] Ch. Hahn, Diplomarbeit, Gerhard–Mercator–Universität Duisburg (1998).
- [Ham87] R.J. Hamers, R.M. Tromp und J.E. Demuth, *Surf. Sci.* **181** (1987) 346.
- [Han91] P.L. Hansen, P.J. Fallon und W. Krätschmer, *Chem. Phys. Lett.* **181** (1991) 367.
- [HaS46] N.B. Hanney und C.P. Smith, *J. Am. Chem. Soc.* **68** (1946) 171.
- [HeG91] M. Henzler und W. Göpel, *Oberflächenphysik des Festkörpers* (Teubner, Stuttgart, 1991).
- [Hei65] V. Heine, *Phys. Rev.* **138** (1965) A1689.
- [Hes97] R. Hesper, L.H. Tjeng und G.A. Sawatzky, *Europhys. Lett.* **40** (1997) 177.
- [Hig90] G.S. Higashi, Y.J. Chabal, G.W. Trucks und K. Raghavachari, *Appl. Phys. Lett.* **56** (1990) 656.
- [Him80] F.J. Himpsel, P. Heimann, T.-C. Chiang, und D.E. Eastman, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980) 1112.
- [Him83] F.J. Himpsel, G. Hollinger und R.A. Pollak, *Phys. Rev. B* **28** (1983) 7014.
- [Hon92] H. Hong, W.E. McMahon, P. Zschack, D.-S. Lin, R.D. Aburano, H. Chen und T.-C. Chiang, *Appl. Phys. Lett.* **61** (1992) 3127.
- [Hor83] Y. Horio und A. Ichimiya, *Surf. Sci.* **133** (1983) 393.
- [Hos94] M. Hosoya, K. Ichimura, Z.H. Wang, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus und P.C. Eklund, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 4981.

- [Hri93] K. Hricovini, R. Günther, P. Thiry, A. Taleb-Ibrahimi, G. Indlekofer, J.E. Bonnet, P. Dumas, Y. Petroff, X. Blase, X. Zhu, S.G. Louie, Y.J. Chabal und P.A. Thiry, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 1992.
- [Hu96] C.-W. Hu, A. Kasuya, S. Suto, A. Wawro und Y. Nishina, *Surf. Rev. Lett.* **3** (1996) 933.
- [Hua82] H.-C.W. Huang, C.F. Aliotta und P.S. Ho, *Appl. Phys. Lett.* **41** (1982) 54.
- [Hun95] M.R.C. Hunt, S. Modesti, P. Rudolf und R.E. Palmer, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 10039.
- [Hun96] M.R.C. Hunt und R.E. Palmer, *Surf. Rev. Lett.* **3** (1996) 937.
- [Jan96] O. Janzen, Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg (1996).
- [Jan99a] O. Janzen und W. Mönch, *J. Phys.: Cond. Matter* **11** (1999) L111.
- [Joh90] R.D. Johnson, G. Meijer und D.S. Bethune, *J. Am. Chem. Soc.* **112** (1990) 8983.
- [Joh92] R.D. Johnson, D.S. Bethune und C.S. Yannoni, *Acc. Chem. Res.* **25** (1992) 169.
- [Kam95a] T.U. Kampen, Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg (1995).
- [Kam95b] T.U. Kampen und W. Mönch, *Surf. Sci.* **331–333** (1995) 490.
- [Kar94] C.J. Karlsson, E. Landemark, Y.-C. Chao und R.I.G. Uhrberg, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 5767.
- [Kat98] E.A. Katz, D. Faiman, S. Goren, S. Shtutina, B. Mishori und Y. Shapira, *Fullerene Sci. Technol.* **6** (1998) 103.
- [Kat99] E.A. Katz, *Solid State Phenomena* (1999), im Druck.
- [Kaw94] H. Kawarada, M. Aoki, H. Sasaki, K. Tsugawa und I. Ohdomari in: *Control of Semiconductor Interfaces*, herausgegeben von I. Ohdomari, M. Oshima und A. Hiraki (Elsevier, Amsterdam, 1994) 161.

- [KCh94] K.M. Chen, Y.Q. Jia, S.X. Jin, K. Wu, W.B. Zhao, C.Y. Li und Z.N. Gu, *J. Phys.: Cond. Matter* **6** (1994) L367.
- [KCh95] K.M. Chen, Y.Q. Jia, S.X. Jin, K. Wu, W.B. Zhao, C.Y. Li, Z.N. Gu und X.H. Zhou, *J. Phys.: Cond. Matter* **7** (1995) L201.
- [KCh96] K.M. Chen, Y.X. Zhang, G.G. Qin, S.X. Jin, K. Wu, C.Y. Li, Z.N. Gu und X.H. Zhou, *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996) 3557.
- [KCh99] K.M. Chen, W.H. Sun, K. Wu, C.Y. Li, G.G. Qin, Q.L. Zhang, X.H. Zhou und Z.N. Gu, *J. Appl. Phys.* **85** (1999) 6935.
- [Kly95] D. Klyachko und D.M. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 3693.
- [Kol96] M. Koltun, D. Faiman, S. Goren, E.A. Katz, E. Kunoff, A. Shames, S. Shtutina und B. Uzan, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **44** (1996) 485.
- [Kor92] A.R. Kortan, N. Kopylov, S. Glarum, E.M. Gyorgy, A.P. Ramirez, R.M. Fleming, F.A. Thiel und R.C. Haddon, *Nature* **355** (1992) 529.
- [KrH90] W. Krätschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos und D.R. Huffman, *Nature* **347** (1990) 354.
- [Kro93] *The Fullerenes*, herausgegeben von H.W. Kroto, J.E. Fischer und D.E. Cox (Pergamon Press, Oxford, 1993).
- [KrS85] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl und R.E. Smalley, *Nature* **318** (1985) 162.
- [LaB82] Landolt-Börnstein, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Vol III/17 (Springer, Berlin, 1982).
- [Lan91] E. Landemark, C.J. Karlsson und R.I.G. Uhrberg, *Phys. Rev. B* **44** (1991) 1950.
- [Lay88] G. Le Lay, J. Peretti und M. Hanbücken, *Surf. Sci.* **204** (1988) 57.
- [Lay97] G. Le Lay, M. Göthelid, V.Y. Aristov, A. Cricenti, M.C. Håkansson, C. Giammichele, P. Perfetti, J. Avila und M.C. Asensio, *Surf. Sci.* **377–379** (1997) 1061.
- [Lep68] M.P. Lepselter und S.M. Sze, *Bell Syst. Techn. J.* **47** (1968) 195.

- [Lev98] J.A. Levinson, A.V. Hamza, E.S.G. Shaqfeh und M. Balooch, *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** (1998) 2385.
- [Ley96] L. Ley, J. Ristein, J. Schäfer und S. Miyazaki *J. Vac. Sci. Technol. B* **14** (1996) 3008.
- [Li92] Y.Z. Li, M. Chander, J.C. Patrin, J.H. Weaver, L.P.F. Chibante und R.E. Smalley, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 13837.
- [Lof92] R.W. Lof, M.A. van Veenendal, B. Koopmans, H.T. Jonkman und G.A. Sawatzky, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 3924.
- [LoC76] S.G. Louie und M.L. Cohen, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 2461.
- [LoC77] S.G. Louie, J.R. Chelikowsky und M.L. Cohen, *Phys. Rev. B* **15** (1977) 2154.
- [Lud88a] R. Ludeke, G. Jezequel und A. Taleb-Ibrahimi, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 601.
- [Lud88b] R. Ludeke, G. Jezequel und A. Taleb-Ibrahimi, *J. Vac. Sci. Technol. B* **6** (1988) 1277.
- [Lud89] R. Ludeke in: *Metallization and Metal-Semiconductor Interfaces*, herausgegeben von I.P. Bastra (Plenum, New York, 1989) 39.
- [Lüt93] H. Lüth, *Surfaces and Interfaces of Solids* (Springer, Berlin, 1993).
- [Mag97] E. Magnano, S. Vandr e, C. Cepek, A. Goldoni, A.D. Laine, G.M. Curr o, A. Santaniello und M. Sacrotti, *Surf. Sci.* **377-379** (1997) 1066.
- [M ar87] P. M artensson, W.-X. Ni, G.V. Hansson, J.M. Nicholls und B. Reihl, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 5974.
- [Max96] A.J. Maxwell, P.A. Br uhwiler, D. Arvanitis, J. Hasselstr om und N. M artensson, *Chem. Phys. Lett.* **260** (1996) 71.
- [Max98] A.J. Maxwell, P.A. Br uhwiler, D. Arvanitis, J. Hasselstr om, M.K.-J. Johanson und N. M artensson, *Phys. Rev. B* **57** (1998) 7312.
- [Mem83] R. Memeo, F. Ciccacci, C. Mariani und S. Ossicini, *Thin Solid Films* **109** (1983) 159.

- [Men98] D. Mendoza, F. Morales und R. Escudero, *Fullerene Sci. Technol.* **6** (1998) 801.
- [Mie73] A.R. Miedema, F.R. de Boer und P.F. de Châtel, *J. Phys. F* **3** (1973) 1558.
- [Mie80] A.R. Miedema, P.F. de Châtel und F.R. de Boer, *Physica B* **100** (1980) 1.
- [Mik97] V.M. Mikushkin und V.V. Shnitov, *Phys. Solid State* **39** (1997) 164.
- [Miu94] Y. Miura, S. Fujieda und K. Hirose, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 4893.
- [Miy96] S. Miyazaki, J. Schäfer, J. Ristein und L. Ley, *Appl. Phys. Lett.* **68** (1996) 1247.
- [Mön86] W. Mönch in: *Festkörperprobleme*, Band 26, herausgegeben von P. Grosse (Vieweg, Braunschweig, 1984) 67.
- [Mön87] W. Mönch, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987) 1260.
- [Mön95] W. Mönch, *Semiconductor Surfaces and Interfaces*, 2. Auflage (Springer, Berlin, 1995).
- [Mön96a] W. Mönch, *Appl. Surf. Sci.* **92** (1996) 367.
- [Mön96b] W. Mönch, *J. Appl. Phys.* **80** (1996) 5076.
- [Mön97a] W. Mönch, *Appl. Surf. Sci.* **117/118** (1997) 380.
- [Mön97b] W. Mönch, *phys. stat. sol. (a)* **159** (1997) 25.
- [Mön99a] W. Mönch, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17** (1999) im Druck.
- [Mön99b] W. Mönch in: *Festkörperprobleme*, Band 39, herausgegeben von P. Grosse (Vieweg, Braunschweig, 1999), im Druck.
- [Moo97] L. Moro, A. Paul, D.C. Lorents, R. Malhotra, R.S. Ruoff, P. Lazzeri, L. Vanzetti, A. Lui und S. Subramoney, *J. Appl. Phys.* **81** (1997) 6141.
- [Mor98] P. Moriarty, M.D. Upward, A.W. Dunn, Y.-R. Ma, P.H. Beton und D. Teehan, *Phys. Rev. B* **57** (1998) 362.
- [Mot38] N.F. Mott, *Proc. Camb. Philos. Soc.* **34** (1938) 568.

- [Mur97] P.W. Murray, M.Ø. Pedersen, E. Lægsgaard, I. Stensgard und F. Besenbacher, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 9360.
- [Ned90] H.H. Neddermeyer, *Crit. Rev. Sol. State Mat.* **16** (1990) 309.
- [Nic87] J.M. Nicholls und B. Reihl, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 8071.
- [Nun87] W. Nunes Rodriguez, Dissertation, Universität Duisburg (1987).
- [Ohn91] T.R. Ohno, Y. Chen, S.E. Harvey, G.H. Kroll, J.H. Weaver, R.E. Hauf-ler und R.E. Smalley, *Phys. Rev. B* **44** (1991) 13747.
- [Osp88] M. Ospelt, J. Henz, L. Flepp und H. von Känel, *Appl. Phys. Lett.* **52** (1988) 227.
- [Pan91] C. Pan, M.P. Sampson, Y. Chai, R.H. Hauge und J.L. Margrave, *J. Phys. Chem.* **95** (1991) 2944.
- [Par91] T.M. Parrill und Y.W. Chung, *Surf. Sci.* **243** (1991) 96.
- [Pas98] J.I. Pascual, J. Gómez-Herrero und A.M. Baró, *Surf. Sci.* **397** (1998) L267.
- [Pau39] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond* (Cornell University, Itha-ka, NY, 1939/1960).
- [Pen62] D.R. Penn, *Phys. Rev.* **128** (1962) 2093.
- [Phy95a] C.L. Hedberg, *Handbook of Auger Electron Spectroscopy* (Physical Elec-tronics, Minnesota, 1995).
- [Phy95b] J. Chastain und R.C. King, *Handbook of X-ray Photoelectron Spectros-copy* (Physical Electronics, Minnesota, 1995).
- [Pur96] D. Purdie, H. Bernhoff und B. Reihl, *Surf. Sci.* **364** (1996) 279.
- [Ren91] S. L. Ren, Y. Wang, A.M. Rao, E. McRae, J.M. Holden, T. Hager, K. Wang, W.-T. Lee, H.F. Ni, J. Selegue und P.C. Eklund, *Appl. Phys. Lett.* **59** (1991) 2678.
- [Rho88] E.H. Rhoderick und R.H. Williams, *Metal-Semiconductor Contacts* (Clarendon Press, Oxford, 1988).

- [Rub81] G.W. Rubloff, P.S. Ho, J.F. Freeouf und J.E. Lewis, Phys. Rev. B **23** (1981) 4183.
- [SaO91] S. Saito und A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) 2637.
- [Sak93] T. Sakurai, X.D. Wang, T. Hashizume, Y. Nishina, H. Shinohara und Y. Saito, Appl. Surf. Sci. **67** (1993) 281.
- [Sar93] D. Sarkar und N.J. Halas, Appl. Phys. Lett. **63** (1993) 2438.
- [Sat86] S. Satpathy, Chem. Phys. Lett. **130** (1986) 545.
- [Sato92] N. Sato, Y. Saito und H. Shinohara, Chem. Phys. **162** (1992) 433.
- [SaW80] Sargent-Welch, *Table of Periodic Properties of the Elements* (Sargent-Welch Scientific Company, Illinois, 1980).
- [ScF59] R.E. Schlier und H.E. Farnsworth, J. Chem. Phys. **30** (1959) 917.
- [Sch38] W. Schottky, Naturwissenschaften **26** (1938) 843.
- [Sch39] W. Schottky und E. Spenke, Wiss. Veröff. Siemens-Werke **18** (1939) 225.
- [Sch40] W. Schottky, Physik. Z. **41** (1940) 570.
- [Sch83] G. Schulze und M. Henzler, Surf. Sci. **124** (1983) 336.
- [Schm93] R.F. Schmitsdorf, Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg (1993).
- [Schm95] R.F. Schmitsdorf, T.U. Kampen und W. Mönch, Surf. Sci. **324** (1995) 249.
- [Schm97] R.F. Schmitsdorf, T.U. Kampen und W. Mönch, J. Vac. Sci. Technol. B **15** (1997) 1221.
- [Schm98] R.F. Schmitsdorf, Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg (1998).
- [Schm99] R.F. Schmitsdorf und W. Mönch, Eur. Phys. J. B **7** (1999) 457.
- [SeD79] M.P. Seah und W.A. Dench, Surf. Interf. Anal. **1** (1979) 2.

- [ShL93] S.G. Shirley und E.L. Louie, J. Phys. Chem. Solids **54** (1993) 1767.
- [Skm98a] K. Sakamoto, T. Suzuki, M. Harada, T. Wakita, S. Suto und A. Kasuya, Phys. Rev. B **57** (1998) 9003.
- [Skm98b] K. Sakamoto, M. Harada, D. Kondo, A. Kimura, A. Kakizaki und S. Suto, Phys. Rev. B **58** (1998) 13951.
- [Sku91] A. Skumanich, Chem. Phys. Lett. **182** (1991) 486.
- [Sob89] M.A. Sobolewski und C.R. Helms, Appl. Phys. Lett. **54** (1989) 638.
- [Som81] G. Somorjai, *Chemistry in Two Dimensions: Surfaces* (Cornell University Press, Ithaca, 1981).
- [Spi67] K. Spiegel, Surf. Sci. **7** (1967) 125.
- [Ste91] P.W. Stephens, L. Mihaly, P.L. Lee, R.L. Whetten, S.M. Huang, R. Kaner, F. Deiderich und K. Holczer, Nature **351** (1991) 632.
- [Sto92] A. Stockhausen, T.U. Kampen und W. Mönch, Surf. Sci. **56–58** (1992) 795.
- [StW93] F. Stepniak, P.J. Benning, D.M. Poirier und J.H. Weaver, Phys. Rev. B **48** (1993) 1899.
- [Sut94] S. Suto, A. Kasuya, O. Ikeno, C.-W. Hu, A. Wawro, R. Nishitani, T. Goto und Y. Nishina, Jpn. J. Appl. Phys. **33** (1994) L1489.
- [Sut96a] S. Suto, A. Kasuya, C.-W. Hu, A. Wawro, K. Sakamoto, T. Goto und Y. Nishina, Thin Solid Films **281–282** (1996) 602.
- [Sut96b] S. Suto, A. Kasuya, C.-W. Hu, A. Wawro, K. Sakamoto, T. Wakita, T. Goto und Y. Nishina, Mat. Sci. Eng. A **217/218** (1996) 34.
- [Sut97] S. Suto, K. Sakamoto, T. Wakita, C.-W. Hu und A. Kasuya, Phys. Rev. B **56** (1997) 7439.
- [Sut98] S. Suto, K. Sakamoto, T. Wakita, M. Harada und A. Kasuya, Surf. Sci. **402–404** (1998) 523.
- [Sze81] S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2. Aufl. (Wiley, New York, 1981).

- [Tak85] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi und M. Takahashi, Surf. Sci. **164** (1985) 367.
- [TeF78] C. Tejedor und F. Flores, J. Phys. C **11** (1978) L19.
- [Ter84] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 465.
- [Tha94] Le Thanh Vinh, M. Eddrief, C.A. Sébenne, P. Dumas, A. Taleb-Ibrahimi, R. Gunther, Y.J. Chabal und J. Derrien, Appl. Phys. Lett. **64** (1994) 3308.
- [Top27] J. Topping, Proc. Roy. Soc. A **114** (1927) 67.
- [Tro92] N. Troullier und J.L. Martins, Phys. Rev. B **46** (1992) 1754.
- [Tsu97] K.-D. Tsuei, J.-Y. Yuh, C.-T. Tzeng, R.-Y. Chu, S.-C. Chung und K.-L. Tsang, Phys. Rev. B **56** (1997) 15412.
- [Tun84] R.T. Tung, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 461.
- [Tun91] R.T. Tung, Appl. Phys. Lett. **58** (1991) 2821.
- [Tun92] R.T. Tung, Phys. Rev. B **45** (1992) 13509.
- [Uba84] H. Ubara, T. Imura und A. Hiraki, Solid State Commun. **50** (1984) 673.
- [Upw97] M.D. Upward, P. Moriarty und P.H. Beton, Phys. Rev. B **56** (1997) R1704.
- [Var] Herstellerangaben der Fa. Varian.
- [Ven80] J.A. Venables, J. Derrien und A.P. Janssen, Surf. Sci. **95** (1980) 411.
- [Wal85] J.R. Waldrop, Appl. Phys. Lett. **47** (1985) 1301.
- [Wal88] J.R. Waldrop und R.W. Grant, J. Vac. Sci. Technol. B **6** (1988) 1432.
- [Wag31] C. Wagner, Phys. Z. **32** (1931) 641.
- [WaH92] Y. Wang, J.M. Holden, A.M. Rao, W.-T. Lee, X.X. Bi, S.L. Ren, G.W. Lehman, G.T. Hager und P.C. Eklund, Phys. Rev. B **45** (1992) 14396.

- [Wan92] X.-D. Wang, T. Hashizume, H. Shinohara, Y. Saito, Y. Nishina und T. Sakurai, *Jpn. J. Appl. Phys.* **31** (1992) L983.
- [WaS91] L.-S. Wang, J. Conceicao, C. Jin und R.E. Smalley, *Chem. Phys. Lett.* **182** (1991) 5.
- [Wea91] J.H. Weaver, J.L. Martins, T. Komeda, Y. Chen, T.R. Ohno, G.H. Kroll, N. Troullier, R.E. Haufler und R.E. Smalley, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991) 1741.
- [Wea94] J.H. Weaver und D.M. Poirier, *Sol. State Phys.* **48** (1994) 1.
- [WeB93] G.K. Wertheim und D.N.E. Buchanan, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 12912.
- [WeB94] G.K. Wertheim und D.N.E. Buchanan, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 11070.
- [Wei96] H.H. Weitering, J.P. Sullivan, R.J. Carolissen, R. Pérez-Sandoz, W.R. Graham und R.T. Tung, *J. Appl. Phys.* **79** (1996) 7820.
- [Wen92] C. Wen, J. Li, K. Kitazawa, T. Aida, I. Honma, H. Komiyama und K. Yamada, *Appl. Phys. Lett.* **61** (1992) 2162.
- [Wer88] J.H. Werner, *Appl. Phys. A* **47** (1988) 291.
- [Wer89] J.H. Werner, *Appl. Phys. Lett.* **54** (1989) 1528.
- [Xu93] H. Xu, D.M. Chen und W.N. Creager, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 1850.
- [Xun93] K. Xun, J. Deng, J. Yao, F. Liu, X. Tao, S. Lü, Z. Wang und S. Wu, *Chinese Phys. Lett.* **10** (1993) 167.
- [Yam95] T. Yamaguchi, *J. Phys. Soc. Jap.* **64** (1995) 1258.
- [Yam96] T. Yamaguchi und S. Miyoshi, *Surf. Sci.* **357–358** (1996) 283.
- [Yeh85] J.J. Yeh und I. Lindau, *Atomic and Nuclear Data Tables* **32** (1985) 1.
- [Yu92] R.C. Yu, N. Tea, M.B. Salamon, D. Lorents und R. Malhotra, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 2050.
- [Zah96] A. Zahab, L. Firlej, F. Brocard und N. Kirova, *Synthetic Metals* **77** (1996) 59.

- [Zan92] D.R.T. Zahn, N. Esser, C. Müller, W. Richter, C. Stephens, R. Whittle, I.T. McGovern, S. Kulkarni und W. Braun, *Appl. Surf. Sci.* **56–58** (1992) 228.
- [Zho91] O. Zhou, J.E. Fischer, N. Coustel, S. Kycia, Q. Zhu, A.R. McGhie, W.J. Romanow, J.P. McCauley Jr., A.B. Smith III und D.E. Cox, *Nature* **351** (1991) 462.
- [Zhu96] J.-S. Zhu, X.-M. Liu, S.-H. Xu, J.-X. Wu und X.-F. Sun, *Solid State Commun.* **98** (1996) 417.
- [Zim91] J.A. Zimmerman, J.R. Eyler, S.B.H. Bach und S.W. McElvany, *J. Chem. Phys.* **94** (1991) 3556.

Veröffentlichungen

Vorveröffentlichung eines Teils dieser Arbeit:

- [Jan99a] O. Janzen und W. Mönch
J. Phys.: Cond. Matter **11** (1999) L111
Valence-band discontinuity at the $C_{60}/Si(111)$ - 7×7 interface

Veröffentlichungen zu anderen Themen:

- [Jan96a] O. Janzen, V. van Elsbergen und W. Mönch
in Proc. 23rd Int. Conf. on the Physics of Semiconductors
Berlin (1996) S. 915
Oxidation of β -silicon carbide(100) surfaces at room temperature
- [Els97] V. van Elsbergen, O. Janzen und W. Mönch
Mat. Sci. Eng. B **46** (1997) 366
Oxidation of clean and H-terminated SiC surfaces
- [Jan99b] O. Janzen, Ch. Hahn, T.U. Kampen und W. Mönch
Eur. Phys. J. B **7** (1999) 1
Explanation of multiplet spots in low-energy electron diffraction patterns of clean $GaN\{0001\}$ - 1×1 surfaces
- [Jan99c] O. Janzen, Ch. Hahn und W. Mönch
Eur. Phys. J. B **9** (1999) 315
Oxidation of $GaN\{0001\}$ - 1×1 surfaces at room temperature
- [Jan99d] O. Janzen und W. Mönch
Surf. Sci. **431** (1999) 278
Comment on: "Initial stages of nitridation of Si(111) surfaces: X-ray photoelectron spectroscopy and scanning tunneling microscopy studies" by M. Tabe and T. Yamamoto [Surf. Sci. 376 (1997) 99]
- [Wey99] S.J. Weyers, O. Janzen und W. Mönch
eingereicht bei J. Phys.: Cond. Matter
Schottky barrier height of cesium on n-Si(111)- 7×7 surfaces

LETTER TO THE EDITOR

Valence-band discontinuity at the C₆₀/Si(111)-7 × 7 interface

O Janzen† and W Mönch

Laboratorium für Festkörperphysik, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, D-47048 Duisburg, Germany

Received 16 February 1999

Abstract. The growth of fullerene films on Si(111)-7 × 7 surfaces and the formation of the C₆₀/Si(111)-7 × 7 interface was studied using low-energy electron diffraction, Auger electron spectroscopy and x-ray as well as ultraviolet photoemission spectroscopy. The initial growth of C₆₀ proceeds layer-by-layer. No chemical reactions or interdiffusion were observed. The C₆₀ deposition does not change the binding energies of Si(2p) and C(1s) electrons. Therefore, the band bending of the clean Si(111)-7 × 7 surface remains the same, irrespective of the C₆₀ coverage. The photoemission measurements yield a valence-band discontinuity of 0.6 ± 0.2 eV at the C₆₀/Si(111)-7 × 7 interface. The band line-up at semiconductor interfaces is explained by the adjustment of the branch points in the continuum of the interface-induced gap states. Our experimentally observed valence-band offset agrees well with the theoretical predictions if the branch point of C₆₀ is assumed at midgap position.

1. Introduction

Solid C₆₀ is a new form of carbon crystal. At room-temperature C₆₀ molecules are arranged in a face-centred cubic (fcc) structure with a lattice parameter of 14.198 Å [1]. The C₆₀ molecules interact by van der Waals-force only. Saito *et al* [2] found solid C₆₀ to have a semiconducting character with a direct band gap. Therefore, C₆₀ films, deposited on Si, form semiconductor heterostructures. The electronic properties of such heterostructures are determined by the band-structure alignment across the interface. Essential parameters are the offsets of the valence- and the conduction-band edges.

Extensive experimental studies have been reported on the adsorption of C₆₀ molecules and the growth of crystalline C₆₀ films on Si(111) substrates. Techniques used were scanning-tunnelling microscopy (STM) [3–9], high-resolution electron energy-loss spectroscopy (HREELS) [10, 11], x-ray diffraction [12] and photoemission spectroscopy [13, 14]. Only two studies focused on the band-edge discontinuities at C₆₀/Si(111) interfaces [15, 16]. However, contradicting results were reported. Transport measurements yielded a valence-band discontinuity smaller than 0.42 eV [15], whereas photoemission gave a negative valence-band offset of -0.4 eV [16]. A negative offset means that the Si valence-band maximum is below the one of C₆₀. Unfortunately, no theoretical prediction of the valence-band offset at C₆₀/Si(111) interfaces is available.

In our present study, we determined the valence-band discontinuity at the C₆₀/Si(111) interfaces using x-ray and ultraviolet photoemission spectroscopy (XPS, UPS). We carefully controlled surface cleanliness and structure, and evaporated C₆₀ onto well-ordered 7 × 7-reconstructed surfaces. This reconstruction is preserved beneath C₆₀ films [12]. Our

† E-mail address: oliver_janzen@uni-duisburg.de.

measurements give a valence-band offset of 0.6 ± 0.2 eV. We explain this experimental result by the continuum of interface-induced gap states (IFIGS), a concept that was successfully applied to explain the band line-up at interfaces between conventional semiconductors [17, 18].

2. Experimental details

The experiments were carried out in a stainless-steel ultrahigh vacuum (UHV) system, which consists of a rapid load-lock, a preparation chamber and an analysis chamber. The rapid load-lock was used for transferring the samples into the UHV and reached a pressure of less than 10^{-4} Pa within 10 min. In the preparation chamber samples could be heated by electron bombardment from the back. The analysis chamber was equipped with a low-energy electron diffraction (LEED) optics and a cylindrical mirror analyser, having an integral electron gun for Auger electron spectroscopy (AES). Furthermore, an x-ray source with a Zr/Mg double anode and a differentially pumped, window-less discharge lamp were employed for x-ray and ultraviolet photoemission spectroscopy (XPS, UPS), respectively. Energy distribution curves of photoemitted electrons were measured with a concentric hemispherical analyser. Both the analysis and the preparation chamber had base pressures of approximately 10^{-8} Pa.

Samples, cut from n-type Si(111) wafers, were first oxidized in 1 bar of O_2 at 900°C for 30 min, then dipped into hydrofluoric acid, which was diluted by a buffered $\text{HF}:\text{NH}_4\text{F}:\text{NH}_4\text{OH}$ -solution, and eventually transferred into the UHV system. This *ex situ* preparation resulted in H-terminated Si(111):H- 1×1 surfaces. Hydrogen was then desorbed by heating the samples indirectly to 850°C for about 2 min. After this procedure, no contaminants were detected by AES or XPS, sharp 7×7 LEED patterns with low background were observed and the UPS spectra showed the surface states of the 7×7 reconstruction. As usual, AES spectra were recorded as first derivatives and intensities of the lines were taken as the peak-to-peak heights (PPH) of the Auger signals.

Pure C_{60} (Hoechst AG, 'super gold grade' > 99.9%) was evaporated from a Knudsen cell in the analysis chamber. It was carefully outgassed at 400°C for more than 24 h. During exposures, its temperature was held at approximately 300°C and the background pressure was lower than 2×10^{-8} Pa. The growth rate at this temperature was determined as 0.5 monolayers (ML) per minute. Here, a monolayer is defined by the results of our AES measurements and is described in the next section.

3. Results

Figure 1 shows the variation of the Si(LVV) and C(KLL) intensities as a function of the C_{60} deposition time. Here, the PPHs of the lines were normalized by their maximum values, i.e., the PPHs of the Si(LVV) line recorded with the clean substrate and of the C(KLL) line recorded after 600 s deposition of C_{60} , respectively. Each data point represents an average of measurements at three different spots on the sample. The error bars are within the symbol size. The dashed lines are meant to guide the eye.

The variations of the Si(LVV) and C(KLL) intensities as a function of deposition time may be described by a sequence of straight line segments. The kinks then indicate the completion of continuous layers, i.e., after 120 s and 240 s of deposition time the first and the second C_{60} monolayer, respectively, are completed. The initial growth thus proceeds layer-by-layer [19]. This yields a growth rate of 0.5 ML per minute or 0.4 nm per minute since the distance between two (111) layers of C_{60} is approximately 0.8 nm [1]. Initially, a sharp 7×7 LEED pattern was observed. Each C_{60} exposure slightly increased the diffuse background, but the

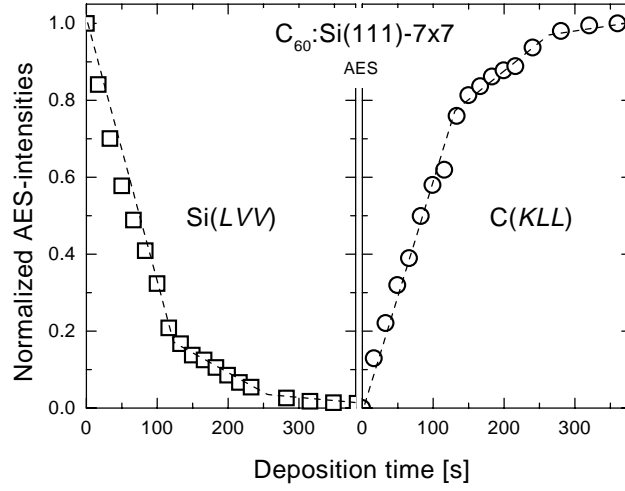


Figure 1. AES intensity ratios $\text{Si(LVV)}/\text{Si(LVV)}_0$ and $\text{C(KLL)}/\text{C(KLL)}_\infty$ recorded with a $\text{Si(111)-7} \times 7$ sample as a function of the C_{60} deposition time. The dashed lines are meant to guide the eye.

7×7 spots remained sharp up to approximately 120 s of deposition time. Thereafter, the background became so intense that the 7×7 pattern could no longer be recognized.

Previous investigations demonstrated that C_{60} multilayers desorb during annealing at 400°C [5, 9], but one monolayer of C_{60} remains adsorbed on $\text{Si(111)-7} \times 7$ surfaces. STM observations [8] identified this monolayer to consist of seven C_{60} molecules per 7×7 surface unit-mesh which is equivalent to 1.12×10^{14} C_{60} molecules per cm^2 . The $\text{Si(LVV)}/\text{C(KLL)}$ PPH-ratio is 0.75 ± 0.05 after 120 s of deposition but amounts to 0.85 ± 0.05 if the C_{60} monolayer is prepared by the annealing of a film of 5 ML at 400°C for 10 min. The difference in the $\text{Si(LVV)}/\text{C(KLL)}$ intensity ratios indicates that the area density of the C_{60} molecules in the as-deposited monolayer is slightly below the one after multilayer desorption. This may be due to adsorbate ordering at elevated temperatures. In the following, we take these AES measurements as calibration of the growth rate and quote C_{60} coverages either in monolayers or in nanometers.

The escape depths λ_{Si} and λ_{C} of 90 eV Si(LVV) and 270 eV C(KLL) Auger electrons, respectively, may be determined from the experimental data shown in figure 1. As a function of the number n of complete C_{60} monolayers, Beer's law gives the substrate and the overlayer intensities as

$$I_{\text{Si}}(n) = I_{\text{Si}}^0 \exp(-nd_{111}\zeta_{\text{Si}}) \quad (1)$$

and

$$I_{\text{C}}(n) = I_{\text{C}}^\infty [1 - \exp(-nd_{111}\zeta_{\text{C}})] \quad (2)$$

respectively, where I_{Si}^0 is the Si(LVV) intensity measured with the clean Si(111) substrate and I_{C}^∞ is the C(KLL) signal recorded with a C_{60} film, the thickness of which exceeds a few escape lengths λ_{C} . The thickness of a complete C_{60} layer is taken as the (111) interlayer distance $d_{111} = 0.82$ nm in solid fcc- C_{60} . The attenuation parameters

$$\zeta_{\text{Si,C}} = 1/\lambda_p + 1/(\lambda_{\text{Si,C}} \cos \alpha_{\text{CMA}}) \quad (3)$$

are determined by the penetration length $\lambda_p = 4.2$ nm of the primary 3 keV electrons and the acceptance angle $\alpha_{\text{CMA}} \approx 42^\circ$ of the CMA. The ratios $I_{\text{Si,C}}(1)/I_{\text{Si,C}}(2)$ of the intensities at

the corresponding kinks in figure 1 then give the escape lengths $\lambda_{Si} = 0.67 \pm 0.05$ nm and $\lambda_C = 0.85 \pm 0.05$ nm. These values are close to what has been reported for *conventional* semiconductors [17].

Figure 2 displays Si(2p) and C(1s) XPS signals recorded with a clean Si(111)- 7×7 surface and after its coverage with up to five monolayers of C₆₀. The binding energies are referenced to the Fermi level which was recorded with a 200 nm thick Pb film. Since the main C(1s) line, measured with the thickest C₆₀ film, will consist of one component only, its full width at half maximum of 0.9 ± 0.05 eV represents the overall resolution determined by the Mg(K α) line and the analyser. The Si(2p) line consists of two spin-orbit split components which cannot be resolved. With increasing C₆₀ coverage, this peak decreases in intensity and it has almost vanished after deposition of 5 ML. However, its peak shape and, even more importantly, its energy position does not change as a function of C₆₀ coverage. The latter observation means that the band bending at the clean Si(111)- 7×7 surface is preserved beneath the C₆₀ film, probably due to the persistence of the 7×7 structure itself [12]. The C(1s) signal becomes more intense with increasing coverage. The spectrum recorded with the 5 ML thick film exhibits the satellite features that are typical of C₆₀ [20]. The structures 2–6 are due to energy losses of photoemitted electrons that excite $\pi-\pi^*$ transitions. Specifically, feature 2 has been attributed to a shakeup process involving direct excitations between states derived from the highest occupied molecular orbitals (HOMO) and from the lowest unoccupied molecular orbitals (LUMO). If we neglect correlation effects the energy shift of this satellite with respect to the main line gives the band gap $W_g^{C_{60}}$ of solid C₆₀ as 1.8 ± 0.1 eV. The binding energy of the main peak, 1, of the C(1s) signal with regard to the Fermi level is the same for all C₆₀ coverages.

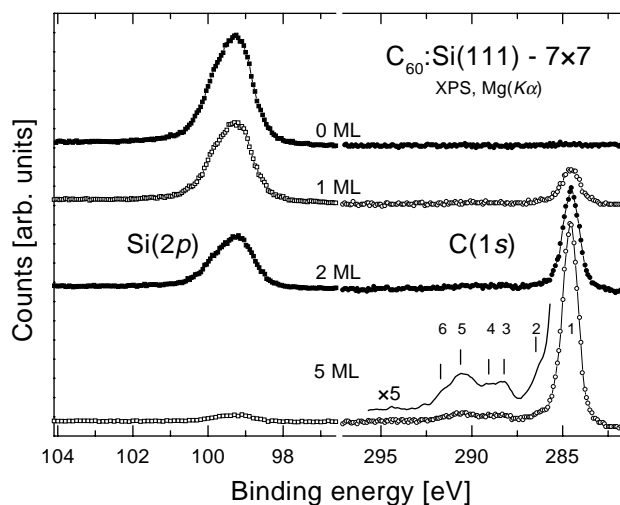


Figure 2. XPS spectra of Si(2p) and C(1s) core levels of a clean and subsequently C₆₀-covered Si(111)- 7×7 surface. Binding energies are referenced to the Fermi level. The solid line in the bottom spectrum on the right represents a smoothed magnification of the C(1s) satellites. The features labelled 2–6 represent energy losses of photoemitted electrons caused by $\pi-\pi^*$ transitions.

Figure 3 displays valence-band spectra of the clean 7×7 surface and a 16.5 nm thick C₆₀ film excited with HeI radiation. The binding energies are again referenced to the experimentally determined Fermi level. The structures labelled S₁, S₂ and S₃ in the top spectrum are due to emission from surface states of the 7×7 surface which were identified as the dangling bonds of adatoms (S₁) and of rest-atoms (S₂) and backbonds of the adatoms

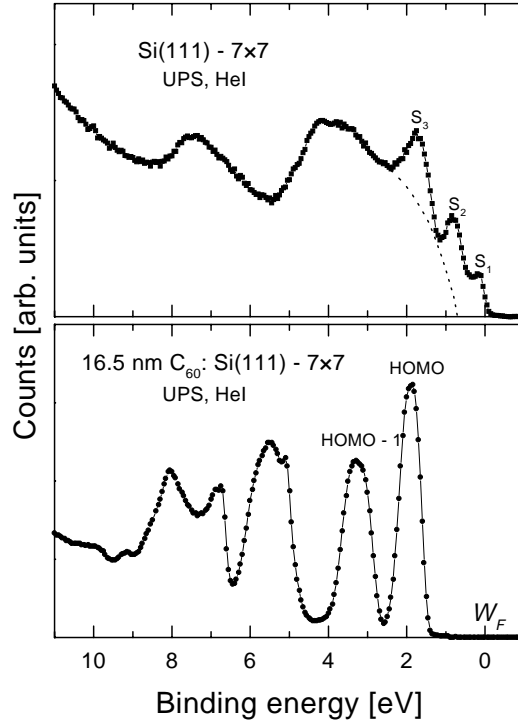


Figure 3. Valence band spectra of a clean Si(111)- 7×7 surface and a 16.5 nm thick C_{60} film. The structures labelled S_1 , S_2 and S_3 are due to emission from surface states of the 7×7 -reconstructed surface. The dashed line indicates the contribution from the valence-band top. The bottom spectrum displays the valence bands of C_{60} where the structure labelled HOMO is derived from the highest occupied molecular orbital.

(S_3) [17]. The dashed line represents the contribution of the valence-band top to the total emission. The onset energy $W_F - W_{vs}^{Si}$ of the valence-band emission may be determined from the well-known energy differences $W_{vs}^{Si} - W(S_2) = 0.15 \pm 0.05$ eV of the surface state S_2 and $W_{vs}^{Si} - W(Si(2p_{3/2})) = 98.56 \pm 0.05$ eV of the $Si(2p_{3/2})$ core level [21] to the valence-band top W_{vs} . Our experimental data $[W_F - W(S_2)]_{\text{exp}} = 0.85 \pm 0.05$ eV and $[W_F - W(Si(2p_{3/2}))]_{\text{exp}} = 99.25 \pm 0.05$ eV both give $W_F - W_{vs}^{Si} = 0.7 \pm 0.1$ eV. This value concurs with the observation reported earlier [17] that the surface states of the Si(111)- 7×7 surface pin the Fermi level at 0.7 eV above the valence-band maximum.

The spectrum recorded with a 16.5 nm thick C_{60} film on a Si(111)- 7×7 surface shows the sequence of peaked features typical of C_{60} [20]. These structures are derived from the molecular orbitals and their sharpness indicates the weak interactions between the molecules. By linear extrapolation of the high-energy tail of the HOMO-derived structure we obtain the valence-band maximum $W_v^{C_{60}}$ of the C_{60} film at 1.3 ± 0.05 eV below the Fermi level. Considering this value and the binding energy $W_F - W(C(1s)) = 284.6 \pm 0.1$ eV we determine the binding energy $W_v - W(C(1s))$ of the C(1s) core levels with regard to the valence-band maximum as 283.3 ± 0.1 eV in solid fcc- C_{60} .

4. Discussion

The $C_{60}/Si(111)-7 \times 7$ interface is abrupt since no chemical reaction occurs and the initial growth proceeds in a layer-by-layer mode. Layer-plus-islands growth has been reported earlier

[5] but we have no indications for islands. This may be due to different growth conditions. At abrupt interfaces the band line-up is established within a few Ångströms and is described by band-edge offsets. The XPS data displayed in figure 2 reveal that the binding energies of both the Si(2p) and the C(1s) levels with regard to the Fermi level do not vary with increasing thickness of the C₆₀ film. On the silicon side of the C₆₀/Si(111)-7 × 7 interface, the pinning of the Fermi level or, in other words, the interface band-bending thus remains the same irrespective of the C₆₀ depositions. On the other side, even a thickness of 16.5 nm is not sufficient for the formation of a space-charge layer in the C₆₀ film. Therefore, the valence-band offset in C₆₀/Si(111)-7 × 7 heterostructures equals the difference of the binding energies of the valence-band maxima with regard to the Fermi level. They were determined from the XPS and the UPS spectra displayed in figures 2 and 3 as $W_F - W_{vs}^{Si} = 0.7 \pm 0.1$ eV and $W_F - W_{vs}^{C60} = 1.3 \pm 0.05$ eV so that we obtain

$$\Delta W_v = W_{vi}^{Si} - W_{vi}^{C60} = W_F - W_{vs}^{C60} - (W_F - W_{vs}^{Si}) = 0.6 \pm 0.2 \text{ [eV]}. \quad (4)$$

Within the limits of experimental error, this valence-band offset agrees with the value obtained from transport measurements at C₆₀/Si(111)-H-1 × 1 heterostructures [15]. However, our photoemission data do not confirm a negative valence-band offset [16].

Figure 4 displays schematically the band diagram of C₆₀/Si(111)-7 × 7 heterostructures. Neither the value nor the sign of the conduction-band discontinuity ΔW_c can be reliably determined from the above experimental value of the valence-band offset. This is due to the large scatter of the band-gap widths reported for solid C₆₀ that range from 1.3 eV up to 2.3 eV [20–25]. For an estimate of the conduction-band offset, we take the band gap energy W_g^{C60} as 1.8 eV. This is an average of the experimental values obtained from photoconductance measurements and electron energy-loss as well as photoemission spectroscopy. This value also

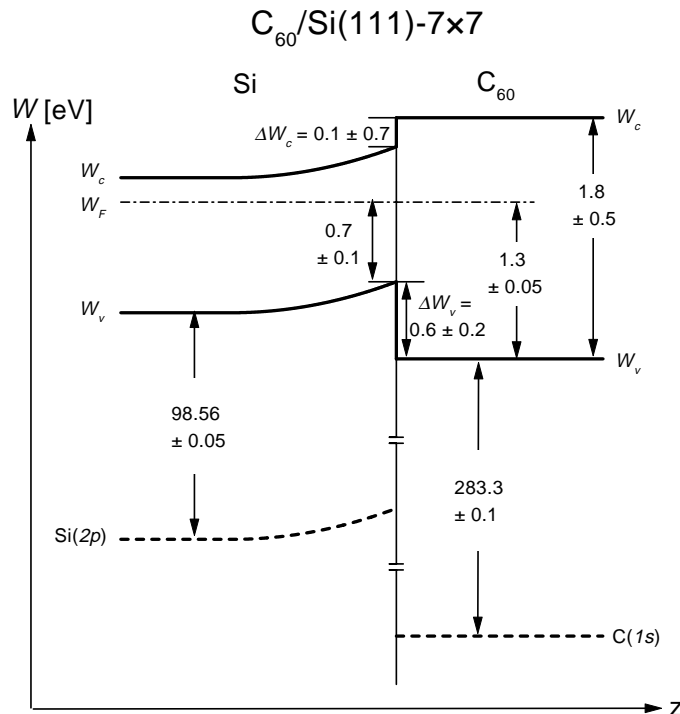


Figure 4. Energy band diagram of the C₆₀/Si(111)-7 × 7 interface.

equals the energy loss observed with the C(1s) photoelectrons in figure 2, that was attributed to HOMO–LUMO transitions. We then estimate a conduction-band offset of 0.1 eV, as indicated in figure 4.

The line-up of the electronic band structures at ideal semiconductor interfaces is determined by the continuum of interface-induced gap states (IFIGS) [17, 18]. These intrinsic interface states originate from the wavefunction tails in the energy range where the valence or the conduction band of one semiconductor overlaps the band gap of the other one. The IFIG states derive from the virtual gap states (ViGS) of the complex band structure of semiconductors. Their character changes across the band gap from predominantly acceptor-like close to the bottom of the conduction band, to mainly donor-like close to the valence-band maximum. The energy W_{bp} , at which the dominant proportion changes, is called their branch point. Again, the branch-point energy is an intrinsic property of each semiconductor. Provided no charge transfer occurs at a semiconductor heterostructure then the bands line up such that the branch points of the two semiconductors in contact are at the same energy. Partially ionic interface bonds, on the other hand, will add an additional layer of interface dipoles and the voltage drop across this electric double layer contributes another term to the band offsets. Chemically speaking, the corresponding charge transfer may be described by the difference $X_2 - X_1$ in the electronegativities of the semiconductors in contact. The valence-band discontinuity may then be written as [26]

$$\Delta W_v^{IFIGS} = (W_{bp} - W_v)_2 - (W_{bp} - W_v)_1 + D(X_2 - X_1) = \Phi_{bp}^2 - \Phi_{bp}^1 + D(\Delta X) \quad (5)$$

where $D(\Delta X)$ represents the interface dipoles.

The branch points W_{bp} of the tetrahedrally coordinated semiconductors are close to the middle of the dielectric or average band gap at the mean value point of the Brillouin zone [18]. The branch-point energy of solid C_{60} , on the other hand, was not calculated but it may be estimated. Due to the weak interaction between the C_{60} molecules the HOMO- and LUMO-derived bands of solid C_{60} only slightly disperse so that the band gap varies by less than 0.5 eV along the high-symmetry directions of the Brillouin zone [2, 27, 28]. If we completely ignore any dispersion of the C_{60} energy bands and assume a constant band-gap width of 1.8 eV across the whole Brillouin zone we then estimate the energy position of the C_{60} branch point at 0.9 eV above the valence-band maximum. We further neglect the dipole term $D(X_{C_{60}} - X_{Si})$. Using the branch-point energy $\Phi_{bp}^{Si} = (W_{bp} - W_v)_{Si} = 0.36$ eV calculated by Tersoff [29] for silicon, we finally obtain the valence-band offset at C_{60}/Si heterostructures as

$$\Delta W_v^{C_{60}/Si} \approx W_g^{C_{60}}/2 - \Phi_{bp}^{Si} = 0.54 \text{ [eV]}.$$

This value agrees remarkably well with the experimentally observed valence-band offset of 0.6 ± 0.2 eV.

5. Conclusions

To summarize, the present study investigated the formation of the $C_{60}/Si(111)-7 \times 7$ interface and the alignment of the electronic band structure at this interface. During the deposition of the C_{60} molecules no chemical reactions occurred and the 7×7 reconstruction was preserved beneath the C_{60} film. Up to at least two monolayers, the initial growth proceeded layer-by-layer. The interface was abrupt and the band bending of the clean $Si(111)-7 \times 7$ surface remained unchanged. The offset $\Delta W_v^{C_{60}/Si} = W_v^{C_{60}} - W_v^{Si}$ of the valence-band maxima at the interface was determined as 0.6 ± 0.2 eV. This experimental value is explained by the continuum of interface-induced gap states. When the slight energy dispersion of the C_{60} HOMO and

LUMO bands is ignored, the IFIGS model yields a valence-band discontinuity of 0.54 eV at $C_{60}/Si(111)-7 \times 7$ interfaces, in good agreement with the experimental data.

The authors would like to thank Dr W Appel from Hoechst AG for providing the 'super gold grade' C_{60} powder.

References

- [1] Dresselhaus M S, Dresselhaus G and Eklund P C 1996 *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* (San Diego: Academic)
- [2] Saito S and Oshiyama A 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 2637
- [3] Li Y Z, Chander M, Patrin J C, Weaver J H, Chibante L P F and Smalley R E 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13 837
- [4] Wang X-D, Hashizume T, Shinohara H, Saito Y, Nishina Y and Sakurai T 1992 *Japan. J. Appl. Phys.* **31** L983
Sakurai T, Wang X-D, Hashizume T, Nishina Y, Shinohara H and Saito Y 1993 *Appl. Surf. Sci.* **67** 281
- [5] Xu H, Chen D M and Creager W N 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1850
- [6] Balooch M and Hamza A V 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 150
- [7] Chen D M, Xu H, Creager W N and Burnett P 1994 *J. Vac. Sci. Technol. B* **12** 1910
- [8] Chen D and Sarid D 1994 *Phys. Rev. B* **49** 7612
Chen D, Chen J and Sarid D 1994 *Phys. Rev. B* **50** 10905
- [9] Dunn A W, Moriarty P, Upward M D and Beton P H 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 506
- [10] Suto S, Kasuya A, Ikeno O, Hu C-W, Wawro A, Nishitani R, Goto T and Nishina Y 1996 *Japan. J. Appl. Phys.* **33** L1489
Suto S, Sakamoto K, Wakita T, Harada M and Kasuya A 1998 *Surf. Sci.* **402–404** 523
- [11] Dumas P, Gruyters M, Rudolf P, He Y, Yu L-M, Gensterblum G, Caudano R and Chabal Y J 1996 *Surf. Sci.* **368** 330
- [12] Hong H, McMahon W E, Zschack P, Lin D-S, Aburano R D, Chen H and Chiang T-C 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 3127
- [13] Moriarty P, Upward M D, Dunn A W, Ma Y-R, Beton P H and Teehan D 1998 *Phys. Rev. B* **57** 362
- [14] Sakamoto K, Harada M, Kondo D, Kimura A, Kakizaki A and Suto S 1998 *Phys. Rev. B* **58** 13951
- [15] Chen K M, Jia Y Q, Jin S X, Wu K, Zhao W B, Li C Y, Gu Z N and Zhou X H 1995 *J. Phys.: Condens. Matter* **7** L201
- [16] Zhu J-S, Liu X-M, Xu S-H, Wu J-X and Sun X-F 1996 *Solid State Commun.* **98** 417
- [17] Mönch W 1995 *Semiconductor Surfaces and Interfaces* 2nd edn (Berlin: Springer), and references therein
- [18] Mönch W 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 1899
Mönch W 1997 *Appl. Surf. Sci.* **117/118** 380
Mönch W 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 5076
- [19] Lüth H 1993 *Surfaces and Interfaces of Solids* 2nd edn (Berlin: Springer)
- [20] Weaver J H, Martins J L, Komeda T, Chen Y, Ohno T R, Kroll G H, Troullier N, Hauffler R E and Smalley R E 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1741
- [21] Miyazaki S, Schäfer J, Ristein J and Ley L 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 1247
- [22] Faiman D, Goren S, Katz E A, Koltun M, Melnik N, Shames A and Shtutina S 1997 *Thin Solid Films* **295** 283
- [23] Ren S L, Wang Y, Rao A M, McRae E, Holden J M, Hager T, Wang K, Lee W-T, Ni H F, Selegue J and Eklund P C 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 2678
- [24] Hansen P L, Fallon P J and Krätschmer W 1991 *Chem. Phys. Lett.* **181** 367
- [25] Hosoya M, Ichimura K, Wang Z H, Dresselhaus G, Dresselhaus M S and Eklund P C 1994 *Phys. Rev. B* **49** 4981
- [26] Tejedor S and Flores F 1978 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11** L19
- [27] Weaver J H and Poirier D M 1994 *Solid State Phys.* **48** ed Ehrenreich H and Spaepen F (San Diego: Academic) p 1
- [28] Troullier N and Martins J L 1992 *Phys. Rev. B* **46** 1754
- [29] Tersoff J 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 465

Danksagung

Mein besonderer Dank gebührt Herrn Prof. Dr. W. Mönch, der mir diese Arbeit im Laboratorium für Festkörperphysik ermöglichte. Für die Förderung, die meine Arbeit und ich durch ihn erfuhren, bin ich ihm sehr verbunden. Insbesondere möchte ich mich für seine ständige Diskussionsbereitschaft und die mir eingeräumte wissenschaftliche Freiheit bedanken.

Des weiteren danke ich Herrn Dr. Volker van Elsbergen. Er hat mich zu Beginn meiner Diplomarbeit das "Laufen" im Labor gelehrt und mich gegen Ende dieser Arbeit durch sorgfältiges Korrekturlesen unterstützt. Die vielen fachlich anregenden Gespräche werde ich, wie unsere persönlichen Gespräche, in guter Erinnerung behalten. Den Mitarbeitern des Laboratoriums für Festkörperphysik, Herrn Dr. Herrmann Nienhaus, Herrn Sascha Weyers und Herrn Stefan Grabowski, spreche ich meinen Dank für die angenehme Arbeitsatmosphäre, das stete Interesse und die Anteilnahme an meiner Arbeit aus. Zahlreiche fachliche Diskussionen mit ihnen haben diese Arbeit maßgeblich gefördert. Bei Frau Britta Hausmanns möchte ich mich für das abschließende Korrekturlesen der Arbeit herzlich bedanken.

Herrn Manfred Jordan und Herrn Jürgen Krusenbaum gilt mein Dank für ihre Hilfe bei der Konstruktion einiger UHV-Bauteile. Weiterhin hat Herr Jürgen Krusenbaum mich durch die Anfertigung der entsprechenden technischen Zeichnungen sowie zweier Abbildungen aus dieser Arbeit unterstützt. Den Mitarbeitern der feinmechanischen Werkstatt danke ich für die Anfertigung der UHV-Bauteile.

Herrn Dr. W. Appel von der HOECHST AG möchte ich meinen Dank dafür aussprechen, daß er mir das in dieser Arbeit verwendete "*super gold grade*" C₆₀ zur Verfügung stellte.

Meinen Eltern möchte ich für die uneingeschränkte Unterstützung meines bisherigen Werdegangs herzlich danken.

In ganz besonderem Maße danke ich meiner Frau Jasminka. Für den Mut, den sie über die Jahre immer wieder in mir aufbaute, und für die Geduld, die sie mir stets entgegenbrachte.

Lebenslauf

25. November 1969 geboren in Oberhausen
- 1976 – 1980 Schuljahre Robert-Koch-Grundschule
in Oberhausen-Osterfeld
- 1980 – 1989 Schuljahre Gesamtschule Osterfeld in Oberhausen
17. Mai 1989 Abitur ebenda
- 1989 – 1990 Zivildienst
im Evangelischen Krankenhaus Oberhausen
- 1990 – 1996 Studium der Physik an der
Gerhard-Mercator-Universität – GH Duisburg
27. Oktober 1992 Diplomvorprüfung im Fach Physik
13. März 1996 Diplom in Physik
Thema der experimentellen Diplomarbeit:
Oxidation von Siliziumkarbidoberflächen
- seit April 1996 Wissenschaftlicher Angestellter im Laboratorium für
Festkörperphysik der Gerhard-Mercator-Universität
– GH Duisburg unter der Leitung von Prof. Dr.
W. Mönch
- August 1998 Unterbrechung der Promotion für ein Praktikum bei
der IBM Deutschland GmbH.