

# Einfluss von Alkalikoabsorption auf die Chemie von Wasser und Stickoxiden auf Siliziumoberflächen

## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Einfluss einer durch Alkalikoabsorption induzierten Veränderung der elektronischen Struktur des Substrates auf die Photochemie der adsorbierten Moleküle  $D_2O$  und  $NO$  untersucht. Dazu wurden zunächst die Systeme  $Si(100)-(2 \times 1):H/D_2O$  und  $Si(100)-(2 \times 1)/NO$  bezüglich ihrer thermodynamischen Eigenschaften, im Sinne von Desorptionsenergien, bezüglich ihrer schwingungsspektroskopischen und photochemischen Eigenschaften untersucht.

Für die mit Cäsium bedeckte Oberfläche konnten TPD- und EELS-Spektren erhalten werden, die über einen Vergleich zu dem aus der Literatur bekannten  $K/Si(100)-(2 \times 1)(H)$ -System Ähnlichkeiten, aber auch Unterschiede offenbarten. Die Adsorption von  $D_2O$  auf die alkalibedeckte Oberfläche führt zur Ausbildung von  $D_2O$ -Dissoziationsprodukten, welche mit Cäsium einen Komplex der Form  $Cs_xO_y(OD)_z$  bilden. Weiterhin bilden sich  $D_2O$ -Hydrathüllen und für höhere Wasserbedeckungen amorphe Eisfilme aus. Es konnte die Bildung einer Spezies mit  $m/e = 17$  im TPD nachgewiesen werden, die einer Reaktion einer Cäsiumoxidstruktur mit der Wasserstoffpassivierung der Siliziumoberfläche zugesprochen wurde. Die wasserstoffpassivierte Siliziumoberfläche zeigte auch mit zusätzlicher Alkalikoabsorption, bezogen auf das Adsorbat  $D_2O$ , keine photochemische Aktivität. Dieses korrespondierte mit einer Nichtexistenz elektronischer Übergänge, wie sie im Bereich der elektronischen Anregung im EELS in einem Energiebereich bis 10 eV beobachtbar sind.

Für die Adsorption von  $NO$  auf der  $Si(100)-(2 \times 1)$ -Oberfläche konnte die aus der Literatur bekannte teilweise molekulare und dissoziative Adsorption des  $NO$  bestätigt werden. Für die  $NO$ -Adsorption auf eine mit Cäsium bedeckte  $Si(100)-(2 \times 1):H$ -Oberfläche wurde teilweise  $NO$ -Dissoziation gefunden. Es wurde die Ausbildung eines  $Cs_xN_yO_z$ -Komplexes postuliert, der die Cäsiumschicht gegen Desorption stabilisiert, d. h. die Cäsiumdesorption zu höheren Temperaturen verlagert.

Die Rekombination der  $NO$  Dissoziationsprodukte liefert im wesentlichen  $N_2$  und  $N_2O$  und zu einem geringeren Anteil  $NH_3$  und  $NO_2$ . Ein Teil des durch Dissoziation des  $NO$  entstehenden Sauerstoffs oxidiert die Siliziumoberfläche, was erkennbar ist an der Intensitätszunahme des Desorptionssignals bei  $\sim 980$  K, welches der Desorption der Siliziumoxidschicht zuzuordnen ist, und an der Sauerstoffbilanz für das  $Cs/Si(100)-(2 \times 1):H/NO$ -System.

Für die Oberflächen  $Cs/Si(100)-(2 \times 1):H/D_2O$  und  $Cs/Si(100)-(2 \times 1):H/NO$  übersteigt der Cäsiumgehalt der gebildeten Cäsiumkomplexe den Gehalt an Sauerstoff bzw. Sauerstoff und Stickstoff um fast eine Größenordnung.

Die durch Cäsiumadsorption induzierte Veränderung der Substratbandstruktur äußerte sich in der Bildung eines Oberflächenplasmonenpeaks im Bereich elektronischer Anregung im EELS. Dieser verschwindet allerdings im Falle sowohl der  $D_2O$ - als auch der  $NO$ -Adsorption. Für das  $Cs/Si(100)-(2 \times 1):H/NO$ -System zeigt sich die Bildung eines Verlustes bei einer Energie von  $\sim 4.6$  eV.

Das Bestrahlen der  $Cs/Si(100)-(2 \times 1):H/NO$  Oberfläche führt zur Oxidation des Siliziumsubstrates, was aus den EELS-Spektren im Bereich der Schwingungsanregung aus einer Peakverschiebung der  $NO$ -Streckschwingung geschlossen werden konnte.

Bezüglich der photoneninduzierten Desorption zeigte ein Vergleich der Geschwindigkeitsverteilung photodesorbierender Teilchen von der  $Si(100)-(2 \times 1)/NO$ -Oberfläche zum einen und von der  $Cs/Si(100)-(2 \times 1):H/NO$ -Oberfläche zum anderen keinen Unterschied. Ein aus TPD-Daten gewonnener Vergleich der Photowirkungsquerschnitte offenbarte allerdings eine grössere Effizienz für die Photodesorption im Falle des cäsiumbedeckten Systems. Der Desorptionsprozess wird in beiden Fällen einem substratinduzierten Loch-Mechanismus zugesprochen.