

Institut für Festkörperforschung

**Kompositionelle und strukturelle
Charakterisierung von verspannten
Si/SiGe-Heterostrukturen mit
hochauflösender Transmissions-
elektronenmikroskopie**

Dirk Stenkamp

The following information is provided for your reference:

1. The first section of the document contains a list of items.

2. The second section contains a table of data.

3. The third section contains a list of items.

4. The fourth section contains a table of data.

5. The fifth section contains a list of items.

6. The sixth section contains a table of data.

7. The seventh section contains a list of items.

8. The eighth section contains a table of data.

9. The ninth section contains a list of items.

10. The tenth section contains a table of data.

11. The eleventh section contains a list of items.

12. The twelfth section contains a table of data.

13. The thirteenth section contains a list of items.

14. The fourteenth section contains a table of data.

15. The fifteenth section contains a list of items.

16. The sixteenth section contains a table of data.

17. The seventeenth section contains a list of items.

18. The eighteenth section contains a table of data.

19. The nineteenth section contains a list of items.

20. The twentieth section contains a table of data.

21. The twenty-first section contains a list of items.

22. The twenty-second section contains a table of data.

23. The twenty-third section contains a list of items.

24. The twenty-fourth section contains a table of data.

25. The twenty-fifth section contains a list of items.

26. The twenty-sixth section contains a table of data.

27. The twenty-seventh section contains a list of items.

28. The twenty-eighth section contains a table of data.

29. The twenty-ninth section contains a list of items.

30. The thirtieth section contains a table of data.

31. The thirty-first section contains a list of items.

32. The thirty-second section contains a table of data.

33. The thirty-third section contains a list of items.

34. The thirty-fourth section contains a table of data.

35. The thirty-fifth section contains a list of items.

36. The thirty-sixth section contains a table of data.

37. The thirty-seventh section contains a list of items.

38. The thirty-eighth section contains a table of data.

39. The thirty-ninth section contains a list of items.

40. The fortieth section contains a table of data.

41. The forty-first section contains a list of items.

42. The forty-second section contains a table of data.

43. The forty-third section contains a list of items.

44. The forty-fourth section contains a table of data.

45. The forty-fifth section contains a list of items.

46. The forty-sixth section contains a table of data.

47. The forty-seventh section contains a list of items.

48. The forty-eighth section contains a table of data.

49. The forty-ninth section contains a list of items.

50. The fiftieth section contains a table of data.

51. The fifty-first section contains a list of items.

52. The fifty-second section contains a table of data.

53. The fifty-third section contains a list of items.

54. The fifty-fourth section contains a table of data.

55. The fifty-fifth section contains a list of items.

56. The fifty-sixth section contains a table of data.

57. The fifty-seventh section contains a list of items.

58. The fifty-eighth section contains a table of data.

59. The fifty-ninth section contains a list of items.

60. The sixtieth section contains a table of data.

61. The sixty-first section contains a list of items.

62. The sixty-second section contains a table of data.

63. The sixty-third section contains a list of items.

64. The sixty-fourth section contains a table of data.

65. The sixty-fifth section contains a list of items.

66. The sixty-sixth section contains a table of data.

67. The sixty-seventh section contains a list of items.

68. The sixty-eighth section contains a table of data.

69. The sixty-ninth section contains a list of items.

70. The seventieth section contains a table of data.

71. The seventy-first section contains a list of items.

72. The seventy-second section contains a table of data.

73. The seventy-third section contains a list of items.

74. The seventy-fourth section contains a table of data.

75. The seventy-fifth section contains a list of items.

76. The seventy-sixth section contains a table of data.

77. The seventy-seventh section contains a list of items.

78. The seventy-eighth section contains a table of data.

79. The seventy-ninth section contains a list of items.

80. The eightieth section contains a table of data.

81. The eighty-first section contains a list of items.

82. The eighty-second section contains a table of data.

83. The eighty-third section contains a list of items.

84. The eighty-fourth section contains a table of data.

85. The eighty-fifth section contains a list of items.

86. The eighty-sixth section contains a table of data.

87. The eighty-seventh section contains a list of items.

88. The eighty-eighth section contains a table of data.

89. The eighty-ninth section contains a list of items.

90. The ninetieth section contains a table of data.

91. The ninety-first section contains a list of items.

92. The ninety-second section contains a table of data.

93. The ninety-third section contains a list of items.

94. The ninety-fourth section contains a table of data.

95. The ninety-fifth section contains a list of items.

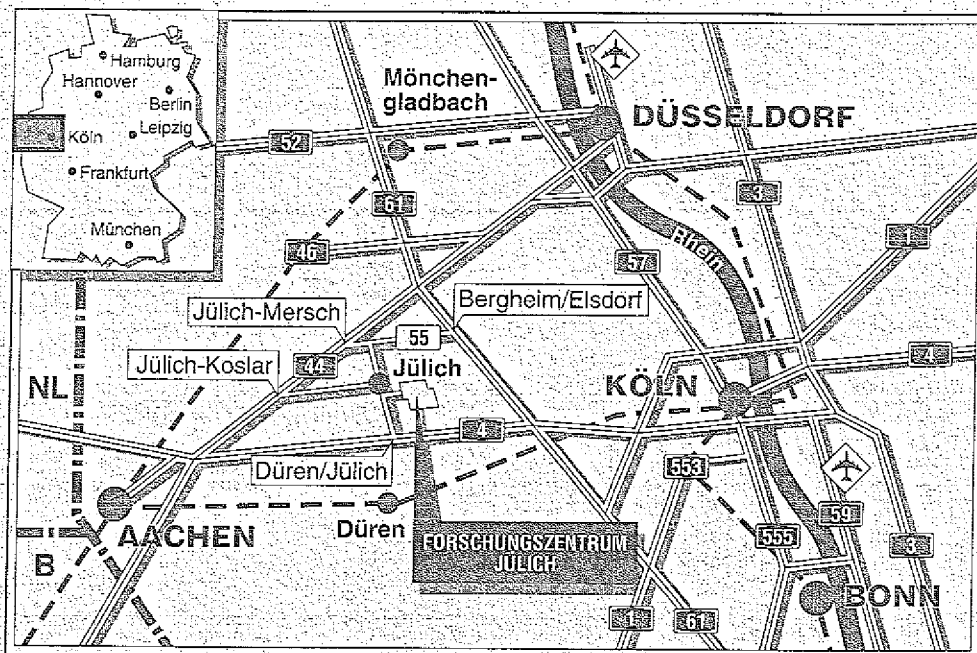
96. The ninety-sixth section contains a table of data.

97. The ninety-seventh section contains a list of items.

98. The ninety-eighth section contains a table of data.

99. The ninety-ninth section contains a list of items.

100. The hundredth section contains a table of data.



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2839

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jüli-2839

D 82 (Diss. RWTH Aachen)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 024 61 / 61 - 61 02 · Telefax: 024 61 / 61 - 61 03 · Telex: 833 556-70 kfa d

Kompositionelle und strukturelle Charakterisierung von verspannten Si/SiGe-Heterostrukturen mit hochauflösender Transmissions- elektronenmikroskopie

Dirk Stenkamp

allgemeine der Natur und der menschlichen
Gesellschaft und der menschlichen
Natur und der menschlichen
Natur und der menschlichen
Natur und der menschlichen

allgemeine der Natur

allgemeine der Natur und der menschlichen
Gesellschaft und der menschlichen
Natur und der menschlichen
Natur und der menschlichen
Natur und der menschlichen

allgemeine der Natur und der menschlichen
Gesellschaft und der menschlichen
Natur und der menschlichen
Natur und der menschlichen
Natur und der menschlichen

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Hochauflösende Gitterabbildung	6
2.1	Bildentstehung	6
2.2	Bildsimulation	9
2.2.1	Das Bloch-Wellen-Verfahren	10
2.2.2	Das Multislice-Verfahren	14
2.2.3	Nichtlineare Abbildungstheorie	18
3	Bildsimulationen für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$-Legierungen	22
3.1	Elektronenstreuverhalten von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen	22
3.1.1	Unverspannte $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen	24
3.1.2	Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen	28
3.2	Bildkontrastverhalten von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen	30
3.2.1	Bildintensitätsverteilung in 5-Strahl-Gitterabbildungen	31
3.2.2	Optimierte Abbildungsbedingungen	32
3.2.3	Kontrastbeitrag von Strahlen höherer Ordnung	38
3.2.4	Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen	40
4	Bildsimulationen für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$-Grenzflächen	42
4.1	Abrupte Grenzflächen	44
4.2	Diffuse Grenzflächen	48
4.3	Kontrastbeitrag von Strahlen höherer Ordnung	49
4.4	Grenzflächen mit Stufen	51
4.5	Geordnete Si-Ge-Grenzflächenphasen	52
4.6	Kurzperiodische Si_mGe_n -Übergitter	55
5	Quantitative Kompositionsbestimmung	58
5.1	Funktionale Abhängigkeiten des chemischen Signals	59
5.2	Bildverarbeitungsalgorithmen	62
5.2.1	Geometrische Bildentzerrung	64
5.2.2	Kompositionsbestimmung	66
5.2.3	Vergleich mit anderen Algorithmen	71

6 Experimentelle Charakterisierung von Si/Si₂Ge_{1-x}-Heterostrukturen	81
6.1 Experimentelle Methoden	81
6.1.1 Probenpräparation	81
6.1.2 Transmissionselektronenmikroskopie	84
6.2 Strukturelle Defekte und Gitterrelaxation	90
6.3 Quantitative Grenzflächencharakterisierung	100
6.4 Untersuchungen zur Interdiffusion	108
7 Diskussion	117
7.1 Bildsimulationen und methodische Entwicklung.....	117
7.2 Schichtqualität, Relaxation und Interdiffusion.....	121
Zusammenfassung	124
Literaturverzeichnis	127
A Programmänderung zu TF1EMS, TF3EMS und LI1EMS	131
B Der "Laplace-of-Gaussian"(LoG)-Operator	133
C Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit	134

1 Einleitung

Einen aktuellen Forschungsschwerpunkt auf dem Gebiet der Halbleiterphysik bildet die Herstellung und Charakterisierung von Halbleiter-Heterostrukturen. Solche Heterostrukturen bestehen aus Schichtfolgen halbleitender Materialien, die mit modernen Wachstumsmethoden wie Molekularstrahlepitaxie (engl. molecular beam epitaxy, MBE), Gasphasenepitaxie (engl. chemical vapour deposition, CVD) oder Flüssigphasenepitaxie (engl. liquid phase epitaxy, LPE) epitaktisch aufeinander abgeschieden werden können. An solchen Heterostrukturen können z.T. völlig neuartige elektronische und optoelektronische Eigenschaften beobachtet werden, die auf dem räumlichen Einschluß von Ladungsträgern oder einer periodischen Modulation des Kristallpotentials beruhen. Dabei gelingt es durch eine geeignete Wahl der Materialien und der Schichtgeometrie, die Eigenschaften solcher Heterostrukturen maßgeschneidert für den Einsatz in Bauelementen abzustimmen.

Große technologische Bedeutung besitzen derzeit Heterostrukturen aus Verbindungshalbleitern wie z.B. $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, in denen die Einzelschichten hinsichtlich ihrer Komposition unterschiedlich, aber hinsichtlich ihres Gitterparameters nahezu gleich sind (gitterangepaßte Heterostrukturen). Daneben besteht eine zweite wichtige Klasse von Halbleiter-Heterostrukturen aus III-V- oder IV-IV-Materialsystemen wie z.B. $\text{InP}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ oder $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, die sich auch hinsichtlich ihrer intrinsischen Gitterparameter deutlich unterscheiden (gitterfehlgepaßte Heterostrukturen). Hierbei zählt das Materialsystem $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ aufgrund seiner Kompatibilität mit der hochentwickelten Si-Technologie und aufgrund einer Vielzahl möglicher Bauelementanwendungen zu den technologisch interessantesten Systemen mit Gitterfehlpassung [1]. Neben der Entwicklung von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Bauelementen mit hohen Elektronenbeweglichkeiten konzentriert sich die Forschungsaktivität dabei insbesondere auf die optoelektronischen Eigenschaften verspannter kurzperiodischer Si_mGe_n -Übergitter, die aus periodischen Schichtungen von abwechselnd m Atomlagen Si und n Atomlagen Ge bestehen ($m + n \leq 40$) [2].

Halbleiter-Heteroschichtsysteme und -Übergitter, bei denen die Einzelschichtdicken oft nur wenige Atomlagen betragen, enthalten naturgemäß eine Vielzahl innerer Grenzflächen zwischen Einzelschichten unterschiedlicher Komposition. Aufgrund des großen Einflusses, den die Qualität der inneren Grenzflächen hinsichtlich ihrer kompositionellen Abruptheit, der Grenzflächenrauigkeit, sowie der Anwesenheit struktureller Defekte auf die (opto)elektronischen Eigenschaften hat, werden Methoden zur umfassenden mikrostrukturellen Charakterisierung von Heterogrenzflächen auf atomarer Skala benötigt.

Die Anwendung der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie auf die Charakterisierung von Halbleiter-Heterostrukturen bietet eine einzigartige Möglichkeit, auf direktem Wege Informationen über einzelne innere Grenzflächen auf atomarer Skala zu erlangen. Die aktuelle Generation hochauflösender Mikroskope mit einem Punktauflösungsvermögen von $d_s = 0.17 \text{ nm}$ ermöglicht es, die atomare Struktur von Halbleiterkristallen entlang verschiedener Kristallprojektionen direkt abzubilden [3] und die Positionen projizierter Atomsäulen aus hochaufgelösten Gitterabbildungen mit einer Ge-

naugigkeit von $\pm 0.1d_s$ zu ermitteln [4]. Eine vollständige Charakterisierung von Halbleiter-Heterogrenzflächen erfordert jedoch neben der Bestimmung der Atomstruktur auch eine Bestimmung der Elementzusammensetzung mit einer räumlichen Auflösung in atomarer Dimension. Erst diese Kombination aus strukturellen und kompositionellen Daten gestattet es, quantitative Aussagen über die Qualität von Heterogrenzflächen zu formulieren.

Ein fundamentaler Zugang zur Bestimmung der Elementzusammensetzung anhand hochaufgelöster elektronenmikroskopischer Gitterabbildungen erschließt sich aus dem Zusammenhang zwischen dem projizierten, kompositionsabhängigen Kristallpotential eines durchstrahlten Probenbereichs und dem daraus resultierenden Bildkontrast in der Abbildung. Mit Bildkontrast ist dabei die individuelle räumliche Verteilung der Bildintensität in Form unterschiedlicher Bildmuster gemeint. Für das gitterangepaßte System $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ und andere Verbindungshalbleitersysteme mit Zinkblendestruktur wurden in neuerer Zeit spezielle hochauflösende Verfahren zur quantitativen Kompositionsbestimmung auf atomarer Skala vorgeschlagen [5–8]. Diese Verfahren basieren auf kompositionsabhängigen Änderungen des Bildkontrastes, die durch eine gezielte Ausnutzung abgelenkter Strahlen vom $\{200\}$ -Typ (sog. "chemische" Reflexe) entstehen. Diese Strahlen haben ihre physikalische Ursache in der geordneten Besetzung der beiden flächenzentrierten (fcc) Untergitter der Zinkblendestruktur mit Kationen (z.B. Ga, Al) bzw. Anionen (z.B. As), und reagieren sensitiv auf Änderungen im Besetzungsverhältnis der Kationen- und Anionenplätze mit unterschiedlichen Gruppe-III- bzw. Gruppe-V-Elementen.

Im Gegensatz zu Verbindungshalbleitersystemen mit Zinkblendestruktur bildet das Elementhalbleitersystem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ über den gesamten Kompositionsbereich $0 \leq x \leq 1$ ungeordnete Substitutionsmischkristalle mit Diamantstruktur aus. Aufgrund der fehlenden Atomordnung sind "chemische" Reflexe wie die $\{200\}$ -Strahlen für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ in diesem Materialsystem kinematisch verboten und können deshalb nicht zur Erzeugung eines kompositions-sensitiven Bildkontrastes ausgenutzt werden. Aus diesem Grund sind die zur Kompositionsbestimmung bei Verbindungshalbleitersystemen vorgeschlagenen Methoden grundsätzlich nicht auf Elementhalbleiter-Heterosysteme wie $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ übertragbar. Darüber hinaus müssen bei $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen zur Kompositionsbestimmung mittels Bildkontrastanalysen zusätzlich die Einflüsse von tetragonalen Gitterverspannungen berücksichtigt werden, die als Folge der Gitterfehlpassung zwischen kohärenten Schichten unterschiedlicher Komposition entstehen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine neuartige quantitative Methode zur kompositionellen und strukturellen Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen und $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen ($0 \leq x \leq 1$) mittels hochauflösender Transmissionselektronenmikroskopie entwickelt. Die Grundlage für diese Methode bildet ein systematischer Zusammenhang zwischen der Komposition einzelner, entlang von kristallographischen $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 100 \rangle$ -Richtungen projizierter Atomsäulen und dem Bildkontrast in hochaufgelösten, unter optimierten Abbildungsbedingungen aufgenommenen Gitterabbildungen. Durch

den Einsatz eines neuen Bildverarbeitungsalgorithmus zur lokalen Bildkontrastanalyse ermöglicht die Methode eine quantitative Bestimmung des Legierungsgehalts auf atomarer Skala mit einer bislang nicht erreichten Genauigkeit und Ortsauflösung. Im experimentellen Teil dieser Arbeit konnten durch Anwendung der Methode auf die Charakterisierung von inneren Grenzflächen in unterschiedlichen $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen jeweilige Werte für die Breite des kompositionellen Übergangs und für die Grenzflächenrauigkeit in der Dimension einzelner Atomlagen ermittelt werden. Neben der Entwicklung und experimentellen Anwendung dieser Methode bestanden weitere Aspekte der vorliegenden Arbeit in der Untersuchung von ein- und zweidimensionalen Gitterdefekten hinsichtlich ihrer Natur und hinsichtlich ihres Beitrags zum Ausgleich von Gitterfehlpasungen, sowie in Untersuchungen zur Interdiffusion in $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen.

Nach einer kurzen Einführung in die Grundlagen der hochauflösenden Gitterabbildung werden in Kapitel 2 zunächst die Berechnungsverfahren beschrieben, die zur Simulation des Abbildungsvorgangs bei $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen und $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen verwendet wurden. In Kapitel 3 wird das simulierte Elektronenstreu- und Bildkontrastverhalten von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen ($0 \leq x \leq 1$) systematisch als Funktion der Komposition x und des elastischen Verspannungszustandes untersucht. Daran schließt sich in Kapitel 4 eine Untersuchung des Bildkontrastverhaltens unterschiedlicher Typen von kohärenten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen mit Hilfe von Bildsimulationen an. In Kapitel 5 wird ein neuartiger Bildverarbeitungsalgorithmus zur lokalen quantitativen Kompositionsbestimmung an $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen vorgestellt, der grundsätzlich auch zur quantitativen Grenzflächenanalyse bei anderen, sowohl verspannten wie auch unverspannten Materialsystemen eingesetzt werden kann. In Kapitel 6 werden die experimentellen Resultate aus den Untersuchungen zur Natur von Gitterdefekten, zur Schichtrelaxation, zur Qualität innerer Grenzflächen und zur Interdiffusion in $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen präsentiert. Die entwickelte Charakterisierungsmethode sowie die experimentellen Untersuchungsergebnisse werden schließlich in Kapitel 7 diskutiert und mit Resultaten aus Untersuchungen mit anderen Methoden verglichen.

2 Hochauflösende Gitterabbildung

In dieser Arbeit wurde zur Charakterisierung von verspannten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heteroschichtsystemen und Si_mGe_n -Übergittern schwerpunktmäßig die hochauflösende (direkte) Gitterabbildung eingesetzt, eine spezielle Abbildungstechnik in der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie. Im ersten Teil dieses Kapitels wird die hochauflösende Gitterabbildung als ein zweistufiger Bildentstehungsprozeß beschrieben, der aus der Streuung einer hochenergetischen Elektronenwelle an der Kristallgitterstruktur der Probe und der Abbildung des resultierenden Wellenfeldes in die Bildebene besteht. Im zweiten Teil dieses Kapitels werden die Verfahren zur numerischen Simulation dieser beiden Teilprozesse erläutert, die in dieser Arbeit zur Bildkontrastberechnung für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen und $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen angewandt wurden. Eine ausführliche Darstellung der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie findet sich in den Referenzen [9,10,11].

2.1 Bildentstehung

Der Bildentstehungsprozeß bei der hochauflösenden Gitterabbildung im Elektronenmikroskop ist in Abb. 2.1 schematisch anhand einer strahlenoptischen Darstellung illustriert. Aus Gründen der Anschaulichkeit besteht das Abbildungssystem aus nur einer Linse, der magnetischen Objektivlinse.

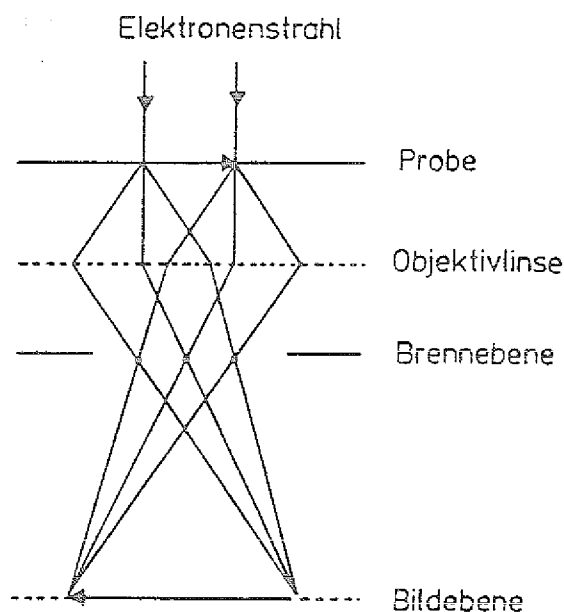


Abb. 2.1: Strahlenoptische Darstellung der hochauflösenden Gitterabbildung (schematisch).

Im ersten Teil des Bildentstehungsprozesses wird die kristalline, elektronentransparente Probe entlang einer niedrig indizierten kristallographischen Richtung $\vec{B}$ von einer ebenen Elektronenwelle mit Wellenvektor $\vec{k}_0$ beleuchtet, deren Wellenlänge λ in Abhängigkeit von der kinetischen Energie E_{kin} der Elektronen typischerweise im Bereich von 2.5 pm ($E_{\text{kin}} = 200$ keV) bis 1.6 pm ($E_{\text{kin}} = 400$ keV) liegt. Durch elastische Beugung am Kristallgitter der Probe findet eine Zerlegung der einfallenden Elektronenwelle in ein Spektrum sinusförmiger Fourier-Wellen $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ mit unterschiedlichen Amplituden $A_{\vec{k}}$ und Wellenvektoren $\vec{k}$ statt:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A_{\vec{k}} \exp(-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (2.1)$$

Für eine hier betrachtete kristalline Probe lautet die Bedingung für das Auftreten einer abgelenkten Fourier-Welle [12]:^a

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g}, \quad (2.2)$$

worin der Beugungsvektor $\vec{g}$ einem reziproken Gittervektor [13] des durchstrahlten Kristallgitters entspricht. Diese Bedingung führt auf einen diskreten Satz von Fourier-Wellen $\psi_{\vec{k}_0 + \vec{g}}$ (im weiteren abkürzend als $\psi_{\vec{g}}$ geschrieben), wobei die einzelnen $\psi_{\vec{g}}$ jeweils Periodizitäten der Probenstruktur mit Raumwellenlängen $1/|\vec{g}|$ bzw. mit Raumfrequenzen $|\vec{g}|$ beschreiben. Im Bild der Strahlenoptik entspricht jeder dieser Fourier-Wellen ein abgelenkter Strahl, der in einem Winkelabstand

$$\alpha = \lambda |\vec{g}| \quad (2.3)$$

zum (ungebeugten) Nullstrahl verläuft (Abb. 2.1). Der Beugungswinkel wird demnach mit zunehmender Raumfrequenz, d.h. mit feiner werdenden Details der Probenstruktur größer. Das resultierende Wellenfeld an der Austrittsfläche des Probe, im weiteren Austrittswellenfunktion $\psi(\vec{r})$ genannt, ergibt sich aus der Summe über den vollständigen Satz von Fourier-Wellen:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} \psi_{\vec{g}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} A_{\vec{g}} \exp(-2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}). \quad (2.4)$$

In Gl. (2.4), wie auch im weiteren, ist ein allen Fourier-Wellen gemeinsamer Wellenvektor $\vec{k}_0$ im Exponentialterm nicht mehr explizit ausgeschrieben.

Den zweiten Teil des Bildentstehungsprozesses bildet der Transfer von gebeugten und ungebeugten Strahlen durch die Objektivlinse des Mikroskops und die nachfolgende Interferenz dieser Strahlen in der hinteren Bildebene. Nach Verlassen der Probe vereinigt die Objektivlinse zunächst alle Strahlen mit dem selben Beugungsvektor $\vec{g}$ in der hinteren Objektivbrennebene zu einem Beugungspunkt, dessen Intensität proportional zum Quadrat der entsprechenden Strahlamplitude ist:

$$I_{\vec{g}} \propto |A_{\vec{g}}|^2. \quad (2.5)$$

^aGl. (2.2), die als Laue-Bedingung bezeichnet wird, gilt strenggenommen nur für Kristalle unendlicher Dicke. Für endliche Dicken gilt die abgeschwächte Bedingung $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} + \vec{s}_g$ ($s_g \ll g$), worin $\vec{s}_g$ den sog. Anregungsfehler bezeichnet [13].

Dieser Vorgang entspricht formal einer Fourier-Analyse der Austrittswellenfunktion. Gemäß dem Huygens-Fresnelschen Prinzip wirken nachfolgend die einzelnen Beugungspunkte als Quellen für Kugelwellen, die in der hinteren Bildebene der Objektivlinse zur Interferenz gelangen und dort ein "Abbild" der durchstrahlten Probenstruktur erzeugen. Dieser Vorgang entspricht formal einer Synthese des diskreten Satzes von Fourier-Wellen $\psi_{\vec{g}}$ (Fourier-Synthese). Die physikalisch zugängliche Meßgröße des resultierenden Interferenzbildes ist die örtliche Bildintensität $I(\vec{r})$. Für den Fall eines idealen Mikroskops ist $I(\vec{r})$ durch das Betragsquadrat der Austrittswellenfunktion gegeben:

$$I_{\text{ideal}}(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2. \quad (2.6)$$

Die resultierende Abbildung kann jedoch bereits unter der Annahme eines idealen Mikroskops artifizielle Bilddetails enthalten, die mit der zugrundeliegenden Probenstruktur nicht mehr intuitiv in Einklang stehen. Enthält z.B. die Probenstruktur Raumfrequenzen bis zu einer höchsten Frequenz g_{max} , so kann die Abbildung – bedingt durch die Betragsquadratbildung in Gl. (2.6) – Bilddetails mit zugehörigen Bildfrequenzen von bis zu $2g_{\text{max}}$, d.h. der doppelten Grenzfrequenz der Probenstruktur, enthalten. Diese Nichtlinearität der Abbildung, die bei den hier betrachteten kristallinen Materialien eine wichtige Rolle spielt, ist eine inhärente Eigenschaft der hochauflösenden Gitterabbildung. Ihr Einfluß muß insbesondere bei der Auswertung von optischen Diffraktogrammen der Bildintensität berücksichtigt werden, damit die in einer Gitterabbildung vorhandenen Bildfrequenzen nicht fälschlicherweise als Raumfrequenzen der Probenstruktur bzw. die höchste Bildfrequenz nicht als erzielte Mikroskopauflösung interpretiert wird [14].

Eine zweite, von den Eigenschaften des Mikroskops unabhängige Schwierigkeit bei der Interpretation hochaufgelöster Gitterabbildungen liegt in der starken Wechselwirkung der einfallenden Elektronenwelle mit dem Kristallpotential der Probe. Dabei erfahren die einzelnen Strahlen beim Probendurchgang mehrfache (dynamische) Beugungsprozesse, was zu einer individuellen Abhängigkeit der Amplituden $A_{\vec{g}}$ der einzelnen Strahlen von der Probendicke führt. Daraus resultiert eine i.a. komplizierte Abhängigkeit der Austrittswellenfunktion (Gl. (2.4)) und der Bildintensität (Gl. (2.6)) von der Probendicke.

Für den Fall realer Elektronenmikroskope ist der Bildentstehungsprozeß mit zusätzlichen Unvollkommenheiten behaftet. So wird durch elektrische und mechanische Instabilitäten des Mikroskops das Bildfrequenzspektrum zu hohen Bildfrequenzen hin stark gedämpft und führt zu einer kompletten Auslöschung von Bildfrequenzen jenseits des Informationslimits d_l des Mikroskops (JEOL 4000EX: $d_l \approx 0.13 \text{ nm}$). Desweiteren wird durch den technisch bedingten Öffnungsfehler der Objektivlinse (auch sphärische Aberration genannt) den abgebeugten Strahlen eine zusätzliche Phasenverschiebung aufprägt, welche in starkem Maße vom Beugungswinkel abhängt. Diese Phasenverschiebung kann in der resultierenden Abbildung für bestimmte Bildfrequenzen zu einer Kontrastauslöschung oder zu einer Kontrastumkehr hell/dunkel führen. Zusätzlich hängt diese Phasenverschiebung von der Defokussierung der Objektivlinse ab, die über

den Objektivlinsenstrom beeinflusst werden kann. Durch die Wahl eines speziellen Defokuswertes, des sog. Scherzer-Defokus [15], kann insbesondere für ein breites Spektrum abgebeugter Strahlen eine konstante Phasenverschiebung erzielt werden. Unter dieser Bedingung, und unter der zusätzlichen Annahme eines reinen Phasenkontrastes,^a werden Raumwellenlängen der Probenstruktur bis hin zum Punktauflösungsvermögen d_s des Mikroskops (JEOL 4000EX: $d_s = 0.17 \text{ nm}$) ohne Kontrastumkehr übertragen. Unterschreitet d_s dabei den Abstand projizierter Atomsäulen für die gewählte Einstrahlrichtung, und werden durch den Einsatz einer Blende in der hinteren Objektivbrennebene nur Strahlen mit $|\vec{g}| \leq 1/d_s$ zur Abbildung zugelassen, so spricht man von einer Strukturabbildung. Darin erscheinen Probenbereiche mit hohem projizierten Potential (Orte projizierter Atomsäulen) dunkel und Bereiche mit niedrigem projizierten Potential (Orte zwischen den projizierter Atomsäulen) hell. Jedoch ist für Proben aus Si oder Ge die Annahme eines reinen Phasenkontrastes bereits für Probendicken $t > 5 \text{ nm}$ nicht mehr erfüllt, da für solche Probendicken auch ein ortsveränderlicher Realteil der Austrittswellenfunktion als Amplitudenkontrast zum Gesamtkontrast der Abbildung beiträgt (vgl. Kap. 3). Da jedoch im Scherzer-Defokus das Punktauflösungsvermögen bezüglich des Amplitudenkontrastes (JEOL 4000EX: 0.36 nm) bedeutend schlechter ist als bezüglich des Phasenkontrastes, werden bei experimentell üblichen Probendicken von 6 bis 16 nm bereits Details der Probenstruktur mit Raumwellenlängen kleiner als 0.36 nm fehlerbehaftet abgebildet.

Zusammenfassend hat der komplexe Elektronenstreuprozess und die beschriebene Unvollkommenheit des Abbildungsvorgangs eine Begrenzung des räumlichen Auflösungsvermögens und eine "Verfremdung" der Abbildung bezüglich der zugrundeliegenden Probenstruktur zur Folge. Um trotzdem verlässliche Informationen aus dem Bereich atomarer Dimensionen mit Hilfe von hochauflösenden Gitterabbildungen gewinnen zu können, sind detaillierte Simulationen des Elektronenstreuprozesses an der Probenstruktur und des Abbildungsvorgangs durch die Mikroskopoptik auf der Grundlage der relativistischen Quantenmechanik erforderlich. Mit ihrer Hilfe lassen sich Abbildungsbedingungen finden, unter denen quantitativ interpretierbare Abbildungen der Atomstruktur entstehen.

2.2 Bildsimulation

Gemäß dem in Kap. 2.1 beschriebenen zweistufigen Bildentstehungsprozess kann auch die Simulation hochauflösender Gitterabbildungen in zwei Teilschritten vorgenommen werden:

- (i) Berechnung der Austrittswellenfunktion $\psi(\vec{r})$ an der Probenunterseite.
- (ii) Berechnung der Intensitätsverteilung $I(\vec{r})$ in der Bildebene.

Zur Berechnung der Austrittswellenfunktion unter Berücksichtigung von Mehrfach-

^aEin reiner Phasenkontrast entsteht dann, wenn der Realteil der Austrittswellenfunktion örtlich konstant ist.

streuprozessen wurden eine Reihe von Verfahren entwickelt. Hierzu zählt das Bloch-Wellen-Verfahren [16,17], das Multislice-Verfahren [18,19] und das Orts- oder Realraumverfahren [20,21], die sich hinsichtlich ihres Lösungsansatzes zur Berechnung von $\psi(\vec{r})$ erheblich unterscheiden. Eine vergleichende Darstellung dieser drei Berechnungsverfahren wird in Ref. [22] gegeben. Zur Berechnung der Intensitätsverteilung $I(\vec{r})$ in der Bildebene hat sich allgemein das Konzept der Transferfunktion auf der Grundlage der nichtlinearen Abbildungstheorie etabliert [23].

In dieser Arbeit wurde zur numerischen Bildsimulation von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen und $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen das Bloch-Wellen- und das Multislice-Verfahren, sowie die nichtlineare Abbildungstheorie bei partiell kohärenter Probenbeleuchtung eingesetzt. Zur numerischen Durchführung dieser Verfahren wurden Programme aus dem EMS-Simulationspaket von P. Stadelmann [24] (Programmname ...EMS) sowie aus einem Paket selbstentwickelter Programme (Programmname ...DS) verwendet.^a Im folgenden werden die theoretischen Grundlagen dieser drei Berechnungsverfahren beschrieben.

2.2.1 Das Bloch-Wellen-Verfahren

Den Ausgangspunkt für das Bloch-Wellen-Verfahren (BW-Verfahren) bildet die relativistisch korrigierte, stationäre Eielektronen-Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ im elektrostatischen Kristallpotential $V(\vec{r})$:

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{8\pi^2 m |e|}{h^2} [E' + V(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = 0. \quad (2.7)$$

Darin beschreibt m die relativistisch korrigierte Elektronenmasse

$$m = m_e \left(1 + \frac{|e| U_B}{m_e c^2} \right) \quad (2.8)$$

(m_e Ruhemasse des Elektrons, U_B Beschleunigungsspannung), e die negative Elektronenladung, h das Planck'sche Wirkungsquantum und $|e|E'$ einen von U_B abhängigen Energieterm

$$E' = U_B \frac{2m_e c^2 + |e| U_B}{2(m_e c^2 + |e| U_B)}. \quad (2.9)$$

Gl. (2.7) kann allgemein aus der quantenmechanischen Klein-Gordon-Gleichung für den Fall hochenergetischer Elektronen abgeleitet werden [25]. Das periodische Kristallpotential $V(\vec{r})$, welches im Fall rein elastischer Streuung reell und positiv ist, kann als diskrete Summe über die Fourier-Koeffizienten $V_{\vec{g}}$ (bzw. über die modifizierten Fourier-Koeffizienten $W_{\vec{g}}$) des Kristallpotentials dargestellt werden:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}) = \frac{h^2}{2m|e|} \sum_{\vec{g}} W_{\vec{g}} \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}). \quad (2.10)$$

^aDie im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programme wurden in den Programmiersprachen PASCAL und C realisiert und sind in den Verzeichnissen [USER.STENKAMP.PASCAL] bzw. [USER.STENKAMP.C] des VAX-Clusters am IMF-IFF, Forschungszentrum Jülich, abrufbar. Eine Liste und Beschreibung der verfügbaren Programme enthält die Datei [USER.STENKAMP.PASCAL]PROGRAMS.LST.

Die Fourier-Koeffizienten $V_{\vec{g}}$ können direkt aus den Strukturamplituden $F_{\vec{g}}$ der Einheitszellen berechnet werden [22]:

$$V_{\vec{g}} = \frac{h^2}{2\pi m_e |e| V_{EZ}} F_{\vec{g}} \quad (2.11)$$

(V_{EZ} Volumen der Einheitszelle). Die Strukturamplituden $F_{\vec{g}}$ ergeben sich aus den atomaren Streuamplituden $f(\vec{g})$ der Einzelatome gemäß

$$F_{\vec{g}} = \sum_i f_i(\vec{g}) \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}_i), \quad (2.12)$$

wobei die Summation über die Gesamtheit aller Atompositionen $\vec{r}_i$ innerhalb der Einheitszelle erfolgt. Für die Berechnung von Gl. (2.12) wurden in dieser Arbeit atomare Streuamplituden verwendet, die auf der Grundlage von relativistischen Hartree-Fock-Rechnungen von Doyle und Turner für elektrisch neutrale Einzelatome ermittelt wurden [26]. Für Temperaturen $T > 0$ K muß bei der Berechnung von $F_{\vec{g}}$ zusätzlich die thermische Bewegung der Kristallgitteratome berücksichtigt werden. Dieser Effekt kann durch den Debye-Waller-Faktor $B(T)$ beschrieben werden [27], welcher eine von T und g abhängige Dämpfung der atomaren Streuamplituden bewirkt:

$$f(\vec{g}, T) = f(\vec{g}, T=0\text{K}) \exp\left(-\frac{1}{4} B(T) g^2\right). \quad (2.13)$$

In dieser Arbeit wurden Debye-Waller-Faktoren für Si und Ge der Ref. [27] und für Ga, Al und As der Ref. [28] entnommen. Diese Werte sind in Tab. 2.1 zusammengestellt.

Atomsorte	Debye-Waller-Faktor $B[\text{nm}^2]$	Absorptionskonstante $\bar{\beta}$
Al	0.004	0.030
Si	0.004	0.032
Ga	0.006	0.050
Ge	0.006	0.054
As	0.006	0.050

Tab. 2.1: Debye-Waller-Faktoren B und Absorptionskonstanten $\bar{\beta}$ verschiedener Atomsorten für eine Beschleunigungsspannung $U_B = 400$ kV.

Neben elastischen Streuprozessen finden beim Durchgang der Elektronen durch den Kristall auch inelastische Streuprozesse statt. Die wichtigsten inelastischen Streuprozesse sind die Anregung von Phononen (auch thermisch diffuse Streuung genannt), von Plasmonen und von Rumpfelektronen, wobei die Anregung von Phononen den Großteil der inelastischen Streuung ausmacht [29]. Wie in Kap. 2.2.3 näher begründet wird, können inelastisch gestreute Elektronen für den weiteren Abbildungsvorgang als verloren, d.h. als absorbiert betrachtet werden. Dieser Absorptionseffekt kann durch die Einführung eines komplexen Kristallpotentials mit korrigierten Potentialkoeffizienten

$$V'_{\vec{g}} = (1 + i\beta(\vec{g})) V_{\vec{g}} \quad (2.14)$$

beschrieben werden [30], wobei $\beta(\vec{g})$ eine von $\vec{g}$ abhängige Absorptionskonstante bezeichnet. Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationsrechnungen wurde für jede Atomsorte eine von $\vec{g}$ unabhängige mittlere Absorptionskonstante $\bar{\beta}$ verwendet. Für Si und Ge wurde $\bar{\beta}$ durch Mittelung der in Ref. [29] angegebenen Werte $\beta(\vec{g})$ für verschiedene $\vec{g}$ bestimmt. Für Ga, Al und As wurden Werte für $\bar{\beta}$ der Ref. [28] entnommen. Die verwendeten Zahlenwerte für $\bar{\beta}$ sind ebenfalls in Tab. 2.1 zusammengestellt.

Bei dem hier betrachteten BW-Verfahren werden als allgemeine Lösung der Wellengleichung (Gl. (2.7)) für ein periodisches Kristallpotential Bloch-Wellen vom Typ

$$\psi^{(j)}(\vec{k}^{(j)}, \vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\left(2\pi i(\vec{k}^{(j)} + \vec{g}) \cdot \vec{r}\right) \quad (2.15)$$

angesetzt, wobei $\vec{k}^{(j)}$ als Bloch-Vektor und die $C_{\vec{g}}^{(j)}$ als Bloch-Wellen-Koeffizienten der j -ten Bloch-Welle bezeichnet werden. Einsetzen von Gl. (2.15) und (2.10) in (2.7) liefert

$$\sum_{\vec{g}} \left\{ C_{\vec{g}}^{(j)} \left[K^2 - (\vec{k}^{(j)} + \vec{g})^2 \right] + \sum_{\vec{h} \neq \vec{g}} C_{\vec{h}}^{(j)} W_{\vec{h}-\vec{g}} \right\} \exp\left(2\pi i(\vec{k}^{(j)} + \vec{g}) \cdot \vec{r}\right) = 0. \quad (2.16)$$

Darin beschreibt K einen Wellenvektor der Elektronen im mittleren modifizierten Kristallpotential W_0 mit

$$K^2 = \frac{1}{\lambda^2} + W_0, \quad (2.17)$$

wobei λ die relativistisch korrigierte Wellenlänge

$$\lambda = \left[\frac{2m_e |e| U_B}{\hbar^2} \left(1 + \frac{|e| U_B}{2m_e c^2} \right) \right]^{-1/2} \quad (2.18)$$

im Vakuum bezeichnet. Gl. (2.16) ist allgemein nur dann erfüllt, wenn jeder Einzelkoeffizient der Exponentialfunktion null wird. Werden bei der Berechnung N Potentialkoeffizienten $W_{\vec{g}}$ einbezogen, so führt diese Forderung zu einem System von N simultanen Gleichungen

$$C_{\vec{g}}^{(j)} \left[K^2 - (\vec{k}^{(j)} + \vec{g})^2 \right] + \sum_{\vec{h} \neq \vec{g}} C_{\vec{h}}^{(j)} W_{\vec{h}-\vec{g}} = 0. \quad (2.19)$$

Zur Bestimmung der einzelnen $\vec{k}^{(j)}$ und $C_{\vec{g}}^{(j)}$ aus diesen Gleichungen wird eine Randbedingung für die Erhaltung des Elektronenimpulses parallel zur Kristalloberfläche ausgenutzt. Dazu setzen wir im folgenden voraus, daß die Einstrahlrichtung i.a. parallel zu einer niedrig indizierten Kristallzonenachse $\vec{B}$ (symmetrischer Laue-Fall [13]) und parallel zur Oberflächennormalen $\vec{n}$ des Kristalls verläuft. Außerdem möge der Abstand der einzelnen Laue-Zonen [13] in Einstrahlrichtung hinreichend groß sein. In diesem Fall können die einzelnen Bloch-Vektoren in eine Komponente $(k_{\perp}^{(j)} \vec{n})$ senkrecht, und in eine für alle Bloch-Vektoren gleiche Komponente $\vec{u}_0$ parallel zur Kristalloberfläche zerlegt werden [22]. Daraus ergibt sich

$$(\vec{k}^{(j)} + \vec{g})^2 = k_{\perp}^{(j)2} + (\vec{g} + \vec{u}_0)^2, \quad (2.20)$$

wobei der Vektor $(\vec{g} + \vec{u}_0)$ im weiteren als $\vec{u}_{\vec{g}}$ bezeichnet wird. Damit kann Gl. (2.19) in Form einer Gleichungsmatrix geschrieben werden:

$$M \cdot \begin{pmatrix} C_{\vec{g}}^{(j)} \\ C_{\vec{h}}^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\vec{i}}^{(j)} \\ \vdots \end{pmatrix} = (k_{\perp}^{(j)2} - K^2) \begin{pmatrix} C_{\vec{g}}^{(j)} \\ C_{\vec{h}}^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\vec{i}}^{(j)} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

mit

$$M = \begin{pmatrix} -\vec{u}_{\vec{g}}^2 & W_{\vec{h}-\vec{g}} & \cdots & W_{\vec{i}-\vec{g}} & \cdots \\ W_{\vec{g}-\vec{h}} & -\vec{u}_{\vec{h}}^2 & \cdots & W_{\vec{i}-\vec{h}} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ W_{\vec{g}-\vec{i}} & W_{\vec{h}-\vec{i}} & \cdots & -\vec{u}_{\vec{i}}^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Durch Diagonalisieren dieser $N \times N$ Matrix ergeben sich N Eigenlösungen, deren Eigenwerte die Wellenvektoren $\vec{k}^{(j)}$ der N Bloch-Wellen und deren zugehörige Eigenvektoren die jeweils N Koeffizienten $C_{\vec{g}}^{(j)}$ der j -ten Bloch-Welle bestimmen^a. Die Lösung für die Austrittswellenfunktion resultiert schließlich aus der Linearkombination der N Bloch-Wellen:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N \alpha^{(j)} \psi^{(j)}(\vec{k}^{(j)}, \vec{r}). \quad (2.23)$$

Die Anregungsstärke $\alpha^{(j)}$ einer einzelnen Bloch-Welle ergibt sich allgemein aus der Stetigkeitsbedingungen für den Elektronenfluß an der Eintrittsfläche des Kristalls. Für den symmetrischen Laue-Fall gilt die Beziehung [17]

$$\alpha^{(j)} = C_0^{(j)*} \quad (2.24)$$

(z^* bezeichnet den konjugiert komplexen Wert der Zahl z). Die Einbeziehung von Absorptionseffekten durch ein komplexes Kristallpotential (Gl. (2.14)) führt zu komplexen Bloch-Vektoren $\vec{k}^{(j)}$, wobei der Imaginärteil einen exponentiellen Abfall der Anregungsstärken $\alpha^{(j)}$ (Gl. (2.23)) mit der Probendicke bewirkt. Für den Fall, daß die Voraussetzungen für Gl. (2.20) nicht erfüllt sind, kann das Gleichungssystem (2.19) näherungsweise durch eine Linearisierung des Terms $K^2 - (\vec{k}^{(j)} + \vec{g})^2$ gelöst werden [22]. Dies ist z.B. erforderlich, wenn Potentialkoeffizienten höherer Laue-Zonen einbezogen werden oder die Oberflächennormale $\vec{n}$ bezüglich der Einstrahlrichtung verkippt ist.

Das BW-Verfahren eignet sich insbesondere zur Berechnung der Austrittswellenfunktion für Kristallstrukturen mit kleinen Einheitszellen hoher Symmetrie, die nur eine

^aIm Vergleich zum hier betrachteten Streuproblem, bei dem für eine vorgegebene Elektronenenergie die Gesamtheit der hierzu erlaubten Bloch-Vektoren bestimmt wird, wird bei elektronischen Bandstrukturrechnungen der Bloch-Vektor vorgegeben, und es wird die Gesamtheit der dazu erlaubten Energiewerte bestimmt [31].

geringe Anzahl unterschiedlicher Atomsorten enthalten. Unter solchen Bedingungen ist zur Beschreibung des Kristallpotentials eine nur geringe Zahl von Potentialkoeffizienten erforderlich, und die Austrittswellenfunktion kann durch eine Superposition von wenigen – im einfachsten Fall nur zwei – stark angeregten Bloch-Wellen beschrieben werden. In diesem Fall können z.B. die periodischen Intensitätsoszillationen einzelner abgebeugter Strahlen mit der Probendicke (die sog. Pendellösung [10]) sehr anschaulich anhand der Interferenz einzelner Bloch-Wellen verstanden werden (vgl. Kap.3.1.1). Für Kristallstrukturen mit großen Einheitszellen und geringer Symmetrie wächst jedoch die Zahl der erforderlichen Potentialkoeffizienten und damit auch die Zahl der signifikanten Bloch-Wellen stark an. In diesem Fall kann das BW-Verfahren aufgrund von numerischen Instabilitäten bei der Matrixdiagonalisierung (Gl.(2.22)) zu fehlerhaften Lösungen für $\psi(\vec{r})$ führen (vgl. Kap.4). Als alternatives Lösungsverfahren kann in diesem Fall das in Kap.2.2.2 beschriebene Multislice-Verfahren verwendet werden. Die Konvergenz der Lösung kann beim BW-Verfahren dadurch überprüft werden, indem die Zahl der zur Berechnung verwendeten Bloch-Wellen erhöht wird, ohne das sich dadurch die Eigenwerte und Eigenvektoren der dominanten Bloch-Wellen signifikant verändern dürfen. Ein zweiter Test besteht darin, die mit dem BW-Verfahren gewonnenen Lösungen für $\psi(\vec{r})$ mit Lösungen zu vergleichen, die mit dem Multislice-Verfahren berechnet wurden. In dieser Arbeit wurde das BW-Verfahren insbesondere zur Berechnung der Austrittswellenfunktion für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen eingesetzt (Kap.3.1).

2.2.2 Das Multislice-Verfahren

Beim Multislice-Verfahren (MS-Verfahren) handelt es sich um ein numerisches Iterationsverfahren zur Berechnung von $\psi(\vec{r})$, welches von Cowley u. Moodie auf der Grundlage wellenoptischer Überlegungen [18,19] und von Ishizuka u. Uyeda auf der Basis der relativistisch korrigierten Schrödinger-Gleichung (Gl.(2.7)) abgeleitet wurde [32].

Beim MS-Verfahren wird die Wechselwirkung der einfallenden Elektronenwelle mit dem dreidimensionalen Kristallpotential in zeitlich aufeinanderfolgende Streuprozesse an dünnen Kristallscheiben (engl. slices) der Dicke Δz zerlegt. Dieser Prozeß ist in Abb.2.2 schematisch illustriert. Der Streuvorgang innerhalb jeder Kristallscheibe besteht aus zwei Teilprozessen, nämlich

- (i) der Streuung am projizierten zweidimensionalen Potential einer einzelnen Kristallscheibe, mathematisch beschrieben durch die Phasengitterfunktion $q_n(x, y)$. Hierdurch wird die gesamte Wirkung des Kristallpotentials entlang der Strecke Δz auf die Streuung an einer infinitesimal dünnen Streuebene reduziert.
- (ii) der nachfolgenden Propagation des Wellenfeldes durch das Vakuum bis zur nächsten Scheibe im Abstand Δz , beschrieben durch den Fresnel-Propagator $p_n(x, y)$.

Den Ausgangspunkt zur Berechnung der Phasengitterfunktion $q_n(x, y)$ bildet das dreidimensionale Kristallpotential $V(\vec{r}) = V(x, y, z)$ (Gl.(2.10)). Das projizierte zweidimensionale Potential $V_p(x, y)$ für eine Kristallscheibe der Dicke Δz ergibt sich daraus

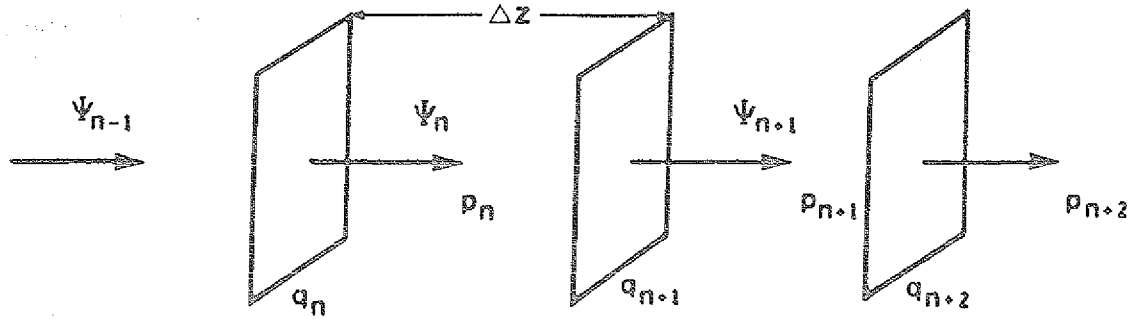


Abb. 2.2: Schematische Darstellung des Multislice-Verfahrens.

zu

$$V_p(x, y) = \frac{1}{\Delta z} \int_z^{z+\Delta z} V(x, y, z) dz. \quad (2.25)$$

Im folgenden wird angenommen, daß die elastische Streuung der einfallenden Welle an der Streuebene einer einzelnen Kristallscheibe eine reine Phasenverschiebung dieser Welle bewirkt. Für hinreichend dünne Kristallscheiben gilt die Näherung des schwachen Phasenobjektes,^a wonach die Phasenverschiebung proportional zum projizierten Potential $V_p(x, y)$ der Kristallscheibe ist [9]. Die Wellenfunktion nach der abrupten Phasenverschiebung an der Streuebene der n -ten Kristallscheibe ergibt sich dann durch Multiplikation der Wellenfunktion vor der Streuebene mit der Phasengitterfunktion $q_n(x, y)$:

$$\psi'_n(x, y) = \psi_{n-1}(x, y) q_n(x, y). \quad (2.26)$$

Die Phasengitterfunktion ist dabei gegeben durch

$$q_n(x, y) = \exp(i\sigma V_p(x, y)\Delta z). \quad (2.27)$$

Darin beschreibt σ die sog. Wechselwirkungskonstante

$$\sigma = \frac{2\pi m |e| \lambda}{h^2}, \quad (2.28)$$

welche als relativistisch korrigierte Größen die Elektronenmasse m (Gl. (2.8)) und die Wellenlänge λ (Gl. (2.18)) der einfallenden Welle enthält.

^a Ein schwaches Phasenobjekt liegt vor, wenn einem großen, räumlich konstanten Realteil der Austrittswellenfunktion ein kleiner, ortsveränderlicher Imaginärteil überlagert ist.

Die Propagation der Elektronenwelle zwischen den Streuebenen einzelner Kristallscheiben wird durch den Fresnel-Propagator $q_n(x, y)$ beschrieben. Zur Ableitung des Fresnel-Propagators wendet man das Huygens-Fresnelsche Prinzip an, welches seine mathematische Entsprechung in der Kirchhoffschen Beugungsformel findet [33]. Danach ergibt sich die Wellenfunktion $\psi_n(x, y)$ an der Austrittsfläche der n -ten Kristallscheibe aus der phasenrichtigen Überlagerung von Kugelwellen, die von allen Punkten der n -ten Streuebene mit der Wellenamplitude $\psi'_n(x, y)$ (Gl. (2.26)) ausgehen. In einer für hochenergetische Elektronen gültigen Näherung kann $\psi_n(x, y)$ mittels einer Ortsraumfaltung berechnet werden:

$$\psi_n(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi'_n(x - \tilde{x}, y - \tilde{y}) p_n(\tilde{x}, \tilde{y}) d\tilde{x} d\tilde{y} = \psi'_n(x, y) \otimes p_n(x, y). \quad (2.29a)$$

Durch Anwendung des Faltungstheorems [34] kann diese Faltungsoperation im Ortsraum durch eine Multiplikation im Fourier-Raum ersetzt werden:

$$\psi_n(x, y) = \mathcal{F} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \{ \psi'_n(x, y) \} P_n(u, v) \right\}, \quad (2.29b)$$

worin $\mathcal{F}$ ($\mathcal{F}^{-1}$) eine (inverse) zweidimensionale Fourier-Transformation und $P_n(u, v)$ den Fresnel-Propagator in der Fourier-Darstellung bezeichnet ($s(u, v)$ Anregungsfehler relativ zur Einstrahlrichtung):

$$P_n(u, v) = \exp \left(2\pi i s(u, v) \Delta z \right). \quad (2.30)$$

Durch die Verwendung der Phasengitterfunktion und des Fresnel-Propagators kann ein vollständiger MS-Zyklus zwischen zwei Kristallscheiben durch die beiden äquivalenten Rekursivgleichungen

$$\psi_n(x, y) = \left(\psi_{n-1}(x, y) q_n(x, y) \right) \otimes p_n(x, y) \quad (2.31a)$$

$$= \mathcal{F} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \{ \psi_{n-1}(x, y) q_n(x, y) \} P_n(u, v) \right\} \quad (2.31b)$$

ausgedrückt werden, und die Austrittswellenfunktion bei einer Probendicke $t = n\Delta z$ kann durch n -malige Anwendung von Gl. (2.31a) oder (2.31b) berechnet werden. Die exakte mathematische Ableitung des MS-Verfahrens ergibt, daß die wiederholte Aneinanderreihung der Teilprozesse Streuung und Propagation in der beschriebenen Form nur dann zulässig ist, wenn das sog. Kriterium von Ishizuka erfüllt ist [35]:

$$\Delta z \leq \frac{2\pi d^2}{\lambda}. \quad (2.32)$$

Darin beschreibt die Größe d einen typischen Abstand, über den sich das Kristallpotential nur unwesentlich ändert. Bei halbleitenden Kristallen wie Si oder Ge liegt dieser Abstand in der Größenordnung von $d \approx 0.01$ nm. Für eine Beschleunigungsspannung von 400 kV resultiert daraus eine maximale Dicke der Kristallscheiben von $\Delta z_{\max} \approx 0.4$ nm.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten MS-Rechnungen (Kap. 3 und 4) wurde die Dicke der Kristallscheiben entsprechend kleiner als $\Delta z_{\max}$ gewählt.

Zur Kontrolle der mit dem MS-Verfahren berechneten Lösungen existieren verschiedene Testverfahren. Diese Verfahren prüfen im wesentlichen, ob die Anzahl der bei der Berechnung einbezogenen Potentialkoeffizienten (beim MS-Verfahren ebenfalls Strahlen genannt) ausreichend groß und die Dicke Δz der Einzelscheiben hinreichend klein ist. Ein erstes Testverfahren beruht auf der Forderung, daß ohne den Einbezug von Absorption das projizierte Kristallpotential (Gl. (2.25)) eine positive reelle Größe sein muß. Ergeben sich bei der Berechnung von $V(x, y)$ negative oder sogar komplexe Werte, muß entsprechend eine größere Anzahl von Potentialkoeffizienten berücksichtigt werden. Ein zweiter, sog. Unitaritätstest basiert darauf, daß für reelle Kristallpotentiale das normierte Betragsquadrat der Phasengitterfunktion $|q(x, y)|^2$ im Idealfall gleich 1 sein muß [22]. Bei signifikanten Abweichungen von 1 muß entsprechend die Zahl der einbezogenen Potentialkoeffizienten erhöht bzw. die Scheibendicke reduziert werden. Ein drittes Testverfahren beruht auf der Intensitätserhaltung des Wellenfeldes bei der Propagation durch den Kristall ohne Einbezug von Absorption [36]. Danach soll die im Idealfall auf 1 normierte Summe der Strahlintensitäten an der Kristallaustrittsfläche einen Wert von 0.9 nicht unterschreiten, andernfalls muß die Zahl der einbezogenen Strahlen erhöht werden.

Die Verwendung des MS-Verfahrens hat insbesondere für Kristalle mit großen Einheitszellen, bei denen eine hohe Zahl von Potentialkoeffizienten in die Rechnung einbezogen werden muß, Vorteile im Vergleich zum BW-Verfahren. So wird bei der numerischen Umsetzung des MS-Verfahrens i.a. die in Gl. (2.31a) auftretende Faltungsoperation im Ortsraum durch die in Gl. (2.31b) beschriebene Multiplikation im Fourier-Raum ersetzt. Für die hierzu erforderliche zweidimensionale diskrete Fourier-Transformation existieren hocheffektive numerische Verfahren wie z.B. die sog. schnelle Fourier-Transformation (engl. fast fourier transform, FFT) [37]. Bei Einbeziehung von N Potentialkoeffizienten führt dies zu einer Reduzierung der erforderlichen Rechenzeit von $\propto N^2$ (Gl. (2.31a)) auf $\propto N \log_2 N$ (Gl. (2.31b)). Im Vergleich dazu steigt der Rechenzeitbedarf beim BW-Verfahren proportional zu N^2 .^a Neben einer Reduzierung der Rechenzeit für große N hat das MS-Verfahren im Vergleich zum BW-Verfahren den weiteren Vorteil, daß mit wachsendem N die Lösungsstabilität nicht beeinträchtigt wird. Dafür geht jedoch beim MS-Verfahren eine physikalisch anschauliche Vorstellung der beim Elektronendurchgang durch die Probe auftretenden dynamischen Beugungsphänomene i.a. verloren. In dieser Arbeit wurde das MS-Verfahren zur Berechnung der Austrittswellenfunktion für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen (begleitend zum BW-Verfahren, Kap. 3) und insbesondere für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen eingesetzt (Kap. 4).

^aEs muß jedoch beachtet werden, daß die Zahl N der einzubeziehenden Potentialkoeffizienten (Strahlen) beim MS-Verfahren i.a. größer ist als beim BW-Verfahren. Dies hängt mit der speziellen Eigenschaft des MS-Verfahrens zusammen, einen i.a. signifikanten Anteil von "überflüssigen" Potentialkoeffizienten $V_g = 0$ in die Rechnung mit einzubeziehen.

2.2.3 Nichtlineare Abbildungstheorie

In den Abschnitten 2.2.1 und 2.2.2 wurden zwei Verfahren beschrieben, mit denen der Durchgang einer hochenergetischen Elektronenwelle durch eine kristalline Probe auf der Grundlage der relativistischen Quantenmechanik berechnet werden kann. Eine Anwendung dieser Verfahren liefert die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ an der Austrittsfläche der Probe. In diesem Abschnitt wird zur Beschreibung des nachfolgenden Abbildungsprozesses, bei dem die einzelnen Strahlen des aus der Probe austretenden Wellenfeldes durch die Mikroskopoptik transferiert werden und in der hinteren Bildebene zur Interferenz gelangen, die sog. nichtlineare Abbildungstheorie verwendet. Im Gegensatz zur linearen Abbildungstheorie, bei der nur Interferenzen zwischen dem Nullstrahl und den abgebeugten Strahlen berücksichtigt werden, bezieht die nichtlineare Abbildungstheorie auch Interferenzen zwischen den abgebeugten Strahlen mit ein. Dabei wird insbesondere auch der Einfluß von Linsenfehlern sowie der Einfluß einer teilkohärenten Probenbeleuchtung auf den Bildkontrast berücksichtigt.

Der in dieser Arbeit verwendete Formalismus der Bildkontrastentstehung basiert auf der nichtlinearen Abbildungstheorie [23] unter partiell kohärenter Beleuchtung in der Notation nach Ishizuka [38]. Als Eingangsgrößen verwendet dieser Formalismus den diskreten Satz von komplexen Fourier-Koeffizienten

$$\psi(\vec{g}) = U_{\vec{g}} \exp(i\theta_{\vec{g}}) \quad (2.33)$$

der Austrittswellenfunktion, wobei $U_{\vec{g}}$ die reelle Strahlamplitude und $\theta_{\vec{g}}$ die reelle Strahlphase bezeichnet. Die Intensitätsverteilung $I(\vec{r})$ in der Bildebene wird ausgedrückt durch die Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g})$ der Bildintensität:

$$I(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} J(\vec{g}) \exp(-2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}), \quad (2.34)$$

mit $J(\vec{g}) = J^*(-\vec{g})$. Die zentrale Gleichung der nichtlinearen Abbildungstheorie beschreibt den funktionalen Zusammenhang zwischen den Fourier-Koeffizienten der Austrittswellenfunktion und den Fourier-Koeffizienten der Bildintensität:

$$J(\vec{g}) = \sum_{\vec{h}} \psi(\vec{h} + \vec{g}) \psi^*(\vec{h}) \tau(\vec{h} + \vec{g}, \vec{h}), \quad (2.35)$$

wobei die Summation über $\vec{h}$ das gesamte Raumfrequenzspektrum der Austrittswellenfunktion umfaßt. Die Größe $\tau(\vec{g}, \vec{h})$ in Gl. (2.35) bezeichnet den sog. Transmissionskoeffizienten, welcher den gesamten gerätespezifischen Einfluß des Mikroskops beschreibt und der für $\vec{h} = 0$ die Transferfunktion des Mikroskops repräsentiert. Ishizuka konnte zeigen [38], daß $\tau(\vec{g}, \vec{h})$ unter Abbildungsbedingungen, wie sie bei der hochauflösenden Gitterabbildung vorliegen, geschrieben werden kann als

$$\tau(\vec{g}, \vec{h}) = P(g) P(h) \exp(i\chi(g) - i\chi(h)) E_t(g, h) E_s(\vec{g}, \vec{h}). \quad (2.36)$$

Darin beschreibt die Aperturfunktion $P(g)$ die Wirkung einer Objektivblende mit dem reziproken Durchmesser $2g_P$:

$$P(g) = \begin{cases} 1 & \text{falls } g \leq g_P \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.37)$$

Die Wirkung des Öffnungsfehlers und einer Objektivlinsendefokussierung auf die Phasenlage der einzelnen Strahlen wird in Gl. (2.36) durch die Wellenaberrationsfunktion

$$\chi(g) = \pi\lambda \Delta f g^2 + \pi C_s \lambda^3 g^4 / 2 \quad (2.38)$$

beschrieben, worin C_s die Öffnungsfehlerkonstante und Δf den Objektivlinsendefokus ($\Delta f < 0$ für Unterfokus) bezeichnet. Die reellen Faktoren $E_t(g, h)$ und $E_s(\vec{g}, \vec{h})$ in Gl. (2.36) werden als zeitliche (Index t) bzw. räumliche (Index s) Dämpfungs envelopes bezeichnet. Sie beschreiben die Wirkung einer eingeschränkten (partiellen) zeitlichen und räumlichen Strahlkohärenz auf den Bildkontrast. Einschränkungen der zeitlichen Strahlkohärenz entstehen durch Defokusschwankungen, die ihrerseits durch Schwankungen der Linsenströme und der Hochspannung sowie durch die thermische Verbreiterung der Elektronenenergie hervorgerufen werden. Einschränkungen der räumlichen Strahlkohärenz entstehen dadurch, daß die von der Quelle ausgehenden Elektronenstrahlen nicht ideal parallel, sondern konvergent verlaufen und in der Bildebene zu gegeneinander verschobenen Interferenzmustern führen. Allgemein bewirkt die Teilkohärenz der Elektronenwelle eine raumfrequenzselektive Dämpfung der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g})$, die tendenziell mit wachsender Raumfrequenz g zunimmt. Sowohl die Defokus- als auch die Strahlrichtungsschwankungen können in guter Näherung durch Gauß-Verteilungen beschrieben werden. Unter dieser Annahme, und bei Vernachlässigung eines Faktors $u \approx 1$ in den Originalformeln in Ref.[38], sind die Dämpfungs envelopes gegeben durch

$$E_t(g, h) = \exp\left(-\left(\frac{\pi}{2}\lambda\Delta\right)^2(g^2 - h^2)^2\right), \quad (2.39)$$

$$E_s(\vec{g}, \vec{h}) = \exp\left(-\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^2\left(\frac{\partial\chi(g)}{\partial\vec{g}} - \frac{\partial\chi(h)}{\partial\vec{h}}\right)^2\right). \quad (2.40)$$

Darin bezeichnet Δ die Defokusstreuung und α den Semikonvergenzwinkel, welche die halbe Breite der angenommenen Gauß-Verteilung für die Defokus- bzw. Strahlrichtungsschwankungen beim $1/e$ -ten Teil des Maximums beschreiben.^a Die in dieser Arbeit verwendeten Werte für C_s , Δ und α sind in Tab.2.2 aufgelistet und wurden für das am Institut für Mikrostrukturforschung installierte Hochauflösungsmikroskop vom Typ JEOL 4000EX mit Hilfe einer Methode nach Frank [39] bei $U_B = 400$ kV experimentell bestimmt.

^aBei der Verwendung älterer Programmversionen des EMS-Simulationspakets [24] (hier: Version von 1988) ist zu beachten, daß die Definitionen von Δ und α nicht für alle Programme einheitlich ist. So werden Δ und α in den Programmen TF1EMS, TF3EMS und LI1EMS als volle bzw. halbe Breite der Gauß-Verteilung beim halben Wert des Maximums interpretiert. Die zur Vereinheitlichung der Definitionen von Δ und α erforderlichen Programmänderungen finden sich im Anhang A.

λ [pm]	C_s [mm]	Δ [nm]	α [mrad]
1.644	1.0	10	0.8

Tab.2.2: Verwendete Mikroskopparameter für eine Beschleunigungsspannung $U_B = 400$ kV.

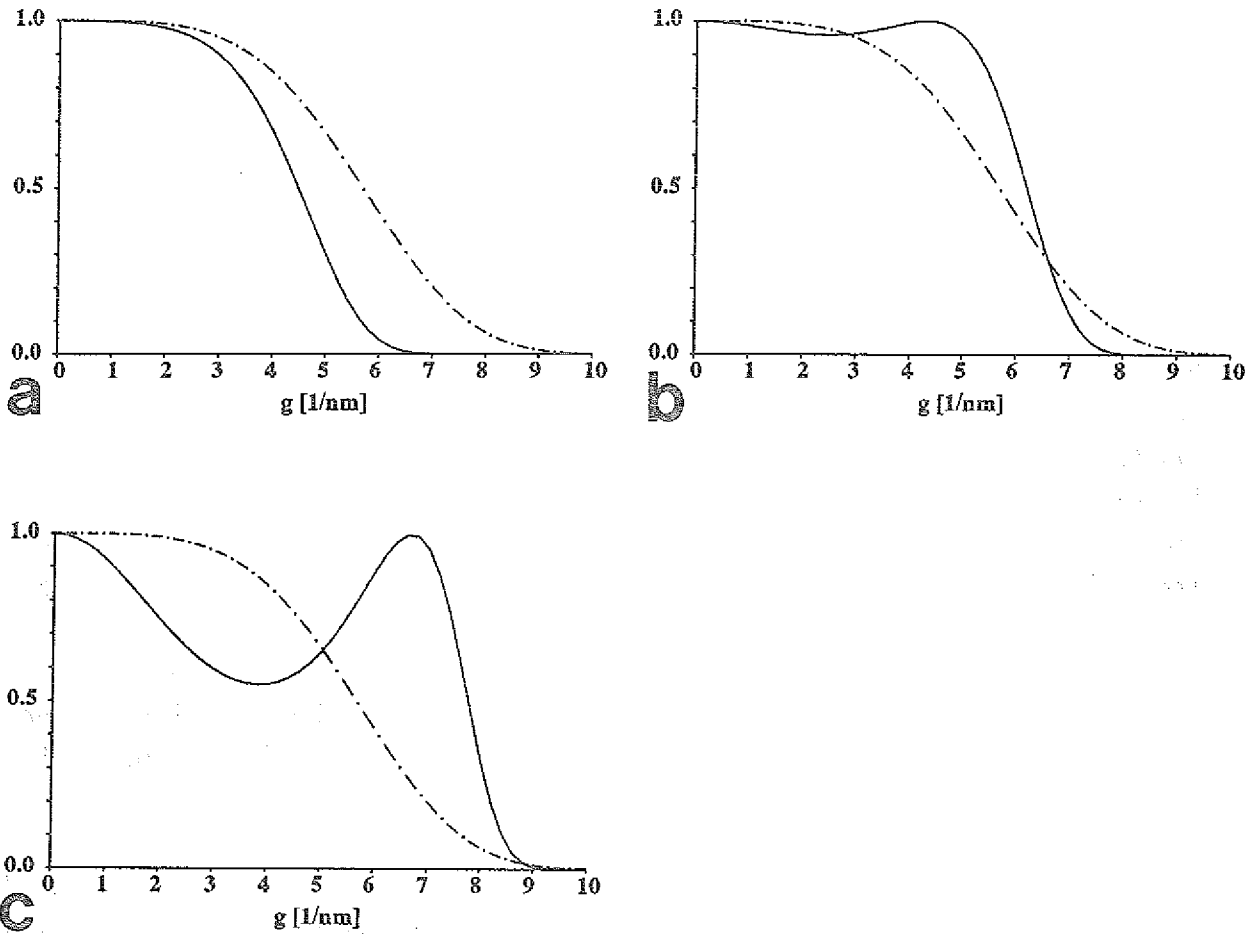


Abb.2.3: Dämpfungenveloppen $E_s(\vec{g}, 0)$ (—) und $E_t(g, 0)$ (---) als Funktion der Raumfrequenz $\vec{g}$ für $\Delta = 10$ nm, $\alpha = 0.8$ mrad und für verschiedene Defokuswerte: (a) $\Delta f = +15$ nm, (b) $\Delta f = -50$ nm und (c) $\Delta f = -120$ nm.

Um die Wirkung der zeitlichen und räumlichen Dämpfungenvelope zu veranschaulichen, zeigt Abb.2.3 eine Auftragung von $E_s(\vec{g}, 0)$ und $E_t(g, 0)$ als Funktion von $\vec{g}$ für Defokuswerte von $+15$ nm (a), -50 nm (b) und -120 nm (c). Anhand dieser Kurvenverläufe ist, stellvertretend für das gesamte Defokusintervall von -120 bis $+15$ nm, deutlich zu erkennen, daß Interferenzbeiträge mit Raumfrequenzen größer als 8 nm^{-1}

vollständig durch die Wirkung der teilkohärenten Probenbeleuchtung gedämpft werden (a-c). Für $\Delta f = -50 \text{ nm}$ (b), was bei den hier verwendeten Mikroskopparametern (Tab. 2.2) dem Scherzer-Defokus entspricht [15], wird das untere Raumfrequenzintervall $0 < g < 3.5 \text{ nm}^{-1}$ nahezu ungedämpft übertragen, wohingegen das mittlere Raumfrequenzintervall $3.5 \text{ nm}^{-1} < g < 6.5 \text{ nm}^{-1}$ durch die Wirkung der zeitlichen Envelope bereits stärker gedämpft übertragen wird. Mit zunehmender Unterfokussierung (c) werden niedrige Raumfrequenzen zunehmend stark durch die räumliche Envelope gedämpft, wohingegen höhere Raumfrequenzen im Vergleich zum Scherzer-Defokus weniger stark gedämpft werden. Im Gegensatz dazu werden bei zunehmender Überfokussierung (a) hohe Raumfrequenzen sehr stark durch die Wirkung der räumlichen Envelope gedämpft, wohingegen niedrige Raumfrequenzen im Bereich $0 < g \leq 3 \text{ nm}^{-1}$ ungedämpft übertragen werden.

Wie anhand von Abb. 2.3a deutlich zu erkennen ist, prägt die räumliche Dämpfungsenvelope dem Transferverhalten des Mikroskops im Überfokusbereich ($\Delta f > 0$) einen betonten Tiefpaßcharakter auf. Dieses charakteristische Transferverhalten ist von Bedeutung für den Kontrastbeitrag, der durch in der Probe inelastisch gestreute Elektronen erzeugt wird. Aufgrund des Farbfehlers der Objektivlinse (auch chromatische Aberration genannt) führt nämlich ein Energieverlust der eingestrahlten Elektronen um den Betrag ΔE dazu, daß diese Elektronen um einen Defokusbetrag von

$$\Delta f_{\text{inel}} = C_c \frac{1 + (E_{\text{kin}}/m_e c^2)}{1 + (E_{\text{kin}}/2m_e c^2)} \frac{\Delta E}{E_{\text{kin}}} \quad (2.41)$$

überfokussiert abgebildet werden (C_c Farbfehlerkonstante). Für $E_{\text{kin}} = 400 \text{ keV}$, $C_c = 2.2 \text{ mm}$ (JEOL 4000EX) und einem typischen Energieverlust an Plasmonen von $\Delta E = 15 \text{ eV}$ beträgt diese Überfokussierung $\Delta f_{\text{inel}} = +106 \text{ nm}$. Üblicherweise wird das Mikroskop zur Abbildung der elastisch gestreuten Elektronen nahe dem Scherzer-Defokus $\Delta f = -50 \text{ nm}$ betrieben. In diesem Fall werden also die inelastisch gestreuten Elektronen mit einer effektiven Überfokussierung von ca. $+56 \text{ nm}$ abgebildet. Bedingt durch den ausgeprägten Tiefpaßcharakter der Transferfunktion in diesem Defokusbereich werden dadurch die hohen Raumfrequenzanteile einer Austrittswellenfunktion der Energie $(E_{\text{kin}} - \Delta E)$ vollständig gedämpft. Hierdurch tragen inelastisch gestreute Elektronen nur noch durch einen monotonen Untergrund zur Bildintensität bei. Der dabei verlorengehende Beitrag der inelastisch gestreuten Elektronen zum Bildkontrast kann in erster Näherung durch den Ausschluß dieser Elektronen vom Abbildungsvorgang beschrieben werden [40], was durch die Verwendung komplexer Kristallpotentiale erreicht wird (Gl. (2.14)).

3 Bildsimulationen für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen

Eine Voraussetzung für die erfolgreiche Entwicklung einer quantitativen Methode zur Charakterisierung von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen mittels hochauflösender Gitterabbildung bildet das grundlegende Verständnis der auftretenden Bildkontrastphänomene auf der Grundlage detaillierter Bildsimulationen. Bevor jedoch das i.a. komplexe Bildkontrastverhalten innerer Grenzflächen untersucht wird, ist es sinnvoll, zunächst das Bildkontrastverhalten der einzelnen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungsschichten zwischen den Grenzflächen zu studieren. Dadurch können in systematischer Weise Abbildungsbedingungen ermittelt werden, die zur Charakterisierung von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen besonders gut geeignet sind. Zu diesem Zweck wurde die hochauflösende Gitterabbildung von ungeordneten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen anhand von Simulationen des Elektronenstreuprozesses und des nachfolgenden Abbildungsvorgangs für Einstrahlrichtungen $\vec{B}$ entlang der [110]- und [100]-Kristallzonenachse detailliert untersucht. Insbesondere wurde dabei auch der Einfluß von tetragonalen Gitterverspannungen auf das Elektronenstreuverhalten und das Bildkontrastverhalten studiert.

3.1 Elektronenstreuverhalten von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen

Das Ergebnis der dynamischen Elektronenstreuprozesse am Kristallpotential der Probe bildet die Austrittswellenfunktion, welche die gesamte verfügbare strukturelle und kompositionelle Information über die Probe enthält. In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse von BW-Simulationen der Austrittswellenfunktion für ungeordnete $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen als Funktion von x und von tetragonalen Gitterverspannungen vorgestellt. Die BW-Simulationen wurden mit den Programmen BU1EMS und BZ2EMS für eine kinetische Elektronenenergie von 400 keV durchgeführt.

Bei den durchgeführten Simulationen wurden Einheitszellen mit Diamantstruktur verwendet, die in Abb. 3.1a,d in einer [110]- und [100]-Projektion gezeigt sind. Darin markiert die Position A den gewählten Ursprung der projizierten Einheitszelle für die jeweilige Kristallprojektion. Der kompositionsabhängige Gitterparameter $a_0(x)$ für die unverspannte, kubische Einheitszelle wurde aus den Gitterparametern für reines Si ($a^{\text{Si}} = 0.5431 \text{ nm}$) und reines Ge ($a^{\text{Ge}} = 0.5657 \text{ nm}$) entsprechend dem Vegardschen Gesetz durch lineare Interpolation bestimmt. Dies stellt eine sehr gute Näherung experimentell ermittelter Werte für $a_0(x)$ dar [41]. Die Geometrie der Einheitszelle für den Fall von Gitterverspannungen wurde der Geometrie von Einheitszellen in kohärenten $\text{Si}(001)/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen angepaßt (Abb. 3.1b,e). In solchen Systemen, bei denen die Diamantstruktur kontinuierlich über innere Grenzflächen hinweg fortgesetzt wird, werden die Gitterfehlpassungen zwischen den $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Einzelschichten durch ein biaxiales Spannungsfeld in der Grenzflächenebene ((x,y) -Ebene) elastisch ausgeglichen. Dies führt zu einer tetragonalen Verspannung der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Einzelschichten, die durch

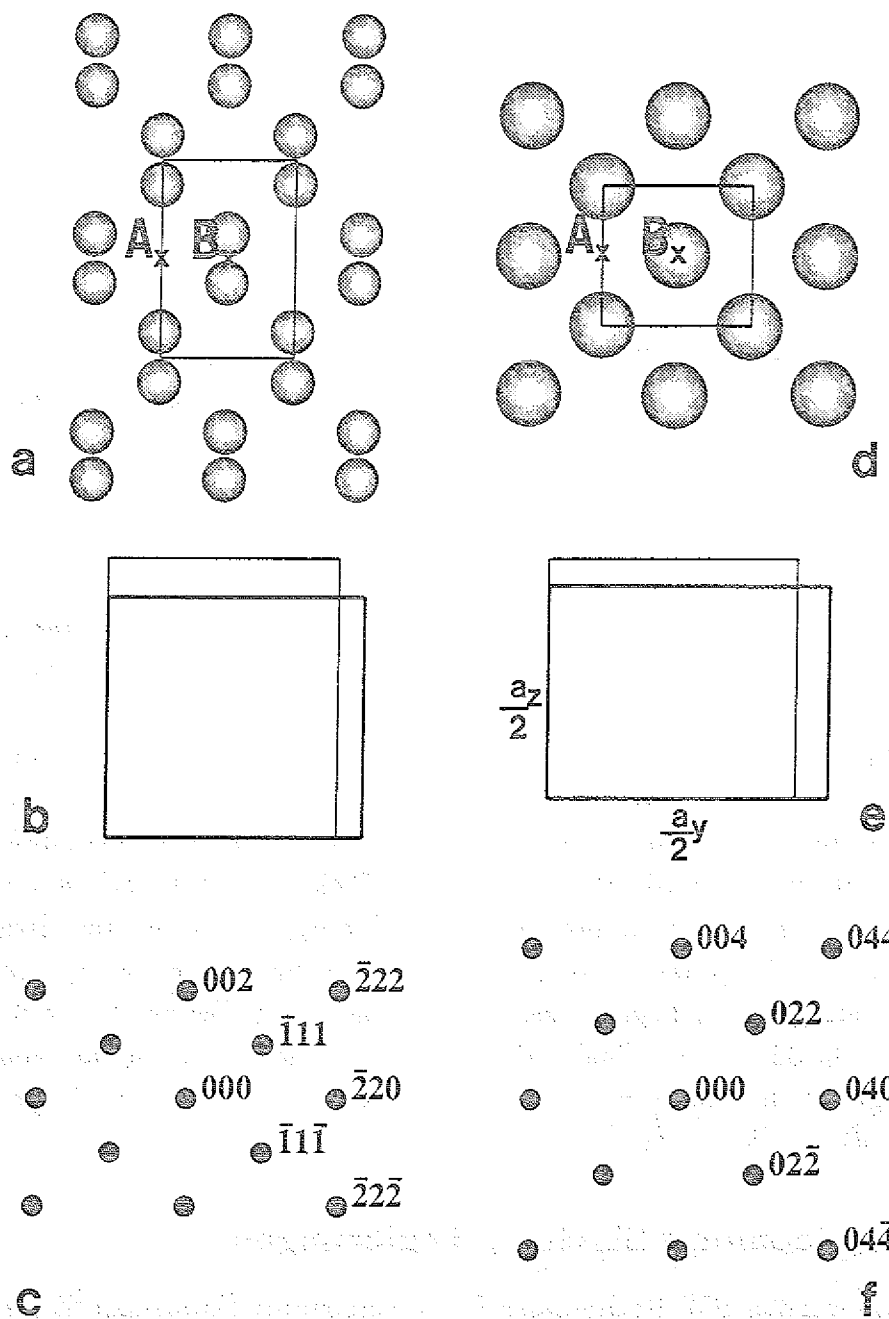


Abb. 3.1: (a,d) Schematische Darstellung der Einheitszelle für ungeordnete $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen in der [110]- und [100]-Projektion. Die Positionen A und B markieren jeweils atomare Tunnel- bzw. Säulenpositionen. (b,e) Einfluß von tetragonalen Gitterverspannungen auf die Geometrie der Einheitszelle (fette Linien: bezüglich der (x,y)-Ebene zugverspannte Einheitszelle). (c,f) Elektronenbeugungsdiagramme mit indizierten Beugungspunkten für die beiden Zonenachsenorientierungen.

die tetragonale Verzerrung

$$\varepsilon_T = \frac{a_x(x) - a_y}{a_0(x)} \quad (3.1)$$

beschrieben wird. Darin ist der laterale Gitterparameter $a_y = a_x$ identisch mit dem Gitterparameter a_s des Substratmaterials, und der Gitterparameter senkrecht zur Grenzflächenebene ist gegeben durch [42]

$$a_z(x) = \frac{2\nu}{1-\nu} (a_0(x) - a_y) + a_0(x), \quad (3.2)$$

worin ν (0.279 für Si, 0.270 für Ge [43]) die Poissonzahl bezeichnet.

Zur Berechnung der Kristallpotentiale wurde die sog. virtuelle Kristallapproximation (engl. virtual crystal approximation, VCA) benutzt, bei der das Kristallpotential der ungeordneten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierung durch ein mittleres Kristallpotential

$$V^{VCA}(\vec{r}) = xV^{Si}(\vec{r}) + (1-x)V^{Ge}(\vec{r}) \quad (3.3)$$

beschrieben wird. Darin bezeichnet $V^{Si}(\vec{r})$ und $V^{Ge}(\vec{r})$ die Kristallpotentiale für reines Si bzw. reines Ge, die gemäß Gl. (2.10, 2.13, 2.14) berechnet wurden. Die Verwendung von VCA-Potentialen führt dazu, daß die projizierte Kristallstruktur für die beiden hier betrachteten Zonenachsenorientierungen jeweils Symmetriezentren an den strategischen Punkten A und B innerhalb der projizierten Einheitszelle besitzt (Abb. 3.1a,d). Diese Zentrosymmetrie bleibt insbesondere auch für den Fall bestehen, daß die Einheitszelle tetragonal verzerrt wird (Abb. 3.1b,e). Das Elektronenstreuverhalten von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen wird nachfolgend anhand der Strahlamplitude $U(\vec{g})$ und Strahlphase $\theta(\vec{g})$ der einzelnen Strahlen $\vec{g}$ beschrieben, die das Fourier-Spektrum von $\psi(\vec{r})$ repräsentieren. Da ungeordnete $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen über den gesamten Bereich $0 \leq x \leq 1$ isostrukturell sind, besteht das Fourier-Spektrum von $\psi(\vec{r})$ aus dem gleichen Satz von Strahlen für alle x . Aufgrund der vorliegenden Zentrosymmetrie gelten zusätzlich die Beziehungen $U(\vec{g}) = U(-\vec{g})$ und $\theta(\vec{g}) = \theta(-\vec{g})$.

3.1.1 Unverspannte $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen

Zunächst wurden BW-Rechnungen für unverspannte (kubische) $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen im Kompositionsbereich $0 \leq x \leq 1$ in Schritten von $\Delta x = 0.1$ für $\vec{B} = [110]$ und $\vec{B} = [100]$ durchgeführt. Eine hinreichende Konvergenz der Lösungen für $\psi(\vec{r})$ wurde hierbei erzielt, indem zur Berechnung des Kristallpotentials die jeweils innersten 71 reziproken Gittervektoren $\vec{g}$ um den Ursprung der nullten Laue-Zone einbezogen wurden. Die Rechnungen zeigen, daß die Austrittswellenfunktion für die $[110]$ -Einstrahlrichtung über den gesamten Kompositionsbereich durch die Wechselwirkung von insgesamt drei stark angeregten Bloch-Wellen bestimmt wird. Diese Beobachtung steht damit in Einklang mit einer BW-Studie für reines Si und reines Ge für die $[110]$ -Einstrahlrichtung [44]. Da zwei der drei dominanten Bloch-Wellen nahezu gleiche Bloch-Vektoren besitzen, können diese zwei Bloch-Wellen in guter Näherung wie eine einzelne Bloch-Welle

behandelt werden. Für die $[100]$ -Einstrahlrichtung wird $\psi(\vec{r})$ über den gesamten Kompositionsbereich durch die Wechselwirkung von nur zwei stark angeregten Bloch-Wellen bestimmt. Ein weiteres wichtiges Untersuchungsergebnis besteht darin, daß von der Gesamtheit der (un)gebeugten Strahlen jeweils der Nullstrahl $\vec{g}_0 = (000)$ und die abgebeugten Strahlen erster Ordnung $\vec{g}_1$, das sind die vier äquivalenten Strahlen $\vec{g}_1 = \{111\}$ für $\vec{B} = [110]$ bzw. $\vec{g}_1 = \{220\}$ für $\vec{B} = [100]$, am stärksten zu $\psi(\vec{r})$ beitragen. Deshalb sind diese Strahlen von grundlegender Bedeutung für die Bildkontrastentstehung bei der hochauflösenden Gitterabbildung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen (vgl. Kap. 3.2).

Abb. 3.2 zeigt eine Auftragung der Strahlintensitäten $I(\vec{g}_0)$ und $I(\vec{g}_1)$ für $\vec{B} = [110]$ und $\vec{B} = [100]$ als Funktion der Probendicke t und der Komposition x . Ebenfalls gezeigt ist die Dickenabhängigkeit der relativen Strahlphasen $\Delta\theta(\vec{g}_1) = (\theta(\vec{g}_1) - \theta(\vec{g}_0))$ für diese Einstrahlrichtungen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur Kurven für $x = 0, 0.5$ und 1 gezeigt. Die Kurvenverläufe für die Strahlintensitäten lassen für die drei Kompositionswerte einen ausgeprägt sinusförmigen Verlauf mit der Probendicke t erkennen (Abb. 3.2a,b,d,e). Solche periodischen Dickenoszillationen der Strahlintensität wurden über den gesamten Kompositionsbereich beobachtet und können anhand der Interferenz der für beide Einstrahlrichtungen jeweils nur zwei dominanten Bloch-Wellen erklärt werden. Die Oszillationsperiode ξ_0 (effektive Extinktionslänge) zeigt hierbei über den gesamten Kompositionsbereich $0 \leq x \leq 1$ eine quasilinear Zunahme mit x . Die generelle Zunahme von ξ_0 mit x kann auf der Basis der Bloch-Wellen-Theorie erklärt werden [10], wonach ξ_0 durch den Reziprokwert $1/(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(j)})$ der Bloch-Vektoren-Differenz der beiden dominanten Bloch-Wellen gegeben ist. Da $\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(j)}$ mit zunehmendem Si-Gehalt, d.h. mit kleiner werdendem mittleren Streupotential, abnimmt, ergibt sich eine entsprechende Zunahme von ξ_0 mit x . Eine ähnliche systematische Abhängigkeit von der Komposition zeigt sich auch für die lokalen Maxima der Strahlintensitäten (Abb. 3.2a,b,d,e) und für die relativen Strahlphasen (Abb. 3.2c,f). Für die Differenz der relativen Strahlphasen für Si und Ge ist für beide Einstrahlrichtungen eine Zunahme mit wachsender Probendicke zu beobachten, mit einem Differenzwert von $\pi/2$ bei $t = 10 \text{ nm}$ für $\vec{B} = [110]$ bzw. $t = 13 \text{ nm}$ für $\vec{B} = [100]$. Wie am Beispiel der Kurven für $x = 0, 0.5$ und 1 demonstriert ist, führt eine Kompositionsvariation von $x = 0$ (reines Ge) bis 1 (reines Si) insgesamt zu einem systematischen Übergang in der Dickenabhängigkeit von $I(\vec{g}_0)$, $I(\vec{g}_1)$ und $\Delta\theta(\vec{g}_1)$. Für beide hier betrachtete Einstrahlrichtungen wurde ein solcher systematischer Übergang im Elektronenstreuverhalten auch für abgebeugte Strahlen höherer Ordnung, z.B. für die $\{400\}$ -Strahlen, beobachtet.

Eine Besonderheit des Elektronenstreuverhaltens für die $[110]$ -Einstrahlrichtung besteht im Verhältnis der Extinktionslängen für Si und Ge von $\xi_0^{\text{Si}}/\xi_0^{\text{Ge}} \approx 2$. Dies führt für unterschiedliche Kompositionen zu beträchtlich unterschiedlichen Strahlintensitäten für den Nullstrahl und die abgebeugten Strahlen erster Ordnung im Dickenbereich nahe $\xi_0^{\text{Ge}} \approx 15 \text{ nm}$. In diesem Dickenbereich ist für Ge der Großteil der Gesamtintensität im Nullstrahl, für Si hingegen in den abgebeugten Strahlen konzentriert. Dieses Streuverhalten kann insbesondere in Beugungskontrastaufnahmen, wo entweder nur der Nullstrahl

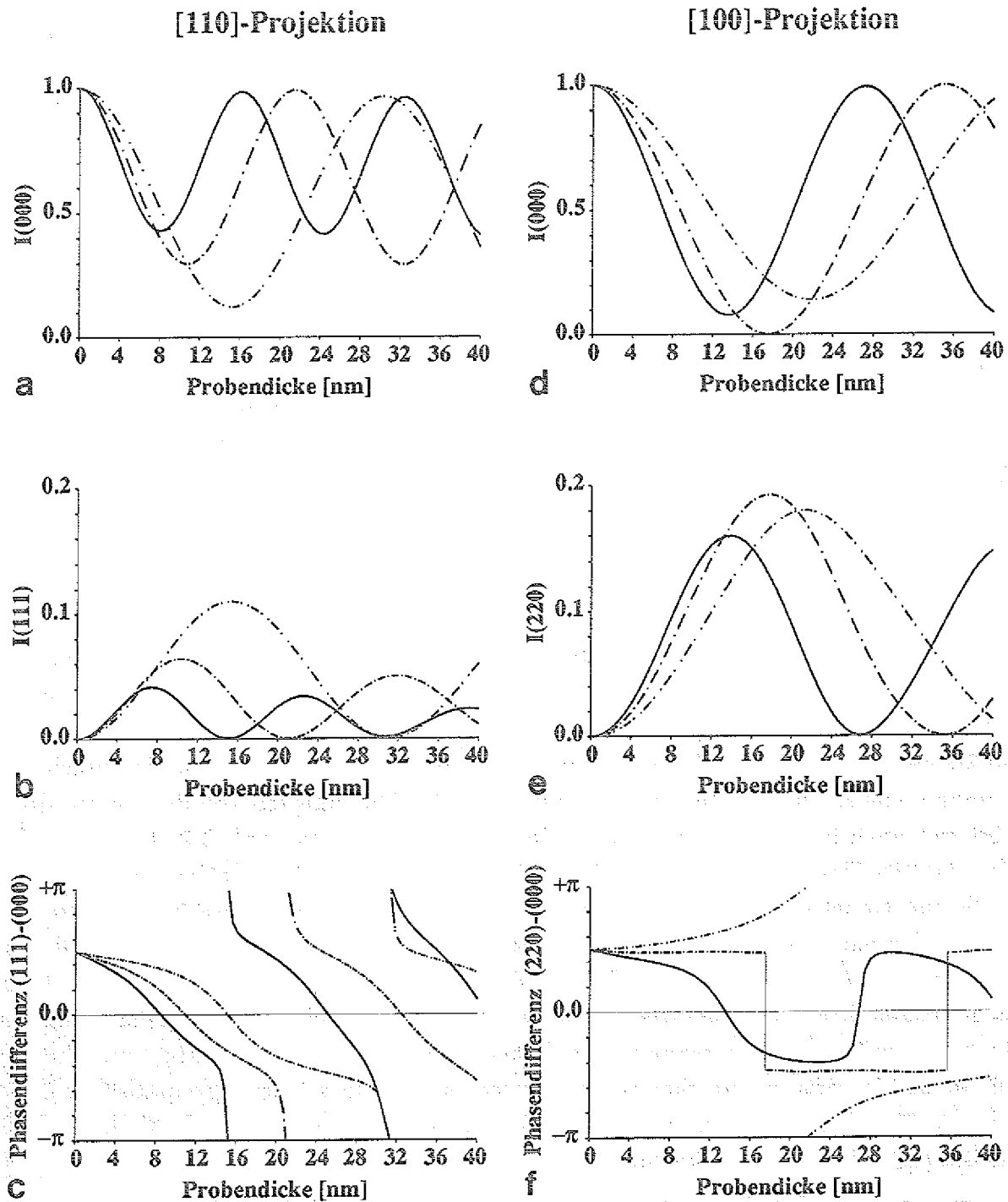


Abb. 3.2: Auftragungen der Strahlintensitäten $I(\vec{g}_0)$, $I(\vec{g}_1)$, sowie der relativen Strahlphasen $\Delta\theta(\vec{g}_1)$ als Funktion der Probendicke t für die [110]- und [100]-Einstrahlrichtung und für Kompositionen $x = 0$ (—), 0.5 (---) und 1 (-·-·-).

oder ein abgelenkter Strahl zur Bildintensität beiträgt (vgl. Kap. 6.1.2), zu beträchtlich unterschiedlichen Bildhintergrundintensitäten für unterschiedliche Kompositionen führen (vgl. Kap. 6.4). Vergleicht man die Minima der Nullstrahlintensitäten für verschiedene Kompositionswerte (Abb. 3.2a), so nimmt die bei der jeweils halben Extinktionslänge im Nullstrahl verbleibende Intensität allgemein mit wachsendem Ge-Gehalt zu.

Eine Besonderheit der $[100]$ -Einstrahlrichtung, die für die $[110]$ -Einstrahlrichtung nicht zu beobachten ist, besteht in einem charakteristischen Verhalten des Nullstrahls und der vier abgelenkten $\{220\}$ -Strahlen mit der Probendicke für $x = 0.5$ (Abb. 3.2d,e,f). Dieses Verhalten ist dadurch gekennzeichnet, daß die Intensität des Nullstrahls bei $(\xi_0/2) \approx 18\text{ nm}$ (und auch bei $3\xi_0/2$) auf null abnimmt und die relative Strahlphase der $\{220\}$ -Strahlen für Dicken bis zu einigen zehn Nanometern nahezu konstant $|\pi/2|$ beträgt. Der Nullstrahl und $\{220\}$ -Strahlen zeigen somit ein Verhalten mit der Probendicke, wie es in ähnlicher Weise auch unter symmetrischen Zweistrahlbedingungen (Bragg-Fall) zu beobachten ist [13]. Für $t < 15\text{ nm}$ ist ebenfalls für $x \neq 0.5$ ein charakteristisches Verhalten der relativen Strahlphasen zu beobachten (Abb. 3.2f). So nimmt für $x < 0.5$ der Betrag $|\Delta\theta(220)|$ systematisch mit t ab, wohingegen für $x > 0.5$ der Betrag $|\Delta\theta(220)|$ systematisch mit t zunimmt. Eine Erklärung dieses Phänomens kann anhand einer Analyse der Bloch-Wellen-Koeffizienten $C_0^{(j)}$ der beiden stark angeregten Bloch-Wellen gegeben werden. Hierbei zeigt sich, daß für $x = 0.5$ die Koeffizienten $C_0^{(j)}$ der beiden dominanten Bloch-Wellen gleich werden mit einem jeweiligen Wert von $1/\sqrt{2}$, wohingegen die Bloch-Wellen-Koeffizienten der übrigen Bloch-Wellen null werden.^a Somit konzentriert sich für $x = 0.5$ die gesamte Intensität des Bloch-Wellen-Feldes ausschließlich auf diese zwei Bloch-Wellen. Entsprechend einer symmetrischen Schwebung durch Überlagerung von zwei Wellen gleicher Amplitude führt die Interferenz dieser beiden Bloch-Wellen mit gleichen Anregungskoeffizienten zu dem zu beobachtenden symmetrischen Schwebungsverhalten (symmetrische Pendellösung) der Strahlintensitäten. Das für $x = 0.5$ und $x \neq 0.5$ zu beobachtende charakteristische Phasenverhalten der $\{220\}$ -Strahlen kann anschaulich anhand der beim MS-Verfahren verwendeten Modellvorstellung vom Elektronenstreuungsprozeß erklärt werden (vgl. Kap. 2.2.2). Danach resultiert die für $x = 0.5$ trotz zunehmender Probendicke konstante relative Strahlphase $\Delta\theta(220)$ daher, daß $\Delta\theta(220)$ an der Streuebene jeder Kristallscheibe der Dicke Δz zwar um einen bestimmten Betrag verändert wird, diese Phasenänderung im Verlauf der Propagation um die Strecke Δz zur nächsten Kristallscheibe jedoch durch eine gegensinnige Phasenänderung um den selben Betrag kompensiert wird. Für $x \neq 0.5$ wird hingegen die Phasenänderungen beim Streuvorgang durch die Phasenänderungen beim Propagationsvorgang entsprechend über- bzw. unterkompensiert. Für reines Si und Ge wurde ein solches "symmetrisches Zweistrahlverhalten" bereits für die $[110]$ -Zonenachsenorientierung bei bestimmten Beschleunigungsspannungen gefunden [45].

^aDies ergibt sich zwangsläufig aus der Normierungsbedingung $\sum_{j=1}^N C_0^{(j)} C_0^{(j)*} = 1$.

3.1.2 Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen

Der Einfluß von tetragonalen Gitterverspannungen (Abb. 3.1b,e) auf das Elektronenstreuverhalten ungeordneter $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen wurde anhand von BW-Rechnungen unter Einbeziehung von 71 Strahlen (vgl. Kap. 3.1.1) für den Kompositionsbereich $0 \leq x \leq 1$ in Schritten von jeweils $\Delta x = 0.1$ untersucht. Dabei wurde für jeden Kompositionswert x die tetragonale Verzerrung ε_T in jeweils zehn Schritten variiert. Die Anfangs- und Endwerte für ε_T entsprachen dabei einer an ein reines Ge(100)- bzw. Si(100)-Substrat angepaßten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierung. Ein zentrales Ergebnis dieser Untersuchungen besteht darin, daß tetragonale Gitterverspannungen über den gesamten Kompositionsbereich zu systematischen Änderungen in den Strahlintensitäten und in den relativen Strahlphasen führen. Daher werden im folgenden – stellvertretend für den gesamten Kompositionsbereich und für den gesamten Bereich möglicher Verspannungszustände – nur solche Fälle erörtert, bei denen der Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen am ausgeprägtesten ist. Dazu zeigt Abb. 3.3 den Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf den Nullstrahl und auf die abgelenkten Strahlen erster Ordnung für Ge entlang der [110]-Einstrahlrichtung (Abb. 3.3a–c) und für Si entlang der [100]-Einstrahlrichtung (Abb. 3.3d–f). Die zugehörigen Werte für ε_T entsprechen hier jeweils dem unverspannten bzw. dem maximal verspannten Zustand für Si und Ge.

Für die [110]-Einstrahlrichtung führen tetragonale Gitterverspannungen zu keiner Änderung der projizierten Kristallsymmetrie im Vergleich zum unverspannten (kubischen) Zustand. Die durchgeführten BW-Rechnungen zeigen, daß für diese Einstrahlrichtung tetragonale Gitterverspannungen sowohl die Zahl der dominanten Bloch-Wellen als auch das Verhalten niedrig indizierter Strahlen mit der Probendicke nicht verändern. Als Folge der Verspannung nimmt die Extinktionslänge ξ_0 für Ge mit zunehmender Druckverspannung um bis zu 6.6 % ab, und für Si mit zunehmender Zugverspannung um bis zu 4.5 % zu, wobei sich die Intensitäten einzelner Strahlen für eine gegebene Komposition lediglich um 2 % verändern. Tetragonale Gitterverspannungen haben ebenfalls einen nur geringen Einfluß auf die relative Strahlphase $|\Delta\theta(111)|$ mit Ausnahme von Bereichen der Kristalldicke, die ungefähr einem Vielfachen von ξ_0 entsprechen (Abb. 3.3c). Ähnlich wie für reines Ge (Abb. 3.3a–c) nehmen allgemein auch für Si-reichere Legierungen die Unterschiede in den Strahlintensitäten und relativen Strahlphasen zwischen dem unverspannten und dem verspannten Zustand mit zunehmender Kristalldicke zu.

Für die [100]-Einstrahlrichtung führen tetragonale Gitterverspannungen dazu, daß die im unverspannten Fall in der Projektion vierzählige Kristallsymmetrie auf eine zweizählige Symmetrie reduziert wird, da die [010]- und die [001]-Richtung nicht mehr äquivalent ist (Abb. 3.1d,e). BW-Rechnungen zeigen, daß diese reduzierte Kristallsymmetrie zum Auftreten einer dritten Bloch-Welle führt, deren Anregungsstärke mit zunehmender Gitterverspannung zunimmt. Jedoch besitzt diese dritte Bloch-Welle einen nur geringen Einfluß auf die sinusförmigen Oszillationen des Nullstrahls und der abgelenkten {220}-Strahlen mit der Probendicke sowie auf die effektive Extinktionslänge (Abb. 3.3d,e). Die maximalen Änderungen in ξ_0 betragen nur 0.3 % für reines Si und

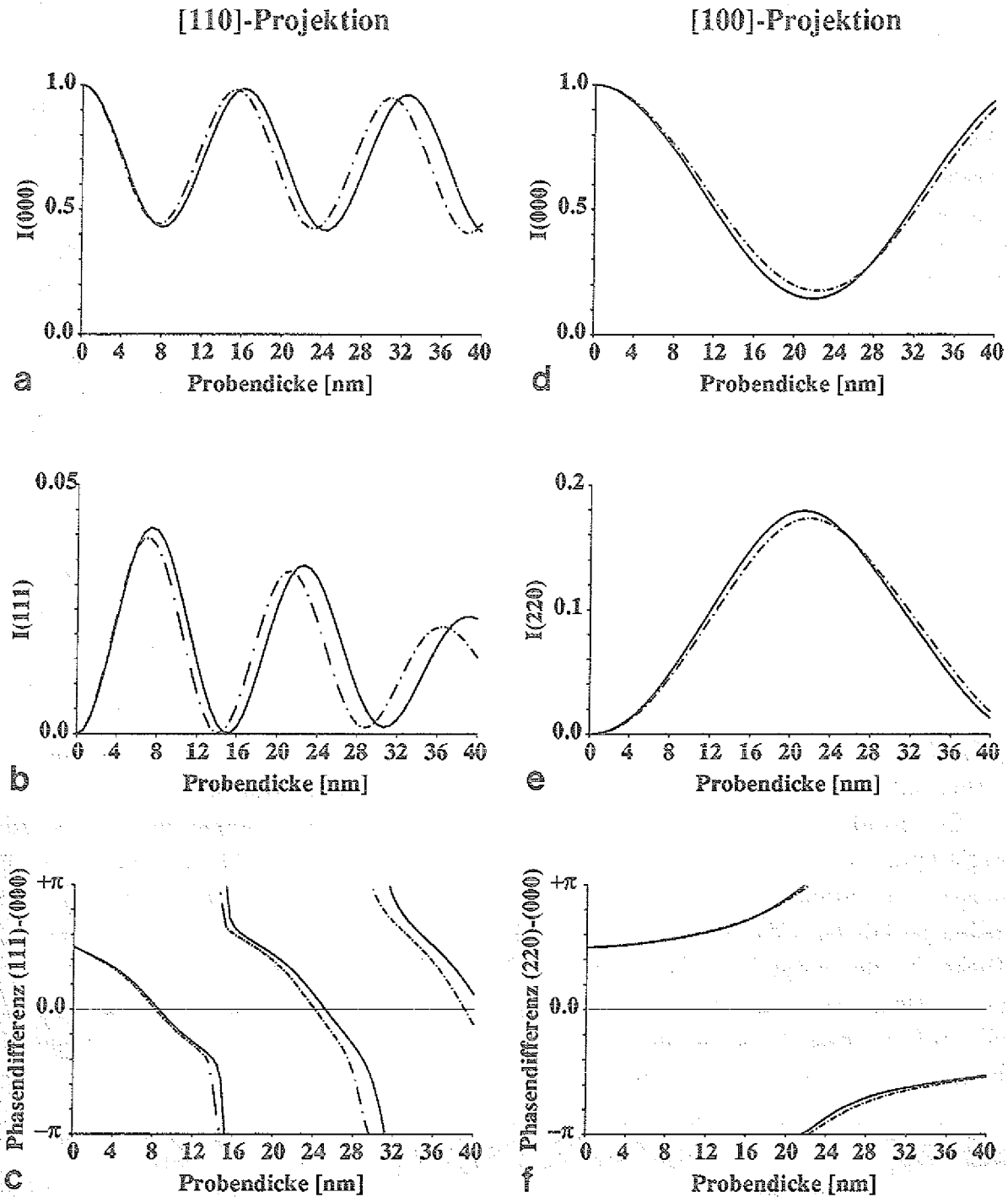


Abb. 3.3: Einfluß von tetragonalen Gitterverspannungen auf den Nullstrahl und auf die abgebeugten Strahlen erster Ordnung für reines Ge entlang der [110]-Einstrahlrichtung und für reines Si entlang der [100]-Einstrahlrichtung: (—) unverspannter Zustand, (---) maximal verspannter Zustand.

0.6 % für reines Ge. Die Variationen in der Nullstrahlintensität sind sehr klein für Si (Abb. 3.3d) und sind sogar zu vernachlässigen für Ge. Die Intensität der $\{220\}$ -Strahlen wird durch tetragonale Gitterverspannungen allgemein nur sehr wenig (Abb. 3.3e), und die relative Strahlphase $\Delta\theta(220)$ nahezu überhaupt nicht beeinflusst (Abb. 3.3f). Betrachtliche Änderungen sowohl in der Strahlintensität als auch in der relativen Strahlphase ergeben sich für den Fall tetragonalen Gitterverspannungen hingegen für die $\{400\}$ -Strahlen. Dieses Verhalten wird durch die erwähnte dritte Bloch-Welle verursacht, die einerseits stark zu den Strahlen $\vec{g} = \pm(040)$, andererseits aber nur sehr schwach zu den Strahlen $\vec{g} = \pm(004)$ beiträgt. Um den Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf den Bildkontrast zu minimieren, sollten diese Strahlen daher vom weiteren Abbildungsprozeß ausgeschlossen werden (vgl. Kap. 3.2.4).

Eine auffällige Beobachtung bestand darin, daß für Probendicken $t > \xi_0/2$ insbesondere solche gebeugten Strahlen vom Typ (hkl) am stärksten von tetragonalen Gitterverspannungen beeinflusst werden, für welche die zugehörigen Änderungen im Netzebenenabstand $|d_{hkl}|$ bei Variationen von ε_T am größten sind. Hierzu zählen die $(2\bar{2}0)$ - und (002) -Strahlen für $\vec{B} = [110]$ und die (040) - und (004) -Strahlen für $\vec{B} = [100]$ (vgl. Abb. 3.1c,f). Dahingegen üben tetragonale Gitterverspannungen nur einen geringen Einfluß auf gebeugte Strahlen aus, für welche die zugehörigen Änderungen von $|d_{hkl}|$ mit variierendem ε_T gering sind, da sich hier die Einflüsse einer Zug- bzw. Druckverspannung des Kristallgitters in zwei zueinander senkrechten Richtungen nahezu kompensieren. Letzteres gilt für die hier betrachteten Einstrahlrichtungen insbesondere für die gebeugten Strahlen erster Ordnung, d.h. für die $\{111\}$ - bzw. $\{220\}$ -Strahlen (Abb. 3.1c,f). Diese geringe Sensitivität bezüglich tetragonaler Gitterverspannungen ist insbesondere für die Bildkontrastentstehung von Bedeutung (Kap. 3.2).

Zur Kontrolle der mit dem BW-Verfahren berechneten Lösungen für $\psi(\vec{r})$ wurden begleitend auch MS-Rechnungen (Programme SC3EMS und MS1EMS) durchgeführt. Bei diesen Simulationen wurden für die in Abb. 3.1.a,b dargestellten projizierten Einheitszellen jeweils 64×64 ($\vec{B} = [110]$) bzw. 32×32 ($\vec{B} = [100]$) Strahlen einbezogen. Die Dicke Δz der Kristallscheiben ("slices") betrug dabei $a_s/\sqrt{2}$ ($\vec{B} = [110]$) bzw. $a_s/2$ ($\vec{B} = [100]$). Das Ergebnis zeigt eine über den gesamten Kompositionsbereich und für alle untersuchten Verspannungszustände perfekte Übereinstimmung der Lösungen für beide Zonenachsenorientierungen.

3.2 Bildkontrastverhalten von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen

In diesem Abschnitt wird das Bildkontrastverhalten hochaufgelöster Gitterabbildungen von ungeordneten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen in der $[110]$ - und $[100]$ -Projektion behandelt. Ein Schwerpunkt der durchgeführten Untersuchungen lag dabei auf der Bestimmung von Abbildungsbedingungen, unter denen Unterschiede im Bildkontrast zwischen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen unterschiedlicher Komposition x maximiert werden. Zu diesem Zweck wurden analytische Gleichungen für die Bildintensitätsverteilung abgeleitet, mit deren Hilfe eine effiziente Bildkontrastanalyse ermöglicht wird. Aus Bildkontrastanaly-

sen für reines Si und Ge in der [110]-Projektion ist bekannt [44], daß die Grundmorphologie des Bildkontrastes beinahe ausschließlich durch lineare Interferenzprozesse von gebeugten Strahlen erster Ordnungen bestimmt wird, wohingegen gebeugte Strahlen höherer Ordnung im wesentlichen nur zu feinen Bildkontrastdetails beitragen. Wegen ihrer fundamentalen Bedeutung wird daher im folgenden für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen zunächst die 5-Strahl-Gitterabbildung behandelt, bei der neben dem Nullstrahl nur die jeweils vier gebeugten Strahlen erster Ordnung zur Bildintensität beitragen. Im Anschluß daran wird dann der Einfluß von Strahlen höherer Ordnung sowie der Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf den Bildkontrast betrachtet.

Im Rahmen der Bildkontrastanalysen wurde zur Berechnung und graphischen Darstellung von Bild-Fourier-Koeffizienten das Programm FC1DS benutzt, wobei als Eingangsgrößen BW-Lösungen für $\psi(\vec{r})$ (vgl. Kap. 3.1) verwendet wurden. Die Berechnung und graphische Darstellung von zweidimensionalen Bildintensitätsverteilungen erfolgte mit Hilfe der Programme IM1EMS, TV3EMS und PR3EMS.

3.2.1 Bildintensitätsverteilung in 5-Strahl-Gitterabbildungen

Für den Fall der 5-Strahl-Gitterabbildung kann die Intensitätsverteilung in der Bildebene gemäß Gl. (2.34) und unter Ausnutzung der in der [110]- und [100]-Projektion vorliegenden Zentrosymmetrie der projizierten Kristallstruktur durch die Gleichung

$$I(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} J(\vec{g}) \cos(2\pi \vec{g} \cdot \vec{r}), \quad (3.4)$$

ausgedrückt werden, worin die Summation über $\vec{g}$ für die [110]-Projektion über $\vec{g}_0 = (000)$, $\vec{g}_{1a} = (\bar{1}11)$, $\vec{g}_{1b} = (1\bar{1}1)$, $\vec{g}_{2a/b} = 2\vec{g}_{1a/b}$, $\vec{g}_3 = (2\bar{2}0)$ und $\vec{g}_4 = (002)$ (vgl. Abb. 3.1c) und für die [100]-Projektion über $\vec{g}_0 = (000)$, $\vec{g}_{1a} = (022)$, $\vec{g}_{1b} = (0\bar{2}2)$, $\vec{g}_{2a/b} = 2\vec{g}_{1a/b}$, $\vec{g}_3 = (004)$ und $\vec{g}_4 = (040)$ (vgl. Abb. 3.1f) auszuführen ist. Die einzelnen Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g})$ in Gl. (3.4) sind dabei gegeben durch

(i) einen Koeffizienten nullter Ordnung, der die örtlich konstante Bildhintergrundintensität beschreibt:

$$J(\vec{g}_0) = U^2(\vec{g}_0) + 4U^2(\vec{g}_1), \quad (3.5a)$$

(ii) zwei Koeffizienten erster Ordnung, die je eine Grundmodulationen der Bildhintergrundintensität mit der Raumfrequenz $|\vec{g}_1|$ beschreiben:

$$J(\vec{g}_{1a}) = J(\vec{g}_{1b}) = 4U(\vec{g}_1)U(\vec{g}_0)E_s(\vec{g}_1, \vec{g}_0)E_t(g_1, g_0) \times \cos(\Delta\theta(g_1) + \chi(g_1)), \quad (3.5b)$$

(iii) zwei nichtlineare Koeffizienten, die je eine Obermodulation der Bildhintergrundintensität mit der doppelten Raumfrequenz der Grundmodulation beschreiben:

$$J(\vec{g}_{2a}) = J(\vec{g}_{2b}) = 2U^2(\vec{g}_1)E_s^4(\vec{g}_1, \vec{g}_0), \quad (3.5c)$$

sowie durch

(iv) zwei nichtlineare Koeffizienten, die höhere Obermodulationen der Bildhintergrundintensität beschreiben:

$$J(\vec{g}_3) = J(\vec{g}_4) = 4 U^2(\vec{g}_1) E_s(\vec{g}_{1a}, \vec{g}_{1b}). \quad (3.5d)$$

Anhand dieser vier Beiträge zur Bildintensitätsverteilung können insgesamt vier charakteristische Bildkontrasttypen unterschieden werden. Der erste bzw. zweite Bildkontrasttyp liegt vor, wenn der Bild-Fourier-Koeffizient $J(\vec{g}_1)$ im Vergleich zu $J(\vec{g}_2)$ hinreichend groß ist und ein positives bzw. negatives Vorzeichen besitzt. In diesem Fall entsteht ein Tunnelkontrast (T-Kontrast) für $J(\vec{g}_1) > 0$ ein Säulenkontrast (S-Kontrast) für $J(\vec{g}_1) < 0$. Im Fall von T-Kontrast ist die Bildintensität im Bereich zwischen projizierten Atomsäulen in bezug auf die Bildhintergrundintensität erhöht (mit lokalen Maxima an den Tunnelpositionen A (vgl. Abb. 3.1)) und an Positionen der projizierten Atomsäulen in bezug auf die Bildhintergrundintensität erniedrigt (mit lokalen Minima an den Säulenpositionen B). Im Fall von S-Kontrast gilt das entsprechend Umgekehrte. Ein dritter Bildkontrasttyp liegt vor, wenn der Bild-Fourier-Koeffizient $J(\vec{g}_1)$ der Bildgrundmodulation null wird, weil entweder die Strahlamplitude $U(\vec{g}_0)$ und/oder der Kosinusterm in Gl. (3.5b) verschwindet. In diesem Fall wird der Bildkontrast hauptsächlich durch den Beitrag des Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_2)$ (Gl. (3.5c)) bestimmt, und es entsteht ein "halbperiodischer" Bildkontrast (HP-Kontrast). Ein vierter Bildkontrasttyp liegt vor, falls die Strahlamplitude $U(\vec{g}_1)$ der abgebeugten Strahlen erster Ordnung sehr klein oder null wird, was für Probendicken nahe $t = \xi_0$ eintritt. In diesem Fall weist die Gitterabbildung einen nur noch sehr geringen oder aber überhaupt keinen Kontrast mehr auf, da alle Terme, die eine Modulation der Bildhintergrundintensität beschreiben, null werden. Derartige Abbildungen sind für eine strukturelle oder kompositionelle Analyse grundsätzlich ungeeignet, da sie keine Bilddetails mehr enthalten, die mit der projizierten Kristallstruktur korreliert werden könnten. Der Beitrag der höheren Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_3)$ und $J(\vec{g}_4)$ zur Bildintensität (Gl. (3.5d)) spielt für die Bildkontrastentstehung eine insgesamt untergeordnete Rolle, da diese Bild-Fourier-Koeffizienten aufgrund einer starken Dämpfung durch die teilkohärente Probenbeleuchtung i.a. vernachlässigbar klein sind.

3.2.2 Optimierte Abbildungsbedingungen

Entsprechend den Ausführungen in Kap. 3.2.1 ist der Bild-Fourier-Koeffizient $J(\vec{g}_1)$ der Bildgrundmodulation von fundamentaler Bedeutung für die Bildkontrastentstehung, da sein Vorzeichen, welches vom Argument des Kosinusters in Gl. (3.5b) abhängt, maßgeblich die Bildmorphologie bestimmt. Ein Vergleich der einzelnen Bild-Fourier-Koeffizienten in den Gleichungen (3.5a–d) zeigt ferner, daß ausschließlich $J(\vec{g}_1)$ sowohl von den Strahlamplituden $U(\vec{g})$ als auch von den Strahlphasen $\theta(\vec{g})$ der Strahlen nullter und erster Ordnung abhängt. Da Variationen der Komposition gemäß Kap. 3.1.1 zu Variationen sowohl von $U(\vec{g})$ als auch von $\theta(\vec{g})$ führen, ist die Empfindlichkeit von $J(\vec{g}_1)$ im Hinblick auf Kompositionsvariationen grundsätzlich besonders hoch. Desweiteren hängt

$J(\vec{g}_1)$ als einziger Bild-Fourier-Koeffizient direkt von der Wellenaberrationsfunktion $\chi(\vec{g})$ ab und kann somit durch Änderungen des Objektivlinsendefokus gezielt beeinflusst werden (Gl. (2.38)).

Entsprechend der funktionalen Abhängigkeit von $J(\vec{g}_1)$ (Gl. (3.5b)) können für Bereiche der Probendicke, in denen sich die relativen Strahlphasen $\Delta\theta(\vec{g}_1)$ für Si und Ge um $\pi/2$ oder mehr unterscheiden (Abb. 3.2c,f), ausgeprägte Bildkontrastunterschiede durch eine geeignete Abstimmung von Δf erzielt werden. Bei dieser Abstimmung können prinzipiell zwei unterschiedliche Techniken angewandt werden. Bei der ersten Technik, die bei Differenzen $\delta(\vec{g}_1) = (\Delta\theta^{\text{Ge}}(\vec{g}_1) - \Delta\theta^{\text{Si}}(\vec{g}_1))$ im Bereich zwischen $\pi/2$ und $3\pi/2$ anwendbar ist, wird Δf so abgestimmt, daß der Kosinusterm in Gl. (3.5b) für Si und Ge zwar denselben Betrag, aber ein unterschiedliches Vorzeichen annimmt ($\cos \dots \approx \pm 0.7$ für $\delta(\vec{g}_1) = \pi/2$ und $3\pi/2$, sowie $\cos \dots = \pm 1.0$ für $\delta(\vec{g}_1) = \pi$). Dies führt bei einer Kompositionsvariation von $x = 0$ bis 1 zu einem Kontrastübergang $\text{T} \rightarrow \text{S}$ bzw. $\text{S} \rightarrow \text{T}$, daß heißt z.B. zu einem Kontrastübergang von reinem S-Kontrast für Ge zu reinem T-Kontrast für Si (vgl. z.B. Abb. 3.5). Bei der zweiten Technik, die bei Werten für $\delta(\vec{g}_1)$ von $\approx \pi/2$ oder $\approx 3\pi/2$ anwendbar ist, wird Δf so abgestimmt, daß z.B. der Kosinusterm in Gl. (3.5b) den Wert 1 für Si und den Wert 0 für Ge annimmt. Daraus würde ein Kontrastübergang $\text{T} \rightarrow \text{HP}$ resultieren, d.h. ein Kontrastübergang von reinem T-Kontrast für Si zu einem HP-Kontrast für Ge. Im Hinblick auf eine quantitative Bildkontrastanalyse experimenteller Gitterabbildungen wird sich an späterer Stelle zeigen (Kap. 5.2.2), daß die erste Abstimmungstechnik, d.h. die Einstellung eines Kontrastübergangs $\text{T} \rightarrow \text{S}$ bzw. $\text{S} \rightarrow \text{T}$, der zweiten Abstimmungstechnik vorzuziehen ist. Die zu einem Kontrastübergang $\text{T} \rightarrow \text{S}$ oder $\text{S} \rightarrow \text{T}$ führenden Kombinationen von Δf und t werden nachfolgend als optimierte Defokus-Dickenkombinationen, und die Gesamtheit der optimierten Defokus-Dickenkombinationen für eine Einstrahlrichtung als optimierte Abbildungsbedingungen bezeichnet. Nachfolgend soll das Bildkontrastverhalten von 5-Strahl-Gitterabbildung unter optimierten Abbildungsbedingungen, die zu einem Kontrastübergang $\text{S} \rightarrow \text{T}$ zwischen Ge und Si in der [110]-Projektion und zu einem Kontrastübergang $\text{T} \rightarrow \text{S}$ zwischen Ge und Si in der [100]-Projektion führen, anhand von Abb. 3.4 und Abb. 3.5 erläutert werden.

[110]-Projektion

Abb. 3.4 zeigt Kurvenverläufe der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(000)$ (a), $J(111)$ (b) und $J(222)$ (c) für $x = 0, 0.5, 0.8$ und 1 als Funktion der Probendicke t für $\Delta f = -53 \text{ nm}$, die mit Hilfe der Gleichungen (3.5a–c) berechnet wurden. Anhand des Kurvenverlaufs für $J(000)$ (Abb. 3.4a) ist abzulesen, daß reines Ge bis zu einer Probendicke von $t = 10.5 \text{ nm}$ in der Abbildung dunkler erscheint als reines Si. Die größten Unterschiede in $J(000)$ für Si und Ge (ungefähr 42 %) ergeben sich bei etwa 16 nm. Jedoch zeigen die Kurvenverläufe von $J(000)$ für solche Probendicken ein nichtmonotones Verhalten mit t . Dieses führt bei bestimmten Probendicken zu Kreuzungspunkten einzelner Kurven für $J(000)$, bei denen der jeweilige Wert für $J(000)$ mehreren unterschiedlichen Kompositionen x zugeordnet werden kann. Ein Beispiel für eine solche mehrdeutige Situation liegt z.B. für $t = 15.5 \text{ nm}$

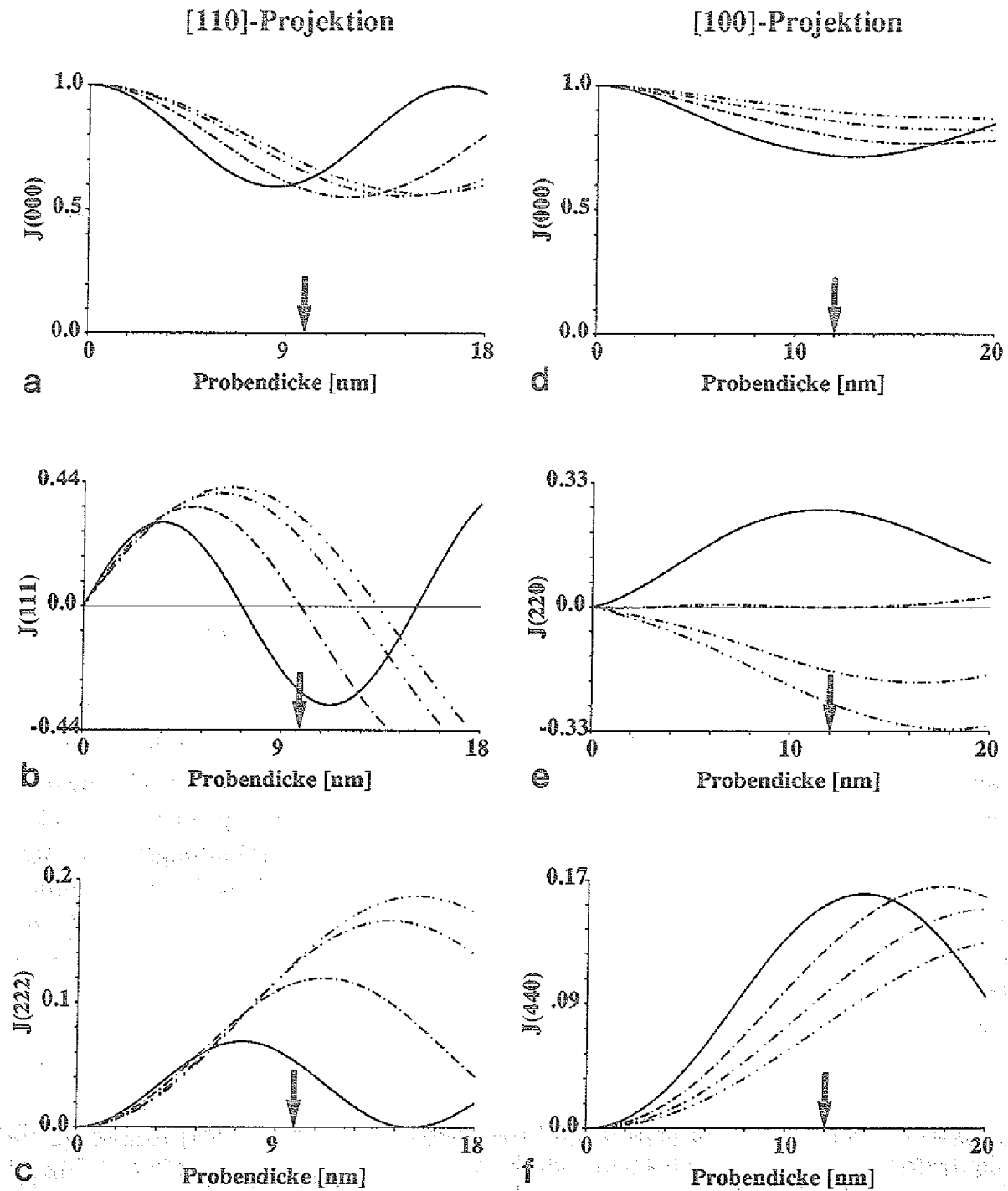


Abb. 3.4: Auftragung der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_0)$, $J(\vec{g}_1)$ und $J(\vec{g}_2)$ als Funktion der Probendicke t für Kompositionen $x = 0$ (—), 0.5 (---), 0.8 (-.-) und 1 (....) für die (a-c) [110]- und (d-e) [100]-Projektion. Die verwendeten optimierten Defokuswerte betragen $\Delta f = -53\text{nm}$ ($\vec{B} = [110]$) bzw. $\Delta f = -35\text{nm}$ ($\vec{B} = [100]$). Pfeile markieren optimierte Probendicken von $t = 9.6\text{ nm}$ ($\vec{B} = [110]$) bzw. $t = 12\text{ nm}$ ($\vec{B} = [100]$).

vor, wo die $J(000)$ -Kurve für $x = 0$ mit der $J(000)$ -Kurve für $x = 0.2$ schneidet. Aus diesem Grund ist der Dickenbereich um $t = 16 \text{ nm}$ für eine Kompositionsbestimmung anhand von Messungen der Bildhintergrundintensität grundsätzlich ungeeignet. Monotone Änderungen von $J(000)$ mit x ergeben sich nur bis zu einer Probendicke von etwa 8 nm . Jedoch beträgt in diesem Dickenbereich der maximale Unterschied in $J(000)$ für Si und Ge lediglich 18% .

Abb. 3.4b zeigt, daß für den verwendeten optimierten Defokuswert von $\Delta f = -53 \text{ nm}$ signifikante Unterschiede in den Bild-Fourier-Koeffizienten $J(111)$ für Si und Ge in einem Dickenbereich $7 \text{ nm} \leq t \leq 13 \text{ nm}$ auftreten. Die Unterschiede in den relativen Strahlphasen für verschiedene Kompositionen, kombiniert mit einem optimierten Wert für $\chi(111)$, führen unter diesen Bedingungen zu entgegengesetzten Vorzeichen des Kosinusters in Gl. (3.5b) für Si und Ge. Daraus resultiert ein reiner T-Kontrast für Si ($J(111) > 0$) und ein reiner S-Kontrast für Ge ($J(111) < 0$) im Dickenbereich von 8 bis 12 nm . Für Kompositionen $0 < x < 1$ findet hingegen ein monotoner Übergang von reinem S- zu reinem T-Kontrast, mit einem Nulldurchgang von $J(111)$ bei $x = 0.5$, statt.

Abb. 3.4c zeigt, daß sich die Bild-Fourier-Koeffizienten $J(222)$ bis zum ersten lokalen Maximum der $J(222)$ -Kurve für reines Ge bei $t = 7.5 \text{ nm}$ für unterschiedliche Kompositionen nahezu nicht unterscheiden. Signifikante Unterschiede in $J(222)$ für Si und Ge ergeben sich erst bei einer Probendicke $t \approx 15 \text{ nm}$, wo die $J(222)$ -Kurve für Ge einen Nulldurchgang, und die $J(222)$ -Kurve für Si ein lokales Maximum aufweist. Da sich jedoch bei bzw. oberhalb dieser Probendicke die $J(222)$ -Kurven für unterschiedliche x nicht monoton bezüglich t verhalten, ähnlich wie die $J(000)$ -Kurven im Bereich um $t = 16 \text{ nm}$ (s.o.), ist eine verlässliche Kompositionsbestimmung durch Messungen von $J(222)$ in diesem Dickenbereich nicht möglich. Ein Vergleich von Abb. 3.4b mit Abb. 3.4c zeigt, daß für den Kompositionsbereich $0.3 < x < 0.7$, für den die Werte für $J(111)$ im optimierten Dickenbereich $7 \text{ nm} \leq t \leq 13 \text{ nm}$ klein oder null sind, der Bildkontrast hauptsächlich durch den Beitrag der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(222)$ bestimmt wird. Dies führt zum Auftreten eines charakteristischen HP-Bildkontrastes für diesen Bereich von Legierungskompositionen.

Abb. 3.5a zeigt simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen in der $[110]$ -Projektion für $x = 0, 0.2, 0.5, 0.8$ und 1 , die durch Anwendung der Gleichungen (3.5a–d) für eine optimierte Defokus-Dickenkombination von $\Delta f = -53 \text{ nm}$ und $t = 9.6 \text{ nm}$ berechnet wurden. Die systematische Kontrastumkehr von S-Kontrast in Ge zu T-Kontrast in Si und das Auftreten eines HP-Kontrastes im Bereich $0.3 < x < 0.7$ ist deutlich zu erkennen.

[100]-Projektion

Abb. 3.4 zeigt Kurvenverläufe der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(000)$ (d), $J(220)$ (e) und $J(440)$ (f) für $x = 0, 0.5, 0.8$ und 1 als Funktion der Probendicke t für $\Delta f = -35 \text{ nm}$. Gemäß Abb. 3.4d weisen die Bild-Fourier-Koeffizient $J(000)$ für Si und Ge um mehr als 10% unterschiedliche Werte im Dickenbereich von 5 bis 17 nm auf, mit einem maximalen

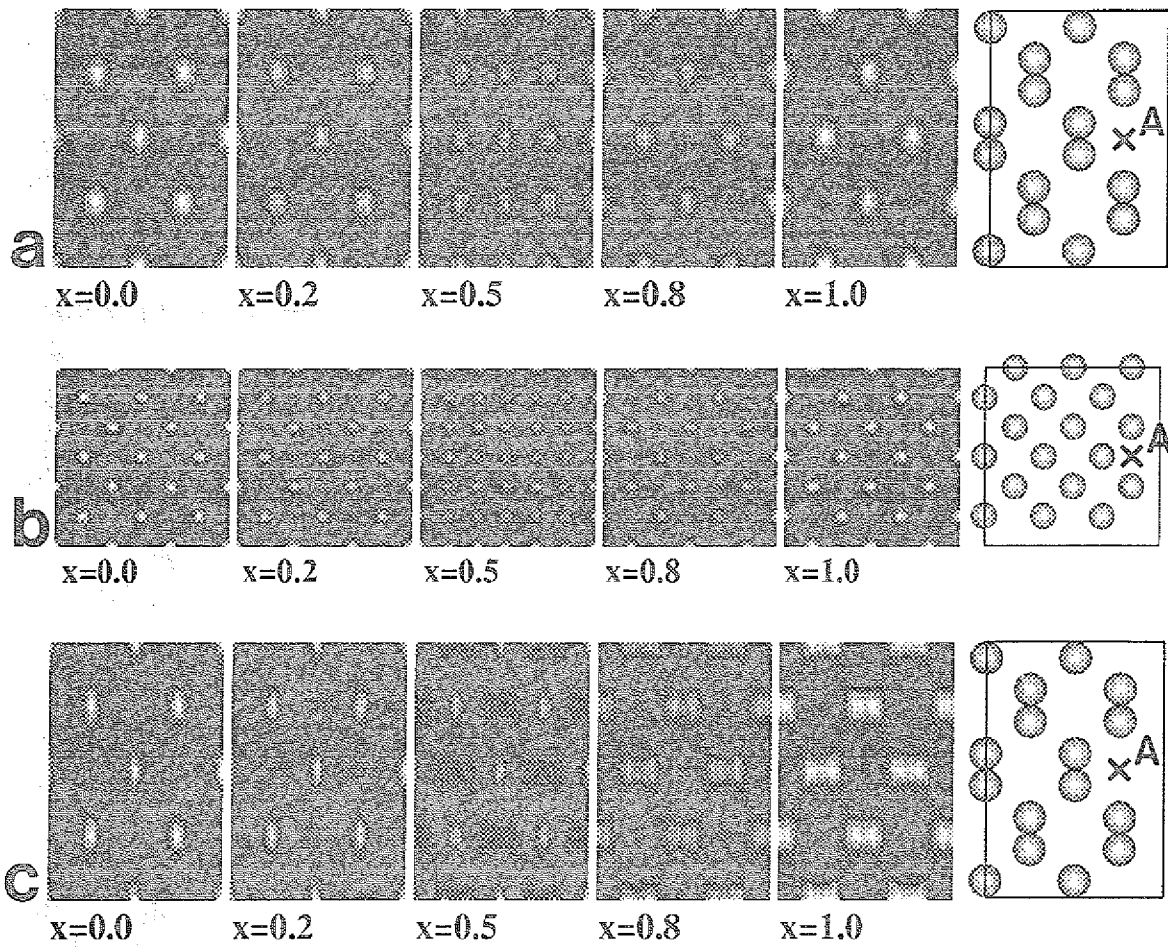


Abb. 3.5: Simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen für verschiedene Kompositionen x für (a) $\vec{B} = [110]$ ($\Delta f = -53\text{nm}$, $t = 9.6\text{nm}$) und (b) $\vec{B} = [100]$ ($\Delta f = -35\text{nm}$, $t = 12\text{nm}$), zusammen mit Projektionen der jeweiligen Kristallstruktur. (c) Der Einfluß von Strahlen höherer Ordnung ist am Beispiel einer Serie von simulierten 9-Strahl-Gitterabbildungen unter optimierten Abbildungsbedingungen für die [110]-Projektion gezeigt ($\Delta f = -48\text{nm}$, $t = 9\text{nm}$).

Unterschied von 18% bei $t = 11\text{nm}$. Für Probendicken oberhalb von 18nm treten Mehrdeutigkeiten bei der Zuordnung zwischen $J(000)$ und x auf, ähnlich wie bereits im Fall der [110]-Projektion diskutiert. Bis zu einer Dicke von $t = 20\text{nm}$ erscheint Ge in der Gitterabbildung dunkler als Si.

Abb. 3.4e zeigt, daß in der hier betrachteten [100]-Projektion eine ausgeprägte Kontrastumkehr zwischen Si und Ge über den gesamten Dickenbereich bis zu 20nm auftritt. Innerhalb dieses großen Dickenbereichs verhalten sich die Bild-Fourier-Koeffizienten $J(220)$ über den gesamten Kompositionsbereich $0 \leq x \leq 1$ streng monoton bezüglich x . Ein erwähnenswertes Verhalten zeigt dabei insbesondere der Bild-Fourier-Koeffizient $J(220)$ für $x = 0.5$, der bis zu einer Dicke von $t \approx 18\text{nm}$ einen nahezu verschwinden-

den Wert aufweist. Der Grund für dieses Verhalten liegt darin, daß für $x = 0.5$ die relative Strahlphase $|\Delta\theta(220)|$ etwa $\pi/2$ (Abb. 3.2f) und die Wellenaberrationsfunktion $\chi(220)$ etwa null beträgt, was gemäß Gl. (3.5b) zu einem verschwindenden Wert für den Kosinusterm und damit letztlich für $J(220)$ führt.

Abb. 3.4e zeigt, daß der Bild-Fourier-Koeffizient $J(440)$ ein monotonen Verhalten bezüglich x für Probendicken bis zu $t = 14\text{ nm}$ aufweist. Jedoch sind die absoluten Änderungen von $J(440)$ um etwa eine Größenordnung geringer als die entsprechenden Änderungen von $J(220)$. Ähnlich wie für die $[110]$ -Projektion, treten auch für die $[100]$ -Projektion unter optimierten Abbildungsbedingungen HP-Bildkontraste für den mittleren Kompositionsbereich $0.3 < x < 0.7$ auf. In diesem Kompositionsbereich sind die entsprechenden Werte für $J(220)$ klein oder null, und der Bildkontrast wird durch den Beitrag der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(440)$ bestimmt.

Abb. 3.5b zeigt eine Serie von simulierten 5-Strahl-Gitterabbildungen für $x = 0, 0.2, 0.5, 0.8$ und 1 in der $[100]$ -Projektion. Als optimierte Defokus-Dickenwerte wurden für diese Simulationen $\Delta f = -35\text{ nm}$ und $t = 12\text{ nm}$ gewählt. Die einzelnen Kontrastmuster lassen deutlich die systematische Kontrastumkehr von reinem S-Kontrast für Si zu reinem T-Kontrast für Ge, zusammen mit dem Auftreten eines charakteristischen HP-Kontrast für den mittleren Kompositionsbereich, erkennen.

Kristallprojektion	Kontrastübergang Ge $\rightarrow$ Si	Defokusbereich [nm]	Dickenbereich [nm]
[110]	T $\rightarrow$ S	0 ... 20	6 ... 12
	S $\rightarrow$ T	-60 ... -40	6 ... 12
[100]	T $\rightarrow$ S	-38 ... -30	0 ... 18
	S $\rightarrow$ T	-60 ... -50	0 ... 18

Tab. 3.1: Optimierte Bereiche für Defokus und Probendicke unter 5-Strahl-Abbildungsbedingungen (T Tunnelkontrast, S Säulenkontrast).

Zusätzlich zu den in Abb. 3.4 und 3.5 verwendeten optimierten Defokus-Dickenkombinationen wurden weitere optimierte Kombinationen von Δf und t durch eine numerische Analyse von Gl. (3.5b) ermittelt. Die Variationen von Δf wurden dabei für die $[110]$ -Projektion auf den Bereiche $-110\text{ nm} < \Delta f < 60\text{ nm}$ und für die $[100]$ -Projektion auf den Bereich $-80\text{ nm} < \Delta f < -10\text{ nm}$ begrenzt. Für Defokuswerte außerhalb dieser Bereiche wirkt sich der Dämpfungseffekt der teilkohärenten Proben-

beleuchtung bereits sehr stark auf die Koeffizienten $J(\vec{g}_1)$ aus und führt zu Abbildungen mit nur sehr geringem Bildkontrast, die für eine quantitative Bildanalyse ungeeignet sind. Eine Zusammenfassung von optimierten Defokus-Dickenkombinationen für 5-Strahl-Gitterabbildungen in der [110]- und [100]-Projektion, unter denen eine systematische Bildkontrastumkehr für Kompositionsvariationen von $x = 0$ bis 1 auftritt, ist in Tab. 3.1 gegeben. Die angegebenen Dickenbereiche beziehen sich dabei auf Fälle, für die sich die funktionale Beziehung zwischen $J(\vec{g}_1)$ und x in dem angegebenen Defokusbereich monoton verhält.

3.2.3 Kontrastbeitrag von Strahlen höherer Ordnung

Abgebeugte Strahlen höherer Ordnung tragen zum Bildkontrast i.a. durch feine, höherfrequente Bilddetails bei, was einer gesteigerten räumlichen Auflösung der Abbildung im Vergleich zum 5-Strahl-Fall entspricht. Detaillierte Bildkontrastanalysen für die Elementhalbleiter Si und Ge in der [110] Projektion haben gezeigt [44], daß "echte" Strukturabbildungen, in denen die Projektion der jeweils engbenachbarten Atomsäulen mit einem Abstand von 0.136 nm in Si korrekt aufgelöst wird (vgl. Abb. 3.1a), unter speziellen Abbildungsbedingungen durch die Einbeziehung von Strahlen aus mehreren höheren Beugungsordnungen erzielt werden können. Anhand von Bildsimulationen konnte auch im Rahmen dieser Arbeit gezeigt werden, daß solche "Hantelabbildungen" ebenfalls für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen über den gesamten Kompositionsbereich erzielt werden können. Dies ist auf der Basis des sehr ähnlichen Elektronenstreuverhaltens für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen unterschiedlicher Komposition direkt einsichtig (Kap. 3.1). Ein wichtiges Resultat dieser Bildsimulationen und begleitend dazu durchgeführter Bildkontrastanalysen besteht darin, daß in solchen "Hantelabbildungen" von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen ein systematischer Zusammenhang zwischen Bildkontrast und Komposition entweder völlig fehlt oder aber auf einen nur extrem kleinen Bereiche von Defokus-Dickenkombinationen beschränkt ist. Im folgenden soll deshalb ein Fall beschrieben werden, für den eine im Vergleich zur 5-Strahl-Gitterabbildung gesteigerte räumliche Auflösung durch die Einbeziehung von Strahlen bis zu $\vec{g} = \{220\}$ erzielt wird, für den aber trotzdem ein systematischer Zusammenhang zwischen Bildkontrast und Komposition erhalten bleibt. Die Bildintensitätsverteilung für diesen 9-Strahl-Fall erhält man aus der Erweiterung des 5-Strahl-Falls durch Einbeziehung von insgesamt neun zusätzlichen Fourier-Beiträgen (unter Vernachlässigung der kinematisch verbotenen und sehr schwachen $\{200\}$ -Strahlen mit Raumfrequenzen $\vec{g} \in \{(000), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (220), (4\bar{4}0), (1\bar{1}3), (1\bar{1}\bar{3}), (3\bar{3}1), (3\bar{3}\bar{1})\}$ (vgl. Abb. 3.1c). Der Großteil dieser Beiträge entsteht durch nichtlineare Strahlinterferenzen, weshalb die entsprechenden Bild-Fourier-Koeffizienten vernachlässigbar klein sind. Zu den relevanten Fourier-Beiträge gehören

$$J'(000) = 2 U^2(220), \quad (3.6a)$$

$$J'(\bar{1}11) = J'(1\bar{1}1) = 4 U(220) U(111) E_t(2\bar{2}0, \bar{1}11) E_s(2\bar{2}0, \bar{1}11) \times \cos(\theta(220) - \theta(111) + \chi(220) - \chi(111)), \quad (3.6b)$$

$$J'(2\bar{2}0) = 4 U(220) U(000) E_t(220, 000) E_s(220, 000) \times \cos(\Delta\theta(220) + \chi(220)). \quad (3.6c)$$

Der defokusunabhängige Bild-Fourier-Koeffizient $J'(000)$ (Gl. (3.6a)) trägt zur Bildhintergrundintensität bei und führt allgemein zu einer Reduzierung des Unterschieds in der Bildhintergrundintensität zwischen Si und Ge im Vergleich zum 5-Strahl-Fall. Der Grund hierfür ist, daß die Dickenoszillationen der $\{220\}$ -Strahlintensitäten – wie im Fall der $\{111\}$ -Strahlintensitäten – ebenfalls in Antiphase zum Nullstrahl erfolgen (vgl. Abb. 3.2b). Die nichtlinearen Bild-Fourier-Koeffizienten $J'(\bar{1}11)$ und $J'(1\bar{1}1)$ (Gl. (3.6b)) tragen zusätzlich zu den Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\bar{1}11)$ und $J(1\bar{1}1)$ (Gl. (3.5b)) zur Grundmodulation der Bildhintergrundintensität bei. Der lineare Bild-Fourier-Koeffizient $J'(2\bar{2}0)$ beschreibt eine eindimensionale sinusförmige Modulation der Bildhintergrundintensität, die in 5-Strahl-Gitterabbildungen nicht zu beobachten ist.

Ausgehend von den optimierten Defokus-Dickenkombinationen für den 5-Strahl-Fall (Tab. 3.1) ist es für den betrachteten 9-Strahl-Fall grundsätzlich erforderlich, optimierte Werte für Δf neu zu bestimmen, für die der Unterschied in $(J(\bar{1}11) + J'(\bar{1}11))$ zwischen Si und Ge maximiert wird. Dies liegt an einem unterschiedlichen Verhalten der $\{220\}$ -Strahlphase verglichen mit den $\{111\}$ -Strahlphasen sowie einer unterschiedlichen Defokusabhängigkeit der Kosinusterme in Gl. (3.5b) und Gl. (3.6b). Eine Neubestimmung von Δf ist jedoch nur für Defokuswerte $\Delta f \leq -40$ nm erforderlich, da für $\Delta f > -40$ nm die Koeffizienten $J'(\bar{1}11)$ und $J'(1\bar{1}1)$ bereits stark durch den Einfluß der teilkohärenten Probenbeleuchtung gedämpft werden. Eine Auswertung des analytischen Ausdrucks für $(J(\bar{1}11) + J'(\bar{1}11))$ ergab, daß für $\Delta f \leq -40$ nm die optimierten Defokuswerte, die für die 5-Strahl-Gitterabbildung gelten (Tab. 3.1), für die 9-Strahl-Gitterabbildung um 5 bis 8 nm in Richtung Überfokus korrigiert werden müssen.

Abb. 3.5c zeigt eine Serie von simulierten 9-Strahl-Abbildungen unter optimierten Abbildungsbedingungen ($\Delta f = -48$ nm, $t = 9.0$ nm) für $x = 0, 0.2, 0.5, 0.8$ und 1. Obgleich die gekreuzten $\{111\}$ -Grundmodulationen auch hier die Grundmorphologie der Abbildung bestimmen, ist der Einfluß des linearen $J'(2\bar{2}0)$ -Beitrags anhand der strichförmigen Bildmodulation an hellen Säulenpositionen für Ge und an hellen Tunnelpositionen für Si deutlich zu erkennen.

Im Vergleich zur $[110]$ -Projektion werden in der $[100]$ -Projektion einzelne Atomsäulen bereits unter 5-Strahl-Abbildungsbedingungen aufgelöst (vgl. Abb. 3.5b). Ein zusätzlicher Beitrag von gebeugten Strahlen höherer Ordnung, wie z.B. der $\{400\}$ -Strahlen, führt in der $[100]$ -Projektion daher weder zu einem Gewinn an struktureller noch an kompositioneller Information. Auch wird in dieser Kristallprojektion der Kontrastbeitrag gebeugter Strahlen höherer Ordnung bereits stark durch den Dämpfungseffekt der teilkohärenten Probenbeleuchtung eingeschränkt. Aus diesen Gründen ist es für die $[100]$ -Kristallprojektion nicht sinnvoll, neben dem Nullstrahl mehr als die vier gebeugten Strahlen erster Ordnung zur Abbildung zuzulassen.

3.2.4 Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen

Tetragonale Gitterverspannungen verursachen Betragsänderungen im reziproken Gittervektoren von bis zu 1.7 % für $\vec{g} = \{111\}$ in der $[110]$ -Projektion und von bis zu 0.6 % für $\vec{g} = \{220\}$ in der $[100]$ -Projektion. Da die Wellenaberrationsfunktion $\chi(g)$ stark von g abhängt (Gl. (2.38)), werden Bildkontrastbeiträge, die eine Abhängigkeit von $\chi(g)$ aufweisen, i.a. bereits durch kleine Variationen von g merklich beeinflusst. Jedoch erweist sich $\chi(g)$ als nahezu unempfindlich gegen Variationen von g für Defokuswerte, für welche die entsprechende Ableitung $\partial\chi(g)/\partial g$ klein ist. Solche Bedingungen liegen für die $\{111\}$ -Strahlen und die $\{220\}$ -Strahlen für Defokusbereiche um den Scherzer-Defokus bei etwa $\Delta f = -50 \text{ nm}$ vor. Diese Vorhersage eines geringen Einflusses von tetragonalen Gitterverspannungen auf den Bildkontrast für solche Defokuswerte wurde durch quantitative Bildkontrastanalysen vollauf bestätigt. Danach ist für solche Defokuswerte der Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf den Bildkontrast von 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen in der $[110]$ -Projektion nur sehr gering, und der Einfluß auf 5-Strahl-Gitterabbildungen in der $[100]$ -Projektion ist für $t < 18 \text{ nm}$ sogar völlig zu vernachlässigen. Um diese geringe Empfindlichkeit des Bildkontrastes bezüglich tetragonaler Gitterverspannungen zu veranschaulichen, zeigt Abb. 3.6 Kurvenverläufe für $J(111)$ und $J(220)$ als Funktion der Probendicke t für die Extremfälle von unverspanntem bzw. maximal verspanntem Ge in der $[110]$ -Projektion (a) und von unverspanntem bzw. maximal verspanntem Si in der $[100]$ -Projektion (b) für $\Delta f = -55 \text{ nm}$. Dieser Defokuswert liegt in einem Bereich von optimierten Defokuswerten für beide Zonenachsen (Tab. 3.1) und hat den zusätzlichen Vorteil, daß dabei die Empfindlichkeit des Bildkontrastes bezüglich tetragonaler Gitterverspannungen minimiert wird. Defokuswerte um $\Delta f = -55 \text{ nm}$ sind deshalb für die Abbildung von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen optimal geeignet (vgl. Kap. 4).

Im Vergleich zu den Bild-Fourier-Koeffizienten erster Ordnung (Abb. 3.6) zeigen Bild-Fourier-Koeffizienten höherer Ordnung, wie z.B. $J'(\bar{1}11)$ und $J'(\bar{1}\bar{1}1)$ für den Fall der 9-Strahl-Gitterabbildung in der $[110]$ -Projektion (Kap. 3.2.3), eine höhere Empfindlichkeit bezüglich tetragonaler Gitterverspannungen. Da jedoch der Anteil von $J'(\bar{1}11)$ an $(J(\bar{1}11) + J'(\bar{1}11))$ weniger als 30% beträgt, wird die Empfindlichkeit des Bild-Fourier-Koeffizienten $(J(\bar{1}11) + J'(\bar{1}11))$ bezüglich tetragonaler Gitterverspannungen überwiegend durch den Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\bar{1}11)$ bestimmt, der seinerseits nur eine geringe Empfindlichkeit bezüglich tetragonaler Gitterverspannungen zeigt.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß tetragonale Gitterverspannungen den Bildkontrast für Defokuswerte nahe dem Scherzer-Defokus entweder nur sehr wenig oder überhaupt nicht beeinflussen. In allen Fällen belassen tetragonale Gitterverspannungen die Grundmorphologie der Abbildung unverändert, und zwar über den gesamten Bereich experimentell möglicher Verspannungszustände des Kristallgitters. Die durchgeführten Berechnungen zeigen insbesondere, daß die Bild-Fourier-Koeffizienten von 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen, wie z.B. die in Abb. 3.6 aufgetragenen Bild-Fourier-Koeffizienten $J(111)$ und $J(220)$, ein allgemein sehr ähnliches Verhalten bezüglich x

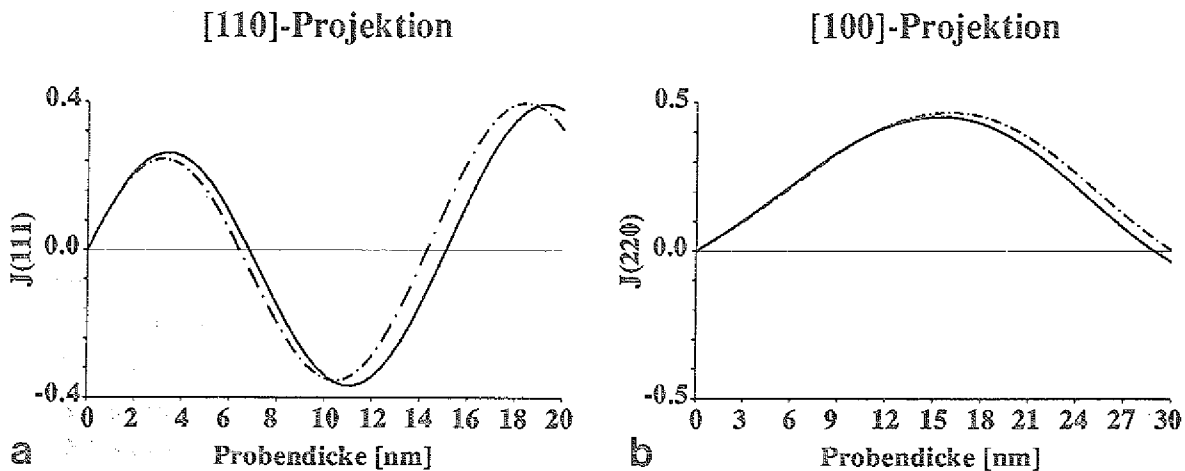


Abb. 3.6: Einfluß von tetragonalen Gitterverspannungen auf die linearen Bild-Fourier-Koeffizienten $J(111)$ (a) und $J(220)$ (b) von 5-Strahl-Gitterabbildungen in der [110]- bzw. [100]-Projektion. Gezeigt sind Extremfälle für unverspanntes (—) und maximal verspanntes (- - -) Ge (a) bzw. Si (b) für jeweils $\Delta f = -55$ nm.

und t für den unverspannten und den verspannten Fall aufweisen. Ein Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen ist für diese Bild-Fourier-Koeffizienten nur bei größeren Probendicken zu beobachten (Abb. 3.6).

4 Bildsimulationen für Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen

Als Grundlage für die quantitative Charakterisierung von Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen mit Hilfe hochaufgelöster Gitterabbildungen wurde in Kap. 3 das Bildkontrastverhalten von ungeordneten Si_xGe_{1-x}-Volumenlegierungen^a als Funktion von x und von tetragonalen Gitterverspannungen detailliert untersucht. Hierbei wurden optimierte Abbildungsbedingungen bestimmt, unter denen die Unterschiede im Bildkontrast für Legierungen unterschiedlicher Komposition maximiert werden. Bei der Gitterabbildung von inneren Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen ist es jedoch nicht sichergestellt, daß der Bildkontrast von einzelnen Legierungsschichten auch im Bereich von Grenzflächen einem Bildkontrast entspricht, der sich unter identischen Abbildungsbedingungen für entsprechende Volumenlegierungen ergeben würde. Solche Bildkontrastunterschiede zwischen Si_xGe_{1-x}-Volumenlegierungen und Si_xGe_{1-x}-Legierungsschichten im Bereich von Grenzflächen können grundsätzlich aufgrund der nichtperiodischen Natur von inneren Grenzflächen zwischen Materialien unterschiedlicher Kristallstruktur und/oder chemischer Zusammensetzung entstehen. Diese nichtperiodische Natur führt zu zusätzlichen Fourier-Anteilen des Kristallpotentials, die für entsprechende Volumenkristalle nicht auftreten und die zu nichtlokalen Bildkontrasteffekten, z.B. durch Fresnel-Beugung [46,47], führen können. Da solche nichtlokalen Effekte i.a. auf komplizierte Weise mit der jeweiligen Grenzflächenstruktur und mit den gewählten Abbildungsbedingungen korreliert sind, ist für eine verlässliche Bildinterpretation ein Studium des Bildkontrastverhaltens für entsprechende Modellgrenzflächen mit Hilfe von Bildsimulationen erforderlich.

In diesem Kapitel werden Bildkontrastsimulationen für zahlreiche Typen von Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächenstrukturen in der [110]- und in der [100]-Projektion präsentiert: abrupte Grenzflächen, diffuse Grenzflächen mit räumlich unterschiedlich ausgedehnten Si-Ge-Durchmischungszonen, Grenzflächen mit kompositionellen Stufen und geordneten Si-Ge-Phasen, sowie sehr engbenachbarte Grenzflächen in kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergittern. Die hier betrachteten Grenzflächentypen beschränken sich ausschließlich auf kohärente Grenzflächenstrukturen, für die eine vollständigen Anpassung der lateralen Gitterparameter $a_x = a_y$ in der (x, y) -Ebene der Grenzfläche vorliegt.

Zur Berechnung des Kristallpotentials (Gl. (2.10)) wurden sehr große Einheitszellen, sog. Superzellen, verwendet. Die Verwendung solcher Superzellen garantiert die zur Berechnung der Austrittswellenfunktion erforderliche periodische Fortsetzbarkeit der Grenzflächenstruktur im Orts- und Fourier-Raum. Im Fall diffuser Grenzflächen wurde zur Berechnung des Kristallpotentials im Bereich der Si-Ge-Durchmischungszonen die virtuelle Kristallapproximation benutzt (Kap. 3.1). Der Abstand $a_z/4$ benachbarter Atomlagen gleicher Komposition senkrecht zur Grenzflächenebene wurde mittels Gl. (3.2) berechnet. Für benachbarte Atomlagen unterschiedlicher Komposition $x_1 \neq x_2$ wurde $a_z/4$ jeweils aus dem arithmetischen Mittelwert von $a_z(x_1)/4$ und $a_z(x_2)/4$ bestimmt.

^aIm weiteren wird die Wortergänzung "Volumen" verwendet, wenn sich die betrachtete Struktur homogen in alle drei Raumrichtungen fortsetzt.

Der laterale Gitterparameter a_s wurde im Bereich zwischen a^{Si} und a^{Ge} variiert, um dadurch den Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf das Bildkontrastverhalten zu untersuchen. Bildsimulationen wurden in der Regel für isolierte Einzelgrenzflächen durchgeführt, für die der Abstand zu benachbarten Grenzflächen 32 Atomlagen betrug. Die daraus resultierende Abmessung der Superzellen in $[001]$ -Richtung stellte eine obere Grenze dar, um die zur Berechnung von $\psi(\vec{r})$ maximal zulässige Anzahl von Potentialkoeffizienten (Strahlen) nicht zu überschreiten ($N_{\text{max}} = 1024$). Neben der Bildkontrastanalyse isolierter Einzelgrenzflächen erfordert eine korrekte Bildinterpretation für den Fall kurzperiodischer Si_mGe_n -Übergitter die Bestimmung eines unteren Grenzflächenabstandes, bei dem die Streubeiträge der Einzelgrenzflächen untereinander zu interferieren beginnen. Zu diesem Zweck wurde das Bildkontrastverhalten kurzperiodischer Si_mGe_n -Übergitter als Funktion von m und n untersucht. Austrittswellenfunktionen für die unterschiedlichen Grenzflächenstrukturen wurden mit Hilfe des MS-Verfahrens berechnet (Programme SC3EMS und MS1EMS), und aus den resultierenden Fourier-Spektren von $\psi(\vec{r})$ wurde unter Anwendung von Gl. (2.34) die Intensitätsverteilung in der Bildebene bestimmt (Programme IM1EMS, TV3EMS und PR3EMS).

Bei den hier betrachteten Gitterabbildungen von Grenzflächenstrukturen entlang niedrig indizierter Zonenachsen kann ein Bildkontrastverhalten, was dem von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen entsprechen würde, zumindest für Bildbereiche angenommen werden, die einige zehntel Nanometer vom eigentlichen Grenzflächenbereich entfernt liegen. Der Grund hierfür ist ein räumlich stark lokalisierter Elektronenstreuprozess, bei dem die einzelnen Atomsäulen eine strahlführende Wirkung auf die einfallenden Elektronen ausüben [48,49], und eine im Ortsraum stark lokalisierte Impulsantwort des Mikroskops^a für Defokuswerte innerhalb des nutzbaren Bereichs von etwa -120 nm bis $+20\text{ nm}$. Für eine effiziente Bildkontrastanalyse von Grenzflächenstrukturen ist es daher sinnvoll, die Bildsimulationen auf Abbildungsbedingungen zu beschränken, unter denen bereits für die entsprechenden Volumenlegierungen ausgeprägte Unterschiede im Bildkontrast für unterschiedliche Kompositionen auftreten. Aus diesem Grund sind die hier für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen gewählten Abbildungsbedingungen auf die Bereiche optimierter Abbildungsbedingungen für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen (Kap. 3.2.2) beschränkt.

Begleitend zum MS-Verfahren wurde für einige ausgewählte $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen auch das BW-Verfahren zur Berechnung der Austrittswellenfunktion eingesetzt (Programme BU1EMS und BZ2EMS). Ein Vergleich der BW-Lösungen mit MS-Lösungen für $\psi(\vec{r})$ ergab jedoch, daß für die ausgewählten Grenzflächenstrukturen eine zufriedenstellende Konvergenz der BW-Lösungen nicht erzielt werden konnte. Eine hinreichende Konvergenz der Lösungen wurde selbst dann nicht erzielt, wenn die Einheitszellen nur insgesamt 16 Si- und Ge-Atome enthielten und bis zu 500 Strahlen in die

^a Die Impuls- oder Stoßantwort des Mikroskops $h(\vec{r})$ ergibt sich aus der inversen Fourier-Transformierten der Transferfunktion $\tau(\vec{g}, \vec{h})$ (Gl. (2.36)). Formal entspricht $h(\vec{r})$ dem Ausgangssignal des elektronenoptischen Übertragungssystems, wenn als Eingangssignal ein Deltastöß $\delta(\vec{r})$ vorliegt. Die Ausdehnung von $h(\vec{r})$ im Ortsraum repräsentiert allgemein ein Maß für die örtliche "Ausschmierung" des Eingangssignals, in diesem Fall also der Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$, als Folge des Übertragungsvorgangs.

BW-Rechnungen einbezogen wurden. Obgleich für diesen Fall die Strahlintensitäten und Strahlphasen ein qualitativ ähnliches Verhalten mit der Probendicke zeigten wie entsprechende MS-Lösungen, so waren die resultierenden Extinktionslängen bei den BW-Lösungen systematisch zu groß. Solche charakteristischen Unterschiede zwischen BW- und MS-Lösungen für den Fall komplexer Einheitszellen wurden auch in einer Vergleichsstudie zu diesen beiden Berechnungsverfahren beobachtet [22].

4.1 Abrupte Grenzflächen

Für die Bildsimulation abrupter Si/Ge-Grenzflächen, im weiteren als Typ (S) bezeichnet, wurde ein abrupter kompositioneller Übergang von reinem Si zu reinem Ge innerhalb einer Atomlage angenommen (Tab. 4.1). Für (S)-Grenzflächen in der [110]-Projektion muß zusätzlich zwischen zwei möglichen Grenzflächen-Untertypen unterschieden werden: beim Typ (S-a) verläuft die Grenzfläche zwischen weitbenachbarten Atomsäulen aus Si- und Ge-Atomen (Abb. 4.1a), wohingegen beim Typ (S-b) die Grenzfläche zwischen engbenachbarten Atomsäulen aus Si- und Ge-Atomen verläuft (Abb. 4.1f). Für (S)-Grenzflächen in der [100]-Projektion ist eine solche Unterscheidung hingegen nicht erforderlich (Abb. 4.2a).

Atomlage	Grenzflächentyp			
	S	D1	D2	D3
1	1	1	1	0.9
2	1	1	1	0.8
3	1	1	1	0.7
4	1	1	0.75	0.6
5	1	0.5	0.5	0.5
6	0	0.5	0.5	0.5
7	0	0	0.25	0.4
8	0	0	0	0.3
9	0	0	0	0.2
10	0	0	0	0.1

Tab. 4.1: Kompositionen x der einzelnen Atomlagen auf (004)-Gitterebenen für abrupte (S) und diffuse (D1–D3) $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächentypen.

Abb. 4.1 und 4.2 zeigen simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen^a von abrupten Si/Ge-Grenzflächen für die [110]-Projektion (Abb. 4.1b für Typ (S-a), Abb. 4.1g für Typ (S-b)) und für die [100]-Projektion (Abb. 4.2b), die für $t = 9 \text{ nm}$ und $\Delta f = -55 \text{ nm}$ (Abb. 4.1) sowie für $t = 10 \text{ nm}$ und $\Delta f = -58 \text{ nm}$ (Abb. 4.2) berechnet wurden. Der

^a Die Bezeichnung M -Strahl-Gitterabbildung ($M = 5, 9$) wird im weiteren in Anlehnung an die Bezeichnung M -Strahl-Gitterabbildung im Fall von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen verwendet. Gemeint ist damit die Verwendung einer Objektivblende mit einem Durchmesser, wie er für M -Strahl-Gitterabbildungen von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierung gewählt wird. Da jedoch das Fourier-Spektrum von $\psi(\vec{r})$ im Fall von Grenzflächenstrukturen zusätzliche niederfrequente Komponenten enthält, passieren die Objektivblende bei der M -Strahl-Gitterabbildung von Grenzflächen real jeweils mehr als M Strahlen.

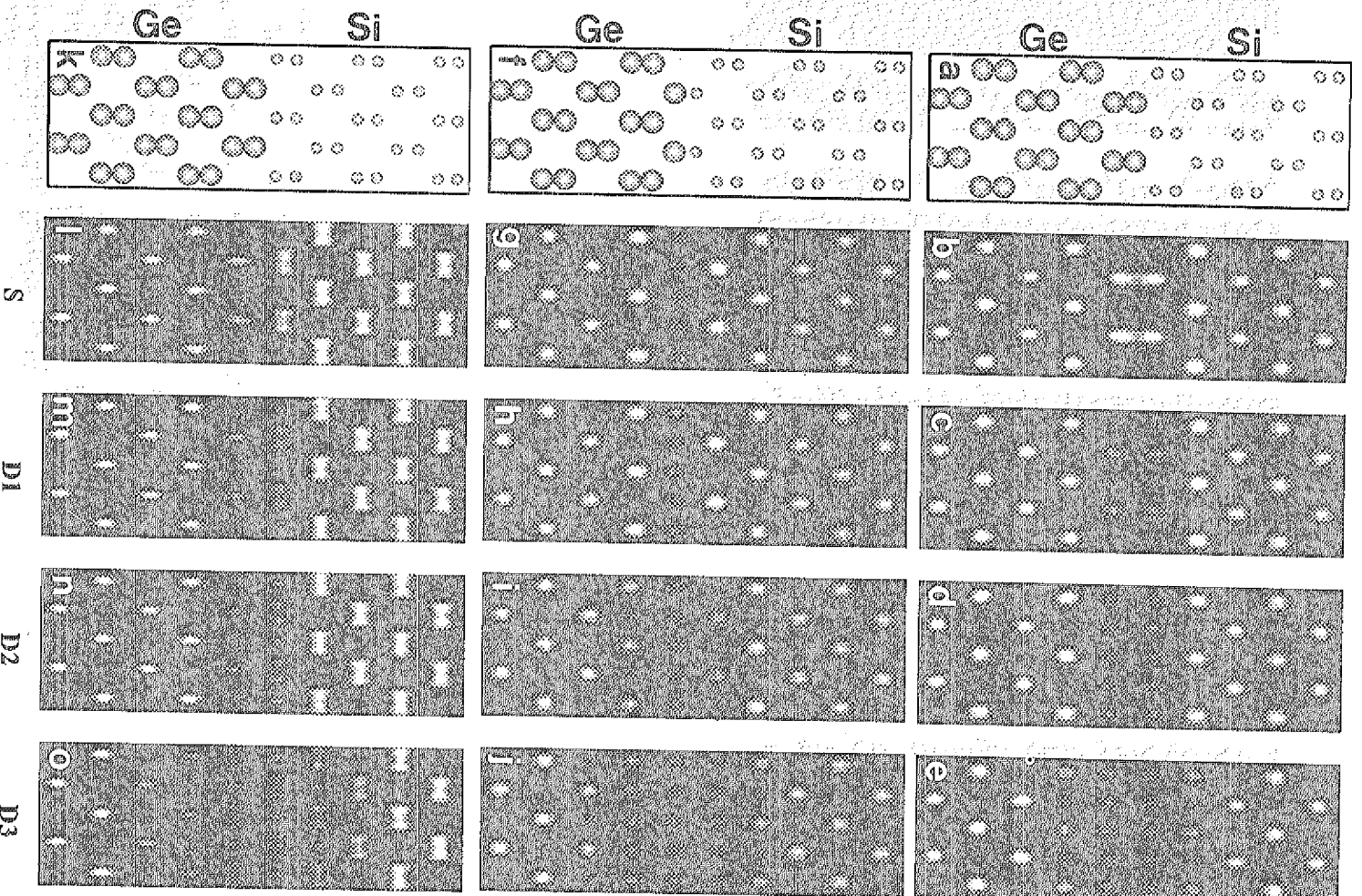


Abb. 4.1 : (b-e, g-j) Simulierte Gitterabbildungen unterschiedlicher Si/Si₂Ge_{1-x}-Grenzflächentypen in der [110]-Projektion. (a, f, k) Projizierte atomare Grenzflächenstruktur für abrupte Grenzflächen vom Typ (S-a), (S-b) und (S-a). (b, g) 5-Strahl-Gitterabbildungen abrupter Grenzflächen vom Typ (S-a) und (S-b). (l) 9-Strahl-Gitterabbildungen einer abrupten Grenzfläche vom Typ (S-a). (c-e, h-j) 5-Strahl-Gitterabbildungen diffuser Grenzflächen vom Typ (D1-a), (D2-a) und (D3-a) bzw. (D1-b), (D2-b) und (D3-b) mit jeweils unterschiedlich breiten Si-Ge-Durchmischungszone(n). (m-o) 9-Strahl-Gitterabbildungen diffuser Grenzflächen vom Typ (D1-a), (D2-a) und (D3-a).

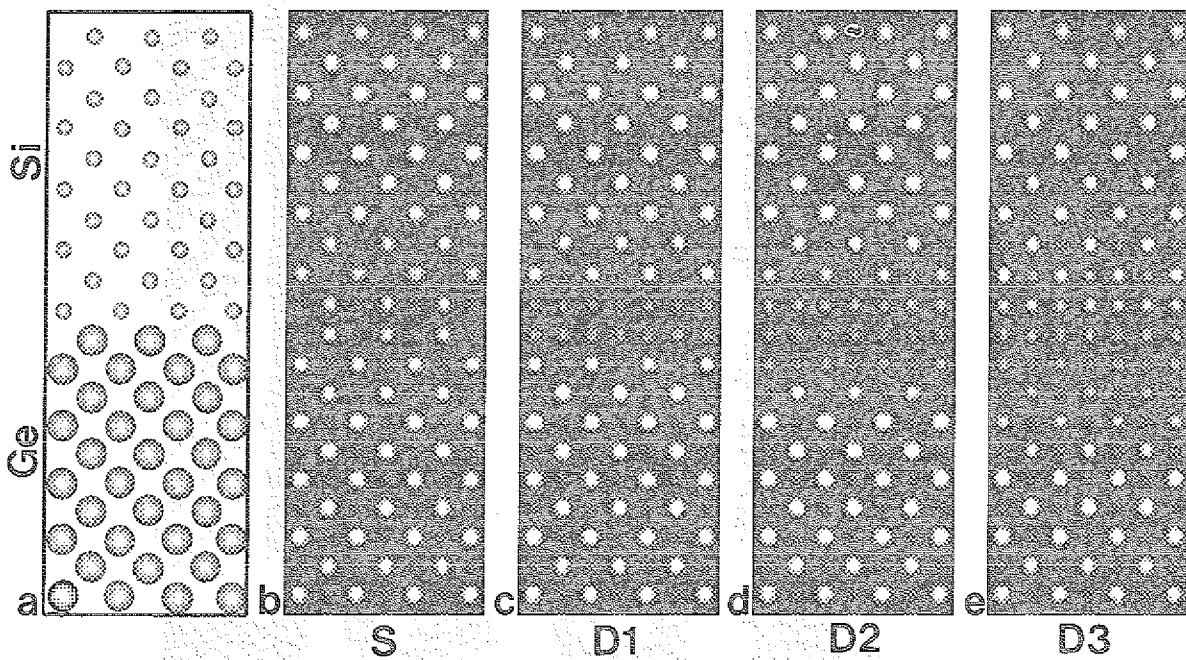


Abb. 4.2: Simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen unterschiedlicher $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächentypen in der $[100]$ -Projektion. (a) Projizierte atomare Grenzflächenstruktur einer abrupten (S)-Grenzfläche. (b) Gitterabbildungen einer abrupten (S)-Grenzfläche. (c–e) Gitterabbildungen diffuser Grenzflächen vom Typ (D1), (D2) und (D3) mit unterschiedlich breiten Si-Ge-Durchmischungszonen.

hierbei verwendete laterale Gitterparameter a_s entspricht dem Gitterparameter eines $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ -Legierungssubstrats. In allen simulierten Gitterabbildungen wird die Position der Grenzfläche im Bild eindeutig durch eine Kontrastumkehr von S-Kontrast für Ge zu T-Kontrast für Si markiert. Für die (S-a)-Grenzfläche in der $[110]$ -Projektion (Abb. 4.1b) und für die (S)-Grenzfläche in der $[100]$ -Projektion (Abb. 4.2b) findet diese Kontrastumkehr örtlich abrupt statt, wobei der Ort der Kontrastumkehr im Bild exakt mit der geometrischen Position der Grenzfläche innerhalb der Einheitszelle übereinstimmt. Hingegen zeigt die (S-b)-Grenzfläche in der $[110]$ -Projektion einen mehr graduellen Kontrastübergang, bei dem an der geometrischen Position der Grenzfläche ein auffälliger HP-Kontrast zu beobachten ist (Abb. 4.1g). Dieser charakteristische Bildkontrastunterschied zwischen der (S-a)- (Abb. 4.1b) und der (S-b)-Grenzfläche (Abb. 4.1g), zusammen mit einer nur für den Fall der (S-a)-Grenzfläche vorhandenen Spiegelsymmetrie im Bildkontrast, erlaubt eine eindeutige Unterscheidung zwischen diesen zwei Grenzflächentypen in $[110]$ -Gitterabbildungen.

Das Auftreten eines HP-Kontrastes an der geometrischen Position der (S-b)-Grenzfläche (Abb. 4.1g) ist ein charakteristisches Beispiel für ein häufig beobachtetes Kontrastverhalten von 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen in der $[110]$ -Projektion. Danach

hängt in dieser Kristallprojektion der lokale Bildkontrast nahezu nicht von der individuellen Komposition der einzelnen engbenachbarten Atomsäulen ab (Positionen B in Abb. 3.1a), sondern wird beinahe ausschließlich durch die mittlere Komposition $\bar{x}$ bestimmt, die sich aus den Einzelkompositionen engbenachbarter Atomsäulen durch Mittelung ergibt. Darüber hinaus reagiert der lokale Bildkontrast für eine gegebene Anzahl von Si- und Ge-Atomen einer einzelnen Atomsäule ebenfalls unempfindlich auf die individuelle räumliche Verteilung der Si- und Ge-Atomen innerhalb der Atomsäule. Für die (S-b)-Grenzfläche (Abb. 4.1g) beträgt $\bar{x}$ für die engbenachbarten Atomsäulen an der Grenzfläche $\bar{x} = 0.5$, und der zu beobachtende HP-Kontrast entspricht exakt einem Bildkontrast, wie er für eine $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ -Volumenlegierung unter identischen Abbildungsbedingungen auftritt (Abb. 3.5a, $x = 0.5$). Dieser für die [110]-Projektion charakteristische Zusammenhang zwischen lokalem Bildkontrast und örtlicher Komposition kann auf der Grundlage der durch den Abbildungsvorgang eingeschränkten räumlichen Bildauflösung erklärt werden. Unter den hier vorliegenden 5-Strahl-Abbildungsbedingungen wird die räumliche Bildauflösung, und damit auch die Empfindlichkeit des Bildkontrastes auf örtliche Kompositionsvariationen, durch die Empfindlichkeit der {111}-Strahlen auf örtliche Variationen des Kristallpotentials bestimmt. Da jedoch in der betrachteten [110]-Projektion die Raumwellenlänge der {111}-Strahlen signifikant größer ist als der Abstand engbenachbarter Atomsäulen, geht die Information über das projizierte Potential einzelner projizierter Atomsäulen – und damit auch über ihre individuelle Komposition – in 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen grundsätzlich verloren.

Ein wichtiges Resultat der Bildsimulationen für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen besteht darin, daß nichtlokale Effekte wie die Fresnel-Beugung den Bildkontrast im unmittelbaren Bereich von Grenzflächen wie auch in der weiteren Umgebung davon nur marginal beeinflussen. In simulierten Gitterabbildungen sind solche Effekte nur im Fall der (S-a)-Grenzfläche (Abb. 4.1b) in Form eines sehr geringen Helligkeitsunterschiedes zwischen hellen Säulenpositionen in Ge und hellen Tunnelpositionen in Si unmittelbar an der Grenzfläche direkt erkennbar. Quantitative Untersuchungen der Bildintensitätsverteilung im Bereich von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen zeigen, daß die Auswirkungen von Fresnel-Beugung für die hier gewählten optimierten Defokuswerte hauptsächlich auf den niederfrequenten Teil des Bild-Fourier-Spektrums konzentriert sind, wie z.B. auf die lokale Bildhintergrundintensität. Im Vergleich dazu werden die für den Bildkontrast wesentlichen, und für die in Kap. 5 beschriebene Methode zur quantitativen Kompositionsbestimmung wichtigen, {111}- bzw. {220}-Bild-Fourier-Koeffizienten nur sehr gering beeinflusst. Gemäß Ref. [47] kann der Einfluß von Fresnel-Beugung auf die Bildintensitätsverteilung anhand des Verhältnisses der Potentialkoeffizienten nullter Ordnung abgeschätzt werden. Da dieses Verhältnis $V^{\text{Si}}(000)/V^{\text{Ge}}(000) = 25/28$ nur unwesentlich von 1 verschieden ist, ist ein signifikanter Einfluß der Fresnel-Beugung auf den Bildkontrast erst für größere Defokusbeträge $|\Delta f|$ zu erwarten. Für große Defokusbeträge in der Größenordnung von 500 bis 1000 nm können die dann signifikanten Bildkontrasteffekte durch Fresnel-Beugung insbesondere auch zur Grenzflächencharakterisierung genutzt

werden [50,51]. Die Vorhersage eines geringen Einflusses von Fresnel-Beugung auf den Bildkontrast unter den hier betrachteten optimierten Abbildungsbedingungen wurde anhand experimentell gewonnener Gitterabbildungen von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen vollauf bestätigt (vgl. Kap. 6.3).

Quantitative Analysen des Bildkontrastes an $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen für unterschiedliche tetragonale Verspannungszustände der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Einzelschichten zeigen, daß der Einfluß solcher Gitterverspannungen auf den Grenzflächenkontrast allgemein äußerst gering ist. Ähnlich wie für den Fall von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen (Kap. 3.2.4) wurden auch für den Fall von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen geringe Variationen in den Bild-Fourier-Koeffizienten als Funktion des Verspannungszustandes festgestellt. Diese Variationen sind jedoch so gering, daß sie in den hier präsentierten simulierten Gitterabbildungen, die für Defokuswerte nahe dem Scherzer-Defokus berechnet wurden, nicht sichtbar sind.

4.2 Diffuse Grenzflächen

Als Modelle für diffuse $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen wurden drei verschiedene Grenzflächentypen verwendet (Tab. 4.1): Beim Typ (D1) beträgt die Breite der Si-Ge-Durchmischungszone 2 Atomlagen, wohingegen sich die Breite der Si-Ge-Durchmischungszone bei den Typen (D2) und (D3) über 4 bzw. 10 Atomlagen erstreckt. Für die [110]-Projektion wurden jeweils Bildsimulationen für die zwei möglichen Grenzflächen-Untertypen durchgeführt, wie sie in Kap. 4.1 beschrieben sind, und im weiteren mit (D1-a), (D1-b), (D2-a) usw. bezeichnet werden.

Abb. 4.1 und Abb. 4.2 zeigen simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen für die drei diffusen Grenzflächentypen für die [110]-Projektion (Abb. 4.1: (c,h) für Typ (D1), (d,i) für Typ (D2) und (e,j) für Typ (D3)) und für die [100]-Projektion (Abb. 4.2: (c) für Typ (D1), (d) für Typ (D2) und (e) für Typ (D3)). Die Bildsimulationen lassen deutlich erkennen, daß für alle drei Grenzflächentypen die Bildkontrastumkehr zwischen reinem Si und reinem Ge zu beiden Seiten der Grenzfläche mit einer systematischen Bildkontrastveränderung im örtlichen Bereich des kompositionellen Übergangs einhergeht. Am deutlichsten sichtbar ist dieses systematische Kontrastverhalten für den Fall der (D3)-Grenzflächen mit einer Breite der Si-Ge-Durchmischungszone von 10 Atomlagen (Abb. 4.1e,j und Abb. 4.2e): ausgehend von hellen Säulenpositionen für reines Ge nimmt die Bildintensität an den Säulenpositionen kontinuierlich mit zunehmendem Si-Gehalt ab, wobei parallel dazu die Bildintensität der für reines Ge dunklen Tunnelpositionen mit zunehmendem Si-Gehalt kontinuierlich zunimmt.

Für die [110]-Projektion kann die Breite der Si-Ge-Durchmischungszone an der Grenzfläche nur mit einer Sicherheit von plus/minus zwei Atomlagen bestimmt werden, da einzelne Atomlagen unter den gewählten 5-Strahl-Abbildungsbedingungen nicht aufgelöst werden. So ist z.B. eine Unterscheidung zwischen den Grenzflächentypen (S-b) (Abb. 4.1g) und (D1-b) (Abb. 4.1h) nahezu nicht möglich, da beide Grenzflächentypen einen ähnlichen HP-Kontrast an der geometrischen Grenzflächenposition zeigen. Die-

ses Kontrastverhalten ist ein weiteres Beispiel für die bereits geschilderte Beobachtung, daß der Bildkontrast in 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen in der $[110]$ -Projektion nahezu ausschließlich empfindlich auf die mittlere Komposition $\bar{x}$ zweier engbenachbarter Atomsäulen reagiert (vgl. Kap. 4.1). Diese mittlere Komposition beträgt für beide hier betrachtete Grenzflächentypen $\bar{x} = 0.5$ für engbenachbarte Atomsäulen direkt an der Grenzfläche. Im Gegensatz zur Nicht-Unterscheidbarkeit zwischen dem (S-b)- und dem (D1-b)-Grenzflächentyp kann der Bildkontrast für eine abrupte Grenzfläche vom Typ (S-a) (Abb. 4.1b), die eine unterschiedliche kristallographischen Position verglichen mit der (S-b)-Grenzfläche (Abb. 4.1g) besitzt, eindeutig von einer diffusen Grenzfläche vom Typ (D1-a) mit einer Breite der Si-Ge-Durchmischungszone von 2 Atomlagen (Abb. 4.1c) unterschieden werden.

Für die $[100]$ -Projektion ermöglicht die bereits unter 5-Strahl-Abbildungsbedingungen getrennte Auflösung einzelner projizierter Atomsäulen, daß die Breite der Si-Ge-Durchmischungszone von diffusen $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen anhand der charakteristischen Bildkontraständerungen im Grenzflächenbereich verläßlich bestimmt werden kann - zumindest für die Grenzflächentypen (S), (D1) und (D2). Im Fall der diffusen Grenzfläche vom Typ (D3) ist es jedoch fraglich, ob z.B. in experimentellen Abbildungen, die mit statistischem Rauschen überlagert sind, die geringen Bildkontrastunterschiede zwischen benachbarten Atomlagen noch visuell verläßlich detektiert werden können. In diesem Fall erfordert die exakte Bestimmung der kompositionellen Übergangsbreite der Grenzfläche eine genaue quantitative Analyse des lokalen Bildkontrastes. Eine speziell hierfür und für eine quantitative lokale Kompositionsbestimmung entwickelte Methode wird in Kap. 5 beschrieben.

Als ein wichtiges allgemeines Ergebnis der durchgeführten Bildsimulationen kann festgehalten werden, daß unter optimierten Abbildungsbedingungen der lokale Bildkontrast für die einzelnen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Atomlagen im Bereich des kompositionellen Übergangs von abrupten und diffusen Grenzflächen in sehr guter Übereinstimmung mit dem entsprechenden Bildkontrast für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen ist (Kap. 3.2.2). Dieses übereinstimmende Bildkontrastverhalten ermöglicht es daher, bereits ohne den Einsatz von Bildverarbeitungsverfahren die Komposition einzelner Atomlagen im Bereich von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen durch visuelle Vergleiche mit den für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen auftretenden Bildkontrastmustern semiquantitativ zu bestimmen.

4.3 Kontrastbeitrag von Strahlen höherer Ordnung

Ähnlich wie für den Fall von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen wurde der Einfluß abgebeugter Strahlen höherer Ordnung auf den Bildkontrast auch für den Fall von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen durch Bildsimulationen unter optimierten 9-Strahl-Abbildungsbedingungen untersucht (vgl. Kap. 3.2.3). Abb. 4.11-o zeigt simulierte 9-Strahl-Gitterabbildungen für die Grenzflächentypen (S-a), (D1-a), (D2-a) und (D3-a) bei $t = 9 \text{ nm}$ und $\Delta f = -48 \text{ nm}$. Alle simulierten Abbildungen reflektieren deutlich den kompositionellen Übergang an den Grenzflächen durch entsprechende örtliche Kontraständerungen:

von reinem S-Kontrast für Ge über einen HP-Kontrast für den mittleren Kompositionsbereich bis hin zu reinem T-Kontrast für Si. Bedingt durch den zusätzlichen Beitrag der $\{220\}$ -Strahlen wird in dieser 9-Strahl-Abbildung der augenscheinliche Kontrastunterschied zwischen Si und Ge im Vergleich zur 5-Strahl-Abbildung (Abb. 4.1b-e) noch durch eine zusätzliche Modulation heller Kontrastpunkte an Tunnel- und Säulenpositionen verstärkt. Ähnlich wie für den Fall von 5-Strahl-Abbildungen (Kap. 4.1 und 4.2) entspricht der Bildkontrast für einzelne Atomlagen im Grenzflächenbereich auch unter 9-Strahl-Abbildungsbedingungen dem Bildkontrast von entsprechenden $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen in sehr guter Übereinstimmung (vgl. Abb. 3.5c), und erlaubt daher eine semiquantitative Kompositionsbestimmung durch Kontrastmustervergleiche.

Entsprechend den Ausführungen in Kap. 3.2.3 erfordert eine "echte" Strukturabbildung von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen in der $[110]$ -Projektion die Einbeziehung von Strahlen aus noch höheren Beugungsordnungen als im Fall der beschriebenen 9-Strahl-Gitterabbildung. Für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen ergibt die Kontrastanalyse solcher hochaufgelösten Gitterabbildungen im Sub-Nanometerbereich bereits einen i.a. unsystematischen Zusammenhang zwischen Komposition und Bildkontrast (Kap. 3.2.3). Für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen wird die Realisierung "echter" Atomabbildungen unter der Bedingung, daß eine kompositionelle Empfindlichkeit des Bildkontrastes erhalten bleiben soll, durch weitere Schwierigkeiten behindert. Zum ersten wären hierzu Abbildungsbedingungen erforderlich, unter denen korrekte Abbildungen der projizierten Atomstruktur simultan über den gesamten Kompositionsbereich, zumindest aber simultan für Si und Ge, entstehen. Die hierzu durchgeführten Untersuchungen zeigen, daß solche Abbildungsbedingungen für die verwendeten Mikroskopparameter (Tab. 2.2) zumindest bei 400 keV nicht existieren. Für den Fall, daß solche Abbildungsbedingungen für andere Elektronenenergien bestimmt werden könnten, müßten die resultierenden Bildkontrastmuster experimentell detektierbare, d.h. hinreichend große Kontrastunterschiede für Atomlagen unterschiedlicher Kompositionen aufweisen. Dies Forderung würde mit hoher Wahrscheinlichkeit den Bereich von nutzbaren Abbildungsbedingungen weiter stark einschränken. Neben diesen Schwierigkeiten erweisen sich solche atomauflösenden Gitterabbildungen zudem als äußerst empfindlich bezüglich geringer Strahl- und Probenverkipungen [44,45]. Aus diesen Gründen wurde für die $[110]$ -Projektion die detailliertere Untersuchung des Einflusses von Strahlen höherer Ordnung auf den Grenzflächenkontrast auf den oben beschriebenen 9-Strahl-Fall beschränkt.

Für die $[100]$ -Projektion ist der Einfluß abgebeugter Strahlen höherer Ordnung auf den Bildkontrast von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen unter optimierten Abbildungsbedingungen aufgrund der starken Dämpfung der entsprechenden Bild-Fourier-Beiträge durch die teilkohärente Probenbeleuchtung allgemein zu vernachlässigen. Dies ist das Ergebnis von Bildsimulationen für abrupte und diffuse $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen, bei denen abgebeugte Strahlen bis zu $\vec{g} = \{400\}$ berücksichtigt wurden. Hierbei wurde für Strahlen $|\vec{g}| > g = \{220\}$ ein signifikanter Einfluß auf den Bildkontrast nicht mehr beobachtet.

4.4 Grenzflächen mit Stufen

Aus Untersuchungen von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Wachstumsoberflächen mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie ist bekannt [52], daß Grenzflächenstufen, an denen eine abrupte Änderung der Komposition in der Ebene der Grenzfläche auftritt, parallel zu kristallographischen $\langle 110 \rangle$ -Richtungen verlaufen. Zur eindeutigen Identifizierung solcher Grenzflächenstufen anhand hochaufgelöster Gitterabbildungen ist es erforderlich, die Elektroneneinstrahlrichtung parallel zur Richtung der Stufe zu wählen. In dieser Arbeit wurden Bildsimulationen für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen durchgeführt, die derartige $\langle 110 \rangle$ -Stufen enthielten. Abb. 4.3 zeigt eine abrupte Si/Ge -Grenzfläche mit zwei räumlich separierten Grenzflächenstufen in einer simulierten 5-Strahl-Gitterabbildung entlang der $[110]$ -Stufenrichtung unter optimierten Abbildungsbedingungen. Die Höhe der Einzelstufen beträgt jeweils eine Atomlage. Anhand der signifikanten Bildkontraständerungen in der simulierten Gitterabbildung können die geometrischen Stufenpositionen eindeutig identifiziert werden. Dabei entspricht der Bildkontrast links bzw. rechts von einer jeweiligen Stufe exakt dem Bildkontrast für die Grenzflächentypen (S-a) (Abb. 4.1b) bzw. (S-b) (Abb. 4.1g). Ein wichtiges Ergebnis von Bildsimulationen, bei denen die Stufenrichtungen jeweils senkrecht zur Einstrahlrichtung verliefen, besteht darin, daß der hierbei zu beobachtende Bildkontrast nicht vom Bildkontrast diffuser Grenzflächen mit einer gleichen projizierten Durchschnittskomposition entlang der Strahlrichtung unterschieden werden kann.

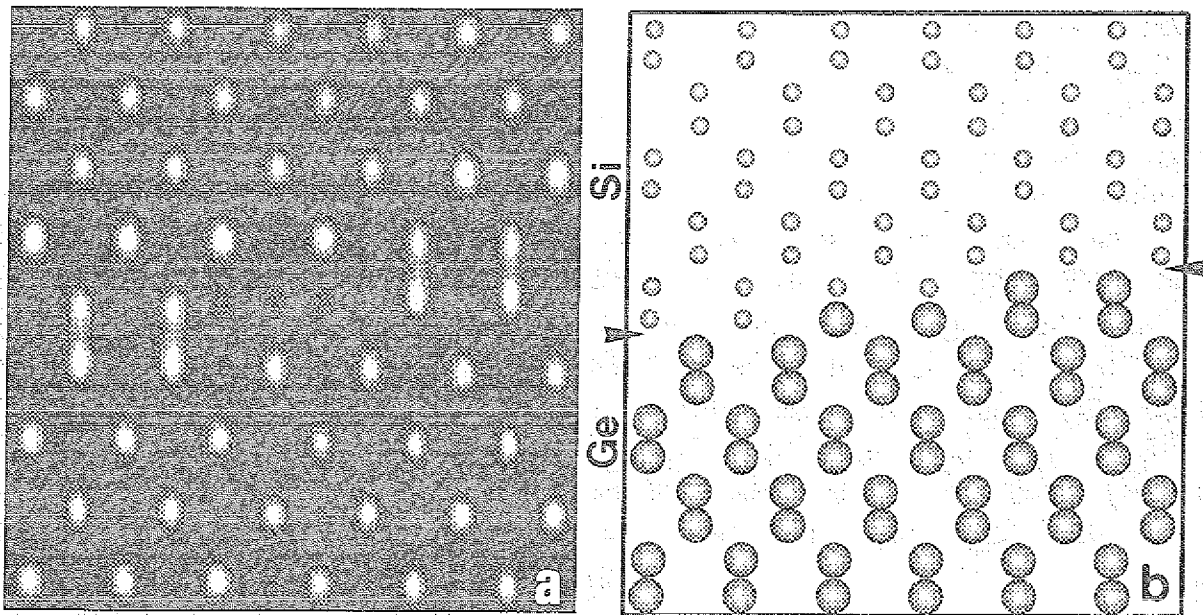


Abb. 4.3: (a) Simulierte 5-Strahl-Gitterabbildung einer abrupten Si/Ge -Grenzfläche mit zwei atomaren Grenzflächenstufen in einer $[110]$ -Projektion. Die Höhe der Grenzflächenstufen beträgt jeweils eine Atomlage. (b) Zugehörige projizierte Einheitszelle.

4.5 Geordnete Si-Ge-Grenzflächenphasen

In Elektronenbeugungsbildern von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Schichtsystemen und -Übergittern, die bei mittleren Temperaturen gewachsen wurden, konnten von einigen Forschergruppen zusätzliche gebeugte Strahlen (Zusatzreflexe) beobachtet werden, die auf die Existenz geordneter Si-Ge-Grenzflächenphasen schließen lassen [53–55]. Solche Zusatzreflexe wurden auch in dieser Arbeit bei kurzperiodischen Si_mGe_n -Übergitterstrukturen beobachtet (Kap. 6.2). Die experimentellen Resultate deuten hinsichtlich der Struktur dieser geordneten Si-Ge-Phasen auf eine periodische Schichtung aus je zwei Atomlagen Si und je zwei Atomlagen Ge auf $\{111\}$ -Gitterebenen hin. Für diese doppelagige Schichtung wurden u.a. zwei Strukturmodelle vorgeschlagen [53,56]: Beim RS1-Modell (Abb. 4.4a) sind jeweils weitbenachbarte $\{111\}$ -Gitterebenen mit demselben Atomtyp besetzt, wohingegen beim RS2-Modell (Abb. 4.4c) jeweils engbenachbarten $\{111\}$ -Gitterebenen mit demselben Atomtyp besetzt sind. Auf der Grundlage von experimentellen Untersuchungen mit Hilfe der Z-Kontrast-Raster-Transmissions-Elektronenmikroskopie wurden noch weitere Strukturmodelle für geordnete Si-Ge-Grenzflächenphasen vorgeschlagen [57].

Um geeignete Abbildungsbedingungen zur Identifizierung von geordneten Si-Ge-Grenzflächenphasen bei 400 keV zu ermitteln, wurden zunächst systematische MS-Bildsimulationen der geordneten RS1- und RS2-Modellstrukturen in Form von Volumenkristallen durchgeführt. Zusätzlich wurden zu Vergleichszwecken Bildsimulationen für eine ungeordnete $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ -Volumenlegierung vorgenommen. Zur Abbildung der RS1- und RS2-Struktur eignen sich insbesondere $\langle 110 \rangle$ -Zonenachsenorientierungen, da hierbei jeweils zwei der insgesamt vier $\{111\}$ -Netzebenenscharen, auf denen eine Ordnungseinstellung vorliegen kann, parallel zur Einstrahlrichtung orientiert sind. Die Abbildung der RS1- und RS2-Struktur in einer $[100]$ -Projektion ist nicht sinnvoll, da das projizierte Kristallpotential in diesem Fall exakt dem projizierten Kristallpotential einer ungeordneten $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ -Legierung entspricht und daher keine signifikanten Bildkontrastunterschiede zu erwarten sind. Abb. 4.4a,c,e zeigt die verwendeten Einheitszellen in der $[110]$ -Projektion. Für diese drei Modellstrukturen wurden Bildsimulationen unter 5-Strahl-Abbildungsbedingungen (Objektivblendendurchmesser: 6.5 nm^{-1}) für Probenstärken bis zu $t = 20 \text{ nm}$ und für Defokuswerte im Bereich von $\Delta f = -90 \text{ nm}$ bis -20 nm durchgeführt. Abb. 4.4b,d,f zeigt entsprechende Bildsimulationen für die drei Modellstrukturen unter optimierten 5-Strahl-Abbildungsbedingungen (Tab. 3.1) bei $t = 8.2 \text{ nm}$ und $\Delta f = -56 \text{ nm}$. Ein besonders auffälliges Kontrastdetail in den Abbildungen der RS1- und RS2-Struktur besteht darin (Abb. 4.4b,d), daß im Vergleich zur ungeordneten Legierung (Abb. 4.4f) jede zweite Reihe von hellen Kontrastpunkten entlang der geordneten $\{111\}$ -Netzebenen ausfällt. Für die geordnete RS1-Struktur erscheinen die verbleibenden hellen Kontrastpunkte an Tunnelpositionen zwischen weitbenachbarten Si-Atomen (Abb. 4.4b), wohingegen für die geordnete RS2-Struktur die verbleibenden hellen Kontrastpunkte an Säulenpositionen zwischen engbenachbarten Ge-Atomen erscheinen (Abb. 4.4d). Während also anhand der Auslöschung jeder zweiten Reihe von hellen Kontrastpunkten allgemein auf das Vorliegen einer geordneten Si-Ge-Phase ge-

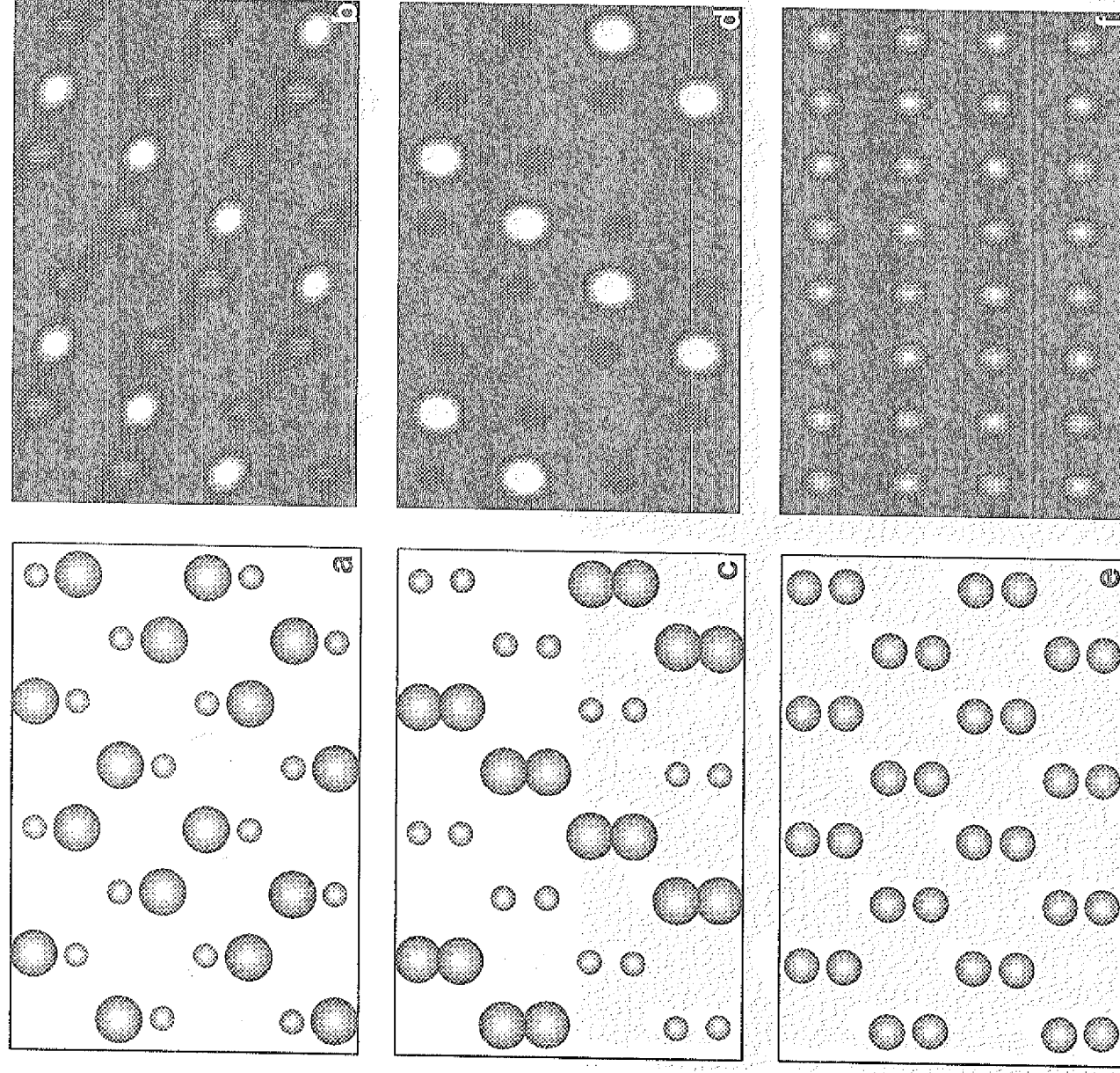


Abb. 4.4: Projizierte Einheitszellen und simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen für die geordneten Si-Ge-Phasen RS1 (a,b) und RS2 (c,d) in der $[110]$ -Projektion. Zum Vergleich ist zusätzlich die projizierte Einheitszelle und eine simulierte 5-Strahl-Gitterabbildung einer ungeordneten $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ -Legierung gezeigt (e,f).

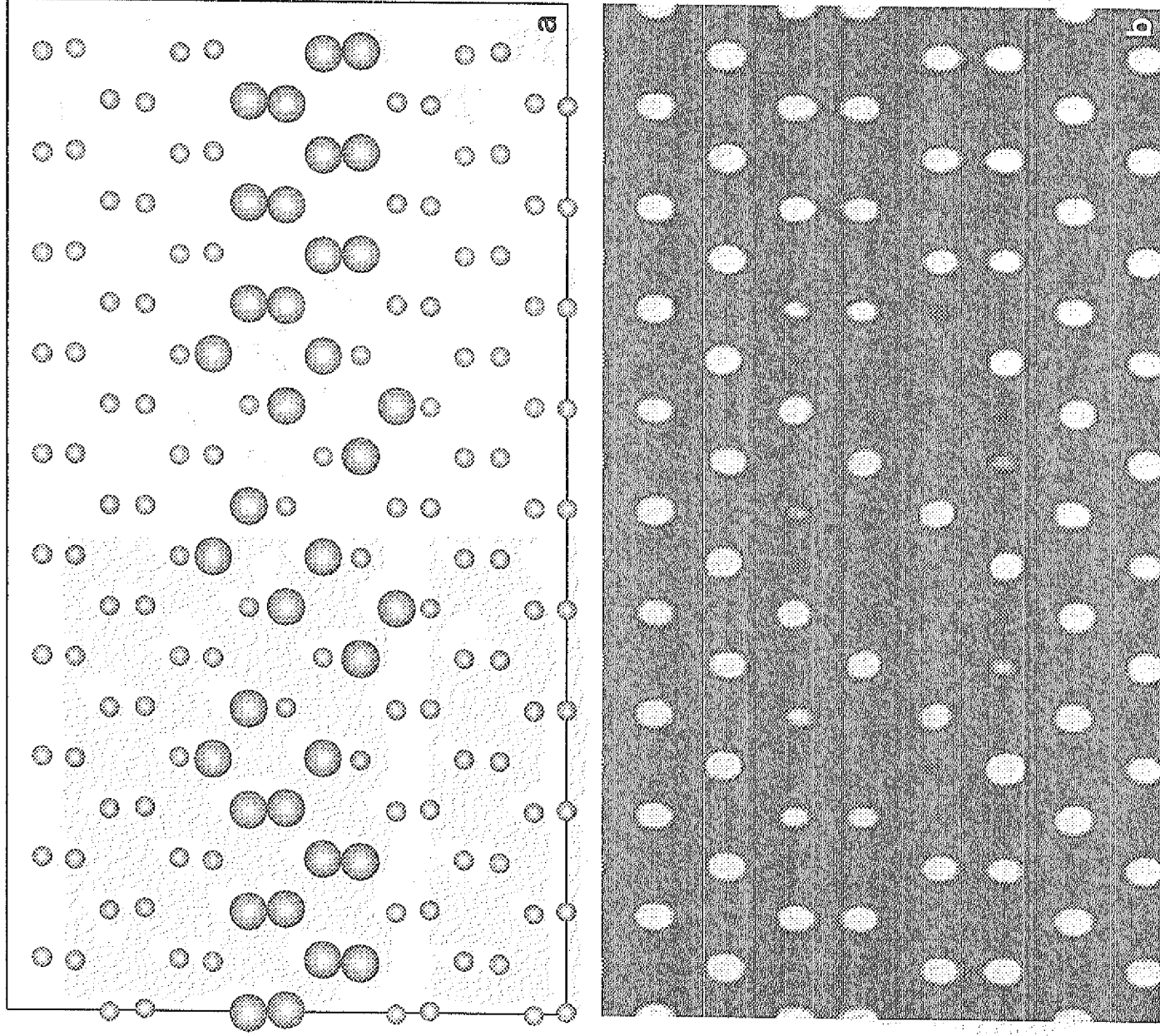


Abb. 4.5: Projizierte Einheitszelle (a) und simulierte 5-Strahl-Gitterabbildung (b) einer geordneten Si-Ge-Grenzflächendomäne innerhalb einer 4 Atomlagen breiten Ge-Schicht, eingebettet in eine Si-Matrix.

geschlossen werden kann, kann anhand der relativen Position der verbleibenden hellen Kontrastpunkte zusätzlich zwischen den geordneten Phasen RS1 und RS2 unterschieden werden. Die durchgeführten systematischen Bildkontrastsimulationen zeigen, daß eine solche Identifizierung und Differenzierung der Ordnungsphasen RS1 und RS2 für Probendicken im Bereich von 7 bis 15 nm und für Defokuswerte im Bereich von -65 bis -45 nm möglich ist.

Ausgehend von den Bildkontrastuntersuchung für die RS1- und RS2-Modellstruktur wurde zusätzlich der Fall einer geordneten Si-Ge-Grenzflächendomäne untersucht. Für die hierzu durchgeführten Bildsimulationen wurde ein in Ref. [54] vorgeschlagenes Strukturmodell verwendet, das in Abb. 4.5a in einer $[110]$ -Projektion gezeigt ist. Dieses Strukturmodell besteht aus einer geordneten Si-Ge-Grenzflächendomäne vom RS1-Typ mit einer Ausdehnung von 6 Atomlagen in $[001]$ -Richtung, die seitlich in eine 4 Atomlagen breite Ge-Schicht, und nach oben und unten in eine Matrix aus reinem Si eingebettet ist. Abb. 4.5b zeigt eine Bildsimulation für diese Struktur unter optimierten 5-Strahl-Abbildungsbedingungen ($t = 8.2$ nm, $\Delta f = -56$ nm). Gemäß den Ergebnissen aus Kap. 4.1 findet an der abrupten Grenzfläche zwischen der Si-Matrix und der Ge-Schicht eine Umkehr des Bildkontrastes von T-Kontrast in Si zu S-Kontrast in Ge statt. Im Vergleich dazu zeigt sich für die geordnete Grenzflächendomäne ein beträchtlich unterschiedliches Bildkontrastverhalten. Erstens findet beim Übergang von der Si-Matrix zur geordneten Si-Ge-Grenzflächendomäne keine Umkehr des Bildkontrastes statt. Zweitens zeigen im Bereich der Grenzflächendomäne nur die Tunnelpositionen zwischen weitbenachbarten und mit Si-Atomen besetzten $\{111\}$ -Ebenen eine Bildintensität, die mit der Bildintensität von Tunnelpositionen in der Si-Matrix vergleichbar ist, d.h. nur jede zweite Reihe von Tunnelpositionen innerhalb der geordneten Grenzflächendomäne erscheint hell. Wie diese Bildsimulation deutlich demonstriert, erlauben solche, im Vergleich zu reinem Si, Ge oder einer $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierung signifikant unterschiedlichen Bildkontraste eine eindeutige Identifizierung dieser geordneten Si-Ge-Grenzflächendomänen. Darüber hinaus sollte auch eine Unterscheidung zwischen unterschiedlich geordneten Si-Ge-Grenzflächenphasen möglich sein, wie es am Beispiel der Modellstrukturen RS1 und RS2 für den Fall geordneter Volumenlegierungen gezeigt ist (Abb. 4.4).

4.6 Kurzperiodische Si_mGe_n -Übergitter

Elastisch gespannte kurzperiodische Si_mGe_n -Übergitter, die aus alternierenden Folgen von jeweils wenigen Atomlagen Si und Ge aufgebaut sind, können als Kristalle mit einer künstlich in die Besetzung der Gitterplätze eingeführten Ordnung betrachtet werden. In Gitterabbildungen solcher Übergitterstrukturen sind unter bestimmten Bedingungen Abweichungen des Bildkontrastes der einzelnen Si- und Ge-Atomlagen vom Bildkontrast reiner Si- bzw. Ge-Volumenkristalle zu erwarten. Solche Bedingungen liegen vor, wenn die Breite der einzelnen Si- und Ge-Schichten vergleichbar ist mit der lateralen Verbreiterung, die der einfallende Elektronenstrahl beim Durchgang durch die Probe und durch die Impulsantwortfunktion des Mikroskops erfährt. Für das hier betrachtete Material-

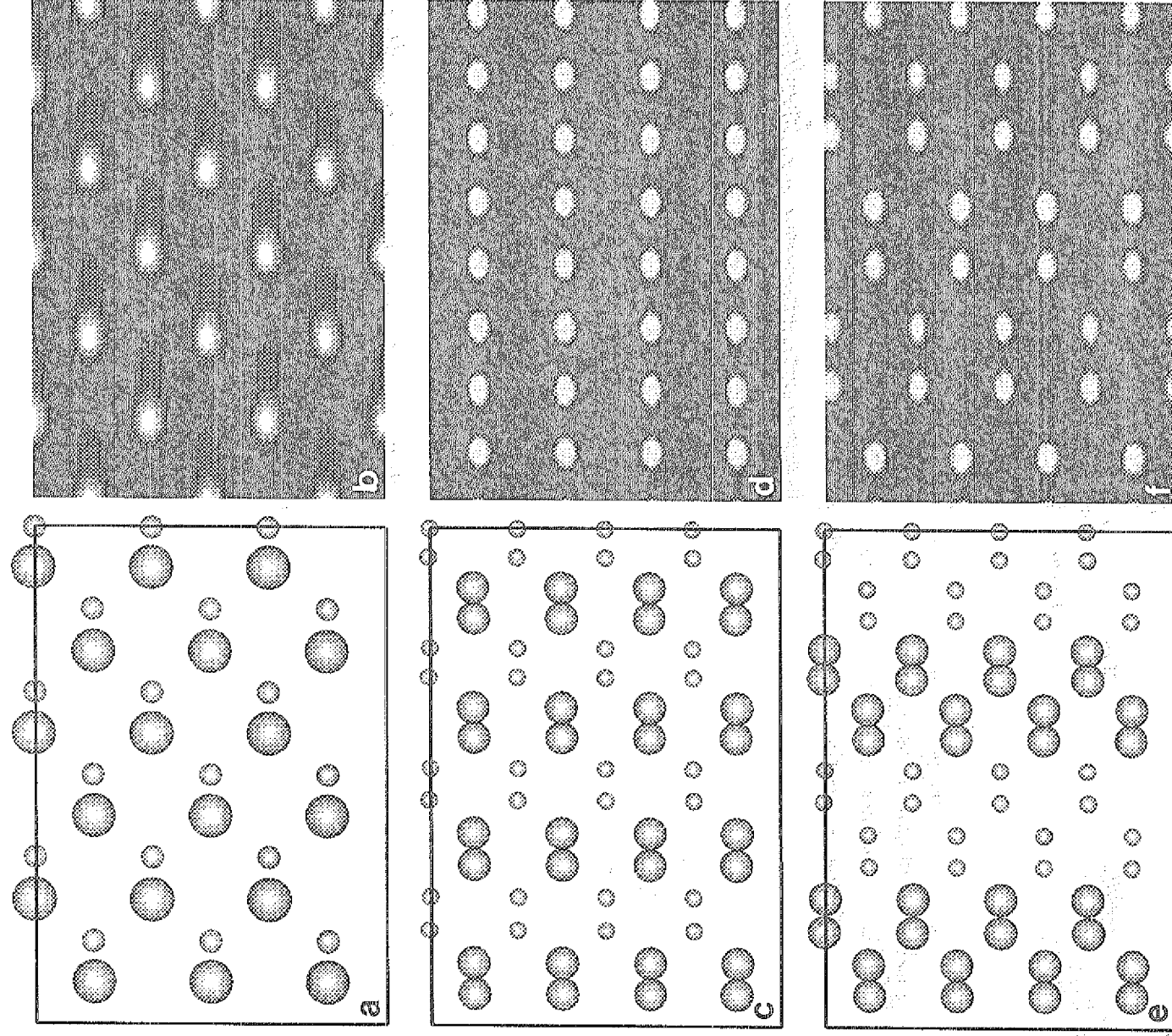


Abb. 4.6: Projizierte Einheitszellen und simulierte 5-Strahl-Gitterabbildungen für verschiedene kurzperiodische Si_mGe_n -Übergitter in der $[110]$ -Projektion: $m : n = 1 : 1$ (a, b), $m : n = 2 : 2$ (c, d), $m : n = 4 : 4$ (e, f).

system Si/Si_xGe_{1-x} beträgt diese laterale Verbreiterungen des Elektronenstrahls unter optimierten Abbildungsbedingungen zwischen 0.2 nm und 0.3 nm. Diese Zahlenwerte wurden mit Hilfe separater Bildsimulationenrechnungen bestimmt, in denen die Auswirkung einer δ -förmigen Störung des Kristallpotentials auf $\psi(\vec{r})$ und $I(\vec{r})$ im Hinblick auf die laterale Verbreiterung der Störung untersucht wurde.

Als Beispiel für ein extrem kurzperiodisches Si_mGe_n-Übergitter soll hier der Fall eines Si₁Ge₁-Übergitters aus alternierenden Atomlagen Si und Ge auf (001)-Gitterebenen betrachtet werden. Abb. 4.6a zeigt die zugehörige Einheitszelle in der [110]-Projektion. Ein solches Si₁Ge₁-Übergitter entspricht exakt einem Kristall mit Zinkblendestruktur, wie z.B. GaAs, bei dem die Si-Atome eins der zwei flächenzentrierten Untergitter besetzen und die Ge-Atome das andere. Verglichen mit zentrosymmetrischen Kristallen mit Diamantstruktur, wie z.B. Si oder Ge, stellt dieses Si₁Ge₁-Übergitter in der [110]-Projektion einen hochgradig nicht-zentrosymmetrischen Kristall dar. Abb. 4.6b zeigt eine Bildsimulation für diese Übergitterstruktur unter optimierten 5-Strahl-Abbildungsbedingungen ($\Delta f = -56$ nm, $t = 8.2$ nm). Wie anhand dieser Bildsimulation deutlich zu erkennen ist, führt die im Vergleich zur Diamantstruktur reduzierte Symmetrie zu einer Anzahl von neuen Bildkontrastmustern, die für zentrosymmetrische Si-, Ge- oder ungeordnete Si_xGe_{1-x}-Kristalle nicht auftreten können (vgl. auch Ref. [44]). Als Auswirkung der fehlenden Zentrosymmetrie zeigen in Abb. 4.6b z.B. die beiden gekreuzten {111}-Kontrastmodulationen eine asymmetrische Lage bezüglich der projizierten Kristallstruktur, so daß Minima oder Maxima der Bildintensität nicht mehr länger mit den Positionen projizierter Atomsäulen zusammenfallen. Dieses Beispiel demonstriert deutlich, daß für den Fall einer Si_mGe_n-Übergitterstruktur mit $m, n = 1$ eine lokale Kompositionsbestimmung nicht, wie für den Fall isolierter Si/Si_xGe_{1-x}-Einzelgrenzflächen gezeigt (Kap. 4.1 und 4.2), anhand eines Vergleichs des Bildkontrastmusters mit den entsprechenden Bildkontrastmustern für Si_xGe_{1-x}-Volumenlegierungen bestimmt werden kann. Vielmehr ist es in diesem Fall für eine lokale Kompositionsbestimmung erforderlich, einen systematischen Bildvergleich zwischen einer Serie von experimentell bei unterschiedlichen Defokus-Dickenkombinationen aufgenommenen Abbildungen und entsprechenden Bildsimulationen nach der sog. Bildvergleichsmethode [11] durchzuführen.

Systematische Bildsimulationen für kurzperiodische Si_mGe_n-Übergitter mit größeren Werten m und n zeigen, daß sich das Bildkontrastverhalten der einzelnen Si/Ge-Grenzflächen bereits für $m, n > 1$ dem Bildkontrastverhalten isolierter Si/Ge-Grenzflächen (Kap. 4.1) angleicht. Dieses Verhalten ist beispielhaft für ein Si₂Ge₂-Übergitter in Abb. 4.6d und für ein Si₄Ge₄-Übergitter in Abb. 4.6f gezeigt. Für beide Übergitter erscheinen lokale Maxima der Bildintensität an Säulenpositionen für Ge und an Tunnelpositionen für Si, was exakt dem Kontrastverhalten von Ge- bzw. Si-Volumenkristallen unter identischen Abbildungsbedingungen entspricht.

5 Quantitative Kompositionsbestimmung

Die detaillierten Bildkontrastanalysen für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen (Kap. 3.2) und für $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen (Kap. 4) in der [110]- und [100]-Projektion haben gezeigt, daß in 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen durch die Wahl optimierter Abbildungsbedingungen ausgeprägte Unterschiede in der Grundmorphologie des Bildkontrastes für Probenbereiche unterschiedlicher Komposition erzielt werden können. In der Fourier-Darstellung der Bildintensitätsverteilung können solche kompositionsabhängigen Bildkontraständerungen durch einen einzelnen Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_1)$, der die Amplitude der Grundmodulation der Bildintensität repräsentiert, beschrieben werden. Dabei zeichnet sich $J(\vec{g}_1)$ insbesondere durch eine hohe räumliche Empfindlichkeit bezüglich lokaler Kompositionsänderungen, die bis in die Dimension einzelner projizierter Atomsäulen hinabreicht (Kap. 4), und durch eine monotone Abhängigkeit von der Legierungskomposition aus. Aufgrund dieser vorteilhaften Eigenschaften des Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_1)$ liegt es daher nahe, $J(\vec{g}_1)$ als chemisches Signal zur lokalen quantitativen Kompositionsbestimmung zu verwenden. Bei genauer Kenntnis des funktionalen Zusammenhangs zwischen $J(\vec{g}_1)$ und x können dadurch Werte für die lokale Probenkomposition durch Messungen von $J(\vec{g}_1)$ innerhalb lokaler Bildbereiche von hochaufgelösten Gitterabbildungen bestimmt werden. Dieses Prinzip bildet die Grundlage einer neuartigen Methode zur lokalen quantitativen Kompositionanalyse von verspannten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelt und experimentell erfolgreich angewandt wurde. Die Methode verwendet zur lokalen Kompositionsbestimmung einen Bildverarbeitungsalgorithmus, der eine hochpräzise Messung der Bild-Fourier-Koeffizienten in kleinen Bildbereichen hochaufgelöster Gitterabbildungen durchführt und anhand dieser Meßwerte quantitative Werte für die lokale, über die Probendicke gemittelte Probenkomposition bestimmt. Die hohe Genauigkeit in der Messung der Bild-Fourier-Koeffizienten wird dabei durch den Einsatz eines zweiten, neuartigen Algorithmus zur geometrischen Bildentzerrung erzielt, mit dem lokale Bildverzerrungen in hochaufgelösten Gitterabbildungen korrigiert werden können. Neben der Anwendung auf gitterfehlgepaßte verspannte Heterosysteme wie $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ eignen sich die entwickelten Bildverarbeitungsalgorithmen auch für die lokale quantitative Kompositionsanalyse bei gitterangepaßten unverspannten Heterosystemen wie z.B. $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Die Algorithmen wurden bereits erfolgreich zur Charakterisierung solcher Strukturen eingesetzt [58–62].

Im ersten Teil dieses Kapitels werden die funktionalen Abhängigkeiten des als chemisches Signal genutzten Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_1)$ untersucht. Im zweiten Teil werden die Bildverarbeitungsalgorithmen beschrieben, die zur geometrischen Bildentzerrung und zur quantitativen Kompositionsbestimmung bei verspannten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen entwickelt und eingesetzt wurden. Im letzten Teil wird der Algorithmus zur quantitativen Kompositionsbestimmung mit anderen, in Zusammenhang mit der quantitativen Kompositionsbestimmung bei III-V-Heterostrukturen vorgeschlagenen Bildverarbeitungsalgorithmen verglichen.

5.1 Funktionale Abhängigkeiten des chemischen Signals

Die Verwendung des Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_1)$ (im weiteren mit J abgekürzt) als chemisches Signal erfordert eine genaue Kenntnis des funktionalen Zusammenhangs zwischen J und x , im weiteren durch die Funktion $J = \mathcal{J}(x)$ beschrieben, damit anhand von Meßwerten für J entsprechende Kompositionswerte x_{det} durch Anwendung der Umkehrfunktion $x_{\text{det}} = \mathcal{J}^{-1}(J)$ bestimmt werden können. Hierbei muß insbesondere beachtet werden, daß $\mathcal{J}(x)$ implizit auch von der Probendicke t , von der tetragonalen Verzerrung ε_T und vom Objektivlinsendefokus Δf abhängt. Für den Fall ungeordneter $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen wurde für $\mathcal{J}(x)$ in Kap. 3.2 ein analytischer Ausdruck abgeleitet (Gl. (3.5b)), der die Abhängigkeiten von x , t , ε_T und Δf vollständig enthält. Für den Fall von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen müßte $\mathcal{J}(x)$ prinzipiell für jede individuelle Grenzflächenstruktur getrennt bestimmt werden, um dabei den möglichen Einfluß nichtlokaler Effekte auf den Bildkontrast zu berücksichtigen. Aufgrund des einheitlichen Bildkontrastverhaltens der in Kap. 4 untersuchten Grenzflächenstrukturen wird an dieser Stelle jedoch angenommen, daß die für den Fall ungeordneter $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen abgeleitete Funktion $\mathcal{J}(x)$ auch für den Fall von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen gültig ist. Wie in Kap. 5.2.2 gezeigt wird, ist diese Annahme für scharfe und diffuse $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen vom Typ (S) bzw. (D1–D3) (vgl. Kap. 4) sehr gut erfüllt. Aus praktischen Gründen wird im weiteren anstelle von $\mathcal{J}(x)$ häufig die normierte Funktion

$$\mathcal{J}_N(x) = \frac{\mathcal{J}(x) - J^{\text{Ge}}}{J^{\text{Si}} - J^{\text{Ge}}} \quad (5.1)$$

verwendet, wobei J^{Si} und J^{Ge} Referenzwerte für J aus Bereichen von reinem Si bzw. reinem Ge bezeichnen.

Um die genaue funktionale Abhängigkeit von J bezüglich x , t , ε_T und Δf zu bestimmen, wurde $\mathcal{J}_N(x)$ unter Anwendung von Gl. (3.5b) für den gesamten Kompositionsbereich $0 \leq x \leq 1$, für die Bereiche optimierter Defokus-Dickenkombinationen unter 5-Strahl-Abbildungsbedingungen (Tab. 3.1), sowie für den gesamten Bereich experimentell zugänglicher Verzerrungen ε_T quantitativ untersucht. Abb. 5.1a zeigt eine Auftragung von $\mathcal{J}_N(x)$ als Funktion von x für drei verschiedene Probendicken im Dickenbereich zwischen 6 und 10 nm ($\vec{B} = [110]$, $\Delta f = -55$ nm). Wie am Verlauf der einzelnen Kurven zu erkennen ist, besteht über diesen großen Dickenbereich ein quasilinearer Zusammenhang zwischen J und x , wobei die Abweichungen von einer ideal linearen Beziehung im Mittel weniger als $\Delta x = \pm 0.02$ betragen. Für die hier betrachtete [110]-Projektion kann der nutzbare Dickenbereich, für den ein solcher quasilinearer Zusammenhang zwischen J und x besteht, durch eine Variationen von Δf insgesamt auf den Bereich von 6 und 12 nm ausgedehnt werden. Für die [100]-Projektion erstreckt sich der Bereich der Probendicke, für den ein quasilinearen Zusammenhang zwischen J und x gilt, sogar über den gesamten Dickenbereich bis zu 18 nm (nicht gezeigt). Auf der Grundlage dieses quasilinearer Zusammenhangs zwischen J und x ist es somit möglich, durch Messungen von J in experimentellen [110]- und [100]-Gitterabbildungen eine eindeutige Kompositionsbestimmung

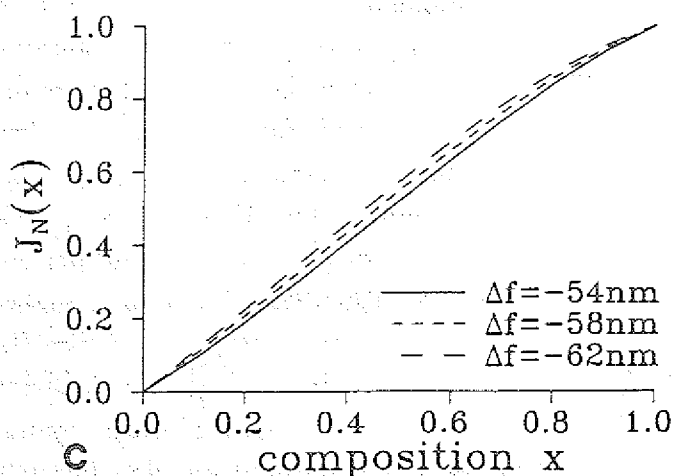
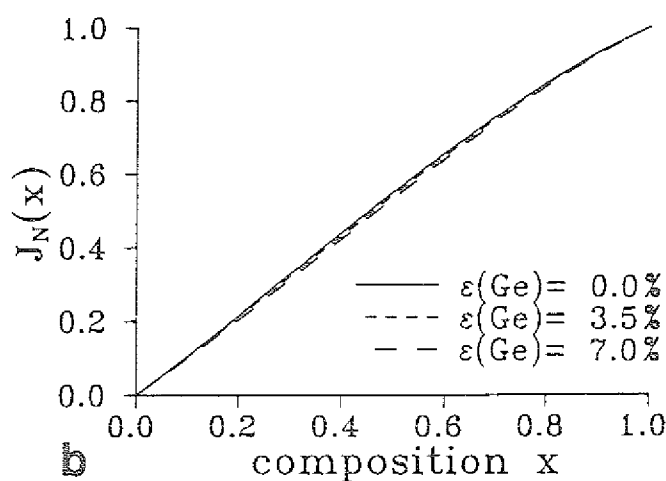
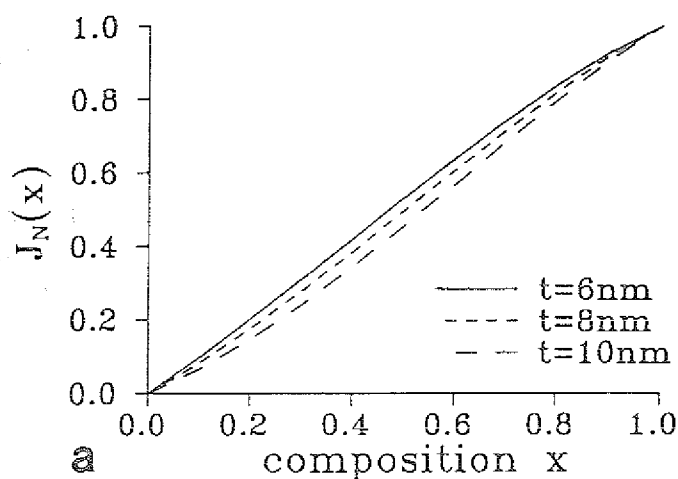


Abb. 5.1: Auftragungen von $J_N(x)$ als Funktion der Komposition x für (a) unterschiedliche Dicken t ($\vec{B} = [110]$, $\Delta f = -55\text{ nm}$), (b) unterschiedliche tetragonale Verzerrungen ε_T ($\vec{B} = [110]$, $t = 8\text{ nm}$, $\Delta f = -55\text{ nm}$) und (c) unterschiedliche Defokuswerte Δf ($\vec{B} = [100]$, $t = 8\text{ nm}$).

über weite Bereiche nutzbarer Probendicken durchzuführen. Abb. 5.1b zeigt den Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf $\mathcal{J}(x)$ für drei verschiedene Verspannungszustände der Schichten ($\vec{B} = [110]$, $t = 8 \text{ nm}$, $\Delta f = -55 \text{ nm}$). Darin entspricht $\varepsilon_T^{Ge} = 0$ einer Ge-Schicht auf einem Ge-Substrat und $\varepsilon_T^{Ge} = 6.95\%$ einer Ge-Schicht auf einem Si-Substrat. Die Kurvenverläufe für die verschiedenen Verspannungszustände sind nahezu identisch und zeigen deutlich, daß der Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf J für den gesamten Bereich möglicher Verspannungszustände vernachlässigbar klein ist. Ein vernachlässigbar kleiner Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf J wurde ebenfalls für die $[100]$ -Projektion beobachtet. Abb. 5.1c zeigt den Einfluß von Defokusvariationen auf $\mathcal{J}(x)$ für drei verschiedene Defokuswerte im Bereich zwischen -62 und -54 nm ($\vec{B} = [100]$, $t = 8 \text{ nm}$). Wie an den Kurvenverläufen zu erkennen ist, reagiert $\mathcal{J}(x)$ nur wenig empfindlich auf Defokusvariationen innerhalb dieses Bereichs. Im Vergleich zu der hier betrachteten $[100]$ -Projektion ist die Defokusabhängigkeit von $J_N(x)$ für die $[110]$ -Projektion noch wesentlich geringer. Dies hängt ursächlich mit einer größeren Fourier-Periode δf des Bild-Fourier-Koeffizienten $J = J(\vec{g}_1)$ für die $[110]$ -Projektion im Vergleich zur $[100]$ -Projektion zusammen. Die Fourier-Periode

$$\delta f = \frac{2}{g^2 \lambda} \quad (5.2)$$

beschreibt allgemein die erforderliche Variation in Δf , für die sich das Argument der Kosinusfunktion in Gl. (3.5b) gerade um 2π ändert und somit zu keiner Änderung im Grundkontrastmuster der Gitterabbildung führt.^a Für kleine Fourier-Perioden reagiert der Bildkontrast demnach empfindlicher auf Defokusvariationen als für große Fourier-Perioden. Entsprechende Werte für δf betragen $\approx 125 \text{ nm}$ für die $[110]$ -Projektion und $\approx 47 \text{ nm}$ für die $[100]$ -Projektion.

Abschließend kann festgehalten werden, daß für die Bereiche optimierter Defokus-Dickenkombinationen in der $[110]$ - und $[110]$ -Projektion ein quasilinearer Zusammenhang zwischen J und x über den gesamten Bereich $0 \leq x \leq 1$ besteht. Insbesondere erweist sich dieser quasilineare Zusammenhang als wenig empfindlich gegen Defokus- und Dickenvariationen und als unempfindlich gegen tetragonale Gitterverspannungen. Diese nachweislich geringe Empfindlichkeit von $\mathcal{J}(x)$ hinsichtlich Variationen von Δf , t und ε_T ist insbesondere für die experimentelle Umsetzung der in diesem Kapitel beschriebenen Methode zur quantitativen Kompositionsbestimmung von Bedeutung. Eine eindeutige Kompositionsbestimmung ist somit durch experimentelle Messungen von J in hochaufgelösten Gitterabbildungen und durch Anwendung der linearen Beziehung

$$x_{\text{det}} = \frac{J - J^{Ge}}{J^{Si} - J^{Ge}} \quad (5.3)$$

^aDiese Aussage gilt strenggenommen nur bei ideal kohärenter Probenbeleuchtung. Bei teilkohärenter Probenbeleuchtung unterscheiden sich die Werte $J(\vec{g}_1)$ für Defokuswerte Δf und $\Delta f + \delta f$ trotz identischer Argumente der Kosinusfunktion in Gl. (3.5b) aufgrund der aperiodisch von Δf abhängigen Dämpfungsterme $E_t(g, h)$ und $E_s(\vec{g}, \vec{h})$.

zuverlässig möglich.

5.2 Bildverarbeitungsalgorithmen

Zur experimentellen Bestimmung lokaler Kompositionswerte x_{det} auf der Grundlage von Gl. (5.3) wurden zwei neuartige Bildverarbeitungsalgorithmen entwickelt, durch deren kombinierte Anwendung eine präzise Messung von J in experimentellen Gitterabbildungen von verspannten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterosystemen ermöglicht wird. Bevor diese Bildverarbeitungsalgorithmen jedoch im Detail beschrieben werden, soll zunächst die grundsätzliche Problematik bei der Ermittlung von Bild-Fourier-Koeffizienten aus experimentellen Gitterabbildungen verspannter Heterostrukturen erörtert werden.

Bei der in dieser Arbeit entwickelten Methode wird zur Ermittlung einzelner Bild-Fourier-Koeffizienten aus experimentellen Gitterabbildungen eine zweidimensionale diskrete Fourier-Transformation (FT) [37] verwendet. Dazu wird die orts- und wertkontinuierliche ^a Bildintensitätsverteilung $I(\vec{r})$ der experimentellen Gitterabbildung, die i.a. in Form der Schwärzungsverteilung eines elektronenmikroskopischen Negativs vorliegt, an ortsdiskreten Stützstellen abgetastet und quantisiert (Digitalisierung).^b Zur Digitalisierung wurde in dieser Arbeit eine "Charge-coupled-device" (CCD)-TV Kamera eingesetzt, die eine lineare Transformation der orts- und wertkontinuierlichen Bildintensitätsverteilung $I(\vec{r}) \in \mathcal{R}$ in eine orts- und wertdiskrete Bildintensitätsverteilung $I(k, l) \in \mathcal{N}$ $\{0 \leq k < K \cap 0 \leq l < L\}$ durchführt. Anschließend wird die diskrete Bildintensitätsverteilung $I(k, l)$ in kleinere Bildbereiche (Bildzellen) $I(m, n)$ $\{0 \leq m < M \cap 0 \leq n < N\}$ unterteilt, und der Bild-Fourier-Koeffizienten J wird durch FT bestimmt. Bei diesem (und möglichen anderen) Bestimmungsverfahren für J müssen jedoch in jedem Fall zwei wichtige Voraussetzungen erfüllt sein:

- (i) Die Dichte der Stützstellen bei der Abtastung von $I(\vec{r})$ muß hinreichend groß sein, so daß die höchste Bildfrequenz g_{max} in der Gitterabbildung mindestens an zwei ortsdiskreten Stützstellen pro Raumperiode $1/g_{\text{max}}$ abgetastet wird. Diese Forderung entspricht dem sog. Abtasttheorem (Shannon-Theorem) [64]. Ist es nicht erfüllt, so kommt es zur fehlerhaften Bestimmung von Bild-Fourier-Koeffizienten durch "Unterabtastung", häufig auch als "aliasing" bezeichnet. Dabei werden die Fourier-Koeffizienten "unter" abgetasteter Bildfrequenzen an den Rändern des Bildfrequenzraumes auf Fourier-Koeffizienten niederfrequenter Bildfrequenzen zurückgefaltet, wodurch eine präzise Messung sowohl der hochfrequenten als auch der niederfrequenten Bild-Fourier-Koeffizienten verhindert wird. Bei experimentellen Gitterabbildungen wird die untere Grenze für die Abtastdichte durch die höchste Bildfrequenz des

^a Eine Funktion kann sowohl in bezug auf ihren Wertebereich als auch in bezug auf ihren Definitionsbereich kontinuierlich (nicht abzählbar) oder diskret (abzählbar) sein. Entsprechend wird eine Funktion $f(\vec{r})$ als wertkontinuierlich oder wertdiskret bzw. als ortskontinuierlich oder ortsdiskret bezeichnet [63].

^b Die Umwandlung einer ortskontinuierlichen in eine ortsdiskrete Funktion erfolgt durch Abtastung, die Umwandlung einer wertkontinuierlichen in eine wertdiskrete Funktion durch Quantisierung [63].

statistischen Rauschspektrums festgelegt.^a Eine Analyse des Bildfrequenzspektrums experimenteller Gitterabbildungen von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen (vgl. Kap. 6.3) ergab, daß eine räumliche Abtastdichte von ca. 5 Stützstellen pro 0.1 nm ausreichend ist, um negative Effekte durch Unterabtastung auszuschließen.

- (ii) Die geometrischen Abmessungen (Kantenlängen) der Bildzelle müssen in einem ganzzahligen Verhältnis zur jeweiligen Bildperiodizität stehen, für die der Bild-Fourier-Koeffizient ermittelt werden soll. Nur unter dieser Bedingung führt z.B. die FT einer einzelnen Bildkosinuswelle mit der Amplitude 1 zur Anregung eines einzelnen Bild-Fourier-Koeffizienten mit der Amplitude 1. Stehen hingegen die geometrischen Abmessungen der Bildzelle in keinem ganzzahligen Verhältnis zur betrachteten Bildperiodizität, so kommt es zu einer Anregung mehrerer, im Bildfrequenzraum benachbarter Bild-Fourier-Koeffizienten, da in diesem Fall die betrachtete Bildperiodizität nur durch Linearkombination mehrerer diskreter Sinus- und Kosinuswellen dargestellt werden kann. Hierbei ist der Einzelbetrag jedes einzelnen angeregten Bild-Fourier-Koeffizienten aus Gründen der Intensitätserhaltung kleiner als 1, was häufig durch den Begriff "leakage" ausgedrückt wird [64]. Unter diesen Bedingungen, und insbesondere wenn die Abbildung unterschiedliche Bildfrequenzen enthält, ist eine exakte Bestimmung einzelner Bild-Fourier-Koeffizienten nicht möglich. Für die hier angestrebte präzise Messung des Fourier-Koeffizienten J bedeutet dies, daß jede Bildzelle exakt ein ganzzahliges Vielfaches von Raumperioden der Grundmodulation enthalten muß. Dies ist gerade für solche Bildzellen erfüllt, die in ihren geometrischen Abmessungen und in ihrer Form einer "lokalen" projizierten Einheitszelle der abgebildeten Kristallstruktur entsprechen. Da die Bildzelle mindestens eine volle Periode der Grundmodulation enthalten muß, ist die kleinste mögliche Bildzelle durch die jeweils kleinste projizierte Einheitszelle der abgebildeten Kristallstruktur bestimmt. Hierdurch wird automatisch eine Untergrenze für die räumliche Auflösung bei der lokalen Messung von $J(\vec{g}_1)$ – und damit letztlich auch für die Bestimmung der lokalen Komposition x_{det} – festgelegt. Für den Fall von gitterfehlgepaßten Heterosystemen wie $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ besteht jedoch ein zentrales Problem bei der Messung von J darin, daß der Gitterparameter und damit auch die Größe der "lokalen" projizierten Einheitszelle des Kristallgitters von der lokalen Komposition abhängt und dadurch örtlich stark variieren kann, wie z.B. im Bereich einer $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzfläche. In der Gitterabbildungen führt dies zu lokal unterschiedlichen, kompositionsabhängigen Verzerrungen des Bildkontrastmusters durch Variationen im Abstand der hellen und dunklen Kontrastpunkte. Darüber hinaus können weitere Ursachen für geometrische Verzerrungen des Bildkontrastes in lokalen Abweichungen von der idealen Kristallstruktur, Verkippen der Probe oder des Elektronenstrahls,^b sowie in Unvollkommenheiten des Digitalisierungsvorgangs liegen. Um auch unter solchen Bedingungen

^aIn Ref. [65] wird fälschlicherweise behauptet, diese untere Grenze sei durch die höchste fundamentale Bildfrequenz der Gitterabbildung nach Abzug des statistischen Rauschens gegeben.

^bProbenverkippen liegen vor, wenn die Richtung des einfallenden Elektronenstrahl nicht exakt parallel zur betrachteten Kristallzonenachse verläuft. Strahlverkippen liegen vor, wenn der aus der

das Fourier-Spektrum lokaler Bildzellen aus dem Bild präzise bestimmen zu können, wurde ein spezieller Algorithmus zur geometrischen Bildentzerrung entwickelt, der im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

5.2.1 Geometrische Bildentzerrung

Für eine präzisen Bestimmung von Bild-Fourier-Koeffizienten aus Gitterabbildungen, die signifikante Bildverzerrungen enthalten, ist es gemäß den Ausführungen im vorangehenden Abschnitt unbedingt erforderlich, diese Bildverzerrungen vor der Durchführung der Fourier-Transformation zu korrigieren. Zu diesem Zweck wurde ein spezieller, zweistufiger Bildverarbeitungsalgorithmus zur geometrischen Bildentzerrung und Bildkontrastsymmetrisierung von hochaufgelösten Gitterabbildungen entwickelt (Programm GA1DS). Die Arbeitsweise dieses Algorithmus soll anhand von Abb. 5.2 am Beispiel einer simulierten Gitterabbildung beschrieben werden (a), die zum einen Bildbereiche mit stark unterschiedlichen Abständen zwischen den hellen (hier projizierten Atomsäulen entsprechenden) Bildkontrastpunkten enthält (Bildbereiche A und B), wie sie typischerweise in Gitterabbildungen gitterfehlgepaßter Heterosysteme auftreten, und zum anderen asymmetrische räumliche Verrückungen der Bildkontrastpunkte aufweist, wie sie typischerweise durch Unvollkommenheiten bei der Abbildung entstehen.

- (i) Im ersten Prozeßschritt wird für jeden hellen Kontrastpunkte in der Abbildung ein Kontrastschwerpunkt bestimmt, der das geometrische Zentrum der Intensitätsverteilung um den Kontrastpunkt festlegt (b). Dazu wird die Bildintensitätsverteilung $I(k, l)$ mit einem speziellen Operator, dem "Laplace-of-Gaussian" (LoG)-Operator [66] (Details siehe Anhang B), prozessiert. Dieser Prozeß verknüpft die Anwendung eines Gaußschen Bildfrequenz-Tiefpaßfilters mit der Anwendung des zweidimensionalen Laplace-Operators auf $I(k, l)$, und liefert als Ergebnis $I''(k, l)$ die zweite räumliche Ableitung der tiefpaßgefilterten Bildintensität. Im Anschluß daran werden die Nullstellen von $I''(k, l)$ ermittelt, die genau die ortsdiskreten Wendepunkte in der Grundmodulation der Bildintensität (weiße Punkte in (b)) repräsentieren. Diese Wendepunkte bilden jeweils einen geschlossenen Linienzug um jeden hellen Kontrastpunkt in der Abbildung. Die Koordinaten aller Wendepunkte eines geschlossenen Linienzugs werden schließlich dazu verwendet, einen geometrischen Koordinatenschwerpunkt zu berechnen, der den Kontrastschwerpunkt des jeweiligen hellen Kontrastpunktes definiert (schwarze Punkte in (b)). Dieses Schwerpunkt-Verfahren zeichnet sich gegenüber einem (einfacheren) Extremalverfahren, bei dem lokale Kontrastschwerpunkt anhand lokaler Maxima der Bildintensität bestimmt werden, durch eine Reihe von Vorteilen aus. Ein erster Vorteil des Schwerpunkt-Verfahrens besteht darin, daß es sehr präzise Koordinaten für die Kontrastschwerpunkte in Form reeller Zahlenpaare liefert, wohingegen das Extremalverfahren lediglich ortsdiskrete (ganzzahlige) Koordinatenpaare für die Kontrastschwerpunkte

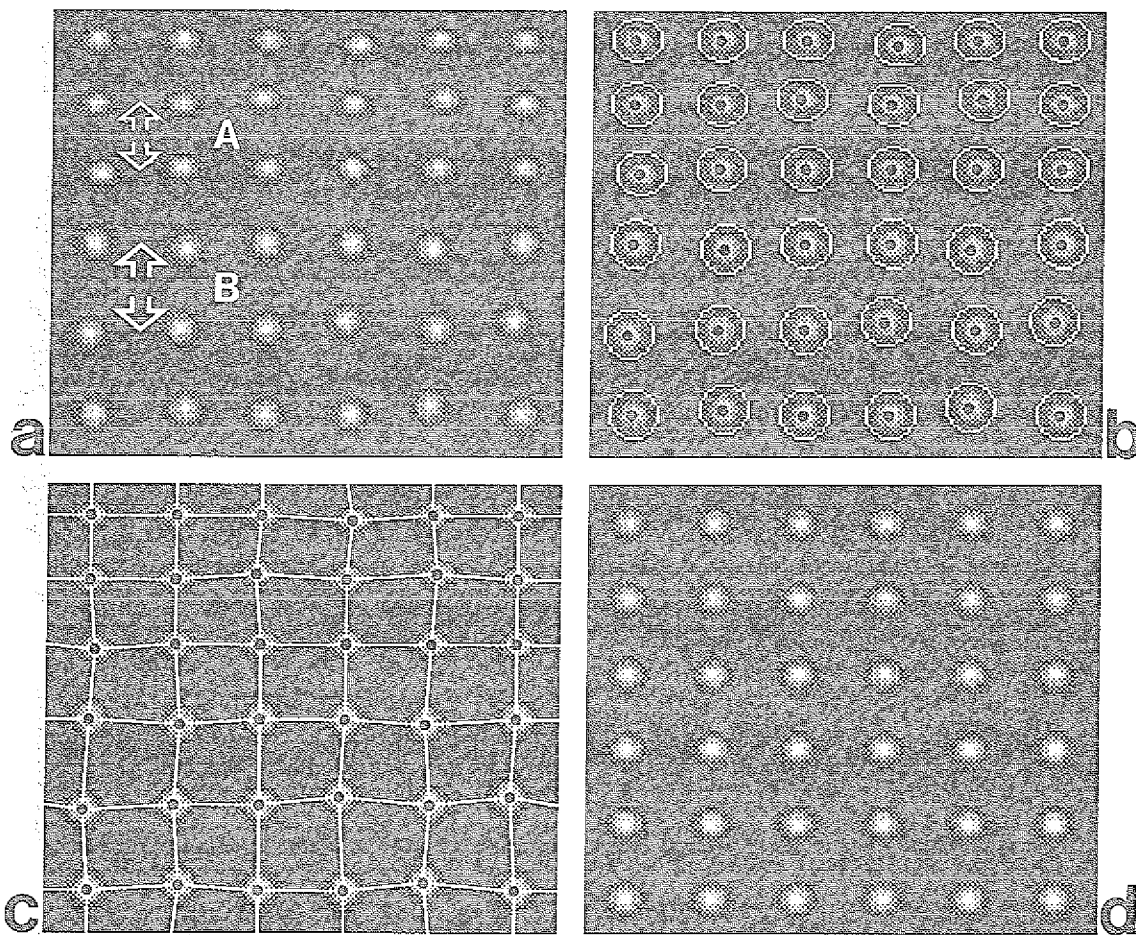


Abb. 5.2: Bildverarbeitungsschritte bei der geometrischen Bildentzerrung: (a) Gitterabbildung mit Bildverzerrungen, (b) Ermittlung von Wendepunkten (weiße Punkte) und Kontrastschwerpunkten (schwarze Punkte) der Bildintensitätsverteilung, (c) Unterteilung in Bildzellen und Interpolation, (d) resultierende, geometrisch entzerrte Gitterabbildung.

liefert. Weiterhin können geringe Fehlorientierungen beim Abbildungsprozeß dazu führen, daß die Bildintensität in der Umgebung heller Kontrapunkte eine asymmetrische Verteilung aufweist, und das Intensitätsmaximum nicht mehr mit dem "mittleren" Zentrum des Kontrapunktes übereinstimmt. Für solche Fälle besitzt das Schwerpunkt-Verfahren den Vorteil, daß zur Bestimmung der Kontrastschwerpunkte die Bildinformation aus einer weitreichenden Umgebung um den jeweiligen Kontrapunkt genutzt wird, und sich nicht – wie im Fall des Extremalverfahrens – auf nur einen einzelnen Bildpunkt stützt. Ein dritter und wesentlicher Vorteil des Schwerpunkt-Verfahrens liegt in der extrem geringen Empfindlichkeit gegen statistisches Bildrauschen. Per Definition ist nämlich der Unterschied zwischen einem lokalen Extremum der Bildintensität und benachbarten Intensitätswerten gerade mi-

nimal. Der Einfluß von statistischem Bildrauschen kann daher sehr leicht zu örtlichen Verschiebungen von lokalen Extrema führen. Im Gegensatz dazu sind die Wendepunkte der (hier kosinusförmigen) Bildintensitätsverteilung so definiert, daß dort der Unterschied zwischen benachbarten Intensitätswerten gerade maximal ist. Aus diesem Grund sind die Ortspositionen der Wendepunkte und damit auch die Ortskoordinaten der Kontrastschwerpunkte ausgesprochen unempfindlich gegen statistische Intensitätsfluktuationen. Die Unempfindlichkeit gegen statistisches Bildrauschen wurde durch ausgiebige Tests bestätigt, in denen die ermittelten Kontrastschwerpunkte für rauschfreie Abbildungen und für Abbildungen, die nachträglich mit starkem statistischem Rauschen überlagert worden waren, verglichen wurden. Da beim Schwerpunkt-Verfahren zur Bestimmung von Kontrastschwerpunkten die zweite räumliche Ableitung der Bildintensität verwendet wird, ist das Verfahren ebenfalls unempfindlich gegen Bildintensitätsstörungen von nullter und erster Ordnung in den Ortskoordinaten, wie z.B. niederfrequente Schwankungen der Bildhintergrundintensität.

- (ii) Im zweiten Prozeßschritt werden benachbarte Kontrastschwerpunkte entlang von zwei Bildrichtungen, die sich nach der geometrischen Form der kleinsten projizierten Kristalleinheitszelle richten, durch Geraden miteinander verbunden (c). Hierdurch findet eine Unterteilung der Abbildung in einzelne Bildzellen statt. Eine einzelne Bildzelle repräsentiert dabei eine "lokale" projizierte Kristalleinheitszelle, die jedoch – wie in (b) deutlich zu erkennen ist – stark verzerrt sein kann. Zur Beseitigung solcher Verzerrungen wird die (ungefilterte) Bildintensitätsverteilung innerhalb jeder Bildzelle in regelmäßigen – der jeweiligen Geometrie der Bildzelle angepaßten – Abständen erneut abgetastet und mit Hilfe einer zweidimensionalen kubischen Interpolation [67] auf eine Normbildzelle übertragen, die aus einem festen zweidimensionalen Raster aus $N' \times N'$ Bildpunkten ($N' = 2^n, n \in \mathbb{N}$) besteht. Das Ergebnis dieses Prozesses ist eine geometrisch entzerrte Gitterabbildung (d), in der alle Bildzellen exakt die gleiche Anzahl von Bildpunkten besitzen, und in der jede einzelne Bildzelle exakt an die lokale Bildperiodizität der zugrundeliegenden Abbildung angepaßt ist. Bei diesem Entzerrungsvorgang überprüft der Algorithmus automatisch, ob die Anpassung der jeweiligen Bildzelle an die zugrundeliegende Bildperiodizität korrekt erfolgt ist. Dazu wird der Bild-Fourier-Koeffizient J mittels FT für jede Bildzelle ermittelt, und die Güte der Anpassung wird anhand der – im Idealfall verschwindenden – Anregungsstärke von Bild-Fourier-Koeffizienten in der Bildfrequenzumgebung von J bewertet.

5.2.2 Kompositionsbestimmung

In diesem Abschnitt wird ein Bildverarbeitungsalgorithmus beschrieben, der die Erstellung von quantitativen Kompositionsverteilungsbildern durch lokale Bildkontrastanalysen von hochaufgelösten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Gitterabbildungen, die unter optimierten Abbildungsbedingungen aufgenommen wurden, ermöglicht (Programm QA1DS). Anhand von

Abb. 5.3 sollen die einzelnen Prozeßschritte dieses Algorithmus am Beispiel einer simulierten [110]-Gitterabbildung erläutert werden, die eine abrupte Grenzfläche vom Typ (S-a) (vgl. Kap. 4.1) zwischen Schichten aus reinem Si und Ge enthält (a). Die Bild-einschübe zeigen jeweils für jeden Prozeßschritt den Einfluß von starkem statistischem Bildrauschen.

- (i) Nach dem Digitalisierungsvorgang wird die Abbildung zunächst geometrisch entzerrt, wozu der in Kap. 5.2.1 beschriebene Algorithmus eingesetzt wird (b). Dabei werden nach Ermittlung von Wendepunkten (weiße Punkte in (b)) und Kontrastschwerpunkten (schwarze Punkte in (b)) der Bildintensitätsverteilung die Verbindungslinien zwischen den Kontrastschwerpunkten so gewählt, daß die Geometrie der resultierenden Bildzellen der kleinsten projizierten Kristalleinheit in der [110]-Projektion entspricht (c). Der Ursprung dieser mosaikähnlichen Anordnung von Bildzellen wird dabei so gewählt, daß die Mitte jeder Bildzelle mit einer Säulenposition in der Abbildung zusammenfällt. Schließlich wird die Bildintensitätsverteilung jeder Bildzelle auf ein Normbildzelle mit einem Raster aus 16×16 Bildpunkten übertragen (d).
- (ii) Im Anschluß an die geometrische Bildentzerrung wird der Bild-Fourier-Koeffizient J für jede Bildzelle durch FT bestimmt. Anhand des gemessenen Wertes für J wird nachfolgend für jede Bildzelle ein Kompositionswert x_{det} durch Anwendung von Gl. (5.3) bestimmt. Die zur Anwendung von Gl. (5.3) erforderlichen Referenzwerte J^{Ge} und J^{Si} werden jeweils in Bildbereichen von reinem Ge bzw. reinem Si durch Mittelung von J über viele Bildzellen ermittelt. Für eine Anwendung des Algorithmus auf $\text{Si/Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen wird der Referenzwert J^{Ge} entsprechend durch einen Referenzwert $J^{\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}}$ ersetzt. Die auf diese Weise ermittelten Kompositionswerte x_{det} werden schließlich in Form eines quantitativen Kompositionsverteilungsbildes, in dem unterschiedliche lokale Kompositionswerte durch unterschiedliche Graustufen (oder Farben) repräsentiert werden, der zugrundeliegenden Gitterabbildung überlagert (d). Aufgrund der speziellen geometrischen Form der kleinsten projizierten Einheitszelle in der hier betrachteten [110]-Projektion erscheint die abrupte Si/Ge-Grenzfläche im Kompositionsverteilungsbild als eine sägezahnförmige Linie (d).

Um die Zuverlässigkeit und die systematischen Fehler des beschriebenen Algorithmus zur lokalen quantitativen Kompositionsbestimmung zu ermitteln, wurde der Algorithmus auf simulierte Gitterabbildungen von abrupten und diffusen $\text{Si/Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen vom Typ (S) bzw. (D1-D3) (vgl. Abb. 4.1 und 4.2) angewendet. Abb. 5.4 zeigt für jeden der vier Grenzflächentypen jeweils das durch Anwendung des Algorithmus ermittelte Kompositionsprofil x_{det} zusammen mit dem nominellen Kompositionsprofil x_{nom} für die [110]- und die [100]-Projektion. Wie ein Vergleich der Kompositionsprofile für abrupte und diffuse Grenzflächen ergibt, sind für beide Kristallprojektionen die Abweichungen $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{sys})} = \pm |x_{\text{det}} - x_{\text{nom}}|$ der ermittelten Komposition vom Nominalwert jeweils für die abrupte Si/Ge-Grenzfläche am größten, für welche Abweichungen von maximal

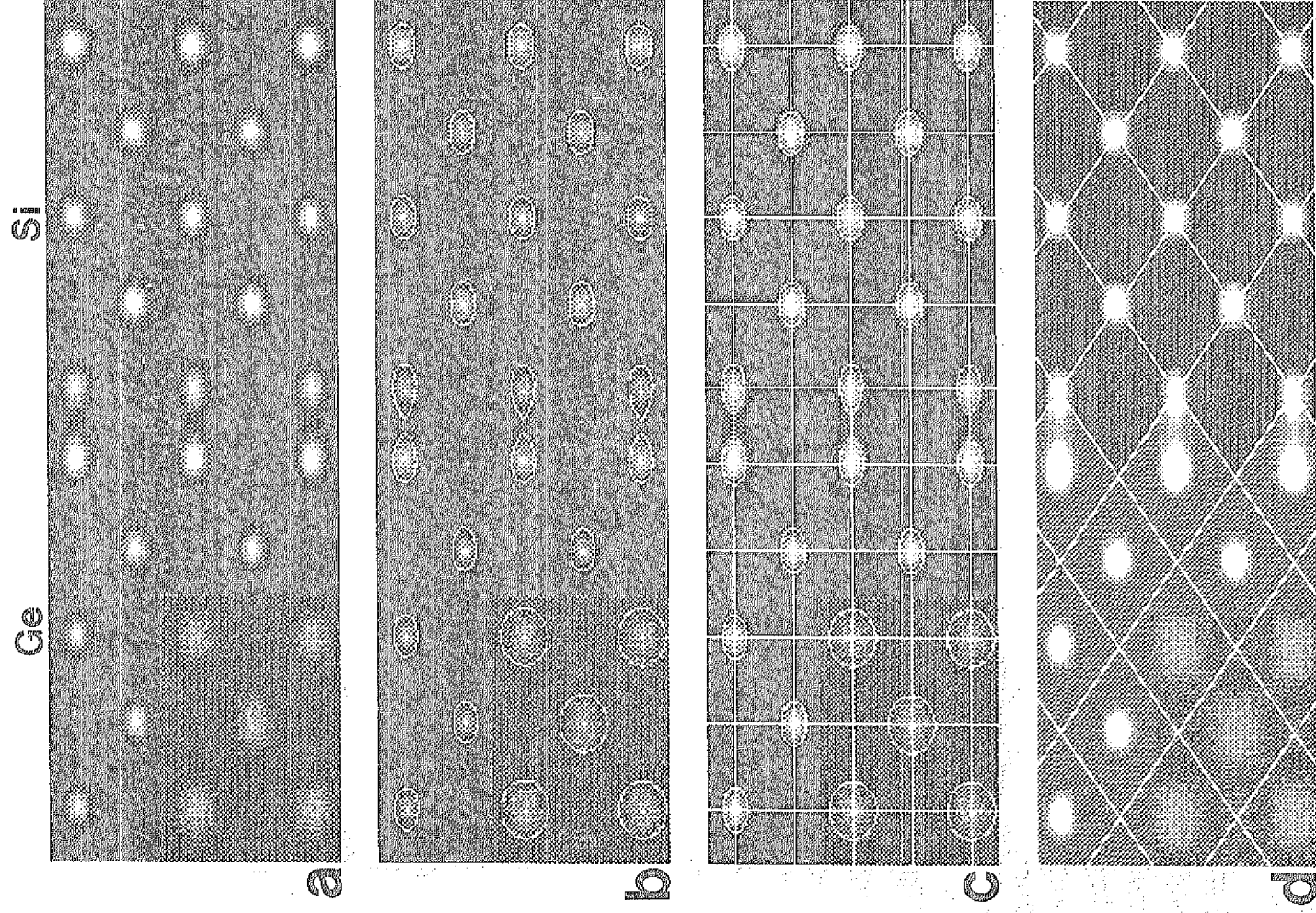


Abb. 5.3: Bildverarbeitungsschritte zur Erstellung quantitativer Kompositionsverteilungsbilder: (a) $[110]$ -Gitterabbildung einer abrupten Si/Ge-Grenzfläche, (b) Ermittlung von Wendepunkten (weiße Punkte) und Kontrast Schwerpunkten (schwarze Punkte) der Bildintensitätsverteilung, (c) Unterteilung in Bildzellen und Bildverzerrung und (d) resultierende Graustufenrepräsentation der lokalen Komposition (hellgrau: $x < 0.05$, dunkelgrau $x > 0.95$). Bildeinschiebe zeigen den Einfluß von starkem statistischem Bildrauschen auf die einzelnen Prozessschritte.

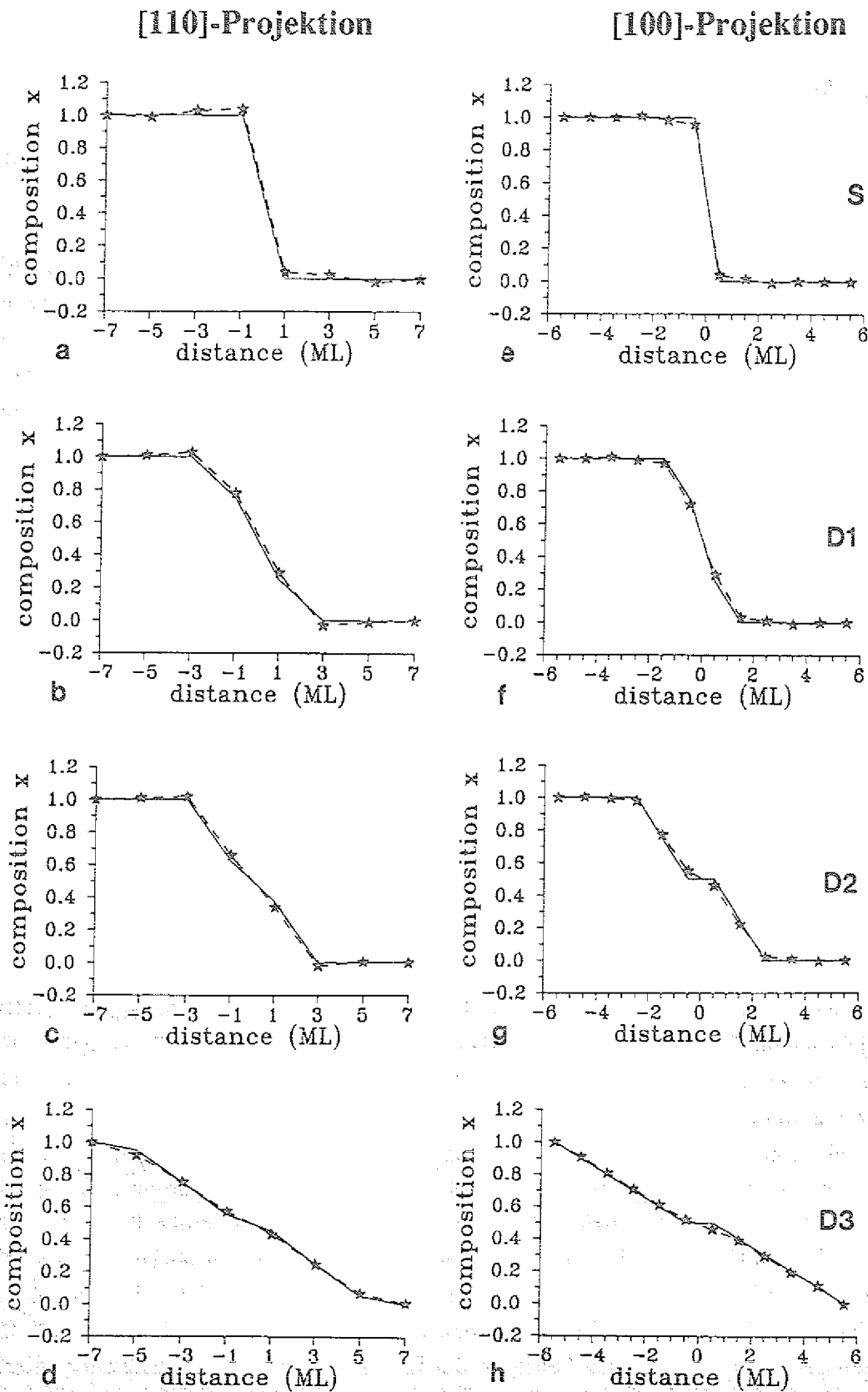


Abb. 5.4: Kompositionsprofile für abrupte (a,e) und diffuse (b-d, f-h) Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen in der [110]- und [100]-Projektion. Nominelle Komposition x_{nom} (—), ermittelte Komposition x_{det} (---).

$\Delta x_{det} = \pm 0.059$ für Bildzellen unmittelbar an der Grenzfläche auftreten (Abb. 5.4a,e). Dieser Maximalwert repräsentiert damit einen inhärenten systematischen Fehler $\Delta x_{det}^{(sys)}$ für die Kompositionsbestimmung mit Hilfe der entwickelten Methode. Für den Fall diffuser Grenzflächen sind die Abweichungen Δx_{det} allgemein geringer als für abrupte Grenzflächen, wobei Δx_{det} mit zunehmender Breite der Si-Ge-Durchmischungszone systematisch abnimmt (Abb. 5.4b–d, f–h). Für die Si/Si_xGe_{1–x}-Grenzfläche vom Typ (D3) beträgt die größte Abweichung nur noch weniger als $\Delta x_{det} = 0.02$ (Abb. 5.4d,h). Als Ergebnis dieses Test kann festgehalten werden, daß bei der Anwendung des entwickelten Algorithmus auf Gitterabbildungen von Si/Si_xGe_{1–x}-Grenzflächen, die für optimierte Abbildungsbedingungen simuliert wurden, eine sehr gute Übereinstimmung zwischen ermittelten und nominellen Werten für die lokale Komposition erzielt wird, was die Leistungsfähigkeit des Algorithmus zur lokalen quantitativen Kompositionsbestimmung deutlich demonstriert. Anhand der Testergebnisse wird ebenfalls die in Kap. 5.1 getroffene Annahme, daß ein quasilinearer Zusammenhang zwischen lokalen Werten für J und der Komposition auch für den Fall von Si/Si_xGe_{1–x}-Grenzflächen besteht, im Nachhinein bestätigt.

Der Fehler in den ermittelten Kompositionswerten hängt neben dem inhärenten systematischen Fehler auch vom statistischen Fehler der Methode ab, der durch statistische Fluktuationen von J für einen festen Kompositionswert bestimmt wird. Solche statistischen Fluktuationen (Rauschen) können durch die Standardabweichung σ der Verteilung von J beschrieben werden. Die Referenzwerte J^{Ge} und J^{Si} können als rauschfrei betrachtet werden, da sie durch Mittelung über sehr viele Bildzellen bestimmt werden. Auf der Grundlage von Gl. (5.3), und durch Anwendung elementarer Fehlerrechnung [34], ergibt sich ein statistischer Fehler der Methode von

$$\Delta x_{det}^{(stat)} = \pm \frac{\sigma}{|J^{Si} - J^{Ge}|}. \quad (5.4)$$

Anhand von Analysen der Bild-Fourier-Spektren experimenteller Si/Si_xGe_{1–x}-Gitterabbildungen wurde für σ ein Durchschnittswert von $\sigma = |\max J^{Ge}|/10$ ermittelt. Für den Fall eines Kontrastübergangs S→T zwischen Ge und Si nimmt der Nenner in Gl. (5.4) den Wert $2|\max J^{Ge}|$ an, woraus ein statistischer Fehler von $\Delta x_{det}^{(stat)} = \pm 0.05$ resultiert. Dieser Fehler schließt auch einen Rauschanteil für J mit ein, der aufgrund von Fluktuationen in der Besetzung einzelner Gitterplätze mit Si- oder Ge-Atomen entlang projizierter Atomsäulen entsteht (Legierungsrauschen). Für den Fall eines Kontrastübergangs S→HP zwischen Ge und Si beträgt der Ausdruck im Nenner von Gl. (5.4) $|\max J^{Ge}|$, und der statistische Fehler ist mit $\Delta x_{det}^{(stat)} = \pm 0.1$ größer als für den Fall eines Kontrastübergangs S→T. Daher sind bei der experimentellen Anwendung der Methode im Hinblick auf einen geringen statistischen Fehler in der Kompositionsbestimmung nach Möglichkeit Kontrastübergänge vom Typ S→T bzw. T→S einzustellen. Die Quelle eines zusätzlichen systematischen Fehlers liegt in der impliziten Annahme, daß sich die Probendicke und der Defokus über den Bereich der analysierten Gitterabbildung nicht ändert. Jedoch sind örtliche Schwankungen von t und Δf in experimentellen Gitterabbildungen immer

zu erwarten, was gemäß den Untersuchungen in Kap. 5.1 zu ähnlichen Variationen in J führt wie eine lokale Änderung der Komposition. Der systematische Fehler, der durch solche Einflüsse entsteht, wird auf $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \pm 0.05$ abgeschätzt. Ein weiterer systematischer Fehler bei der quantitativen Kompositionsbestimmung kann durch Unvollkommenheiten während des Abbildungsvorgangs entstehen, insbesondere durch Strahl- und Probenverkipnungen. Strahlverkipnungen führen gemäß Ref. [68] zu einer individuellen Verschiebung von Teilen des Bildkontrastmusters, wobei der Verschiebungsvektor einzelner Bildkontrast-Teilmuster vom zugehörigen Bildfrequenzenvektor $\vec{g}$ abhängt. Ein Vorteil der hier vorgestellten Methode besteht jedoch darin, daß als chemisches Signal zur quantitativen Kompositionsbestimmung nur die Amplitude J einer einzigen Bildfrequenz $\vec{g} = \vec{g}_1$ verwendet wird, und zwar über den gesamten Kompositionsbereich. Der relative Unterschied in $|\vec{g}_1|$ beträgt entsprechend der Gitterfehlpassung zwischen Si und Ge für unterschiedliche Kompositionen maximal nur 4.2 %. Aus diesen Gründen führen Strahlverkipnungen zwar zu einer absoluten Verschiebung des Grundkontrastmusters der Gitterabbildung in bezug auf die projizierte Kristallstruktur, jedoch sind die relativen Verschiebungen der Grundkontrastmuster zwischen Probenbereichen unterschiedlicher Komposition vernachlässigbar klein. Strahlverkipnungen führen in Gitterabbildungen von Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen daher nicht zu asymmetrischen Bildmustern und haben somit auch keinen negativen Einfluß auf die quantitative Kompositionsbestimmung. Die Ergebnisse von Bildsimulationen zeigen, daß Probenverkipnungen um Winkel > 5 mrad zu Asymmetrien im lokalen Bildkontrastmuster führen können. Jedoch werden solche Kontrastasymmetrien zum einen nahezu vollständig durch den in Kap. 5.2.1 beschriebenen Algorithmus zur Bildentzerrung korrigiert, und der verbleibende Fehler in der Kompositionsbestimmung ist vernachlässigbar klein. Zum anderen führt eine Probenverkipnungen um einen Winkel > 5 mrad zu einer völligen Auslöschung von HP-Bildkontrasten in der Gitterabbildung, weshalb solche großen Probenverkipnungen im Experiment leicht zu erkennen und entsprechend zu korrigieren sind. Für den Gesamtfehler der entwickelten Methode ergibt sich somit letztlich ein Wert von $\Delta x_{\text{det}} = \pm 0.1$.

5.2.3 Vergleich mit anderen Algorithmen

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methode zur lokalen quantitativen Kompositionsbestimmung verwendet einen Algorithmus, der die kompositionelle Bildinformation durch eine lokalen Bildkontrastanalyse im Fourier-Raum extrahiert (Kap. 5.2.2). Im Gegensatz zu diesem "Fourier-Raum"-Algorithmus wurden zur quantitativen Kompositionsbestimmung bei III-V-Heterosystemen u.a. Algorithmen vorgeschlagen, bei denen eine Kompositionsbestimmung durch Bildmusterkorrelationen im Ortsraum durchgeführt wird [5–7]. Im folgenden sollen am Beispiel des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus von Ourmazd und Kollegen [5,6] die Unterschiede zwischen einem typischen "Ortsraum"-Algorithmus und dem in dieser Arbeit entwickelten "Fourier-Raum"-Algorithmus erörtert werden.

Um einen transparenten Vergleich der beiden Algorithmen vornehmen zu können, wird der "Kreuzkorrelations"-Algorithmus zunächst aus der Ortsdarstellung in eine Fourier-Darstellung überführt. Den Ausgangspunkt bildet die zweidimensionale Bildintensitätsverteilung einer Bildzelle $I(m, n)$ $\{0 \leq m < M \cap 0 \leq n < N\}$. Für diese Bildzelle wird ein Intensitätsvektor $\vec{I}$ definiert, dessen $M \times N$ Komponenten durch die Einzelwerte $I(m, n)$ gegen sind

$$\vec{I} = (I(0, 0), \dots, I(M-1, 0), \dots, I(0, N-1), \dots, I(M-1, N-1)).$$

Analog dazu wird ein Fourier-Vektor

$$\vec{J} = (J(0, 0), \dots, J(M-1, 0), \dots, J(0, N-1), \dots, J(M-1, N-1))$$

der Bildzelle definiert, dessen Komponenten $J(k, l) \in \mathbb{C}$ $\{0 \leq k < M \cap 0 \leq l < N\}$ sich aus der zweidimensionalen Fourier-Transformation von $I(m, n)$ ergeben:

$$J(k, l) = \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} I(m, n) \exp(-2\pi i(km/M + ln/N)). \quad (5.5)$$

Für einen gegebenen Fourier-Vektor kann der entsprechende Intensitätsvektor durch eine zweidimensionale Fourier-Rücktransformation bestimmt werden:

$$I(m, n) = \frac{1}{MN} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} J(k, l) \exp(2\pi i(km/M + ln/N)). \quad (5.6)$$

Beim "Kreuzkorrelations"-Algorithmus wird zur Kompositionsbestimmung der normierte Kreuzkorrelationskoeffizient $C(\vec{I}_A, \vec{I}_B)$ von zwei Bildzellen A und B verwendet:

$$C(\vec{I}_A, \vec{I}_B) = \frac{\sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} I_A(m, n) I_B(m, n)}{\sqrt{\sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} I_A^2(m, n)} \sqrt{\sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} I_B^2(m, n)}} = \frac{\vec{I}_A \vec{I}_B}{|\vec{I}_A| |\vec{I}_B|}. \quad (5.7)$$

Da die Komponenten der Intensitätsvektoren allgemein reell sind, kann der Kreuzkorrelationskoeffizient alternativ auch durch entsprechende Fourier-Vektoren $\vec{J}_A$ und $\vec{J}_B$ ausgedrückt werden, was durch Einsetzen von Gl. (5.6) in Gl. (5.7) und durch Anwendung des Parsevalschen Theorems [34] direkt verifiziert werden kann:

$$C(\vec{I}_A, \vec{I}_B) = C(\vec{J}_A, \vec{J}_B^*). \quad (5.8)$$

Im weiteren soll $\vec{I}_x$ den Intensitätsvektor einer Bildzelle mit der zu bestimmenden Komposition x , und $\vec{I}_0$ und $\vec{I}_1$ sollen die Intensitätsvektoren für Referenzbildzellen für $x = 0$ bzw. $x = 1$ bezeichnen. Beim "Kreuzkorrelations"-Algorithmus ist das normierte chemische Signal $C_N(x)$ durch folgende Beziehung gegeben:

$$C_N(x) = \frac{\arccos C_x}{\arccos C_1}, \quad (5.9)$$

worin C_x den normierte Kreuzkorrelationskoeffizient bezeichnet:

$$C_x = \frac{\vec{I}_x^\parallel \vec{I}_0}{|\vec{I}_x^\parallel| |\vec{I}_0|}. \quad (5.10)$$

In Gl. (5.10) bezeichnet $\vec{I}_x^\parallel$ die Projektion des Intensitätsvektors $\vec{I}_x$ auf eine Hyperebene $\mathcal{P}$, die von den beiden Referenz-Intensitätsvektoren $\vec{I}_0$ und $\vec{I}_1$ aufgespannt wird. Entsprechend Gl. (5.8) kann Gl. (5.10) in äquivalenter Form durch die entsprechenden Fourier-Vektoren ausgedrückt werden:

$$C_x = \frac{\vec{J}_x^\parallel \vec{J}_0^*}{|\vec{J}_x^\parallel| |\vec{J}_0|}. \quad (5.11)$$

In dieser Gleichung bezeichnet $\vec{J}_x^\parallel$ die Projektion des Fourier-Vektors $\vec{J}_x$ auf eine Hyperebene $\mathcal{Q}$, die von den beiden Referenz-Fourier-Vektoren $\vec{J}_0$ und $\vec{J}_1$ aufgespannt wird. Im weiteren wird angenommen, daß die Intensitätsverteilung der Bildzellen ein Symmetriezentrum besitzt, d.h. $\vec{J} = \vec{J}^*$. Zur Berechnung von $\vec{J}_x^\parallel$ aus $\vec{J}_x$ werden in der Ebene $\mathcal{Q}$ zwei orthonormale Basisvektoren $\vec{j}_0$ und $\vec{j}_1$ mit folgenden Eigenschaften definiert:

$$\begin{aligned} \vec{j}_0 &= \gamma \vec{J}_0 \quad \{\gamma \in \mathcal{R}\} \quad \wedge \quad |\vec{j}_0| = 1 \\ \vec{j}_1 &= \gamma_0 \vec{J}_0 + \gamma_1 \vec{J}_1 \quad \{\gamma_0, \gamma_1 \in \mathcal{R}\} \quad \wedge \quad |\vec{j}_1| = 1 \quad \wedge \quad \vec{j}_1 \vec{j}_0 = 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Die Verwendung dieser Basisvektoren ergibt

$$\begin{aligned} \vec{J}_x^\parallel &= \alpha_0 \vec{j}_0 + \alpha_1 \vec{j}_1 \\ \vec{J}_1 &= \beta_0 \vec{j}_0 + \beta_1 \vec{j}_1 \end{aligned} \quad (5.13)$$

mit reellen Koeffizienten

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \vec{J}_x \vec{j}_0 & \alpha_1 &= \vec{J}_x \vec{j}_1 \\ \beta_0 &= \vec{J}_1 \vec{j}_0 & \beta_1 &= \vec{J}_1 \vec{j}_1. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Durch Einsetzen von Gl. (5.13) in Gl. (5.11) ergibt sich

$$C_x = \frac{\alpha_0}{\sqrt{\alpha_0^2 + \alpha_1^2}} \quad \text{und} \quad C_1 = \frac{\beta_0}{\sqrt{\beta_0^2 + \beta_1^2}}. \quad (5.15)$$

Durch Verwendung von Gl. (5.9) und der Beziehungen $\arccos(x/\sqrt{1+x^2}) = \operatorname{arccot} x$ und $\operatorname{arccot}(x/y) = \arctan(y/x)$ ergibt sich schließlich eine übersichtliche Fourier-Darstellung für das normierte chemische Signal $C_N(x)$:

$$C_N(x) = \frac{\arctan(\alpha_1/\alpha_0)}{\arctan(\beta_1/\beta_0)}. \quad (5.16)$$

Darin bezeichnet der Quotient α_1/α_0 den Tangens des "Winkels" ϕ_x zwischen $\vec{J}_x^\parallel$ und $\vec{j}_0$, und β_1/β_0 den Tangens des "Winkels" ϕ_1 zwischen $\vec{J}_1$ und $\vec{j}_0$, also $C_N(x) = \phi_x/\phi_1$.

Im folgenden sollen die beiden hier betrachteten Algorithmen hinsichtlich der beiden wichtigsten Eigenschaften miteinander verglichen werden, nämlich

- (i) hinsichtlich des funktionalen Zusammenhangs zwischen dem jeweiligen chemischen Signal $\mathcal{J}_N(x)$ (Gl. (5.1), (5.3)) bzw. $\mathcal{C}_N(x)$ (Gl. (5.16)) und der Komposition x , sowie
- (ii) hinsichtlich der Empfindlichkeit gegen statistisches Bildrauschen.

Gemäß Gl. (5.16) wird die Kompositionsabhängigkeit des normierten chemischen Signals $\mathcal{C}_N(x)$ nur durch den Zähler $\arctan(\alpha_1/\alpha_0)$ bestimmt, da der Nenner $\arctan(\beta_1/\beta_0)$ lediglich eine von x unabhängige Normierungskonstante repräsentiert. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird deshalb im weiteren der Nenner als 1 angenommen. Für das normierte chemische Signal ergibt sich unter dieser Annahme

$$\mathcal{C}_N(x) = \arctan \frac{\sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} J_x(k, l) \vec{j}_1(k, l)}{\sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} J_x(k, l) \vec{j}_0(k, l)}. \quad (5.17)$$

Wie Gl. (5.17) zeigt, besteht der Nenner und der Zähler aus je einer gewichteten Summe der Bild-Fourier-Koeffizienten $J_x(k, l)$, wobei jeder einzelne Bild-Fourier-Koeffizient mit der entsprechenden Komponente des Basisvektors $\vec{j}_0$ bzw. $\vec{j}_1$ gewichtet wird. Da die Summation über alle Werte von k, l ausgeführt wird, hängt das chemische Signal $\mathcal{C}_N(x)$ im allgemeinsten Fall von allen $M \times N$ Bild-Fourier-Koeffizienten $J_x(k, l)$ ab. Werden jedoch die Referenz-Intensitätsvektoren $\vec{I}_0$ und $\vec{I}_1$ wie üblich als rauschfrei betrachtet, so sind in den Referenz-Fourier-Vektoren $\vec{J}_0$ und $\vec{J}_1$, und entsprechend auch in $\vec{j}_0$ und $\vec{j}_1$, nur solche Vektorkomponenten von null verschieden, die fundamentalen Bildfrequenzen der Gitterabbildung entsprechen. Mit fundamentalen Bildfrequenzen sind hierbei solche Bildfrequenzen gemeint, die direkt mit dem Raumfrequenzspektrum der abgebildeten Gitterstruktur korreliert sind und nicht ursächlich von statistischem Bildrauschen herrühren. Dadurch wird die Summation im Nenner und Zähler von Gl. (5.17) effektiv nur über die fundamentalen Bild-Fourier-Koeffizienten ausgeführt, da alle anderen Summanden null sind. Dies führt dazu, daß der gesamte Einfluß von Bildrauschen auf den Rauschanteil reduziert ist, der auf die fundamentalen Bild-Fourier-Koeffizienten entfällt. Die Verwendung des projizierten Intensitätsvektors $\vec{I}_x^{\parallel}$ anstelle von $\vec{I}_x$ in Gl. (5.9) hat zur Folge, daß die zu $\mathcal{C}_N(x)$ (Gl. (5.17)) beitragenden Bild-Fourier-Koeffizienten letztlich auf solche Bild-Fourier-Koeffizienten beschränkt sind, die einen nichtverschwindenden Wert in den Referenz-Fourier-Vektoren $\vec{J}_0$ oder $\vec{J}_1$ aufweisen.

Trotz der geringen Zahl von Bild-Fourier-Koeffizienten, die effektiv zu $\mathcal{C}_N(x)$ beitragen, ergibt sich für $\mathcal{C}_N(x)$ eine i.a. komplexe Abhängigkeit von der Komposition x , die aus der in Gl. (5.17) enthaltenen gewichteten Summation der kompositionsabhängigen fundamentalen Bild-Fourier-Koeffizienten im Nenner und Zähler, der anschließenden Quotientenbildung, sowie aus der nichtlinearen funktionalen Charakteristik der Arcustangensfunktion resultiert. Dieser Zusammenhang zwischen $\mathcal{C}_N(x)$ und x soll nachfolgend an einem einfachen Beispiel erläutert werden. Dazu betrachten wir eine Abbildung, die durch nur zwei kompositionsabhängige Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_A, x)$ und $J(\vec{g}_B, x)$

beschrieben wird:

$$\begin{aligned} J(\vec{g}_A, x) &= a - x^v & \{a, v \in \mathcal{R}_{\geq 0} \mid a \neq 1\} \\ J(\vec{g}_B, x) &= x^w & \{w \in \mathcal{R}_{\geq 0}\}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Die zugehörigen Referenz-Fourier-Vektoren lauten

$$\begin{aligned} \vec{j}_A &= (1, 0, 0, \dots, 0) \\ \vec{j}_B &= (0, 1, 0, \dots, 0). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Damit ergibt sich für die Kompositionsabhängigkeit des normierten chemischen Signals:

$$C_N(x) = \arctan \left[\frac{x^w}{a - x^v} \right]. \quad (5.20)$$

Für kleine Kompositionswerte $x \ll 1$ kann die Arcustangensfunktion durch ihr Argument ersetzt werden:

$$C_N(x) = \frac{x^w}{a - x^v}. \quad (5.21)$$

Wie Gl. (5.21) zeigt, ergibt sich ein linearer Zusammenhang zwischen $C_N(x)$ und x nur unter restriktiven Bedingungen für die Kompositionsabhängigkeit der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_A, x)$ und $J(\vec{g}_B, x)$. Danach darf $J(\vec{g}_A, x)$ überhaupt nicht von x abhängen ($v = 0$), wohingegen $J(\vec{g}_B, x)$ linear von x abhängen muß ($w = 1$). Für andere Werte der Exponenten v und w ergibt sich in allen Fällen ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen $C_N(x)$ und x . Für größere Kompositionswerte führt jedoch selbst eine lineare Kompositionsabhängigkeit des Quotienten in Gl. (5.21) zu Nichtlinearitäten des chemischen Signals $C_N(x)$, die aus der nichtlinearen funktionalen Charakteristik der Arcustangensfunktion in Gl. (5.20) resultieren.

Das erörterte Beispiel entspricht nahezu der Situation, wie sie für das System GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ in der [100]-Projektion vorliegt [28]. Unter optimierten Abbildungsbedingungen zeigen dort die Bild-Fourier-Koeffizienten $J(000)$ und $J(220)$ ein von der Komposition nahezu unabhängiges Verhalten (entsprechend $J(\vec{g}_A, x)$ für $v = 0$), wohingegen der Bild-Fourier-Koeffizient $J(200)$ nahezu linear mit x variiert (entsprechend $J(\vec{g}_B, x)$ für $w = 1$). Die Tatsache, daß das chemische Signal, wie Gl. (5.20) zeigt, über eine Arcustangensfunktion von den einzelnen Bild-Fourier-Koeffizienten abhängt, erklärt (hier) einsichtig die in Ref. [8] (ohne Erklärung) getroffene Feststellung, wonach $C_N(x)$ "exzellent" durch eine Arcustangensfunktion beschrieben werden kann.

Für das $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -System ist die Situation im Vergleich zum GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -System verändert, da in diesem Fall die Bildintensitätsverteilung neben dem Bild-Fourier-Koeffizienten $J(\vec{g}_1)$, der linear von der Komposition abhängt, maßgeblich auch durch die Bild-Fourier-Koeffizienten $J(000)$ und $J(\vec{g}_2)$ bestimmt wird, die nichtlinear oder sogar nichtmonoton von x abhängen (vgl. Kap. 3.2). Die Einbeziehung aller fundamentalen Bild-Fourier-Koeffizienten in Gl. (5.17) führt dazu, daß $C_N(x)$ beträchtliche Abweichungen von einer linearen Kompositionsabhängigkeit zeigt. Dies ist in Abb. 5.5 gezeigt, wo auf der Grundlage der Gleichungen (3.5a-d) das normierte chemische Signal $C_N(x)$ für

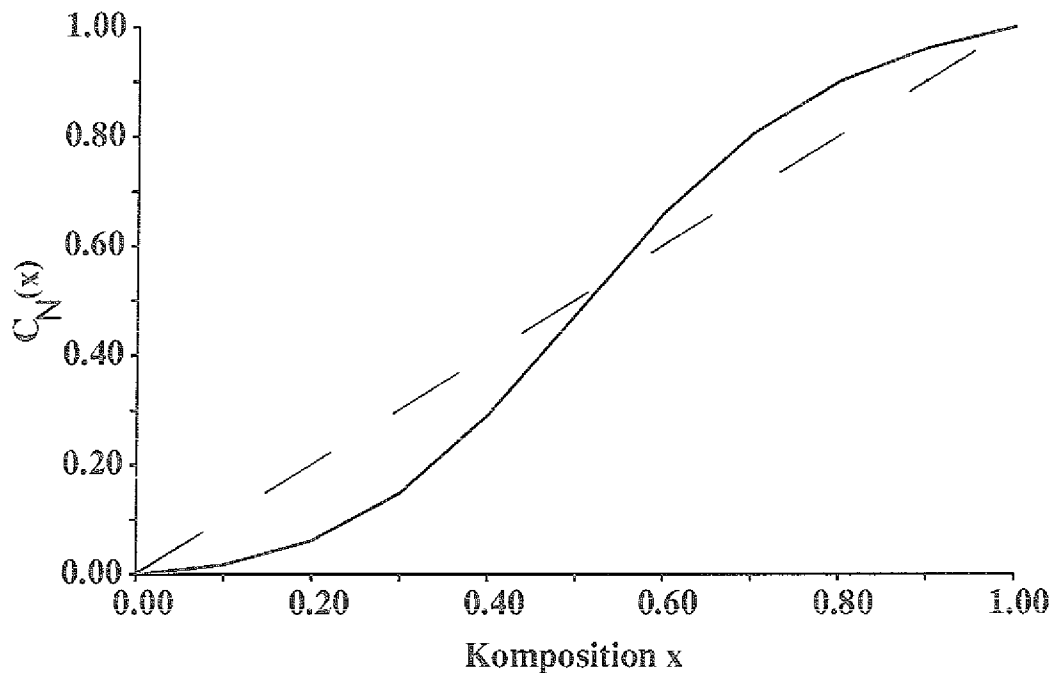


Abb. 5.5: Auftragung des mit Hilfe des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus [5,6] berechneten chemischen Signals $C_N(x)$ für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ als Funktion von x ($\vec{B} = [110]$, $t = 10 \text{ nm}$, $\Delta f = -55 \text{ nm}$).

$\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen als Funktion der Komposition aufgetragen ist. Die gewählten Abbildungsbedingungen entsprechen hierbei den Abbildungsbedingungen, die in Abb. 5.1 für die Auftragung von $\mathcal{J}_N(x)$ verwendet wurden ($\vec{B} = [110]$, $t = 10 \text{ nm}$, $\Delta f = -55 \text{ nm}$). Signifikante Abweichungen von einer linearen Beziehung $C_N(x) \propto x$ sind anhand des Kurvenverlaufs deutlich zu erkennen, die zudem stark mit der Probendicke und dem Defokus variieren (nicht gezeigt). Im Gegensatz zu dieser komplizierten Kompositionsabhängigkeit des chemischen Signals bei der "Kreuzkorrelations"-Methode ergibt sich bei der in dieser Arbeit entwickelte "Fourier-Raum"-Methode ein quasilinearer Zusammenhang zwischen dem chemischen Signal $\mathcal{J}_N(x)$ und x , da zur Bestimmung von $\mathcal{J}_N(x)$ nur ein einzelner Bild-Fourier-Koeffizient, der seinerseits linear von x abhängt, verwendet wird (vgl. Kap. 5.1). Ein zusätzlicher Vorteil der "Fourier-Raum"-Methode besteht in der geringen Empfindlichkeit dieses quasilinearen Zusammenhangs gegen Schwankungen der Probendicke und des Defokus.

Den zweiten wichtigen Vergleichsaspekt bildet die Empfindlichkeit der beiden Methoden zur Kompositionsbestimmung in bezug auf statistisches Bildrauschen. In experimentellen Gitterabbildungen sind in der Regel alle $M \times N$ Bild-Fourier-Koeffizienten $J(k, l)$ einer Bildzelle von statistischem Bildrauschen betroffen, wobei das Rauschen eines einzelnen Bild-Fourier-Koeffizienten durch seine Standardabweichung $\sigma(k, l)$ quantifiziert werden kann. Unter der Annahme, daß die Referenz-Intensitätsvektoren $\vec{I}_0$ und $\vec{I}_1$ frei von statistischem Rauschen sind, und daß die Komposition x_{det} durch Gl. (5.17) gegeben

ist, ergibt sich durch Anwendung elementarer Fehlerrechnung [34] für die "Kreuzkorrelations"-Methode ein statistischer Fehler in der Kompositionsbestimmung von:

$$\begin{aligned}\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} &= \sqrt{\sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} \left(\frac{\partial x_{\text{det}}}{\partial J(k, l)} \right)^2 \sigma^2(k, l)} \\ &= \frac{1}{\phi_1 |\underline{J}_x|^2} \sqrt{\sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} (j_1(k, l) \alpha_0 - j_0(k, l) \alpha_1)^2 \sigma^2(k, l)}.\end{aligned}\quad (5.22)$$

Dieser komplexe Ausdruck für $x_{\text{det}}^{(\text{stat})}$ kann wesentlich vereinfacht werden, indem für das statistische Bildrauschen ein "weißes" Rauschspektrum angenommen wird, d.h. $\sigma(k, l) = \sigma \{0 \leq k \leq M-1 \cap 0 \leq l \leq N-1\}$. Unter dieser Annahme ergibt sich für den statistischen Fehler in x gemäß Gl. (5.22):

$$\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \frac{\sigma}{\phi_1 |\underline{J}_x|} \quad (5.23)$$

Demnach hängt $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})}$ zum einen umgekehrt proportional vom "Winkel" ϕ_1 zwischen $\vec{J}_0$ und $\vec{J}_1$ ab, und zum anderen proportional vom relativen Bildrauschen $\sigma/|\underline{J}_x|$. Insbesondere ist der statistische Fehler nicht, wie im Fall der "Fourier-Raum"-Methode, von der betrachteten Komposition unabhängig, sondern hängt über den Betrag $|\underline{J}_x|$ von der Komposition ab. Unter optimierten 5-Strahl-Abbildungsbedingungen, und unter der Annahme $\sigma = (\max J^{\text{Ge}})/10$, ergibt sich durch Anwendung von Gl. (3.5a-d) für den statistischen Fehler in x ein mittlerer Wert von $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \pm 0.053$. Dieser Fehler ist vergleichbar mit dem Fehler, der sich für die "Fourier-Raum"-Methode ergibt (Kap. 5.2.2). Die Annahme eines "weißen" Rauschspektrums ist jedoch für den Fall experimenteller Gitterabbildungen, für die das Rauschspektrum Gauß-förmig um den Ursprung des Bildfrequenzraumes verteilt ist, nicht gerechtfertigt. Dies führt dazu, daß z.B. der Bild-Fourier-Koeffizienten $J(000)$, d.h. die Bildhintergrundintensität, eine bedeutend höhere Standardabweichung im Rauschen aufweist als z.B. die Amplitude $J(\vec{g}_1)$ der Grundmodulation. Aus diesem Grund kann ein statistischer Fehler von $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \pm 0.053$ lediglich als eine Fehleruntergrenze angesehen werden. Für die im Rahmen dieser Arbeit experimentell aufgenommenen Gitterabbildungen von Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen ergaben sich unter optimierten Abbildungsbedingungen, und für den Fall von Kontrastübergängen vom Typ S→T zwischen Ge und Si, statistische Fehler in x von bis zu $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \pm 0.11$ bei Anwendung des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus. Die "Fourier-Raum"-Methode besitzt demnach ein wesentlich günstigeres Signal-zu-Rausch-Verhältnis $1/\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})}$, das z.T. mehr als doppelt so hoch ist im Vergleich zur "Kreuzkorrelations"-Methode. Darüber hinaus ergibt sich bei der "Kreuzkorrelations"-Methode ein im Vergleich zur "Fourier-Raum"-Methode ebenfalls höherer systematischer Fehler $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{sys})}$ durch den Einfluß nicht-lokaler Kontrasteffekte aufgrund von Fresnel-Beugung (vgl. Kap. 4.1), da von solchen Effekten stark betroffene niederfrequente Bild-Fourier-Koeffizienten (z.B. $J(000)$) bei der

"Kreuzkorrelations"-Methode ebenfalls zur Kompositionsbestimmung verwendet werden.

Zum Abschluß dieses Kapitels soll am Beispiel des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus demonstriert werden, daß der in dieser Arbeit entwickelten Algorithmus zur geometrischen Bildentzerrung (Kap. 5.2.1) auch in Kombination mit anderen "Orts-Raum"- oder "Fourier-Raum"-Algorithmen zur quantitativen Kompositionsbestimmung vorteilhaft eingesetzt werden kann. Dazu wird für den Fall einer diffusen GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Grenzfläche in der [100]-Projektion die Auswirkung einer geringen Strahlverkipfung auf die quantitative Kompositionsbestimmung mittels des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus untersucht. Abb. 5.6a zeigt eine simulierte 9-Strahl-Gitterabbildung für eine diffuse Grenzfläche, die zwischen Schichten aus reinem GaAs und AlAs eine 4 Kationenlagen breite Durchmischungszone aufweist (durch Pfeile gekennzeichnet), unter optimierten Abbildungsbedingungen ($\Delta f = -20 \text{ nm}$, $t = 10.7 \text{ nm}$), wie sie in Ref. [8] für dieses Materialsystem ermittelt wurden. Der Bildkontrast in reinem GaAs wird durch ein $\{220\}$ -Bildkontrastmuster dominiert und verändert sich systematisch mit zunehmendem Al-Gehalt der Kationenlagen zu einem $\{200\}$ -Bildkontrastmuster. Abb. 5.6b zeigt den Einfluß einer Strahlverkipfung um 1.9 mrad senkrecht zur Grenzflächenebene auf den Bildkontrast unter sonst gleichen Abbildungsbedingungen wie in Abb. 5.6a. Gemäß den Ausführungen in Kap. 5.2.2 führt die Strahlverkipfung zu einer Verschiebung der lokalen Bildkontrastmuster in bezug auf die projizierte Kristallstruktur, wobei die Verschiebungsbeträge für das $\{220\}$ - und das $\{200\}$ -Bildkontrastmuster signifikant verschieden sind. Dies verursacht eine betonte Asymmetrie des Bildkontrastmusters in Bereichen von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ und reinem AlAs. Daß im Bereich von reinem AlAs überhaupt ein $\{220\}$ -Bildkontrastmuster auftritt, hängt mit dem Einfluß von Strahlverkipfungen auf die Wellenaberrationsfunktion χ zusammen [68]. Die direkte Anwendung des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus auf Gitterabbildungen, die solche stark asymmetrischen Bildkontrastmuster aufweisen, kann zu beträchtlichen Fehlern bei der lokalen Kompositionsbestimmung führen. Eine quantitative Kompositionanalyse mit Hilfe des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus ergab Abweichungen von bis zu $\Delta x = 0.08$ zwischen lokalen Kompositionswerten für die mit Abbildungsfehlern behaftete Gitterabbildung in Abb. 5.6b und lokalen Kompositionswerten für die (ideale) Gitterabbildung in Abb. 5.6a. Ein erfolgreicher Einsatz von Bildmusterkorrelations-Algorithmen wie dem "Kreuzkorrelations"-Algorithmus zur Kompositionsbestimmung ist jedoch auch bei Gitterabbildungen mit stark asymmetrischen Bildkontrastmustern möglich, wenn begleitend dazu der in Kap. 5.2.1 beschriebene Algorithmus zur geometrischen Bildentzerrung und Kontrastsymmetrisierung eingesetzt wird. Das Ergebnis einer Anwendung dieses Algorithmus auf die Gitterabbildung in Abb. 5.6b ist in Abb. 5.6c gezeigt, in der deutlich die Symmetrisierung des Bildkontrastmusters zu erkennen ist. Eine Anwendung des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus auf die korrigierte Gitterabbildung in Abb. 5.6c liefert lokale Kompositionswerte, die in sehr guter Übereinstimmung mit lokalen Kompositionswerten für den Fall der (idealen) Gitterabbildung (Abb. 5.6a) sind, und die in Abb. 5.6d

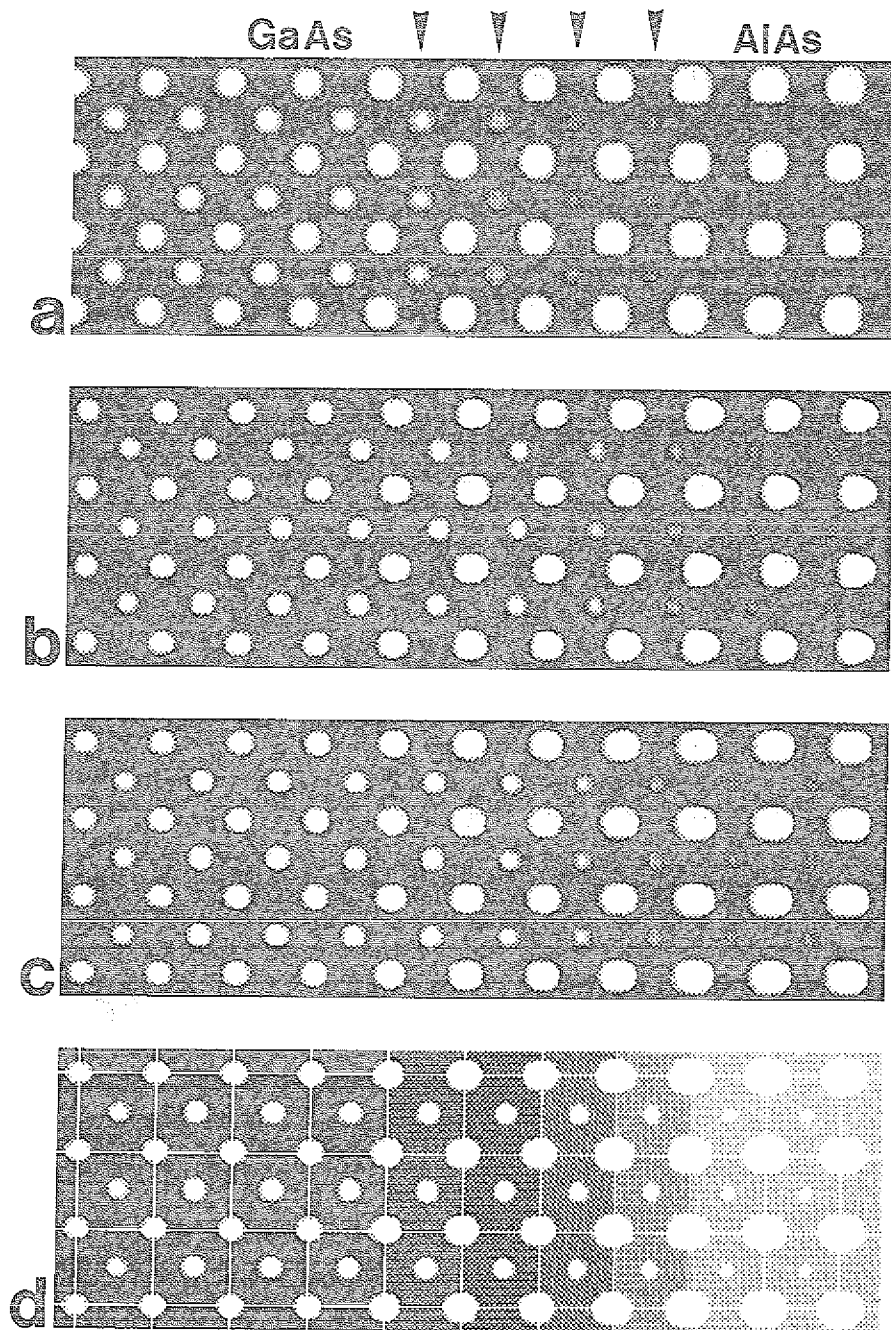
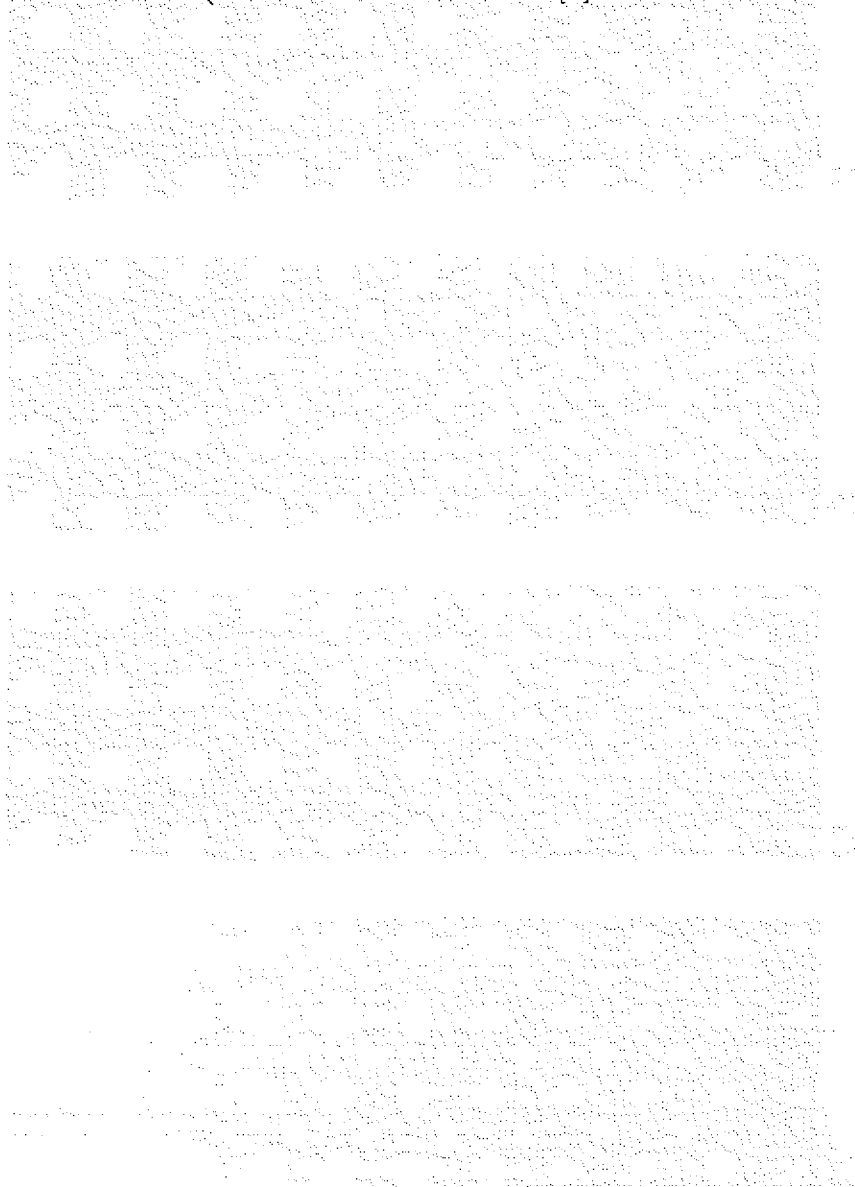


Abb. 5.6: (a) Simulierte 9-Strahl-Gitterabbildung einer diffusen $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Grenzfläche mit einer 4 Kationenlagen breiten Durchmischungszone in der $[100]$ -Projektion ($\Delta f = -20 \text{ nm}$, $t = 10.7 \text{ nm}$). (b) Gitterabbildung unter identischen Abbildungsbedingungen wie in (a), mit Ausnahme einer Strahlverkipfung um 1.9 mrad senkrecht zur Grenzflächenebene. (c) Geometrisch korrigierte Gitterabbildung aus (b). (d) Quantitative Graustufenrepräsentation des lokalen Al-Gehalts, ermittelt mit Hilfe des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus [5,6].

in Form einer Graustufenrepräsentation des örtlichen Al-Gehaltes dargestellt sind. Lokale Bildkontrastasymmetrien, wie sie in Abb. 5.6b beispielhaft gezeigt sind, können in experimentellen [100]-Gitterabbildungen von GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Grenzflächen in der Tat häufig beobachtet werden (siehe z.B. Abb. 2 in Ref. [6] oder Abb. 2 in Ref. [8]).



6 Experimentelle Charakterisierung von Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen

Im experimentellen Teil dieser Arbeit wurden verspannte Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen unterschiedlichen Schichtaufbaus und unterschiedlicher kompositioneller Zusammensetzung mit analytischen und hochauflösenden elektronenmikroskopischen Methoden charakterisiert. Die untersuchten Proben umfassen zweidimensionale Si_xGe_{1-x}-Quantentopf-Strukturen, lang- und kurzperiodische Si_mGe_n-Übergitter, sowie dünne epitaktische Si_xGe_{1-x}-Filme, die mit CVD, MBE oder LPE auf [001]-orientierten Si-Substraten gewachsen wurden.^a Im Rahmen einer Grundcharakterisierung wurde die allgemeine Morphologie der Schichtsysteme, die mittlere Komposition und der Verspannungszustand einzelner Schichtkomponenten, sowie die Natur, die Häufigkeit und der Beitrag zum Gitterfehlpassungs-Ausgleich von ein- und zweidimensionalen Gitterdefekten untersucht. Den Schwerpunkt der experimentellen Untersuchungen bildete die kompositionelle und strukturelle Charakterisierung von ausgewählten Schichtsystemen mit Hilfe der in dieser Arbeit entwickelten quantitativen Methode zur Grenzflächenanalyse auf atomarer Skala. Durch den Einsatz dieser Methode konnten an inneren Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen Werte für die Breite des kompositionellen Übergangs und für die Grenzflächenrauigkeit in Form von Grenzflächenstufen ermittelt werden. Anhand der experimentell gewonnenen Ergebnisse wurden insbesondere auch die theoretischen Vorhersagen bezüglich des Bildkontrastverhaltens von Si_xGe_{1-x}-Legierungen und Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen, sowie die Verlässlichkeit der aus hochaufgelösten Gitterabbildungen bestimmten Kompositionswerte überprüft. Einen zusätzlichen Aspekt der experimentellen Arbeiten bildete die quantitative Untersuchung der Interdiffusion in langperiodischen Übergitterstrukturen, wodurch Interdiffusionskoeffizienten bestimmt werden konnten. Ein Teil der charakterisierten Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen wurde auch von anderen Forschergruppen mit Hilfe hochauflösender Röntgenbeugung (engl. X-ray diffraction, XRD), Rutherford-Rückstreuung (engl. Rutherford backscattering, RBS), sowie mit Raman-Spektroskopie und Photolumineszenz-Spektroskopie (PL) untersucht. Die kompositionellen und strukturellen Daten, die aus diesen Untersuchungen in Form integraler Mittelwerte über größere Probenvolumina gewonnen wurden, werden jeweils an geeigneter Stelle mit Untersuchungsergebnissen dieser Arbeit verglichen.

6.1 Experimentelle Methoden

6.1.1 Probenpräparation

Für die Charakterisierung im Transmissionselektronenmikroskop wurden von den

^aUm für Teile des Schichtsystems einen definierten Verspannungszustand zu einzustellen, wurde die Mehrzahl der Quantentopf- und Übergitterstrukturen nicht direkt auf das Si-Substrat, sondern auf einen zuvor aufgetragenen, homogenen oder strukturierten Si_xGe_{1-x}-Legierungspuffer (Dicke 20–1200 nm) aufgewachsen.

Si/Si_xGe_{1-x}-Heterosystemen [110]- und [100]-Querschnittsproben sowie [001]-Aufsichtsproben nach konventionellen Techniken [69] angefertigt.

Querschnittsproben: Zur Präparation von Querschnittsproben wurden vom Ausgangsmaterial zunächst jeweils zwei rechteckige Probenstücke von ca. 5 mm × 7 mm entlang der [110]- und $[1\bar{1}0]$ -Richtungen abgespalten. Diese zwei Probenstücke wurden zusammengeklebt, so daß die Epitaxieschichten einander zugewandt waren, und zusätzlich rechts und links mit je zwei ebensogroßen Kristallstücken aus reinem Si (Dicke 500 µm) beklebt. Als Klebstoff wurde im Anfangsstadium der Arbeit Araldit mit IDP-Härter verwendet, der vor dem Klebevorgang zur Vermeidung von Blasenbildung zunächst 45 min ausgegast, und nach dem Klebevorgang in einem Ofen bei 110° C etwa eine Stunde lang ausgehärtet wurde. Die resultierende Dicke der Klebstoffschicht zwischen den Si/Si_xGe_{1-x}-Probenstücken betrug hierbei zwischen 10 und 40 µm. Im Verlauf der Arbeit wurde anstelle von Araldit der Klebstoff G1 (Fa. Gatan) verwendet, der nicht ausgegast und nur ca. 20 min bei 80° C ausgehärtet werden muß. Bei Verwendung von G1 betrug die Dicke der Klebstoffschicht nur noch etwa 2 bis 5 µm. Diese extrem geringe Klebstoffdicke führte dazu, daß die TEM-Proben nach der abschließenden Dünnung durch Ionenbeschuß über sehr weite Bereiche der keilförmigen Probenränder homogen durchstrahlbar waren. Ferner betrug der Keilwinkel der Probenränder nur etwa 14°, im Gegensatz zu Keilwinkeln von etwa 22° bei Verwendung von Araldit-Kleber. Solche flach ansteigenden Probenränder waren insbesondere für die Anwendung der entwickelten Methode zur quantitativen Kompositionsbestimmung von Vorteil (vgl. Kap. 5), da die Probendicke in den jeweils analysierten Bildbereichen von ca. $10 \times 10 \text{ nm}^2$ nur um ca. 2,5 nm variierte, was zu entsprechend kleinen systematischen Fehlern in der Kompositionsbestimmung führte. Nach dem Klebevorgang wurden aus dem entstandenen Schichtpaket mit einer Fadensäge ca. 0,5 mm dicke Scheiben ausgesägt, so daß die Oberflächennormale der jeweiligen Scheibe einer [110]- bzw. $[1\bar{1}0]$ -Richtungen entsprach. Zum Einbau in den TEM-Probenhalter wurden aus diesen Scheiben mittels eines Ultraschallbohrers (Fa. Gatan) kreisförmige Proben mit 3 mm Durchmesser gebohrt. Diese Proben wurden dann durch beidseitiges Abdünnen mit Naßschleifpapier abnehmender Körnung (800–4000) auf eine Restdicke von ca. 100 µm gebracht. Anschließend wurde mit einem Muldenschleifgerät (Fa. Gatan) eine einseitige, sphärische Vertiefung ($R = 10 \text{ mm}$) in die Probe eingebracht, so daß die Restdicke zwischen Muldentiefpunkt und Probenunterseite etwa 10 µm betrug. Zur Dickenkontrolle wurde die Eigenschaft von Si ausgenutzt, bei dieser Dicke unter Durchlichtbeleuchtung eine Lichttransparenz in Form eines hellgelben Schimmers zu zeigen. Sodann wurden beide Probenseiten mittels eines Filzrades mit aufgetragener kolloidaler SiO₂-Lösung (Mastermet) für 5 min poliert und anschließend in Aceton- und Ethanolbädern für jeweils 5 min gereinigt. Abschließend fand die Dünnung der Proben bis zur Perforation in einer Ionendünnungsapparatur (Fa. Gatan) statt. Dazu wurden zwei fokussierte Ar⁺-Ionenstrahlen mit einer Energie von 3,5 keV unter einem Winkel von 13,5° zur Probenoberfläche beidseitig auf die rotierende Probe ($\nu = 2,0 \text{ min}^{-1}$) geschossen, wobei eine

Perforation des Probenzentrums nach 15 bis 20 min erreicht war. Um einem Aufheizen der Probe und einer dadurch möglicherweise induzierten Veränderung der Mikrostruktur vorzubeugen, wurden die Proben während des Dünnungsvorganges mit flüssigem Stickstoff gekühlt. Eine Nachdünnung der TEM-Probe bei verminderter Ionenenergie, wie sie häufig zur Reduzierung der amorphen Oberflächenschichten durchgeführt wird, wurde nicht vorgenommen, da sich hierdurch die Probenqualität nachweislich verschlechterte.

Aufsichtsproben: Zur Präparation von Aufsichtsproben wurden vom Ausgangsmaterial quadratische Probenstücke von ca. 4 mm Kantenlänge abgespalten und daraus mittels Ultraschallbohrens entlang der [001]-Oberflächennormale kreisförmige Proben mit 3 mm Durchmesser gebohrt. Die nachfolgenden Präparationsschritte entsprechen denen für Querschnittsproben, mit der Ausnahme, daß sowohl die mechanische als auch die abschließende Dünnung durch Ionenbeschuß jeweils nur einseitig von der Substratseite her erfolgte.

Wegen der Sprödigkeit der untersuchten Halbleitermaterialien bei Raumtemperatur ist zu erwarten, daß das Sägen und Schleifen während des Präparationsvorgangs lediglich dünne Oberflächenbereiche der Probe stört. Diese werden durch den nachfolgenden Ionendünnungsprozeß schon in einem frühen Stadium wieder abgetragen, so daß die Mikrostruktur im Inneren der Probe ungestört bleibt. Der Ionenbeschuß selbst hinterläßt dünne, amorphe Oberflächenschichten auf beiden Seiten der abgedünnten Probe [70], die bei den hier gewählten optimierten Dünnungsparametern bei frisch präparierten Proben im Bereich zwischen 1.5 bis 2.5 nm lagen. Für Probendicken im Bereich von 8 bis 25 nm, die für die hochauflösende Gitterabbildung relevant waren, konnten keine negativen Einflüsse dieser amorphen Oberflächenschichten, abgesehen von einem Beitrag zum Bildrauschen, auf den Bildkontrast beobachtet werden.

Neben der beschriebenen Technik zur Präparation von Querschnittsproben wurde eine alternative Querschnitts-Präparationstechnik auf ihre Anwendbarkeit bei verspannten Si/Si_xGe_{1-x}-Proben hin überprüft. Bei dieser Technik, die bislang insbesondere bei III-V-Halbleitern erfolgreich angewendet wurde [71,72], wird das Ausgangsmaterial entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtung angeritzt und gespalten, wodurch sich im Idealfall Spaltflächen vom $\{110\}$ -Typ ergeben. Die entstehenden rechteckigen Bruchstücke werden dann auf einer Ecke stehend mit Silberleitkleber auf einen Kupferring aufgeklebt, so daß eine [100]-Querschnittsprobe mit einem Keilwinkel von 90° entsteht. Diese Präparationstechnik für Querschnitte besitzt im Vergleich zur konventionellen Präparationstechnik den Vorteil, daß durch die vorgegebene Probengeometrie die örtliche Probendicke stets in einem festen Verhältnis zum projizierten Abstand vom Probenrand steht. Die genaue Kenntnis der örtlichen Probendicke kann insbesondere hilfreich für Vergleiche zwischen experimentellen und simulierten Gitterabbildungen sein. Diesem Vorteil steht hingegen der Nachteil entgegen, daß die Änderung der projizierten Probendicke über einen gegebenen Bildbereich etwa 8mal so groß ist im Vergleich zu konventionell präparierten Querschnittsproben. Die Anfertigung von Spaltproben, die für hochauflösende Gitterabbildungen geeignet waren, konnte im Rahmen dieser Arbeit für Proben aus reinem

Ge und reinem Si erfolgreich durchgeführt werden. Jedoch lieferte diese Präparationstechnik bei verspannten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen keine befriedigenden Ergebnisse. Der Grund dafür bestand in einem unkontrollierten Ablauf des Spaltvorgangs, woraus in der Regel hochindizierte, über den durchstrahlbaren Bereich wechselnde Spaltebenen resultierten. Als Ursache für diesen unkontrollierten Spaltvorgang kommen in der Hauptsache die z.T. erheblichen mechanischen Spannungen in den untersuchten Schichtsystemen in Betracht, die durch Gitterfehlpassungen zwischen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Einzelschichten unterschiedlicher Komposition entstehen.

6.1.2 Transmissionselektronenmikroskopie

Zur Charakterisierung der $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen wurden in dieser Arbeit Methoden der analytischen und der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie eingesetzt, mit einem Schwerpunkt auf der hochauflösenden Gitterabbildung. Dabei wurden die Proben hinsichtlich ihrer allgemeinen Morphologie und hinsichtlich beobachteter Gitterdefekte mittels konventioneller und hochauflösender Beugungskontrastabbildung untersucht. Der Verspannungszustand und die mittlere Komposition einzelner $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Schichten wurde anhand von Feinbereichs-Beugungsbildern (engl. selected area diffraction, SAD) bestimmt. Zur Kompositionsbestimmung auf mikroskopischer Skala ($\approx 0.1 \mu\text{m}^2$) wurde die energiedispersive Röntgenspektroskopie (engl. energy-dispersive X-ray spectroscopy, EDS) eingesetzt. Quantitative Grenzflächenanalysen und Detailanalysen an ein- und zweidimensionalen Gitterdefekten auf atomarer Skala wurden mittels hochauflösender Gitterabbildung durchgeführt. Im folgenden werden die eingesetzten elektronenmikroskopischen Verfahren im einzelnen beschrieben, wobei hinsichtlich von Details zur Beugungskontrastanalyse von Gitterdefekten und zur Kompositionsbestimmung mit EDS auf Ref. [73] verwiesen sei.

Die elektronenmikroskopischen Arbeiten wurden an insgesamt drei Transmissionselektronenmikroskopen durchgeführt. Zur analytischen Elektronenmikroskopie wurden ein Philips EM 430T (300 kV) und ein JEOL 4000FX (400 kV), und zur hochauflösenden Gitterabbildung ein JEOL 4000EX (400 kV) verwendet. Alle Geräte waren mit einer emissionsstarken LaB_6 -Kathode ausgestattet und wurden bei den angegebenen Beschleunigungsspannungen betrieben. Zudem verfügten alle Geräte über einen Doppelkipp-Probenhalter, der neben einer lateralen Probenverschiebung ebenfalls die Verkippung der Probe innerhalb eines bestimmten Öffnungskegels ermöglichte. Zur Reduzierung der bei der Bestrahlung der Probe auftretenden Kohlenstoff-Kontamination wurden in der Regel die an allen Geräten adaptierten Stickstoff-Kühlfallen zur Verbesserung des Vakuums in der Mikroskopsäule benutzt. Zur Elementanalyse auf mikroskopischer Skala wurden energiedispersive Röntgenspektrometer der Fa. Edax (Philips EM 430T) bzw. Tracor-Northern (JEOL 4000FX) verwendet. Die beiden Jeol-Mikroskope waren mit einem Bildverstärkersystem (Fa. Gatan) ausgestattet, an das beim 4000EX zusätzlich eine Signalprozessoreinheit (Fa. Tietz) zur Fourier-Transformation der Bildintensitätsverteilung adaptiert war.

Hochauflösende Gitterabbildung: Die experimentelle Anwendung der entwickelten Methode zur quantitativen Grenzflächenanalyse erforderte die Einstellung einer exakten Zonenachsenorientierung der Probe und optimierter Werte für die Probendicke und den Defokus (vgl. Kap.3-5). Die Einstellung einer [110]- bzw. [100]-Zonenachsenorientierung wurde jeweils im Beugungsmodus unter Zuhilfenahme der in dickeren Probenbereichen zu beobachtenden Kikuchi-Linien vorgenommen [74]. Optimierte Werte für die Probendicke wurden für die [110]-Projektion im Bereich um $t = 10 \text{ nm}$ eingestellt (Tab.3.1). Wie in Abb.3.4a gezeigt ist, sind im Bereich dieser Probendicke die Bildhintergrundintensitäten für Si-reiche und Ge-reiche Probenbereiche nahezu gleich, unabhängig vom Defokus. Dies erlaubte eine einfache Identifizierung dieses optimierten Dickenbereichs in der Abbildung. Für die [100]-Projektion erstreckt sich der Bereich optimierter Probendicken über den gesamten für die hochauflösende Gitterabbildung nutzbaren Dickenbereich bis zu $t = 18 \text{ nm}$ (Tab.3.1). Optimierte Defokuswerte nahe dem Scherzer-Defokus ($\Delta f = -50 \text{ nm}$) wurden für beide Kristallprojektionen anhand charakteristischer Bilddetails eingestellt. Dazu wurde zuerst durch Defokusvariation ein minimaler Bildkontrast im Bereich des amorphisierten Probenrandes eingestellt. Gemäß der linearen Abbildungstheorie ist diese Bedingung für einen Defokus von etwa -20 nm erfüllt [11]. Davon ausgehend wurde dann durch eine definierte Verminderung des Objektivlinsenstromes ein Defokuswert von -50 nm zunächst grob eingestellt. Eine Feinabstimmung von Δf im Bereich optimierter Probendicken wurde dann anhand der Bedingung $J^{\text{Si}}(\vec{g}_1) = -J^{\text{Ge}}(\vec{g}_1)$ durchgeführt, was einem maximalen Bildkontrastunterschied zwischen reinem Si und Ge (oder einer Si_xGe_{1-x}-Legierung) entspricht. Die Feinabstimmung von Δf ist allgemein unkritisch, da gemäß Kap.5.1 eine quasilineare Beziehung zwischen dem chemischen Signal $J(\vec{g}_1)$ und x über größere Defokusbereiche gilt.

Zur Detailanalyse von Versetzungen und planaren Gitterdefekten mittels hochauflösender Gitterabbildung wurde die in Kap.3.2 und 4 für die [110]- und [100]-Projektion ermittelte Eigenschaft des Bildkontrastes ausgenutzt, wonach für ungestörte Kristallbereiche die Positionen projizierter Atomsäulen mit hellen oder dunklen Kontrastpunkten in der Abbildung zusammenfallen. Dies erlaubte es, den Stufenanteil des Burgers-Vektors einer Versetzung, die parallel zum Elektronenstrahl orientiert war, durch Ausführen eines Burgers-Umlaufs [75] in ungestörten Kristallbereichen um den Versetzungskern zu bestimmen. In analoger Weise wurde bei der Analyse von planaren Gitterdefekten, im hier betrachteten Fall von Stapelfehlern und Mikrozwillingen, verfahren.

Um quantitativ auswertbare Gitterabbildungen der Probenstruktur zu erhalten, ist eine exakte Justage des elektronenoptischen Strahlengangs im Mikroskop unbedingt erforderlich. Zur exakten Mikroskopjustage wurde der Sachverhalt ausgenutzt, daß nur Strahlen, die auf der optischen Achse einer Linse verlaufen, von Variationen der Linsenbrechkraft unberührt bleiben. Durch entsprechende Anregungsvariationen des Kondensor-, Objektiv- und Projektorlinsensystems wurde das Mikroskop nach diesem Prinzip jeweils bis zur bestmöglichen Abbildungsqualität justiert.

Beugungskontrastabbildung: Durch den Einsatz einer Objektivblende mit entsprechend kleinem Durchmesser trägt bei der Beugungskontrastabbildungen nur ein kleiner Raumfrequenzbereich der Austrittswellenfunktion um den Nullstrahl (Hellfeldabbildung) oder um einen abgebeugten Strahl^a (Dunkelfeldabbildung) zur Bildintensität bei. Die Ortsauflösung im Bild nimmt dabei mit kleiner werdendem Objektivblendendurchmesser ab.

Übersichtsaufnahmen der untersuchten Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen wurden in der Regel unter Hellfeldabbildungsbedingungen aufgenommen, so daß neben dem Nullstrahl jeweils nur ein abgebeugter Gitterreflex vom {400}-Typ ($\vec{B} = [110]$) bzw. vom {220}-Typ ($\vec{B} = [100]$) stark angeregt war (Zweistrahlfall). Für kurzperiodische Si_mGe_n-Übergitterstrukturen ist jedoch das Kontrastverhalten von Hellfeldabbildungen nicht trivial und soll deshalb ausführlicher erörtert werden. Bei Übergitterstrukturen umfaßt das Fourier-Spektrum der Austrittswellenfunktion aufgrund der periodischen Modulation des Kristallpotentials zusätzliche Fourier-Koeffizienten $\vec{g}_{\vec{U}G}$ (Übergitterreflexe), die für homogene Volumenkristalle nicht auftreten. Zur räumlichen Auflösung der Übergitterstruktur in Hellfeldabbildungen muß der Objektivblendendurchmesser entsprechend so groß gewählt werden, daß neben dem Nullstrahl mindestens ein Übergitterreflex erster Ordnung zur Bildintensität beiträgt. Unter solchen Abbildungsbedingungen wird die Kompositionsmodulation im Übergitter als eine sinusförmige Bildkontrastmodulation in Form eines periodischen Musters aus hellen und dunklen Kontraststreifen wiedergegeben. In Abb. 6.1 ist dieses Bildkontrastverhalten am Beispiel einer Unterfokus-Hellfeldabbildung eines Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512) bei 400 keV verdeutlicht. Da zu dieser Abbildung – neben dem Nullstrahl – ausschließlich die gleich stark angeregten Übergitterreflexe $\pm \vec{g}_{\vec{U}G}$ erster Ordnung beitrugen, wird in der Abbildung zwar die Übergitterperiode $L = (ma_z^{\text{Si}} + na_z^{\text{Ge}})/4$, nicht aber die unterschiedliche Dicke der einzelnen Si- und Ge-Schichten $d_z^{\text{Si}} = ma_z^{\text{Si}}/4$ bzw. $d_z^{\text{Ge}} = na_z^{\text{Ge}}/4$ korrekt durch das Kontraststreifenmuster wiedergegeben. Zur korrekten Auflösung von d_z^{Si} und d_z^{Ge} wäre es erforderlich gewesen, zusätzliche Übergitterreflexe höherer – zumindest der zweiten – Beugungsordnung bei der Abbildung mit einzubeziehen. Einen wichtigen Aspekt bildet auch die relative Position des Kontraststreifenmusters bezüglich der projizierten Übergitterstruktur. Dabei muß grundsätzlich unterschieden werden, ob jeweils beide Übergitterreflexe $\pm \vec{g}_{\vec{U}G}$ oder nur ein Übergitterreflex $\vec{g}_{\vec{U}G}$ einer Beugungsordnung zum Bildkontrast beitragen. Der erste Fall entspricht den Abbildungsbedingungen, wie sie bei der hochauflösenden Gitterabbildung vorliegen. Bei symmetrischer Probenorientierung (Laue-Fall: $I(\vec{g}_{\vec{U}G}) = I(-\vec{g}_{\vec{U}G})$) entsteht ein ortsfestes Kontraststreifenmuster, bei dem die einzelnen Kontraststreifen in Abhängigkeit vom Defokus entweder mit Si- oder mit Ge-Schichten zusammenfallen. Entsprechend Gl. 5.2 führt eine Defokusvariation um den Betrag $\Delta f = 1/(g_{\vec{U}G}^2 \lambda)$ zu einer Kontrastumkehr des Streifenmusters. In Abb. 6.1b ist diese Umkehr des Übergitterkontrastes anhand einer Überfokus-Hellfeldabbildung des

^aIn Zusammenhang mit der Beugungskontrastabbildung wird i.a. anstelle der Bezeichnung "Strahl" die synonyme Bezeichnung "(Gitter-)Reflex" verwendet.

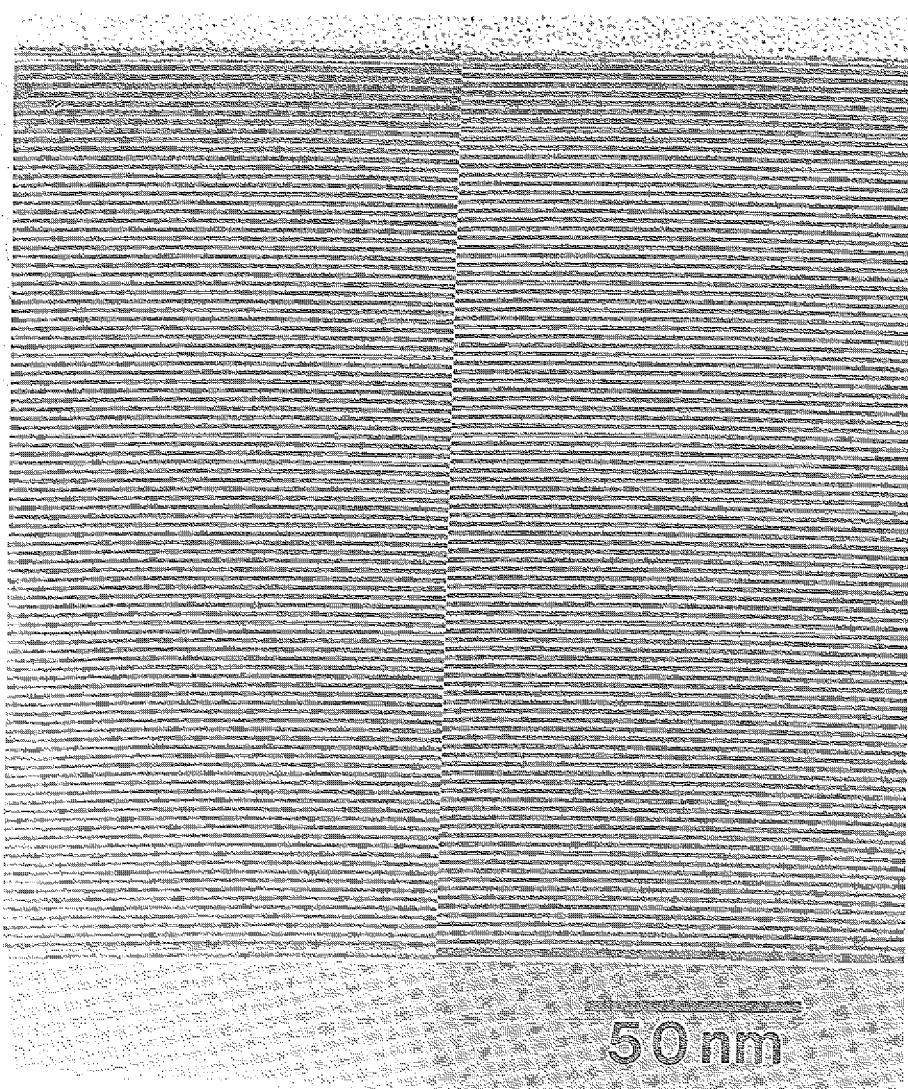


Abb. 6.1: (a) Unterfokus- und (b) Überfokus-Hellfeldabbildung eines Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512) in der [110]-Projektion bei 400 keV ($\vec{g} = (004)$). Die Abbildungen unterscheiden sich durch einen umgekehrten (invertierten) Bildkontrast im Bereich des Übergitters.

Übergitter aus Abb. 6.1a gezeigt. Die gewählten Abbildungsbedingungen entsprechen denen in Abb. 6.1a, es wurde lediglich der Defokus um einen Betrag von ca. $\Delta f = 2.6 \mu\text{m}$ variiert. Eine Verkipfung der Probe in Richtung der Übergittermodulation führt indes dazu, daß die relativen Strahlphasen für $\vec{g}_{\text{ÜG}}$ und $-\vec{g}_{\text{ÜG}}$ nicht mehr gleich sind, was seinerseits eine relative Verschiebung des Kontrastmusters bezüglich der projizierten Übergitterstruktur verursacht. Für den Fall, daß jeweils nur ein Übergitterreflex $\vec{g}_{\text{ÜG}}$ einer Beugungsordnung zum Bildkontrast beiträgt, ist die relative Lage des Kontraststreifenmusters bezüglich der projizierten Übergitterstruktur völlig unbestimmt. In diesem Fall bewirken Defokusvariationen eine Verschiebung des Kontraststreifenmusters, jedoch tritt dabei keine Bildkontrastumkehr oder -auslöschung auf.

Beugungskontrastabbildungen wurden ferner zur Bestimmung des Burgers-Vektors $\vec{b}$, der Linienrichtung $\vec{u}$ sowie der Dichte ρ von Versetzungen verwendet. Zur Bestimmung von $\vec{b}$ wurde das Auslöschungskriterium $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ benutzt [76]. Zur Bestimmung von $\vec{u}$ wurden für verschiedene Kristallprojektionen jeweils Abbildungs-Beugungsbild-Paare aufgenommen, so daß Richtungen in der Abbildung mit kristallographischen Richtungen im Beugungsbild identifiziert werden konnten. Zur kristallographischen Richtungszuordnung wurden entsprechende Eich Tabellen für die relative Bilddrehung zwischen der Abbildung und dem Beugungsbild verwendet. Ähnlich wie für $\vec{u}$ wurde auch die Habitussebene planarer Gitterdefekte durch Kippexperimente bestimmt. Die Bestimmung von ρ wurde nach der in Ref. [77] beschriebenen Methode durchgeführt.

Zur Analyse von Netzwerken aus Fehlpasungsversetzungen im Bereich inkohärenter Grenzflächen wurde die Schwachstrahl-Dunkelfeld-Abbildungstechnik (engl. weak-beam dark field technique, WBDF) verwendet [78]. Durch Verwendung dieser Technik konnten auch eng benachbarte Versetzungslinien mit Abständen > 1.5 nm getrennt aufgelöst und hinsichtlich ihrer Bestimmungsgrößen charakterisiert werden.

Zur Untersuchung der Gitteranpassung zwischen epitaktisch gewachsenen Schichtsystemen und dem Si-Substrat wurde bei [001]-Aufsichtspröben die Moiré-Technik eingesetzt [13,76]. Moiré-Kontraste entstehen grundsätzlich dann, wenn ein zur Abbildung beitragender Reflex sowohl Teile des Si-Substrats als auch Teile einer epitaktischen Schicht, die einen gegenüber dem Si-Substrat leicht unterschiedlichen lateralen Gitterparametern besitzt, durchläuft. Durch Anwendung einer speziellen Moiré-Technik [79], bei der die Reflexe $\vec{g} = (220)$, $(2\bar{2}0)$ und (400) gleichzeitig stark angeregt sind, entstehen in der Abbildung zwei orthogonale Scharen von Moiré-Streifen, die parallel zu den projizierten (220) - bzw. $(2\bar{2}0)$ -Netzebenen des Gitters verlaufen. Der Abstand D^M zwischen parallelen Moiré-Streifen ist dabei gegeben durch

$$D^M = \frac{d_{220}^{\text{Si}} d_{220}^{\text{SiGe}}}{|d_{220}^{\text{SiGe}} - d_{220}^{\text{Si}}|}. \quad (6.1)$$

Aus Meßwerten für D^M wurden anhand von Gl. (6.1) entsprechende Werte für den mittleren lateralen Gitterparameter $\bar{a}_y$ der Epitaxieschicht bestimmt.

Feinbereichs-Beugung: Im Beugungsmodus des Elektronenmikroskops kann der zum Beugungsbild beitragende Probenbereich durch Verwendung einer Selektorblende gezielt ausgewählt und auf einen projizierten Bereich von $\approx 0.2 \mu\text{m}^2$ begrenzt werden. Abb. 6.2 zeigt zur Veranschaulichung das Feinbereichs-Beugungsbild des in Abb. 6.1 abgebildeten kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512, vgl. Abb. 6.1) in der [110]-Projektion. Neben intensitätsreichen Basisreflexen $\vec{g}$, welche die Grundanordnung der Si- und Ge-Atome im Diamantgitter widerspiegeln, sind schwächer angeregte Übergitterreflex $\vec{g}_{\text{UG}}$ entlang der [001]-Richtung zu erkennen. Die Zahl der sichtbaren Übergitter-Beugungsordnungen um jeden Basisreflex und die örtliche Intensitätsverteilung eines Übergitterreflexes erlauben u.a. auch detaillierte Rückschlüsse auf die Übergitterqualität [80] (vgl. Kap. 6.2).

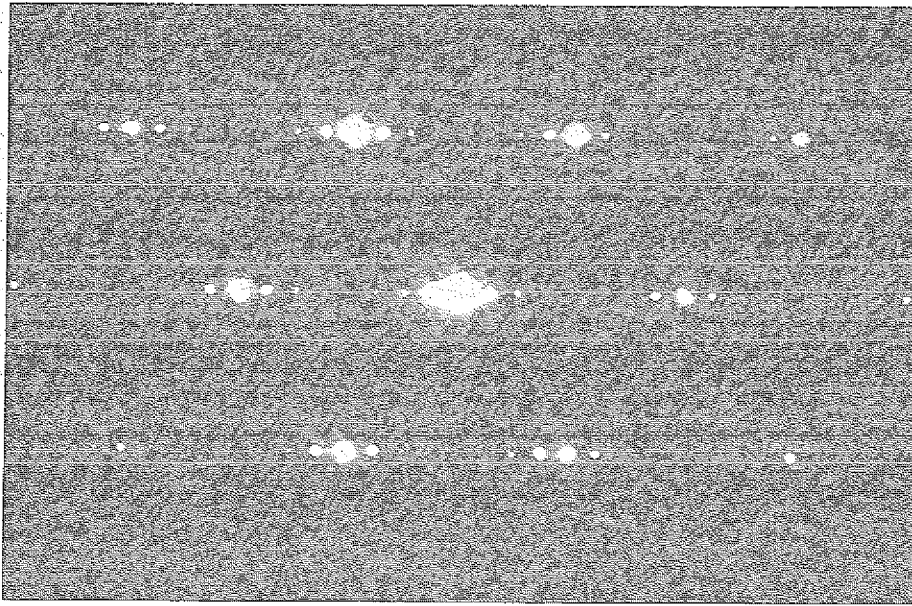


Abb. 6.2: Feinbereichs-Beugungsbild eines kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512) in der [110]-Projektion.

Aus Feinbereichs-Beugungsbildern wie in Abb. 6.2 wurden der mittlere laterale Gitterparameter $\bar{a}_x = \bar{a}_y$ und der mittlere orthogonale Gitterparameter $\bar{a}_z$ einer Legierungs- oder Übergitterschicht anhand des Abstands des (2 $\bar{2}0$)- bzw. (004)-Basisreflexes vom Ursprung $\vec{g} = (000)$ mit einem Fehler von 0.3 % bestimmt. Der mittlere Volumengitterparameter $\bar{a}_0$ wurde daraus durch Anwendung von Gl. (3.2) berechnet, aus dem wiederum ein Wert $\bar{x} = (a^{\text{Ge}} - \bar{a}_0)/(a^{\text{Ge}} - a^{\text{Si}})$ für die mittlere Schichtkomposition bestimmt wurde. Im Fall einer Übergitterstruktur (Abb. 6.2) wurde die mittlere Übergitterperiode $\bar{L}$ aus der gemittelten Abstandsdifferenz zwischen Übergitterreflexen n -ter und $(n+1)$ -ter Ordnung ermittelt, woraus sich die Gesamtzahl der Atomlagen $(m+n) = 4\bar{L}/\bar{a}_z$ einer Übergitterperiode ergab. Unter Ausnutzung von Gl. (3.2) wurde aus $\bar{L}$ und $\bar{a}_z$ die Zahl der Ge-Atomlagen

$$m = \frac{4\bar{L}}{\eta_0 a_0^{\text{Si}}} \left(\frac{1-\nu}{1+\nu} \right) \left(\frac{a_z^{\text{Ge}}}{\bar{a}_z} - 1 \right) \quad (6.2)$$

und die Zahl der Si-Atomlagen $(m+n) - m$ getrennt bestimmt, wobei $\eta_0 = 0.042$ die Gitterfehlpassung zwischen Si und Ge beschreibt.

6.2 Strukturelle Defekte und Gitterrelaxation

Im Rahmen der durchgeführten elektronenmikroskopischen Grundcharakterisierungen wurden die Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen hinsichtlich ihrer Morphologie und hinsichtlich struktureller Defekte charakterisiert. Dazu wurde eine Einteilung in zwei Probenklassen vorgenommen. Die erste Klasse umfaßte Heterostrukturen, bei denen die Gitterfehlpassung zwischen dem aufgewachsenen Schichtsystem und dem Si-Substrat ausschließlich durch elastische Gitterverspannungen des Schichtsystems ausgeglichen wurde. Solche Heterostrukturen, bei denen der laterale Gitterparameter a_y des Schichtsystems mit dem Gitterparameter a_0^{Si} des Si-Substrats übereinstimmte, werden im weiteren als pseudomorph bezeichnet. Die zweite Klasse umfaßte Heterostrukturen, bei denen die Gitterfehlpassung zwischen dem aufgewachsenen Schichtsystem und dem Si-Substrat vollständig oder teilweise durch strukturelle Defekte, wie z.B. Fehlpassungsversetzungen, ausgeglichen wurde. Solche Heterostrukturen, bei denen a_y jeweils größer war als a_0^{Si} , werden im weiteren als relaxiert bezeichnet. Zur Einteilung in diese Klassen wurde a_y für jede Probe aus Feinbereichs-Beugungsbildern von Querschnittsproben und/oder durch Moiré-Kontrastanalysen an Aufsichtsproben ermittelt und mit a_0^{Si} verglichen. Entsprechend dieser vorgenommenen Klassifizierung konnten bei allen Proben einer Probenklasse charakteristische morphologische und strukturelle Merkmale beobachtet werden, die im folgenden beschrieben und an Beispielen belegt werden sollen.

Pseudomorphe Heterostrukturen

Pseudomorphe Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen waren dadurch gekennzeichnet, daß in Aufsichtsaufnahmen keine Moiré-Kontraste beobachtet werden konnten und $\bar{a}_y$ im Rahmen der Meßgenauigkeit mit a_0^{Si} übereinstimmte. Darüber hinaus wurden in solchen Heterostrukturen über den gesamten durchstrahlbaren Probenbereich keine Gitterdefekte beobachtet, die auf eine Relaxation des aufgewachsenen Schichtsystems hinsichtlich des Si-Substrats hingedeutet hätten. Abb. 6.3 zeigt stellvertretend für die Klasse pseudomorpher Proben die Übersichtsaufnahme eines Si_mGe_n-Übergitters (nominell $m : n = 32 : 6$, Probe VK232), das mit MBE bei 480° C auf einem Si-Substrat gewachsen wurde. Die Ge-Einzelschichten sind in der Abbildung deutlich am dunklen Bildhintergrundkontrast zu erkennen. Obschon der Bildkontrast unter den gewählten Zweistrahl-Abbildungsbedingungen sehr sensitiv auf das Vorhandensein von Gitterdefekten reagierte, sind über den gesamten Bildbereich keine Gitterdefekte zu erkennen. Dieses Ergebnis wurde ebenfalls durch hochauflösende Gitterabbildungen bestätigt (vgl. Abb. 6.12). Wie die Übersichtsaufnahme deutlich erkennen läßt, weisen die Grenzflächen zwischen den epitaktischen Einzelschichten mit zunehmendem Abstand vom Si-Substrat zunehmend starke laterale Welligkeiten (Undulationen) auf. Solche Grenzflächenwelligkeiten wurden sowohl in pseudomorphen als auch in relaxierten Heterostrukturen beobachtet. In Feinbereichs-Beugungsbildern des Übergitters konnten diese Grenzflächenwelligkeiten jeweils mit charakteristischen Verbreiterungen der Intensitätsverteilung einzelner Übergitterreflexe korreliert werden [80]. Mit Hilfe der in dieser Arbeit entwickelten Methode

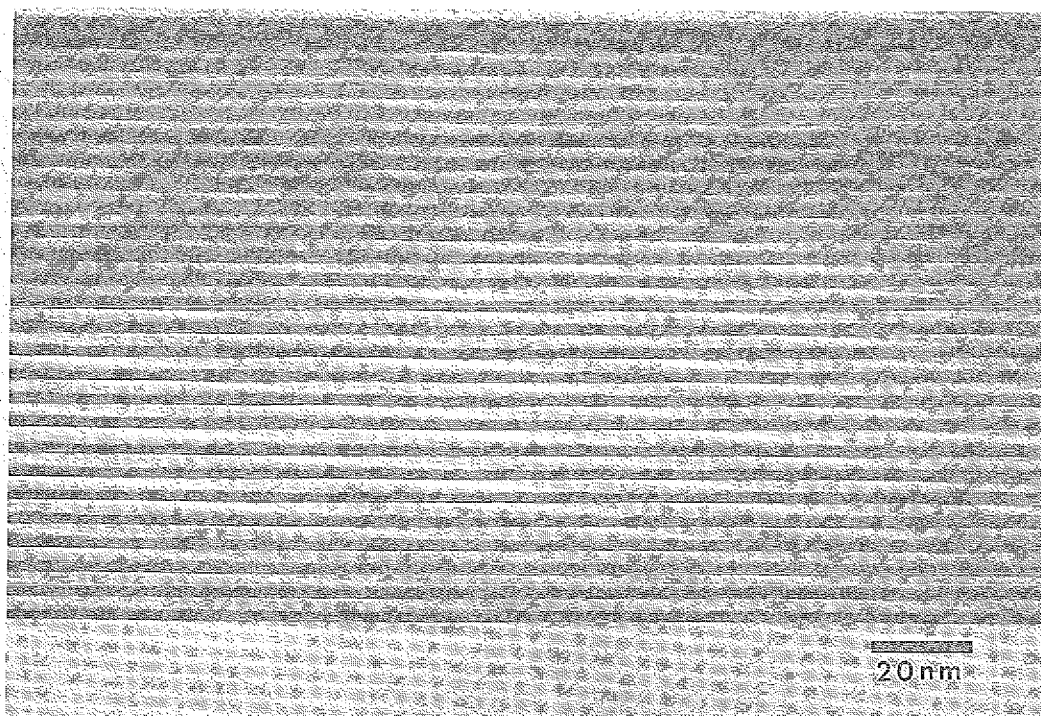


Abb. 6.3: Übersichts-Hellfeldabbildung eines pseudomorph gewachsenen Si_mGe_n-Übergitters (nominell $m : n = 32 : 6$, Probe VK232) in der [110]-Projektion. Ge-reiche Schichten erscheinen dunkel.

zur quantitativen Grenzflächenanalyse wurden solche Grenzflächenwelligkeiten als örtliche Schwankungen in der Besetzung individueller (004)-Gitterebenen mit Si- oder Ge-Atomen identifiziert, die auf atomarer Skala durch Grenzflächenstufen mit Stufenhöhen von einer bis zu wenigen Atomlagen zustandekommen (Kap. 6.3).

Relaxierte Heterostrukturen

Relaxierte Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen waren dadurch gekennzeichnet, daß in Auf-sichtsabbildungen Moiré-Kontraste beobachtet werden konnten und $\bar{a}_y$ um z.T. mehr als 2 % größer war als a_0^{Si} . Darüber hinaus wurde bei allen relaxierten Heterostrukturen, mit Ausnahme der weiter unten behandelten Übergitterstrukturen auf Gradientenpuffern, jeweils ein dichtes zweidimensionales Netzwerk aus Fehlpassungsversetzungen an der Grenzfläche zwischen dem aufgewachsenen Schichtsystem und dem Si-Substrat beobachtet. Detailanalysen ergaben, daß dieses Netzwerk aus jeweils zwei orthogonalen Scharen von 90°-Versetzungen (Lomer-Versetzungen [75]) mit Burgers-Vektoren $\vec{b} = a_y/2 [110]$ bzw. $\vec{b} = a_y/2 [1\bar{1}0]$ in der Grenzflächenebene bestand. In allen Proben, die ein solches Netzwerk aus Fehlpassungsversetzungen enthielten, wurden ebenfalls Fadenversetzungen beobachtet, die vom Netzwerk der Fehlpassungsversetzungen ausgingen und bis zur Probenoberfläche verliefen. In manchen Übergitterstrukturen, die auf dünnen Si_xGe_{1-x}-

Legierungspuffern gewachsen wurden, erreichte die Dichte dieser Fadenversetzungen Werte bis zu $\rho \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. In solchen Übergitterstrukturen waren sehr starke laterale Grenzflächenwelligkeiten zu beobachten, und die Übergitterschichtung zeigte lokal starke Abweichungen von der mittleren Übergitterperiode und der nominellen kompositionellen Zusammensetzung. In Feinbereichs-Beugungsbildern von solchen Übergitterstrukturen wurde ebenfalls eine starke Intensitätsverminderung der Übergitterreflexe beobachtet. Diese Beobachtung kann durch einen erhöhten Anteil diffuser Streuung an den Inhomogenitäten der Übergitterschichtung erklärt werden. Neben Fehlpassungsversetzungen und Fadenversetzungen wurden in MBE-gewachsenen kurzperiodischen Übergitterstrukturen zusätzlich planare Gitterdefekte beobachtet. Detailanalysen ergaben, daß es sich bei diesem Defektyp um Mikrozwillinge mit Habitusebenen vom $\{111\}$ -Typ handelte, die einen signifikanten Beitrag zum Ausgleich der Gitterfehlpassung zwischen dem epitaktischen Schichtsystem und dem Si-Substrat lieferten, wie anhand des nachfolgenden Beispiels detailliert beschrieben wird.



Abb. 6.4: Übersichts-Hellfeldabbildung einer kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitterstruktur ($m : n = 5 : 5$, Probe B2099) auf einem relaxierten Si_{0.4}Ge_{0.6}-Puffer in der $[110]$ -Projektion. Die Abbildung zeigt Teile des Si-Substrats (Si), den Legierungspuffer (P_c) sowie des Übergitters (ÜG).

Am Beispiel einer Si_mGe_n-Übergitterstruktur ($m : n = 5 : 5$, Probe B2099), die mit MBE bei 330° C auf einem relaxierten Si_{0.4}Ge_{0.6}-Puffer (Dicke 60 nm) gewachsen wurde, sollen die in relaxierten Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen typischerweise beobachte-

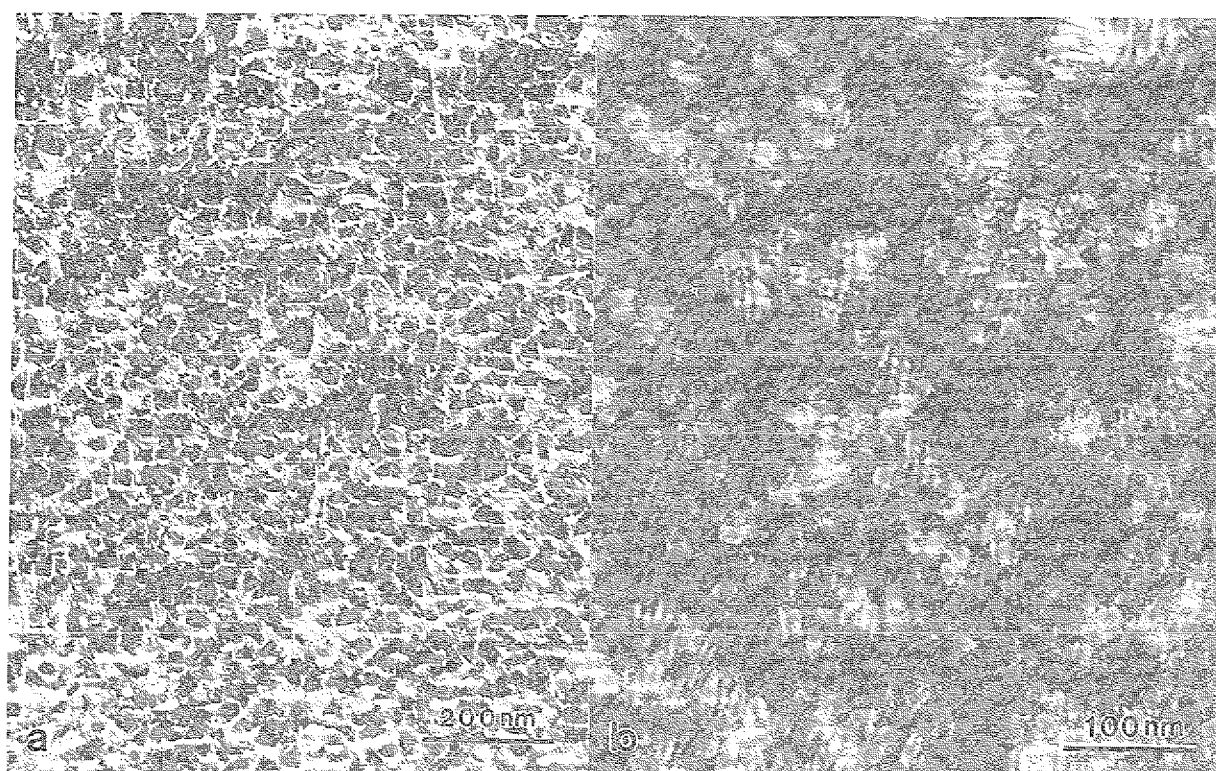


Abb. 6.5: (a) Fehlpassungsversetzungen an der Substrat-Puffer-Grenzfläche unter verschiedenen WBDF-Abbildungsbedingungen in der [001]-Projektion (Probe B2099, $\vec{g} = (220)$). (b) Zweidimensionales Moiré-Kontrastmuster in einer [001]-Hellfeldabbildung (Probe B2099, $\vec{g} = (220)$).

ten Schichtmorphologien und Gitterdefekte, sowie der individuelle Beitrag einzelner Gitterdefekte zur Schichtrelaxation im Detail erörtert werden. Abb. 6.4 zeigt die Übersichts-Hellfeldabbildung eines Querschnitts dieser Probe, in der das Si-Substrat, der Si_{0.4}Ge_{0.6}-Legierungspuffer sowie das Übergitter zu erkennen sind. Im Gegensatz zu der planaren Grenzfläche zwischen Si-Substrat und Puffer sind an der Grenzfläche zwischen Puffer und Übergitter sowie im Bereich des Übergitters deutliche Grenzflächenwelligkeiten zu erkennen, die eine Welligkeitsperiode von 80 bis 150 nm und eine Welligkeitsamplitude von bis zu 15 nm aufweisen. Ein Netzwerk aus Fehlpassungsversetzungen in der Grenzfläche zwischen Puffer und Si-Substrat ist unter diesen Abbildungsbedingungen nur anhand lokaler Spannungskontraste zu erkennen. Fadenversetzungen treten dagegen deutlich erkennbar als linienhafte dunkle Kontraste hervor, die sich von der Grenzfläche zum Si-Substrat bis zur Schichtoberfläche fortsetzen. Zur Detailanalyse der Fehlpassungsversetzungen in der Grenzfläche zwischen Puffer und Si-Substrat wurden an [001]-Aufsichtspröben Kontrastanalysen unter WBDF-Abbildungsbedingungen durchgeführt. Abb. 6.5a zeigt die WBDF-Abbildung einer Aufsichtspröbe B2099 unter einer unkonventionellen Abbildungsbedingung [81], bei der neben dem zur Abbildung verwendeten schwachen (220)-Reflex zusätzlich der (400)-Reflex stark angeregt war. Hierdurch wer-

den beide Scharen von Fehlpassungsversetzungen simultan sichtbar. Die Linienrichtungen der 90°-Fehlpassungsversetzungen entsprechen exakt den kristallographischen [110]- bzw. [1 $\bar{1}$ 0]-Richtung, und die jeweils zur Linienrichtung orthogonalen Burgers-Vektoren liegen in der (001)-Grenzflächenebene. Messungen des mittleren Abstands zwischen benachbarten parallelen Fehlpassungsversetzungen ergaben bei dieser Probe Werte von $D^{VS} \approx 22$ nm, was einer Liniendichte $1/D^{VS}$ von 4.5×10^5 Fehlpassungsversetzung pro cm entspricht. Unter der Annahme, daß die Gitterfehlpassung ausschließlich durch das Netzwerk aus Fehlpassungsversetzungen in der Substrat-Puffer-Grenzfläche ausgeglichen wird, ergibt sich aus D^{VS} durch Anwendung der Beziehung [82]

$$D^{VS} = \frac{|\vec{b}| a_0^{\text{Si}}}{|a_y - a_0^{\text{Si}}|} \quad (6.3)$$

ein mittlerer Wert für den lateralen Gitterparameter der Epitaxieschicht von $\bar{a}_y^{VS} = 0.553$ nm. Zusätzlich zur WBDF-Abbildungstechnik wurde zur Detailanalyse der Schichtrelaxation auch die Moiré-Abbildungstechnik eingesetzt. Abb. 6.5b zeigt die Hellfeldabbildung einer Aufsichtspröbe B2099, in der ein zweidimensionales Moiré-Kontrastmuster zu erkennen ist. Hierdurch wird eindeutig die Relaxation des Puffers bezüglich des Si-Substrats belegt. Die lokalen Deformationen und Auslöschungen der Moiré-Kontraste, die im Idealfall parallel zu den zwei orthogonalen Netzebenenscharen vom {220}-Typ verlaufen sollten, dokumentieren darüber hinaus die starken Verzerrungen der Gitterebenen im Bereich dieser Grenzfläche. Messungen des Abstandes zwischen benachbarten Moiré-Streifen ergaben Mittelwerte von $D^M \approx 7$ nm. Durch Verwendung von Gl. (6.1) ergibt sich daraus ein mittlerer lateraler Gitterparameter des Legierungspuffers von $\bar{a}_y^M = 0.559$, in sehr guter Übereinstimmung mit Werten von $\bar{a}_y^{\text{SAD}} = 0.559$ und $\bar{a}_y^{\text{XRD}} = 0.557$, die anhand von Feinbereichs-Beugungsbildern bzw. mittels Röntgenbeugung [80] bestimmt wurden.

Die Diskrepanz zwischen $\bar{a}_y^M = \bar{a}_y^{\text{SAD}} = 0.559$ nm und $\bar{a}_y^{VS} = 0.553$ nm für den betrachteten Fall der Übergitterprobe B2099 zeigt deutlich, daß die Liniendichte der Fehlpassungsversetzungen in der Substrat-Puffer-Grenzfläche zu gering ist, um den durch $\bar{a}_y^M = \bar{a}_y^{\text{SAD}}$ bestimmten tatsächlichen Relaxationsgrad des Schichtsystems erklären zu können. Eine solche Diskrepanz zwischen $\bar{a}_y^M$ und $\bar{a}_y^{\text{SAD}}$ wurde bei nahezu allen MBE-gewachsenen kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergittern auf homogenen Legierungspuffern festgestellt. Eine wichtige experimentelle Beobachtung bestand darin, daß solche Diskrepanzen stets mit dem Vorhandensein von planaren Gitterdefekten im Bereich des Legierungspuffers und im substratnahen Teil des Übergitters korreliert waren. In Abb. 6.4 (Probe B2099) sind solche planaren Gitterdefekte an geradlinigen Bildkontrasten zu erkennen, die einen Winkel von 35° zur Substrat-Puffer-Grenzfläche aufweisen. Ferner wurden in [110]- und [100]-Feinbereichs-Beugungsbildern von Probenbereichen, die solche planaren Gitterdefekte enthielten, jeweils Zusatzreflexe $\vec{g}^{\text{PD}}$ beobachtet (z.B. $\vec{g}^{\text{PD}} = \pm(2\bar{2}0)$ für [110]-Querschnittsproben und $\vec{g}^{\text{PD}} = \{200\}$ für [001]-Aufsichtsproben), die für Kristalle mit Diamantstruktur kinematisch verboten sind. Wie Abb. 6.6a (Probe B2099) anhand einer Querschnitts-Dunkelfeldabbildungen im "Licht" eines solchen Zu-

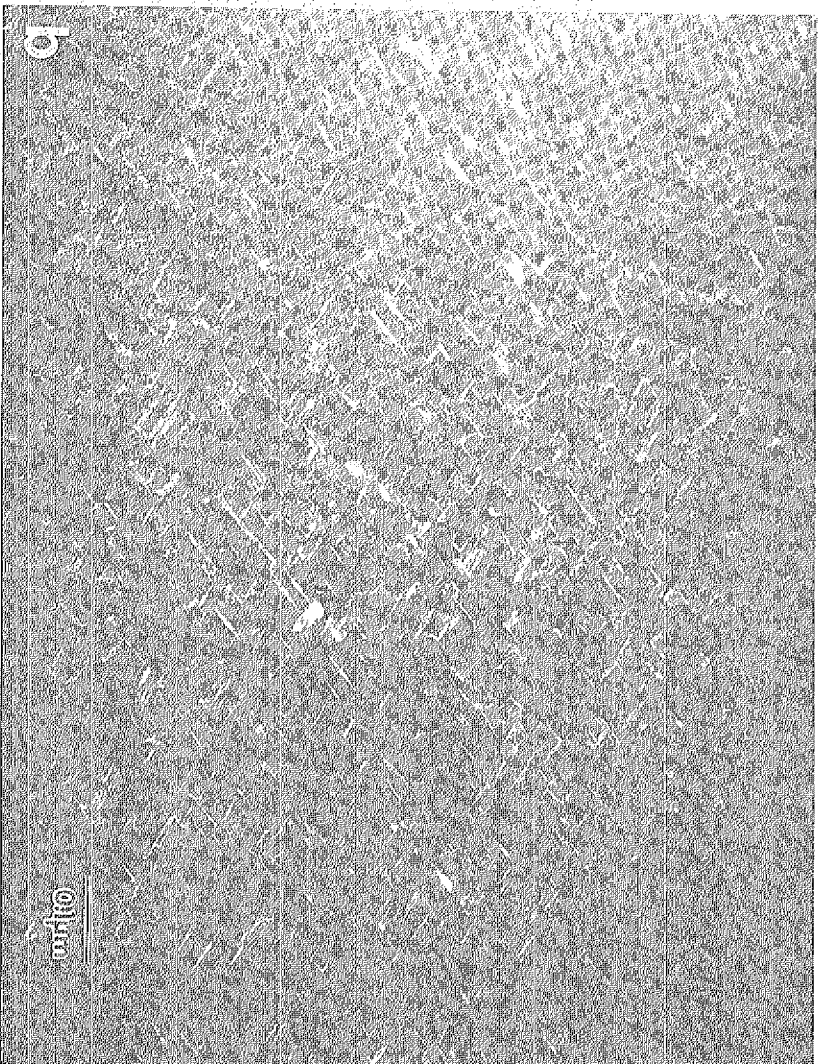


Abb. 6.6: Dunkelfeldabbildungen von planare Gitterdefekten (helle Bildkontraste) in der (a) [110]- und (b) [001]-Projektion. Zur Abbildung wurde ein Zusatzreflex $\vec{g}^{\text{PD}} = (2\bar{2}0)$ (a) bzw. $\vec{g}^{\text{PD}} = (200)$ (b) verwendet.

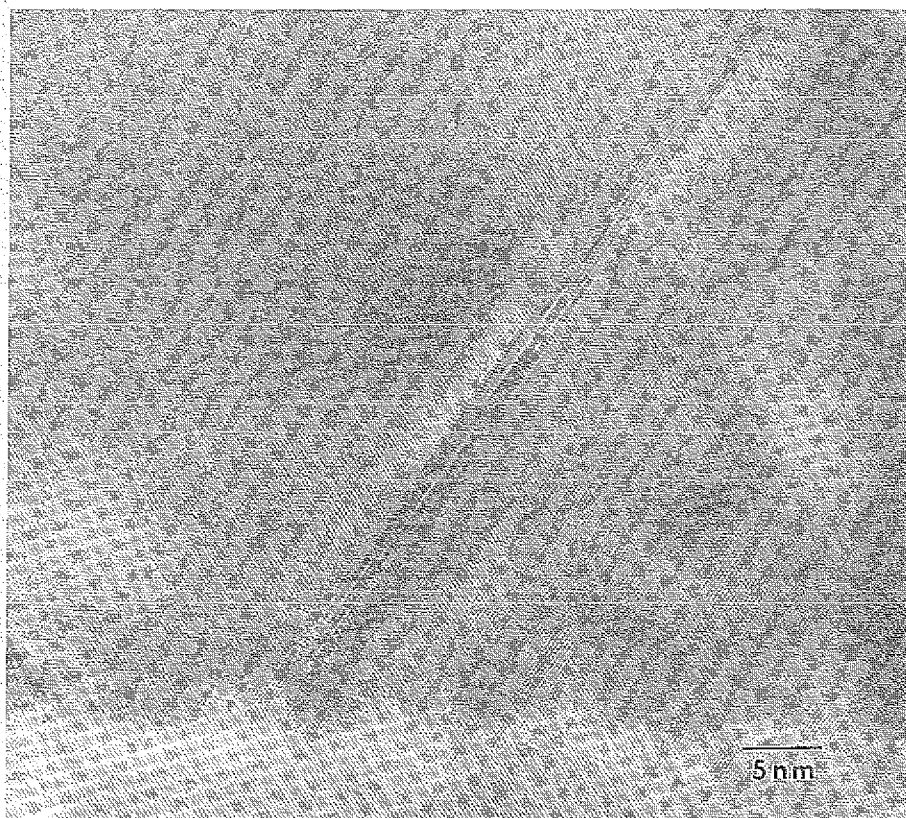


Abb. 6.7: Hochaufgelöste [110]-Gitterabbildung von Mikrozwillingen im Bereich des Legierungspuffers der Probe B2099.

satzreflexes zeigt, treten unter solchen Abbildungsbedingungen die planaren Gitterdefekte durch einen hellen Bildkontrast stark hervor. Dadurch wird belegt, daß die beobachteten Zusatzreflexe durch Beugungsprozesse im Bereich dieser planaren Gitterdefekten entstehen. Abb. 6.6b zeigt eine entsprechende Aufsicht-Dunkelfeldabbildung, in der diese Defekte als lateral begrenzte, flächenhafte Kontraste zu erkennen sind. In Kombination mit Querschnitts-Abbildungen konnte daraus die Habitusebene solcher planaren Gitterdefekte bestimmt werden, die vom {111}-Typ ist. Weiterhin konnte durch hochauflösende Gitterabbildungen gezeigt werden, daß jeder dieser planaren Gitterdefekte aus einem Mikrozwilling besteht, der seinerseits aus einer Anzahl benachbarter Stapelfehler aufgebaut ist. Abb. 6.7 zeigt solche Mikrozwillinge im Bereich des Legierungspuffers der Probe B2099 in einer hochaufgelösten [110]-Gitterabbildung (Proben-
dicke ≈ 22 nm). Analysen solcher Gitterabbildungen mit Hilfe von Burgers-Umläufen ergaben, daß die einzelnen Stapelfehler innerhalb solcher Mikrozwillinge jeweils von zwei Shockley-Partialversetzungen [75] mit Burgersvektoren vom Typ $\vec{b}_p = a/6 \langle 112 \rangle$ berandet werden. Eine Auszählung über viele Mikrozwillinge ergab ferner, daß jeder Mikrozwilling im Mittel aus drei benachbarten Stapelfehlern aufgebaut ist. Daraus resultiert ein mittlerer Burgers-Vektor für jeden Mikrozwilling von $\vec{b}^{PD} = a/2 \langle 112 \rangle$. Die Projektion dieses Burgers-Vektors auf die Substrat-Puffer-Grenzfläche entspricht demnach einer Gitter-

translation um den Vektor $a/2 \langle 110 \rangle$. Damit liefert die Anwesenheit eines Mikrozwillings dieser Art im Mittel einen identischen Beitrag zum Ausgleich der Gitterfehlpassung wie eine Fehlpassungsversetzung vom Lomer-Typ an der Substrat-Puffer-Grenzfläche. Eine experimentelle Bestimmung der "Liniendichte" planarer Gitterdefekte, d.h. die Zahl der Schnittpunkte solcher Defekte mit einer Linie vom $\langle 110 \rangle$ -Typ pro Längeneinheit, ergab Werte im Bereich von 2 bis $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, mit einem genauen Wert von $2.6 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ für die Probe B2099. Unter der Annahme, daß jeder planare Gitterdefekt im Mittel dem Beitrag einer Fehlpassungsversetzung zum Fehlpassungsausgleich entspricht, ergibt sich für die hier betrachtete Probe B2099 eine Gesamtliniendichte von $7.1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Im Rahmen der Meßgenauigkeit stimmt dieser Wert sehr gut mit dem theoretischen Wert von $7.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ überein, der sich gemäß Gl. (6.3) für $a_y = 0.559 \text{ nm}$ ergibt. Eine ähnlich gute Übereinstimmung zwischen diesen Werten ergab sich auch für alle anderen diesbezüglich charakterisierten kurzperiodischen Übergitterstrukturen. Als wichtiges experimentelles Ergebnis kann damit festgehalten werden, daß planare Gitterdefekte in Form der beobachteten Mikrozwillingen als ein zweiter Relaxationsmechanismus neben der Relaxation über Fehlpassungsversetzungen einen signifikanten Beitrag zum Ausgleich von Gitterfehlpassungen liefern.

Neben kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergittern, die auf homogenen Si_xGe_{1-x}-Puffern gewachsen wurden (z.B. Probe B2099), wurden ebenfalls kurzperiodische Si_mGe_n-Übergitterstrukturen auf Gradientenpuffern untersucht. Bei diesen Proben bestand der Puffer aus einem strukturierten Schichtsystem aus 12 einzelnen, 50 nm dicken Si_xGe_{1-x}-Legierungsschichten, wobei die nominelle Komposition der einzelnen Schichten in $[001]$ -Wachstumsrichtung sukzessive von $x = 0.97$ bis auf $y = 0.44$ abnahm. Abgeschlossen wurde der Puffer jeweils durch eine homogene, 500 nm dicke Si_xGe_{1-x}-Legierungsschicht (nominell $x = 0.6$). Abb. 6.8a verdeutlicht den Schichtaufbau dieser Proben am Beispiel einer kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitterstruktur ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512), die mit MBE bei 500° C auf einem Gradientenpuffer gewachsen wurde. Detailanalysen ergaben, daß bei solchen Übergitterstrukturen der Gradientenpuffer kontinuierlich über den gesamten Pufferbereich mit variierendem Ge-Gehalt durch den Einbau von Fehlpassungsversetzungen relaxiert. Diese Netze aus Fehlpassungsversetzungen in verschiedenen Schichtebenen sind untereinander durch Fadenversetzungen verknüpft, was in Abb. 6.8a deutlich erkennbar ist. Dabei bleiben die Fadenversetzungen im wesentlichen auf den Bereich des Gradientenpuffers beschränkt und bilden dort geschlossene Versetzungsschleifen. Einzelne dieser geschlossenen Versetzungsschleifen verlaufen dabei bis hinab in Bereiche des Si-Substrats, wobei eine bevorzugte kristallographische Ausrichtung der Versetzungsschleifen auf $\{111\}$ -Ebenen zu beobachten ist. In solchen Übergitterstrukturen auf Gradientenpuffern war die Dichte der Fadenversetzungen im oberen Pufferbereich und im Bereich des Übergitters mit Werten $< 10^6 \text{ cm}^{-2}$ i.a. wesentlich geringer als bei Übergitterstrukturen auf homogenen Legierungspuffern. Ferner wurden Fadenversetzungen, die bis zur Schichtoberfläche verliefen, ausschließlich in Form kleiner lokalisierter Versetzungsgruppen beobachtet. Dadurch erscheinen in Querschnittsaufnahmen

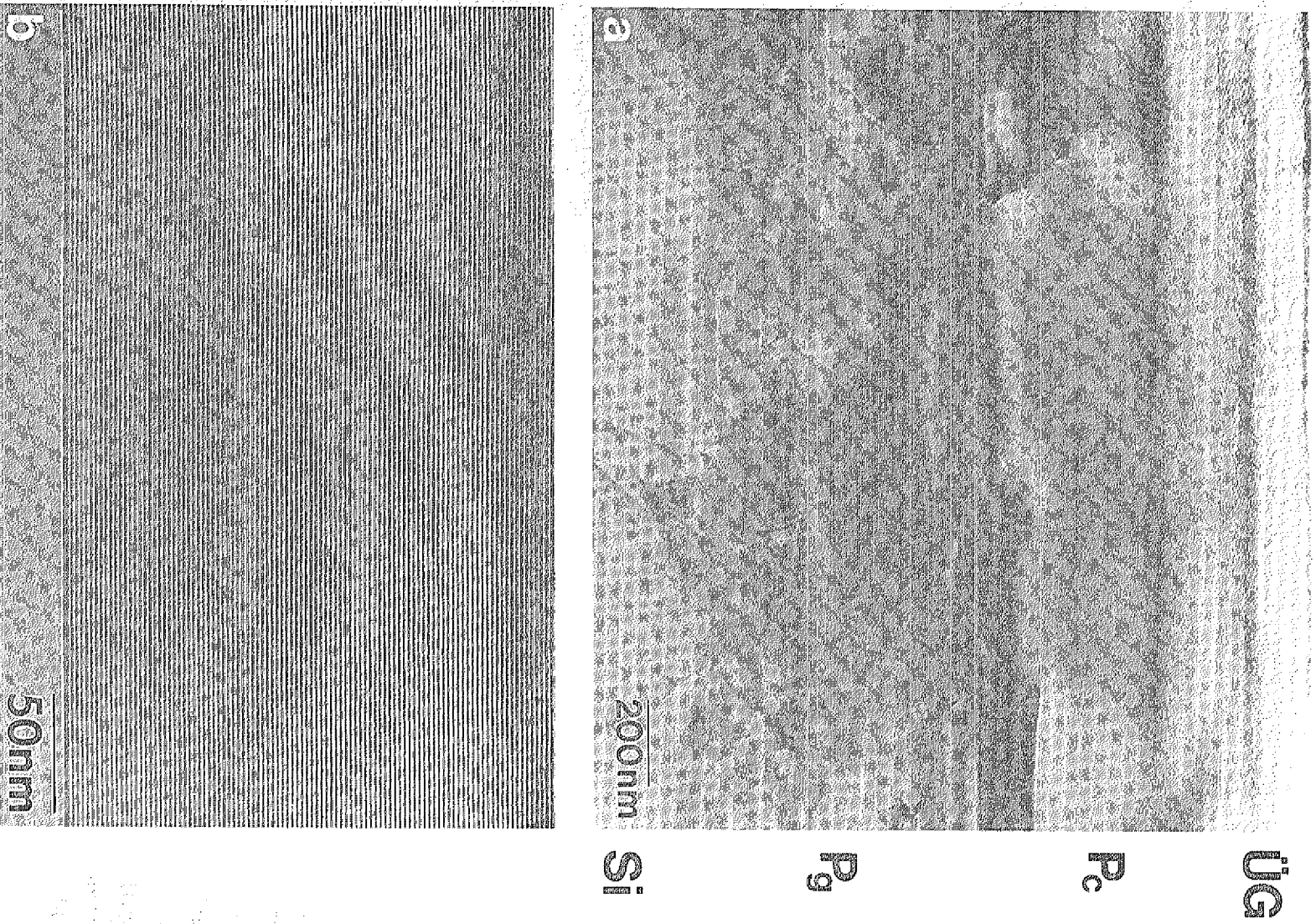


Abb. 6.8: Hellfeldabbildungen einer kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergittersstruktur ($m : n = 6 : 4$, Probe B2512) auf einem relaxierten Gradientenpuffer in der [110]-Projektion. (a) Übersichtsabbildung: Si-Substrat (Si), Pufferbereich mit ansteigenden Ge-Gehalt (P_c), homogener Pufferbereich (P_c), Übergitter (ÜG). (b) Detailabbildung des Übergitters.

wie z.B. in Abb. 6.8a weite Bildbereiche (einige μm) des Pufferbereichs mit konstantem Ge-Gehalt sowie die angrenzende Übergitterschichtung vollständig frei von Gitterdefekten. Die hohe Qualität solcher Übergitter auf Gradientenpuffern ist in Abb. 6.8b für das Beispiel der Probe B2512 anhand einer Detailabbildung des Übergitters dokumentiert. Diese hohe Qualität dokumentierte sich auch in Feinbereichs-Beugungsbildern, in denen eine hohe Zahl intensitätsreicher, scharf definierter Beugungsordnungen von Übergitterreflexen zu beobachten war (Abb. 6.2).

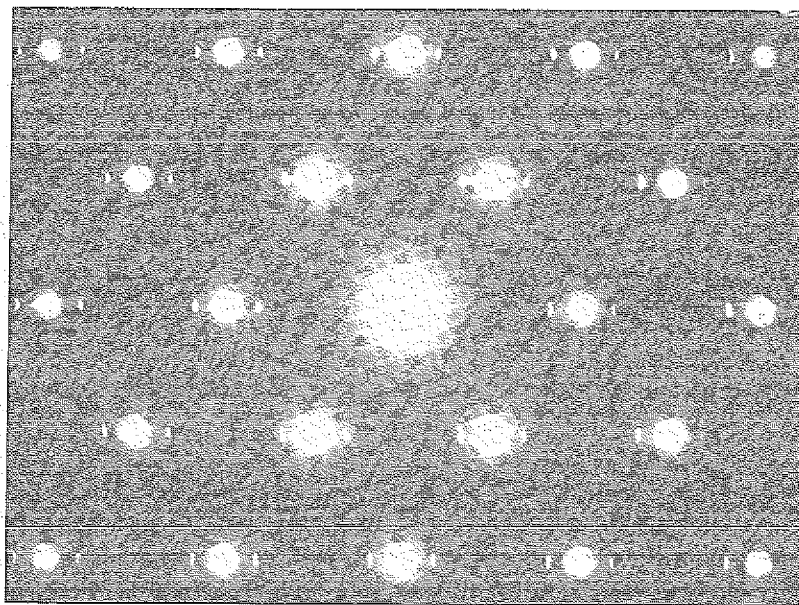


Abb. 6.9: Zusatzreflexe vom Typ $\vec{g} = \{h/2, k/2, l/2\}$ (h, k, l ungerade) in einem $[110]$ -Feinbereichs-Beugungsbild eines kurzperiodischen Si_mGe_n -Übergitters ($m : n = 5 : 5$, Probe B2214).

Bei einigen kurzperiodischen Si_mGe_n -Übergittern ($4 \leq n \leq 6$, $m = n$, Probenreihe B2212–B2215), die mit MBE bei 320°C auf 50 nm dicken homogenen $\text{Si}_{0.25}\text{Ge}_{0.75}$ -Puffern gewachsen wurden, konnten in Feinbereichs-Beugungsbildern von $[110]$ -Querschnittsproben zusätzliche Reflexe $\vec{g} = \{h/2, k/2, l/2\}$ (h, k, l ungerade) beobachtet werden. Abb. 6.9 zeigt solche Zusatzreflexe am Beispiel eines $[110]$ -Feinbereichs-Beugungsbildes der Probe B2214. Über das Auftreten solcher Zusatzreflexe in MBE-gewachsenen Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen wurde bereits in einigen Studien berichtet [53–55], wobei als Ursache für die beobachteten Zusatzreflexe in allen Fällen geordnete Si-Ge-Phasen im Bereich von Si/Ge-Grenzflächen vermutet wurden (vgl. Kap. 4.5). Ein sicherer Nachweis solcher geordneter Si-Ge-Grenzflächenphasen erfordert jedoch neben der Information aus der Elektronenbeugung noch zusätzliche Informationen über die Struktur und die kom-

positionelle Zusammensetzung der Si/Ge-Grenzflächen auf atomarer Skala. Bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben, die Anzeichen für solche geordneten Si-Ge-Phasen zeigten, war jedoch die jeweilige Übergitterqualität aufgrund hoher Versetzungsdichten und starker Grenzflächenwelligkeiten nicht hinreichend gut, als daß sich diese Proben für hochauflösende Gitterabbildungen geeignet hätten. Daher konnte die in Kap. 4.5 auf der Grundlage von Bildsimulationen für geordnete Si-Ge-Modellphasen vorrausgesagte Möglichkeit, geordnete Si-Ge-Phasen mittels hochauflösender Gitterabbildung identifizieren zu können, experimentell nicht überprüft werden.

6.3 Quantitative Grenzflächencharakterisierung

In diesem Abschnitt wird an repräsentativen Beispielen die experimentelle Anwendung der entwickelten quantitativen Methode zur Grenzflächencharakterisierung (Kap. 3, 4 und 5) auf innere Grenzflächen in Si_mGe_n-Übergitterstrukturen, zweidimensionalen Si_xGe_{1-x}-Quantentopf-Strukturen und dünnen Si_xGe_{1-x}-Filmen in der [110]- und in der [100]-Projektion präsentiert. Die Zielsetzung bei der experimentellen Anwendung der Methode bestand zum einen darin, die theoretischen Vorhersagen hinsichtlich des Bildkontrastverhaltens hochaufgelöster Gitterabbildungen von Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen zu prüfen und die Verlässlichkeit der mittels der neuen Methode ermittelten Kompositionswerte durch Vergleiche mit anderen Bestimmungsmethoden zu überprüfen. Desweiteren sollten durch Anwendung der Methode quantitative Daten über die Breite des kompositionellen Übergangs und über die Rauigkeit innerer Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen bestimmt werden. Entsprechend den Grundannahmen über die Gitterstruktur bei der theoretischen Ableitung der Methode wurden quantitative Grenzflächenanalysen ausschließlich an kohärenten Grenzflächen durchgeführt, die sowohl im unmittelbaren Grenzflächenbereich als auch in der weiteren Grenzflächenumgebung frei von Fehlpassungsversetzungen, Fadenversetzungen und planaren Gitterdefekten waren. Eine entsprechende Vorauswahl geeigneter Probenbereiche erfolgte dabei anhand der Vorcharakterisierung.

Si_mGe_n-Übergitter

Abb. 6.10 zeigt eine hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung^a eines kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 5 : 5$, Probe B1763), das mit MBE bei 300° C auf einen relaxierten, homogenen Si_{0.25}Ge_{0.75}-Puffer gewachsen wurde, in der [110]-Projektion. Unter den gewählten optimierten Abbildungsbedingungen ($\Delta f = -50$ nm, $t = 8$ nm) korrespondieren für Si jeweils helle Kontrapunkte mit Tunnelpositionen (vgl. Abb. 3.1a),

^a Im Vergleich zu der in Kap. 3–5 stets betrachteten 5- bzw. 9-Strahl-Gitterabbildung tragen bei der 7-Strahl-Gitterabbildung in der [110]-Projektion zusätzlich zu den abgebeugten {111}-Strahlen die kinematisch verbotenen Strahlen $\vec{g} = \pm(002)$ über die sog. Umweganregung [13] zur Bildintensitätsverteilung bei. Diese Strahlen wurden im Experiment in Ermangelung einer geeigneten Objektivblende stets mit einbezogen, ihr Kontrastbeitrag ist jedoch für die Bereiche optimierter Probendicken vernachlässigbar klein (vgl. Kap. 4.3).

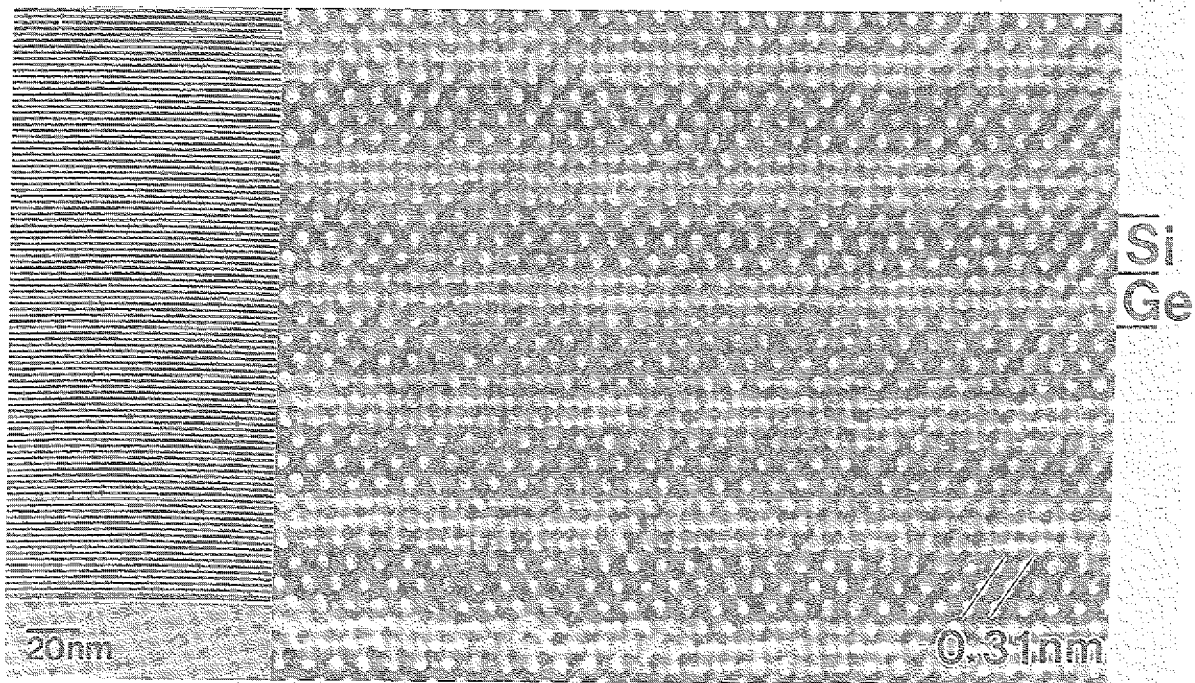


Abb. 6.10: Experimentelle Hellfeldabbildung (links) und hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung eines verspannten kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 5 : 5$, Probe B1763) in der [110]-Projektion.

wohingegen die Anwesenheit von Ge durch einen auffälligen HP-Kontrast mit hellen Kontrastpunkten sowohl an Tunnel- wie auch an Säulenpositionen angezeigt wird. Entsprechend den zu beobachtenden abrupten Kontrastübergängen an den einzelnen Si/Ge-Grenzflächen beträgt die Breite des kompositionellen Übergangs von Si zu Ge zwischen 1–2 Atomlagen. Anhand einer visuellen Inspektion der Abbildung unter flachem Winkel entlang der einzelnen Reihen von Kontrastpunkten ist ferner zu erkennen, daß alle Grenzflächen kohärent sind, dabei jedoch Grenzflächenstufen mit Stufenhöhen von 1–2 Atomlagen aufweisen. Quantitative Bildkontrastanalysen an einer Reihe von Schichtperioden in verschiedenen Bereichen des Übergitters ergaben, daß die beim Schichtwachstum vorgegebene Dicke jeder Si- und Ge-Einzelschicht von nominell 5 Atomlagen auch in atomarer Dimension nahezu perfekt eingehalten wird. Diese ermittelten Werte für die Einzelschichtdicken stimmten ebenfalls in exzellenter Weise mit integralen Mittelwerten über größere Übergitterbereiche überein, die mittels SAD- und XRD-Messungen bestimmt wurden [80]. Die Übersichts-Hellfeldabbildung des Übergitters, die im linken Bildbereich von Abb. 6.10 gezeigt ist, bestätigt den hohen Perfektionsgrad dieses kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitters auf einer anderen Vergrößerungsskala.

Abb. 6.11a zeigt eine hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung eines kurzperiodischen

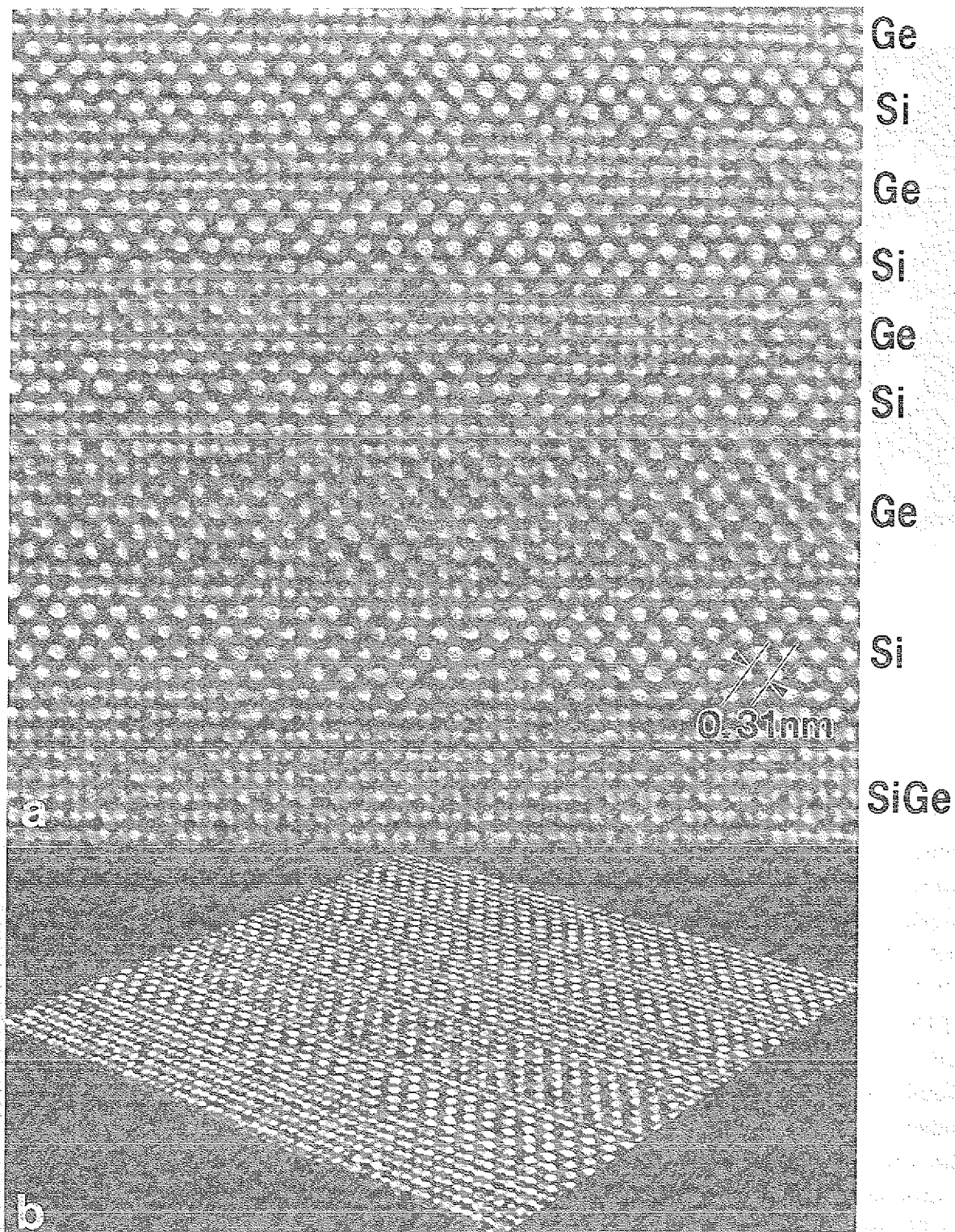


Abb. 6.11: (a) Experimentelle hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung eines verspannten kurzperiodischen Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512) in der [110]-Projektion. (b) Perspektivische Darstellung desselben Bildbereichs.

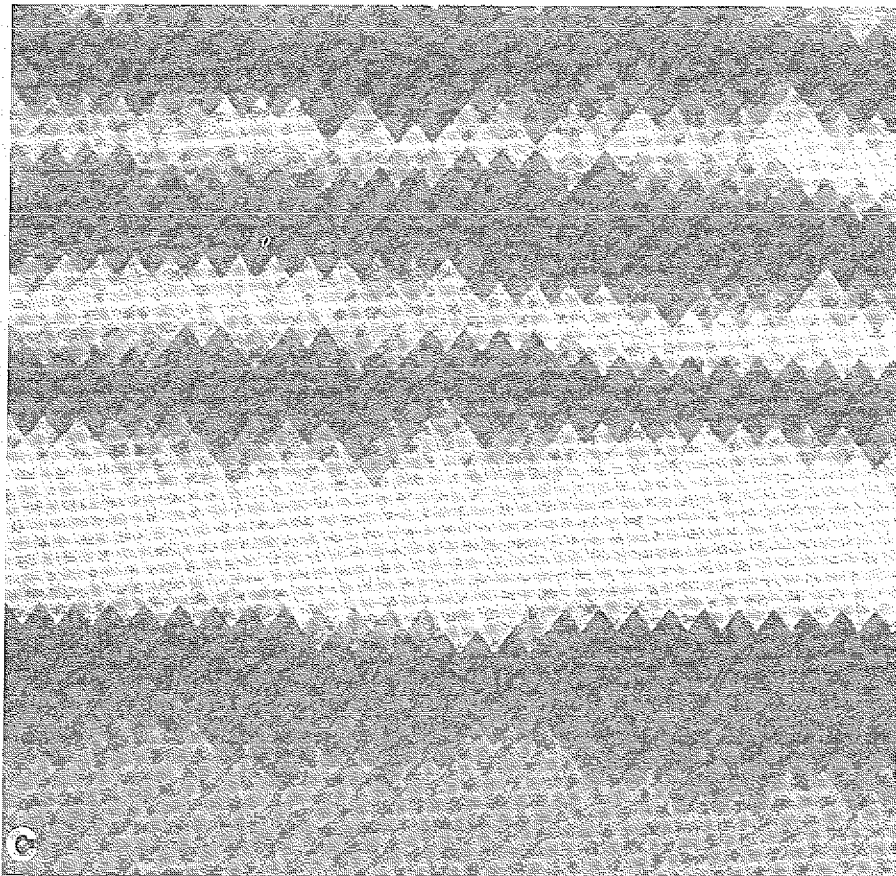


Abb. 6.11: (c) Quantitative Graustufenrepräsentation der durch Anwendung der Methode bestimmten lokalen Komposition x_{det} . Die unterschiedlichen Graustufen repräsentieren jeweils Kompositionsbereiche von 0–0.12 (hellgrau), von 0.12–0.375 (hell-/mittelgrau), von 0.375–0.625 (mittelgrau), von 0.625–0.875 (mittel-/dunkelgrau) sowie von 0.875–1.0 (dunkelgrau).

Si_mGe_n-Übergitters ($m : n = 9 : 6$, Probe B2512), das mit MBE bei 500° C auf einen Gradientenpuffer gewachsen wurde (vgl. Abb. 6.8), in der [110]-Projektion ($\Delta f = -50$ nm, $t = 10$ nm). Abb. 6.11b zeigt denselben Bildbereich in einer perspektivischen Darstellung (Scheimpflug-Darstellung). In den Abbildungen sind jeweils der obere Bereich des Legierungspuffers mit konstanter Komposition und die ersten vier Übergitterperioden zu erkennen. Unter den gewählten optimierten Abbildungsbedingungen ist eine Bildkontrastumkehr von reinem T-Kontrast in Si zu reinem S-Kontrast in Ge, zusammen mit einem HP-Kontrast in Legierungsbereichen mit $0.3 \leq x \leq 0.7$, sehr deutlich zu erkennen. Das experimentell zu beobachtende Bildkontrastverhalten bestätigt damit in exzellenter

Weise die in Kap. 3 und 4, Abb. 3.5 und 4.1, erarbeiteten theoretischen Vorhersagen. Anhand des kompositions-sensitiven Bildkontrastmusters sind lokale Schichtdickenvariationen und Abweichungen der mittleren Einzelschichtdicke von den Nominalwerten klar zu erkennen, insbesondere für die ersten zwei Übergitterperioden. Durch Anwendung der in Kap. 5 beschriebenen Algorithmen zur quantitativen Kompositionsbestimmung wurden für Paare aus engbenachbarten Atomsäulen innerhalb der einzelnen Si- und Ge-Schichten jeweils über die Probendicke von $t = 9.5 \text{ nm}$ gemittelte Kompositionswerte bestimmt. Abb. 6.11c zeigt ein quantitatives Kompositionsverteilungsbild in Form einer Graustufenrepräsentation des lokalen Si-Gehalts. Anhand dieses Verteilungsbildes ist zu erkennen, daß die Grenzflächen von Si zu Ge im Mittel über alle Einzelschichtgrenzflächen eine geringere Breite des kompositionellen Übergangs und auch eine geringere Grenzflächenrauigkeit aufweisen als die dazu inversen Grenzflächen von Ge zu Si. Dieser Unterschied ist besonders stark ausgeprägt zwischen der Puffer/Si- und der ersten Si/Ge-Grenzfläche. Eine solche Asymmetrie zwischen Si/Ge- und Ge/Si-Grenzflächen wurde nahezu bei allen mit MBE gewachsenen Übergitterstrukturen beobachtet (vgl. z.B. auch Abb. 6.12). Mittelung der Kompositionswerte über den in Abb. 6.11a sichtbaren Pufferbereich und Verwendung der ersten Si- bzw. Ge-Schicht oberhalb des Puffers als Referenz zur absoluten Kompositionsbestimmung ergab eine mittlere Pufferkomposition von $x_{\text{det}} = 0.49$. Dieser Wert ist in sehr guter Übereinstimmung mit Durchschnittswerten, die mit Hilfe von Feinbereichs-Elektronenbeugung ($x_{\text{det}}^{\text{SAD}} = 0.45$) und energiedispersiver Röntgenspektroskopie ($x_{\text{det}}^{\text{EDS}} = 0.47$) ermittelt wurden. Diese Übereinstimmung bestätigt somit nachweislich die quantitative Verlässlichkeit der entwickelten Methode.

Abb. 6.12a zeigt eine hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung einer verspannten Ge-Schicht in einem Si_mGe_n-Übergitter ($m : n = 32 : 6$, Probe VK232), das mit MBE bei 480° C pseudomorph auf Si gewachsen wurde, in der [110]-Projektion. Abb. 6.12b zeigt denselben Bildbereich in einer perspektivischen Darstellung. Mit Bezug auf die Übersichts-Hellfeldabbildung dieses Übergitters in Abb. 6.3 zeigt Abb. 6.12 die fünfte Ge-Schicht in der Schichtfolge von unten. In Abb. 6.12 ist an der Si/Ge-Grenzflächen (unten) ein abrupter Umschlag des Bildkontrastes von T-Kontrast in Si zu S-Kontrast in Ge deutlich zu erkennen. Ein Vergleich mit entsprechenden Bildsimulationen für scharfe und diffuse Grenzflächen (Kap. 4.1 und 4.2) zeigt, daß es sich hierbei um eine abrupte Grenzfläche mit einer kompositionellen Übergangsbreite von nur einer Atomlage handelt. Darüber hinaus enthält die Grenzfläche eine [110]-Grenzflächenstufe mit einer Stufenhöhe von 2 Atomlagen, was durch eine Betrachtung der Abbildung unter flachem Winkel entlang der Grenzflächenlinie und durch einen Vergleich mit Bildsimulationen für Grenzflächenstufen (Kap. 4.4) direkt erkennbar ist. Im Gegensatz zu dem atomar abrupten Kompositionsübergang an der Si/Ge-Grenzfläche (unten) zeigt die Ge/Si-Grenzfläche (oben) einen graduellen Kompositionsübergang (gut sichtbar in Abb. 12b), mit einer örtlichen Breite der Si-Ge-Durchmischungszone im Bereich von 4–6 Atomlagen. Abb. 12c zeigt ein mit Hilfe der entwickelten Methode bestimmtes Kompositionsprofil über beide Grenzflächen, wobei jeder Kompositionswert einen Mittelwert aus

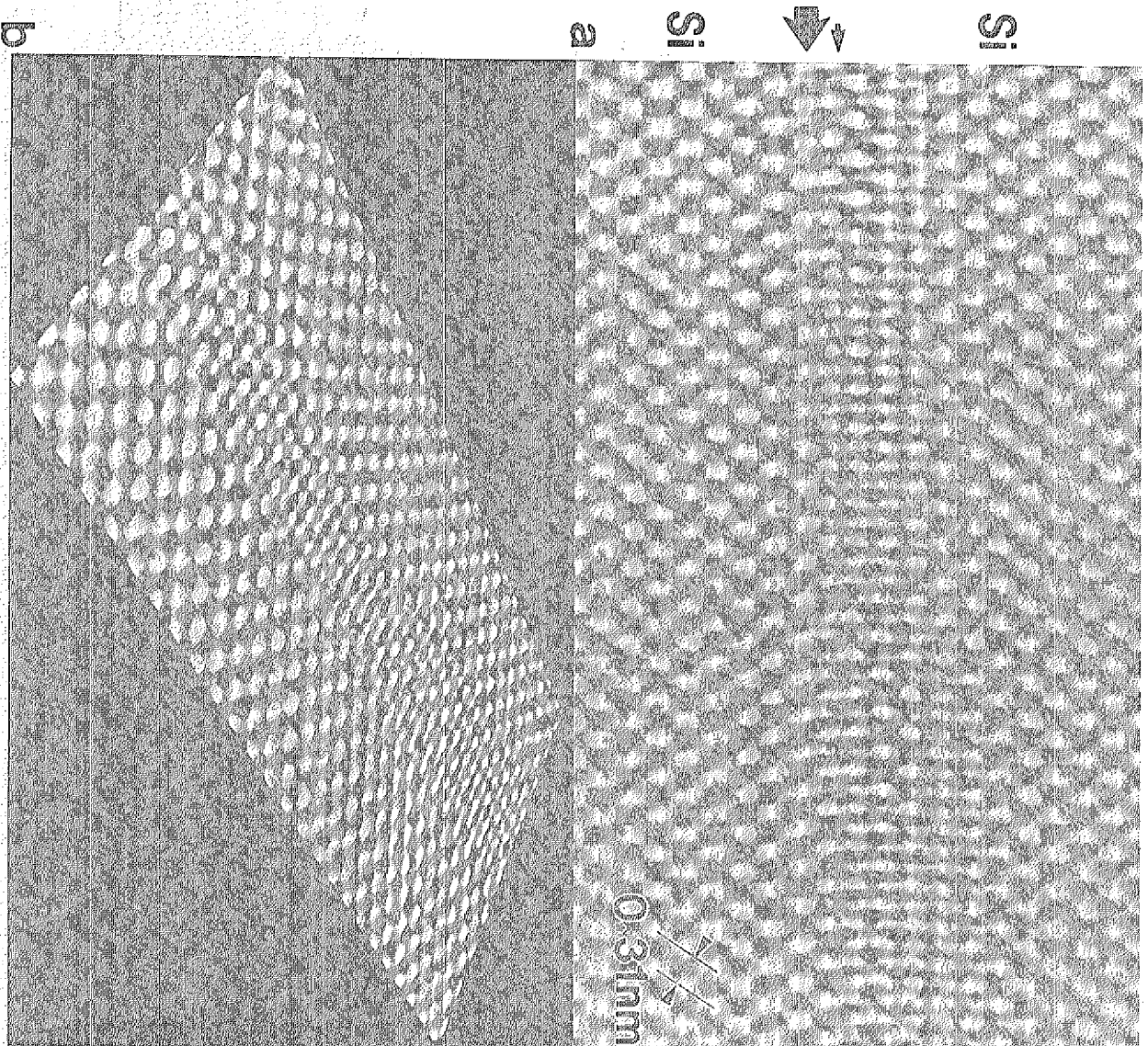


Abb. 6.12: (a) Experimentelle hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung einer verspannten Ge-Schicht in einem Si_mGe_n -Übergitter ($m : n = 32 : 6$, Probe VK232) in der $[110]$ -Projektion. (b) Perspektivische Darstellung desselben Bildbereichs.

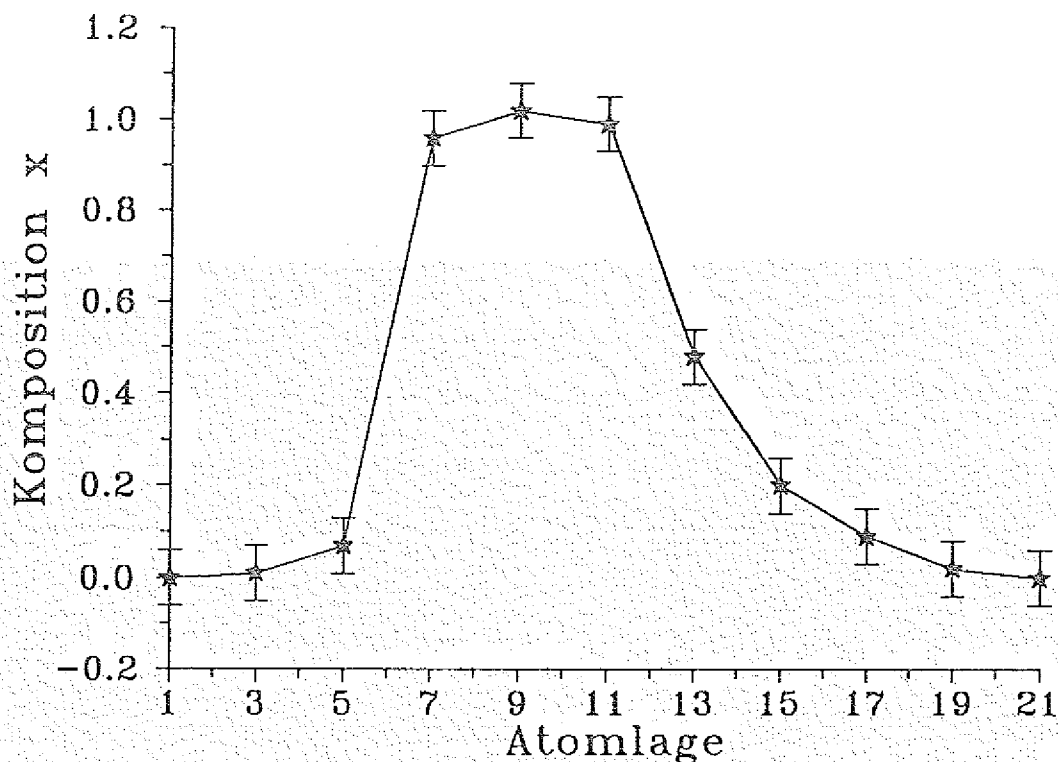


Abb. 6.12: (c) Mit Hilfe unserer quantitativen Methode bestimmtes mittleres Kompositionsprofil über beide Grenzflächen der in (a,b) gezeigten Ge-Schicht. Zur Bestimmung wurde der Bildbereich links der Grenzflächenstufe gewählt. Durch die Mittelung über jeweils zehn Bildzellen ist der statistische Fehler auf $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \pm 0.032$ reduziert.

jeweils zehn Werte für x_{det} benachbarter Bildzellen parallel zur Grenzfläche (links der Grenzflächenstufe) repräsentiert. Der Unterschied in der Grenzflächenschärfe zwischen der Si/Ge- und der Ge/Si-Grenzfläche ist offensichtlich. An dieser Probe wurden im oberen Bereich des Übergitters wegen der dort starken Grenzflächenwelligkeiten keine quantitativen Grenzflächencharakterisierungen durchgeführt (vgl. Abb. 6.3). Bedingt durch die Projektion des betrachteten Probenvolumens in die Bildebene würden nämlich diese Grenzflächenwelligkeiten dazu führen, daß die kompositionelle Übergangsbreite der Grenzflächen auf atomarer Skala verfälscht wiedergegeben würde.

Zweidimensionale $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Quantentopf-Strukturen

Abb. 6.13a zeigt eine 7-Strahl-Gitterabbildung eines $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Quantentopfes (nominal $x = 0.3$, Probe LV1) in einer Si-Matrix, die mit CVD bei 700°C pseudomorph auf Si gewachsen wurde, in der [110]-Projektion. Unter den gewählten optimierten Abbildungsbedingungen lassen sich Bereiche lokal unterschiedlicher Komposition deutlich unterscheiden. Eine Betrachtung der Aufnahme unter flachem Winkel entlang von $\langle 111 \rangle$ -Richtungen (Pfeile) läßt die Veränderung des Bildmusters im Bereich der Legierungsschicht besonders deutlich erkennen. Abb. 6.13b zeigt eine durch quantitative Bildmusteranalyse von Abb. 6.13a gewonnene Graustufen-Repräsentation der lokalen Komposi-

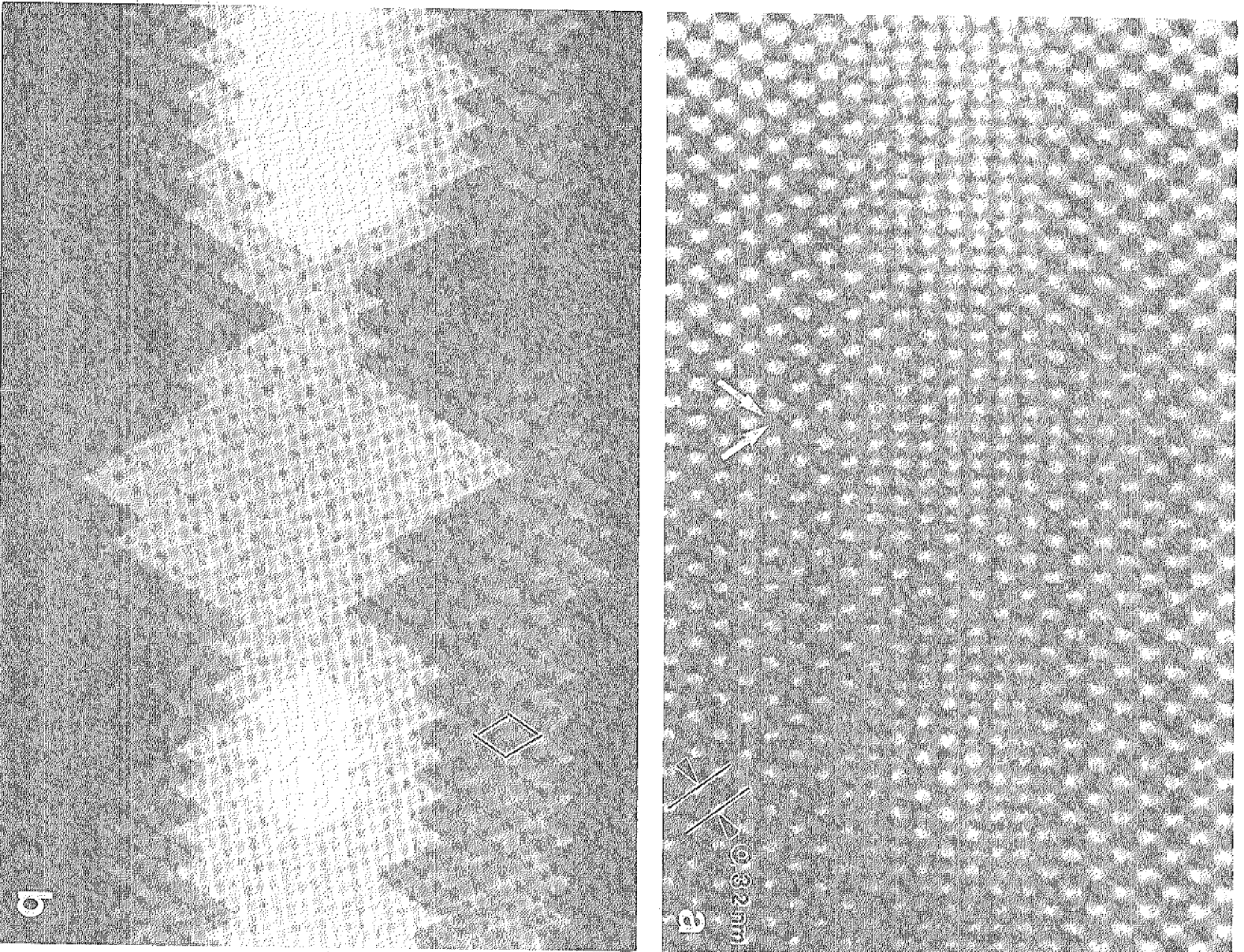


Abb. 6.13: (a) Experimentelle hochaufgelöste 7-Strahl-Gitterabbildung eines in Si eingebetteten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Quantentopfes (nominal $x = 0.3$) in der [110]-Projektion. (b) Quantitative Graustufenrepräsentation der durch Anwendung der Methode bestimmten lokalen Komposition x_{loc} . Die unterschiedlichen Graustufen repräsentieren Kompositionen von $x = 0.40 - 0.55$ (hellgrau), von $x = 0.55 - 0.70$ (hell-/mittelgrau), von $x = 0.70 - 0.85$ (mittel-/dunkelgrau) sowie von $x = 0.85 - 1.0$ (dunkelgrau).

tion. Die laterale Auflösung entspricht der Fläche der abgebildeten Bildzelle. Der hellste Grauwert entspricht Kompositionen von $x = 0.40 - 0.55$, der dunkelste Kompositionen von $x = 0.85 - 1.0$, mit Zwischenstufen von $x = 0.55 - 0.70$ und $x = 0.70 - 0.85$. Deutlich sind lokale Ge-Anreicherungen in Form von Facettierungen auf $\{111\}$ -Flächen und Schwankungen der Schichtdicke zu erkennen.

Dünne $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Filme

Abb. 6.14a zeigt eine 5-Strahl-Gitterabbildung eines kohärenten Grenzflächenbereichs zwischen einer dünnen, mit LPE bei 850°C auf $\text{Si}(001)$ gewachsenen $\text{Si}_{0.14}\text{Ge}_{0.86}$ -Schicht und dem $\text{Si}(001)$ -Substrat (Probe MA1) in der $[100]$ -Projektion. Abb. 6.14b zeigt denselben Bildbereich in einer perspektivischen Darstellung. Im Vergleich zu den bislang betrachteten Gitterabbildungen in der $[110]$ -Projektion, bei denen engbenachbarte Atomsäulen nicht getrennt aufgelöst werden, repräsentiert diese $[100]$ -Gitterabbildung direkt die projizierte Kristallstruktur mit atomarer Auflösung. Unter den hier gewählten optimierten Abbildungsbedingungen entsprechen helle (dunkle) Kontrastpunkte jeweils einzelnen projizierten Ge-(Si-)Atomsäulen. Die zu beobachtende Umkehr des Bildkontrastes bestätigt, wie für den Fall der $[110]$ -Projektion bereits gezeigt, vollständig die theoretischen Vorhersagen. Anhand der zu beobachtenden örtlichen Bildkontrastvariationen ist zu erkennen, daß die betrachtete Grenzfläche sowohl eine beträchtliche Breite im kompositionellen Übergang als auch laterale Grenzflächenrauigkeiten aufweist. Eine quantitative Bildkontrastanalyse ergab für die Breite des kompositionellen Übergangs mittlere Werte von ca. 5 Atomlagen. Anhand des hier gezeigten experimentellen Beispiels wird deutlich demonstriert, daß kompositions-sensitive und zur quantitativen Kompositionsbestimmung auswertbare Gitterabbildungen auch für die $[100]$ -Projektion erzielt werden können, wobei in dieser Projektion insbesondere auch das hohe Mikroskopauflösungsvermögen bei 400 keV vorteilhaft ausgenutzt wird.

In detaillierten Untersuchungen an solchen dünnen, mit LPE gewachsenen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Filmen auf $\text{Si}(001)$ - und $\text{Si}(011)$ -Substraten konnten in inkohärenten Grenzflächenbereichen unkonventionelle Fehlpassungsversetzungen auf sekundären Gleitebenen nachgewiesen werden. In einer Zusammenarbeit mit anderen Forschergruppen konnte dabei die Natur dieser unkonventionellen Fehlpassungsversetzungen durch den Einsatz hochauflösender Gitterabbildung detailliert charakterisiert werden [83,84].

6.4 Untersuchungen zur Interdiffusion

Das Interdiffusionsverhalten in $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen, die stets Festkörpersysteme fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht repräsentieren, stellt einen wissenschaftlich interessanten und technologisch wichtigen Aspekt dar, insbesondere hinsichtlich der Langzeitstabilität solcher Heterostrukturen bei Raumtemperatur und der Stabilität gegen Temperaturbehandlungen, wie sie z.B. für die Bauelementherstellung erforderlich sind. Die in dieser Arbeit entwickelte Methode zur quantitativen Grenzflächencharakterisierung bietet grundsätzlich die Möglichkeit, das Interdiffusionsverhalten an

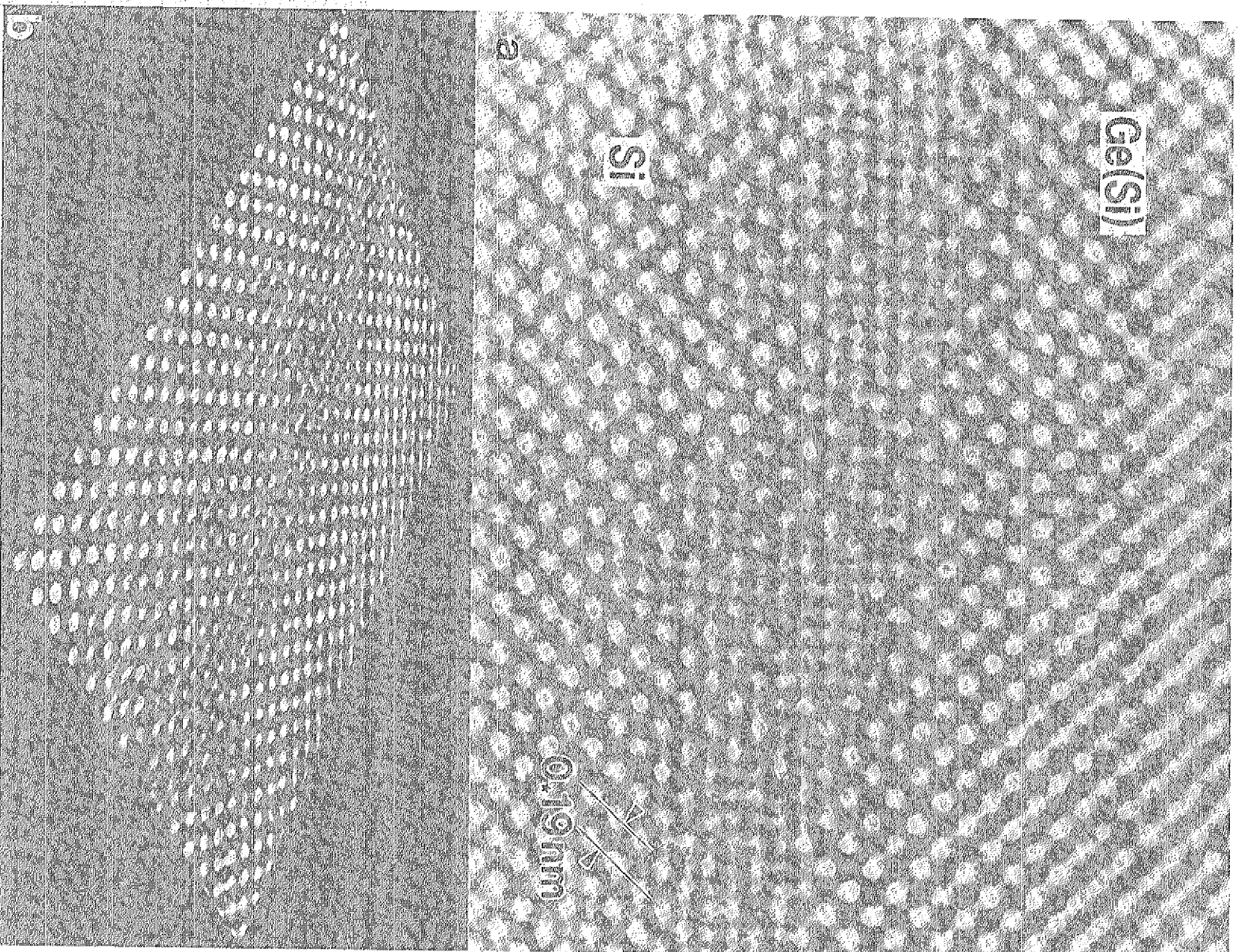


Abb. 6.14: (a) Experimentelle hochaufgelöste 5-Strahl-Gitterabbildung einer dünnen $\text{Si}_{0.14}\text{Ge}_{0.86}$ -Schicht auf $\text{Si}(001)$ in der $[100]$ -Projektion (Probe MA1). (b) Perspektivische Darstellung desselben Bildbereichs.

einzelnen inneren Grenzflächen in $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen auf atomarer Skala zu untersuchen. Interessante Fragestellungen betreffen dabei u.a. (i) die mögliche Abhängigkeit der Interdiffusion vom Abstand zur Probenoberfläche (Tiefenabhängigkeit) aufgrund der Erzeugung von Punktdefekten an der Probenoberfläche, (ii) den Einfluß tetragonaler Gitterverspannungen auf die Interdiffusion, (iii) mögliche Nichtlinearitäten im Interdiffusionsverhalten, z.B. in Form eines kompositionsabhängigen Interdiffusionskoeffizienten, sowie (iv) den Einfluß der Interdiffusion auf die Grenzflächenmorphologie, z.B. in Form induzierter Grenzflächenwelligkeiten oder Gitterdefekte. Insbesondere können mittels unserer Methode auch die Frühstadien der Interdiffusion an einzelnen inneren Grenzflächen untersucht werden. Dadurch können die durch andere Methoden wie z.B. XRD, RBS [85] oder Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie (SIMS) gewonnenen Diffusionsdaten im Bereich sehr kleiner Diffusionskoeffizienten, die für diese Methoden nicht mehr zugänglich sind, ergänzt werden. Um im Hinblick auf geplante Experimente zur Interdiffusion in $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen die optimalen Voraussetzungen für eine Anwendung unserer Methode zu prüfen, wurden in dieser Arbeit erste elektronenmikroskopische Untersuchungen zur Interdiffusion an Übergitterstrukturen durchgeführt.

Als Probenmaterial wurde eine langperiodische, mit MBE bei 550°C auf $\text{Si}(001)$ gewachsene Übergitterstruktur verwendet, die aus 5 Schichtenperioden von abwechselnd reinem Si (Dicke 10 nm) und einer $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$ -Legierung (Dicke 10 nm) bestand (Probe H1). Von dieser Struktur wurden unbehandelte sowie getemperte Proben, die im Rahmen von RBS-Untersuchungen in einem Quarzlampeofen 5 s einer Temperatur von 1075°C ausgesetzt worden waren [85], untersucht. Zur Untersuchung im Transmissions-elektronenmikroskop wurden Querschnitte dieser Übergitterstruktur präpariert, die jeweils aus einer getemperten und einer unbehandelten Probe aufgebaut waren.

Abb. 6.15a zeigt eine Übersichts-Hellfeldabbildung der unbehandelten Übergitterprobe H1 in einer $[340]$ -Projektion, in der das Si-Substrat und die 5 Übergitterperioden anhand unterschiedlicher Bildintensitäten deutlich zu erkennen sind. Die abgebildete Übergitterstruktur zeigt über den gesamten Bildbereich weder ein- noch zweidimensionale Gitterdefekte, und die Gitterfehlpassung zwischen Substrat und dem Übergitter wird vollständig durch tetragonale Gitterverspannungen ausgeglichen (pseudomorphes Wachstum). Die Grenzflächen zwischen den einzelnen Si- und $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$ -Einzelschichten zeigen bei der hier vorliegenden Ortsauflösung von etwa 1 nm nahezu keine lateralen Welligkeiten, und der abrupte Übergang der Bildintensität an den einzelnen Grenzflächen deutet auf eine geringe kompositionelle Übergangsbreite hin. Abb. 6.15b zeigt einen (in (a) markierten) Ausschnitt einer einzelnen $\text{Si}/\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$ -Grenzfläche in einer hochaufgelösten Gitterabbildung unter optimierten Abbildungsbedingungen in der $[110]$ -Projektion. Die abgebildete Grenzfläche ist kohärent und auf atomarer Skala abrupt, zeigt jedoch laterale Grenzflächenrauhigkeiten im Bereich von 6–8 Monolagen, die in (a) nicht aufgelöst werden. Ferner sind anhand von Fluktuationen des örtlichen Bildkontrastmusters im Bereich der Legierungsschicht lokale Schwankungen der Komposition zu erkennen. Im Bereich der Si-Schicht treten solche Bildmusterfluktuationen hingegen nicht

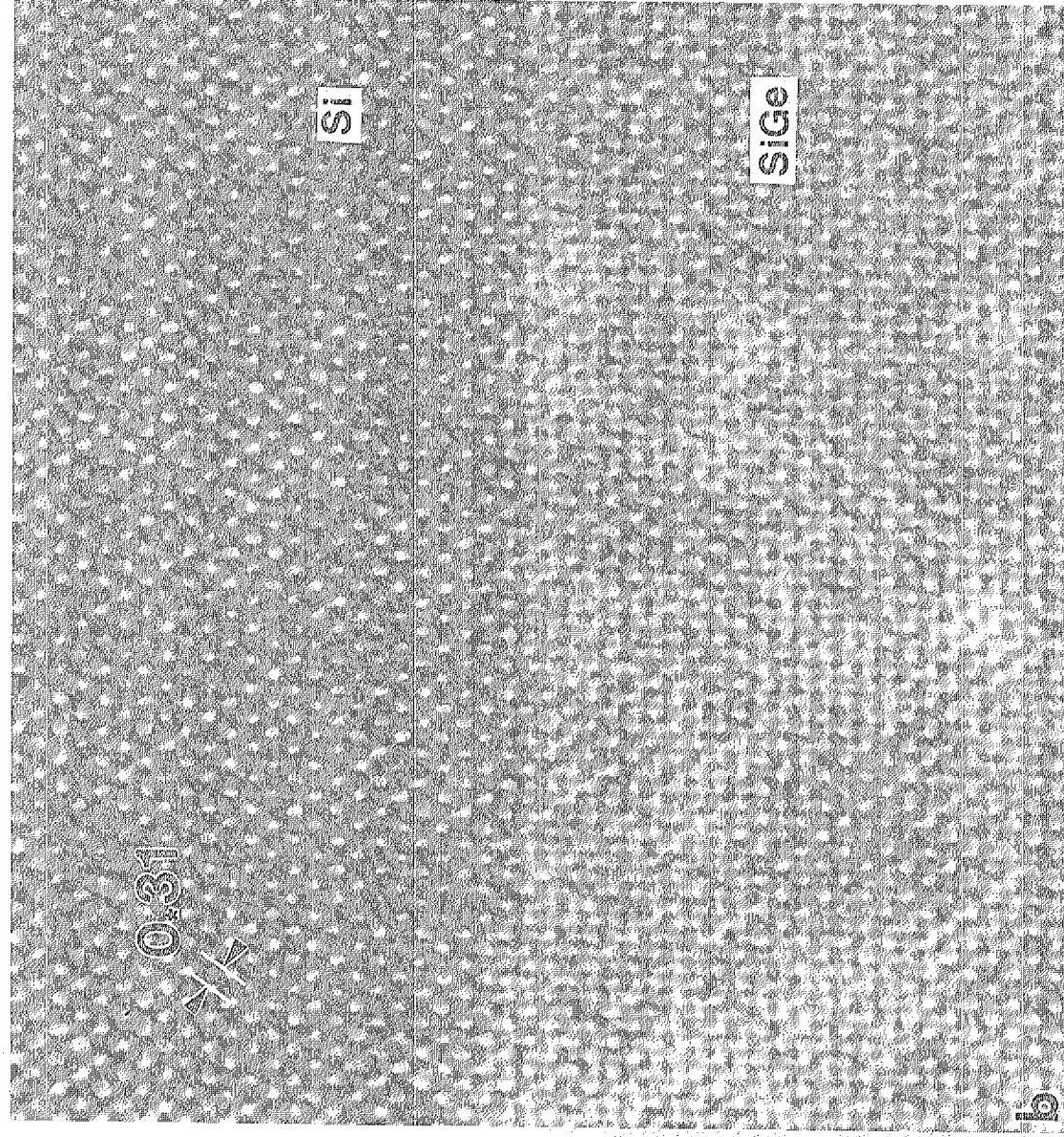
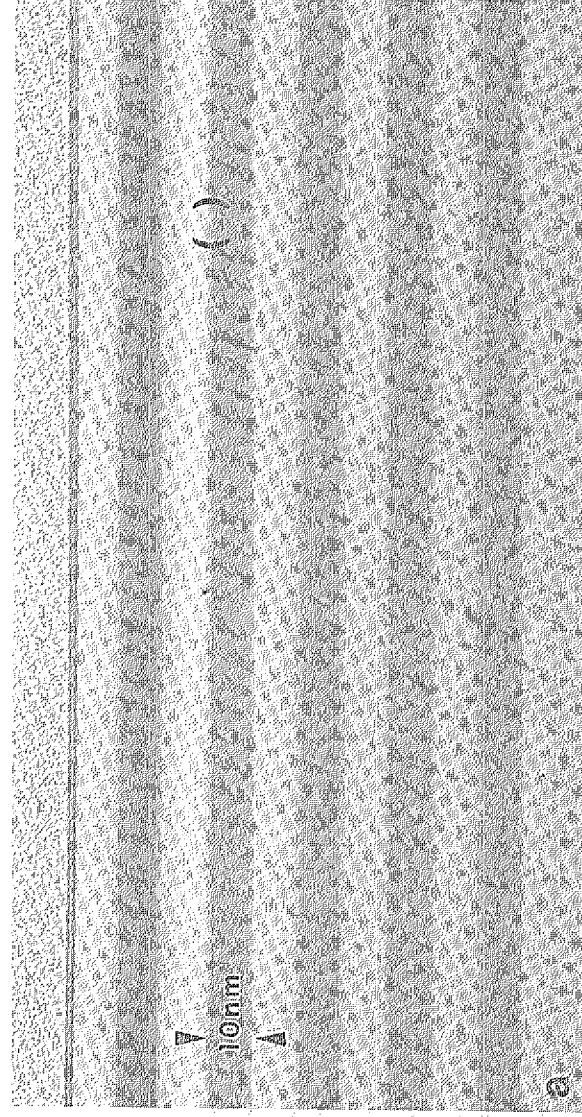


Abb. 6.15: (a) Übersichts-Hellfeldabbildung und (b) hochaufgelöste Gitterabbildung einer langperiodischen Si/Si_{0,73}Ge_{0,27}-Übergitterstruktur (Probe H1) vor der Temperbehandlung.

auf.

Abb. 6.16a zeigt eine Übersichts-Hellfeldabbildung einer getemperten Übergitterprobe H1 unter identischen Abbildungsbedingungen wie in Abb. 6.15a. Im Vergleich zu dem kastenförmigen Bildintensitätsprofil vor der Temperbehandlung (Abb. 6.15a) zeigt diese Abbildung eine sinusförmige Modulation der Bildintensität, die auf eine Durchmischung der im Ausgangszustand abrupten Grenzflächen durch Interdiffusion zurückzuführen ist. Neben dieser Veränderung im Bildintensitätsprofil sind jedoch im Vergleich zum Ausgangszustand (Abb. 6.15a) keine weiteren signifikanten Änderungen in der Probenmorphologie zu beobachten. Die durchmischten Grenzflächen zeigen weder verstärkte Welligkeiten noch sind Gitterdefekte zu beobachten. Abb. 6.16b zeigt eine hochaufgelöste Gitterabbildung der getemperten Probe H1 unter optimierten Abbildungsbedingungen in der [110]-Projektion. Deutlich ist darin ein gradueller Kontrastübergang zu beobachten, der die Durchmischung des im Ausgangszustand (Abb. 6.15b) abrupten Kompositionsprofils auf atomarer Skala anzeigt. Bei der hier betrachteten Probe ist die Interdiffusion dabei bereits so weit fortgeschritten, daß der abgebildete Probenbereich keine Bereiche konstanter Komposition (Kompositionsplateaus) mehr enthält, die der Ausgangskomposition von $x = 0.73$ bzw. $x = 1$ entsprechen. Aufgrund des Fehlens solcher Referenzbereiche (vgl. Kap. 5.2) kann die von uns entwickelte Methode in diesem speziellen Fall nur zur Ermittlung von relativen Kompositionsänderungen über den Bildbereich, nicht aber zur Bestimmung eines absoluten Kompositionsprofils eingesetzt werden. Zur vollen Ausnutzung der Leistungsfähigkeit der Methode müßten bei der Temperbehandlung die Temperzeit τ und/oder die Temperatur T so weit reduziert werden, daß die resultierende Interdiffusionslänge kleiner bleibt als die jeweils halbe Breite der Einzelschichten des Übergitters.

Das absolute Kompositionsprofil für die getemperte Übergitterprobe kann im speziellen Fall des hier betrachteten langperiodischen Übergitters durch Messung der lokalen Bildintensität $I(000)$ in der Hellfeldabbildung Abb. 6.16a mit einer Ortsauflösung von ca. 1 nm bestimmt werden. Als Kompositionsreferenz werden dazu die Plateaus für $I(000)$ in den mittleren Einzelschichtbereichen für $x = 0.73$ und $x = 1$ in Abb. 6.15a verwendet. Dies wird dadurch ermöglicht, daß $I(000)$ unter den gewählten Abbildungsbedingungen (Zentrum des Laue-Kreises bei $\vec{g} = (0, 0, 2.1)$) über den gesamten Bildbereich monoton von der lokalen Probenkomposition abhängt. Dieser Zusammenhang ist in Abb. 6.17 gezeigt, wo die Bildintensität als Funktion der Probendicke für verschiedene Legierungskompositionen aufgetragen ist. Darüber hinaus ist wegen der sehr großen Bild-Fourier-Periode der Übergittermodulation von $\delta f = 0.5 \text{ nm}$ (Gl. (5.2)) die Abhängigkeit der lokalen Bildintensität vom Defokus vernachlässigbar klein. Abb. 6.18a zeigt Kurvenverläufe der lokalen Bildintensität als Funktion des Ortes für die unbehandelte Probe ($I_{\text{orig}}(000)$) und für die getemperte Probe ($I_{\text{temp}}(000)$), die mit Hilfe einer CCD-Kamera (vgl. Kap. 5.2) aus den in Abb. 6.15a bzw. Abb. 6.16a gezeigten Hellfeldabbildungen durch Mittelung über Bereiche parallel zum Grenzflächenverlauf ermittelt wurden. Die Kurven für die Bildintensität können unter Bezugnahme auf die entspre-

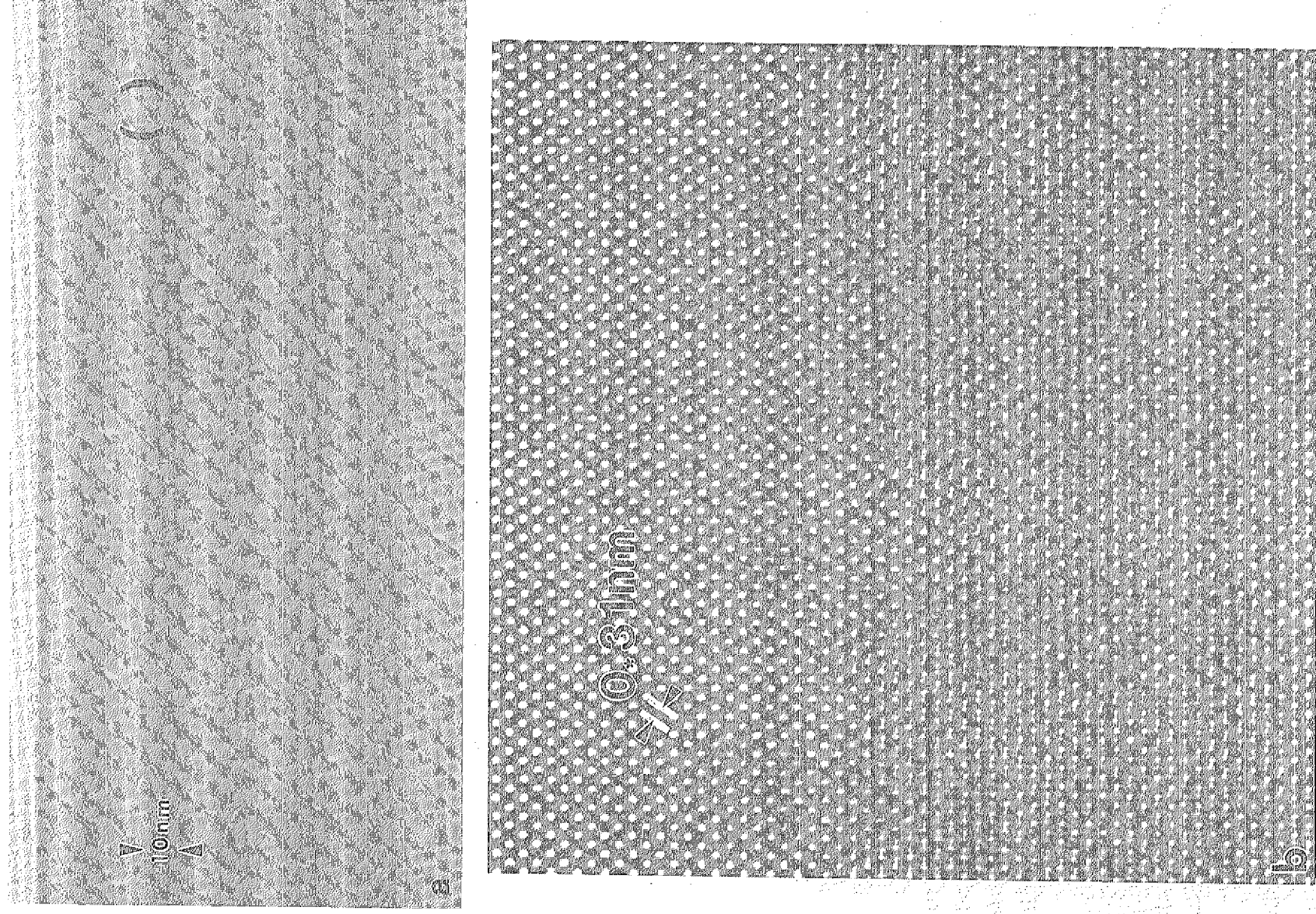


Abb. 6.16: (a) Übersichts-Hellfeldabbildung und (b) hochaufgelöste Gitterabbildung einer langperiodischen Si/Si_{0.73}Ge_{0.27}-Übergitterstruktur (Probe H1) nach der Temperbehandlung.

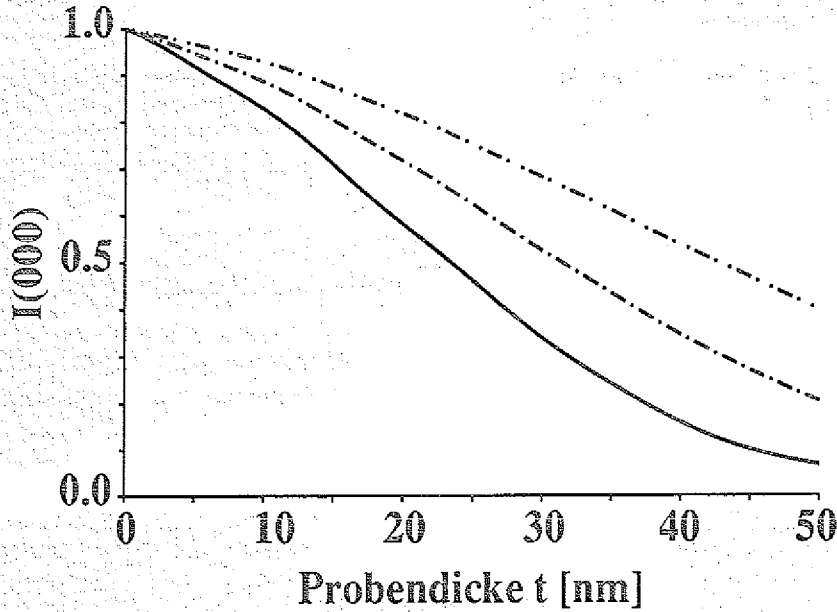


Abb. 6.17: Auftragung der Bildintensität $I(000)$ als Funktion der Probendicke t für die [340]-Projektion (Zentrum des Laue-Kreises bei $\vec{g} = (0, 0, 2.1)$) und für Kompositionen $x = 0$ (—), 0.5 (---) und 1 (- · -).

chenden Kompositionen $x = 0.73$ bzw. $x = 1$ für die Plateaus von $I_{\text{orig}}(000)$ direkt als Kompositionsprofile $x_{\text{orig}}(z)$ bzw. $x_{\text{temp}}(z)$ interpretiert werden. Im Vergleich zu dem kastenförmigen Profil von $x_{\text{orig}}(z)$ ist anhand des sinusförmigen Kurvenverlaufs von $x_{\text{temp}}(z)$ die Durchmischung des Kompositionsprofils deutlich zu erkennen. Gemäß einer für alle Einzelschichten nahezu gleichen relativen Betragsdifferenz zwischen den Extremalwerten für $x_{\text{orig}}(z)$ und $x_{\text{temp}}(z)$ im Bereich der Schichtmitte ergibt sich insbesondere auch keine signifikante Tiefenabhängigkeit der Interdiffusion für die hier durchgeführte Temperaturbehandlung.

Für den Fall der hier betrachteten periodischen Übergitterstruktur kann anhand der experimentell bestimmten Kompositionsprofile $x_{\text{orig}}(z)$ und $x_{\text{temp}}(z)$ ein Wert für den Diffusionskoeffizienten D bestimmt werden. Die Grundlage dieses Bestimmungsverfahrens bildet die Lösung der linearen Diffusionsgleichung für eine periodische Schichtung zweier Materialien A und B (Periodenlänge L) in einer Sequenz A-B-A-B-... [86]:

$$x_{\text{temp}}^{\text{sim}}(z) = C_0 + \sum_n C_n \exp(-k^2 D \tau) \cos(kz), \quad (6.4a)$$

mit $k = 2\pi n/L$ $\{n \in \mathcal{N}_0\}$. Die Kompositions-Fourier-Koeffizienten C_n ergeben sich dabei aus der Fourier-Analyse von $x_{\text{orig}}(z)$:

$$C_n = \frac{2}{L} \int x_{\text{orig}}(z) \cos(kz) dz. \quad (6.4b)$$

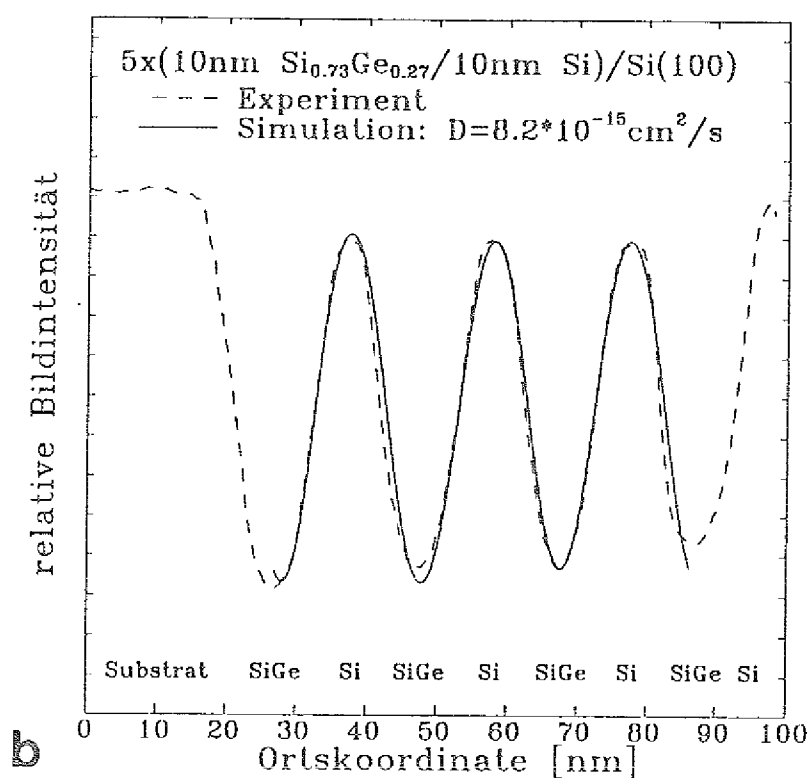
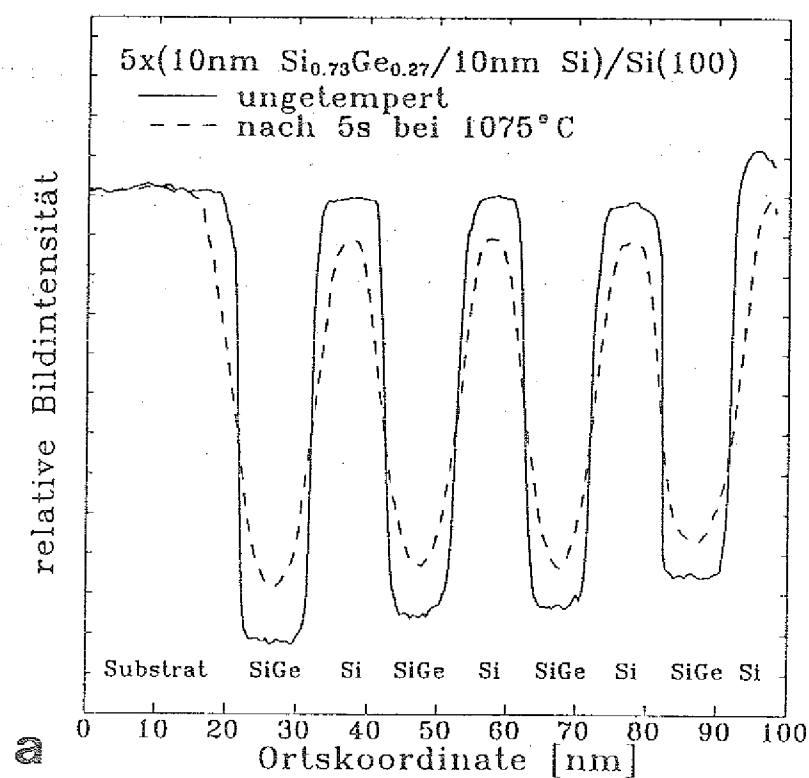


Abb. 6.18: (a) Gemessene Bildintensitäten als Funktion des Ortes für die unbehandelte Probe H1 (—) und für die getemperte Probe (- - -). (b) Anpassung eines simulierten Kompositionsprofils (—) an das experimentell für die getemperte Probe H1 ermittelte Kompositionsprofil (- - -).

Durch Anpassung von $x_{temp}^{sim}(z)$ an die experimentell bestimmte Kurve für $x_{temp}(z)$ wurde ein Wert $D = 8.2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ ermittelt, für den sich die beste Anpassung der Kurvenverläufe ergab. Abb. 6.18b zeigt diese Anpassung des simulierten an das experimentell ermittelte Kompositionsprofil, ausgedrückt in Einheiten der relativen Bildintensität. Die Unsicherheit in der Bestimmung von D beträgt dabei etwa $\Delta D = \pm 1.3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$. Eine Analyse von Gl. (6.4) ergab ferner, daß aufgrund der bereits fortgeschrittenen Interdiffusion nur noch Kompositions-Fourier-Koeffizienten C_n nullter und erster Ordnung einen signifikanten Beitrag zu x_{temp} (Gl. (6.4a)) liefern. In diesem Fall ist also die verwendete Hellfeldabbildung, trotz der im Vergleich zur hochauflösenden Gitterabbildung reduzierten Ortsauflösung, für eine präzise Bestimmung von D vollkommen ausreichend.

7 Diskussion

7.1 Bildsimulationen und methodische Entwicklung

In dieser Arbeit wurde erstmals das Elektronenstreuverhalten und die Bildkontrastentstehung für verspannte und unverspannte $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Legierungen ($0 \leq x \leq 1$) und für unterschiedliche Typen von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen in hochaufgelösten Gitterabbildungen systematisch untersucht. Durch eine Analyse linearer und nichtlinearer Interferenzbeiträge zum Bildkontrast konnten dadurch optimierte Abbildungsbedingungen bei 400 keV ermittelt werden, unter denen sich ein systematischer Zusammenhang zwischen der lokalen Komposition und dem Bildkontrastmuster in der Abbildung ergibt. Auf dieser Grundlage wurde eine neuartige Methode zur kompositionellen und strukturellen Charakterisierung von inneren Grenzflächen in verspannten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen in der [110]- und [100]-Projektion entwickelt, die u.a. eine quantitative Bestimmung lokaler Kompositionswerte mit einer Ortsauflösung im Bereich der jeweils kleinsten projizierten Struktureinheit ermöglicht, und die auch insbesondere tetragonale Gitterverzerrungen vollständig berücksichtigt.

Im folgenden sollen die wichtigsten Resultate hinsichtlich des Elektronenstreuverhaltens, des Bildkontrastverhaltens und der quantitativen Charakterisierungsmethode diskutiert werden:

(i) Ein Vergleich der Austrittswellenfunktionen für unverspannte und verspannte $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen lieferte in allen Fällen eine exzellente Übereinstimmung zwischen BW-Lösungen und MS-Lösungen (Kap. 3.1). Dieses Resultat zeigt deutlich die Gleichwertigkeit beider Berechnungsverfahren für den Fall kleiner Einheitszellen hoher Symmetrie, für die das Kristallpotential durch einen kleinen Satz von Potentialkoeffizienten beschrieben werden kann. Im Gegensatz dazu wurde im Fall von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächenstrukturen keine Übereinstimmung zwischen BW- und MS-Lösungen mehr beobachtet (Kap. 4). In diesem Fall führen die örtlich variierenden Gitterabstände und Besetzungszahlen der Gitterplätze zu einer beträchtlichen Erhöhung der Zahl von Potentialkoeffizienten. Aus der Einbeziehung dieser hohen Zahl von Potentialkoeffizienten resultiert beim BW-Verfahren eine entsprechend hohe Zahl von Blochwellen, von denen viele jedoch nur eine marginale Anregungsstärke besitzen. Aufgrund einer beschränkten numerischen Rechengenauigkeit resultieren daraus Instabilitäten in der Lösung für $\psi(\vec{r})$, welche die beobachteten Diskrepanzen zwischen dem BW- und dem MS-Verfahren erklären. Aus diesem Grund wurden die Bildsimulationen für Grenzflächen ausschließlich mittels des MS-Verfahrens durchgeführt.

(ii) Das Studium des Elektronenstreuverhaltens von unverspannten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Volumenlegierungen im Bereich von $x = 0$ bis 1 (Kap. 3.1.1) hat gezeigt, daß die Änderungen in der Besetzungszahl der Gitterplätze und im Gitterparameter mit variierendem x sich

sowohl auf die Amplituden als auch auf die relativen Phasen von gebeugten und ungebeugten Strahlen aus dem Fourier-Spektrum von $\psi(\vec{r})$ auswirken. Für Probendicken bis zu 40 nm ist ein systematischer Übergang des Elektronenstreuverhaltens mit x zu beobachten. Der Einfluß tetragonaler Gitterverzerrungen auf das Elektronenstreuverhaltens ist dabei allgemein bis zu Dicken von $t < \xi_0/2$ zu vernachlässigen und für $t > \xi_0/2$ nur gering. Im Fall der [110]-Zonenachsenorientierung verändern tetragonale Gitterverzerrungen die projizierte Kristallsymmetrie nicht. Im Bild der Bloch-Wellen-Theorie sind aus diesem Grund im Vergleich zum unverspannten Ausgangszustand für die Beschreibung der Austrittswellenfunktion keine zusätzlichen Bloch-Wellen erforderlich. Diese Vorhersage wird vollständig durch die numerischen Rechnungen bestätigt. Im Gegensatz zur [110]-Zonenachsenorientierung wird die projizierte Kristallsymmetrie im Fall tetragonaler Gitterverspannungen hingegen für die [100]-Zonenachsenorientierung reduziert. In diesem Fall ist der für unverspannte Volumenkristalle erhaltene Satz dominanter Blochwellen zur Beschreibung von $\psi(\vec{r})$ nicht mehr ausreichend, und die numerische Berechnung von $\psi(\vec{r})$ ergibt eine zusätzliche (dritte) Blochwelle, deren Anregungsstärke mit zunehmender Verspannung monoton zunimmt.

(iii) Die Verwendung analytischer Ausdrücke zur Beschreibung der Bildintensitätsverteilung in hochaufgelösten Gitterabbildungen (Kap. 3.2) hat sich als eine effiziente Vorgehensweise zur Bestimmung von optimierten Abbildungsbedingungen erwiesen, für die sich ein systematischer Zusammenhang zwischen der Legierungskomposition eines Probenbereichs und dem zugehörigen Bildkontrast in der Abbildung ergibt. Mit Hilfe dieser Ausdrücke konnte ferner gezeigt werden, daß tetragonale Gitterverzerrungen den Bildkontrast i.a. nur wenig und für Defokuswerte nahe dem Scherzer-Defokus nahezu überhaupt nicht beeinflussen. Dieses Resultat ist insbesondere von Bedeutung für die quantitative Charakterisierung von verspannten Heterosystemen unter dem möglichen Einfluß von Relaxationseffekten in dünnen Probenbereichen [87]. Das im theoretischen Teil dieser Arbeit auf der Basis der nichtlinearen Abbildungstheorie vorausgesagte Bildkontrastverhalten konnte dabei im experimentellen Teil (Kap. 6) an einer Reihe von Beispielen vollständig bestätigt werden.

(iv) Signifikante Bildkontrastunterschiede zwischen Si und Ge können über weite Bereiche der Probendicke dadurch erzielt werden, daß bei Verwendung optimierter Defokuswerte unterschiedliche Strahlphasen von Strahlen erster Ordnung direkt in eine Bildkontrastumkehr für Si und Ge umgesetzt werden. Die Einstellung solcher Bildkontrastunterschiede, die zudem eine systematische Abhängigkeit von der Komposition zeigen, bildet die Grundlage der entwickelten Methode zur quantitativen Grenzflächencharakterisierung. Bei III-V- oder II-VI-Materialsystemen wie z.B. GaAs/AlAs ist die Situation hingegen anders als bei Si/Si_xGe_{1-x}. Bei diesen Materialsystemen entstehen Bildkontrastunterschiede zwischen Bereichen unterschiedlicher Komposition durch den kompositions-sensitiven Amplitudenbeitrag der "chemischen" {200}-Reflexe. Solche Re-

flexe existieren für das System $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ nicht.

(v) Die geometrische Korrektur hochauflöster Gitterabbildungen ist im Fall verspannter Heterosysteme eine notwendige Voraussetzung für eine quantitative Bildkontrastanalyse. Der zu diesem Zweck entwickelte Bildverarbeitungsalgorithmus ermöglicht eine hochpräzise und gegen statistisches Bildrauschen unempfindliche geometrische Bildkorrektur und lokale Bildkontrastsymmetrisierung. Ferner ist dieser Algorithmus auch im Fall gitterangepaßter Heterosysteme vorteilhaft einsetzbar [58–62]. In Kap. 5.2.3 wurde dies am Beispiel der Kompositionsanalyse an einer GaAs/AlAs-Grenzfläche demonstriert. In dem dort betrachteten Fall konnten die Auswirkungen lokaler Bildmusterasymmetrien, die von einer geringen Strahlverkipfung herrührten, nahezu vollständig durch Anwendung des Algorithmus beseitigt werden. Erst dadurch ergaben sich bei einer Kompositionsbestimmung mit Hilfe des "Kreuzkorrelations"-Algorithmus von Ourmazd und Kollegen [5,6] korrekte Resultate für die lokale Komposition.

(vi) Mit Hilfe der von uns entwickelten Methode ist eine quantitative Kompositionsbestimmung an kohärenten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen mit einer Genauigkeit von $\Delta x = \pm 0.1$ für eine Atomsäule in der [100]-Projektion und für ein engbenachbartes Atomsäulenpaar in der [110]-Projektion möglich. Die erzielte Genauigkeit ist damit vergleichbar mit Angaben über die Genauigkeit von Methoden zur Kompositionsbestimmung bei III-V- oder II-VI-Verbindungshalbleitersystemen [5–8]. Bei $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ erweisen sich die Werte für die ermittelte Komposition als unempfindlich gegen Fluktuationen in der Besetzungszahl einzelner Gitterplätze innerhalb einer Atomsäule in der [100]-Projektion sowie auch zwischen engbenachbarten Atomsäulen in der [110]-Projektion. Aufgrund eines sehr hohen relativen Unterschiedes im chemischen Signal $J(\vec{g}_1)$ zwischen Si und Ge von ca. 200 % ergibt sich für unsere Methode ein sehr hohes Signal-zu-Rauschverhältnis von etwa 20 (Kap. 5.2.2).

(vii) Grundsätzlich ist eine quantitative Anwendung unserer Methode auf kohärente $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen beschränkt. Bei einer Anwendung auf Grenzflächenbereiche mit Defekte wie z.B. Fehlpassungsversetzungen könnten hierdurch entstehende Bildkontrastveränderungen zu Fehlern in der Kompositionsbestimmung führen. In solchen Fällen müßte die Anwendbarkeit der Methode jeweils speziell durch Bildsimulationen überprüft werden. Abgesehen von einer quantitativen Kompositionsbestimmung im Bereich von Defekten ist die Methode aber in jedem Fall dazu geeignet, durch Einstellung kompositions-sensitiver Abbildungsbedingungen z.B. die genaue Lage einer Fehlpassungsversetzung bezüglich des kompositionellen Übergangs an einer Grenzfläche zu ermitteln [83,84]. Die Tatsache, daß kompositions-sensitive und quantitativ auswertbare Abbildungen von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Grenzflächen sowohl in der [110]- als auch in der [100]-Projektion aufgenommen werden können, eröffnet darüber hinaus eine allgemein interessante Perspektive für zukünftige Anwendungen der Methode. So könnte anhand

von Abbildungen ein und desselben Grenzflächenbereichs in verschiedenen Projektionen die Grenzflächenstruktur in diesem Bereich noch wesentlich umfassender im Sinne eine dreidimensionalen Rekonstruktion von Position und Spezies einzelner Grenzflächenatome charakterisiert werden.

(iix) Unsere Methode verwendet einen "Fourier-Raum"-Algorithmus, der ausschließlich solche Bildkontrastanteile einer hochaufgelösten Gitterabbildung nutzt, die eine hohe kompositionelle Sensitivität besitzen und die unter optimierten Abbildungsbedingungen quasilinear von der Komposition abhängen. Im Gegensatz dazu werden bei "Ortsraum"-Algorithmen, wie sie zur Charakterisierung von III-V- und II-VI-Heterosystemen vorgeschlagen wurden [5–8], alle fundamentalen Bildkontrastanteile zur lokalen Kompositionsbestimmung verwendet (Kap. 5.2.3). Wie am Beispiel der "Kreuzkorrelations"-Methode explizit gezeigt werden konnte (vgl. Abb. 5.5), führt dies i.a. zu einer komplexen Abhängigkeit des chemischen Signals von der Komposition. Darüber hinaus ist bei der "Kreuzkorrelations"-Methode der statistische Fehler in der Kompositionsbestimmung allgemein höher im Vergleich zu unserer Methode. Dies wird durch den hohen Rauschbeitrag von fundamentalen Bild-Fourier-Koeffizienten verursacht, die Bildmodulationen mit großer Raumwellenlänge beschreiben. Der statistische Fehler in x_{det} ist dabei für unsere Methode mit $\Delta x_{\text{det}}^{(\text{stat})} = \pm 0.05$ im Mittel nur halb so groß wie entsprechende Werte bei Anwendung der "Kreuzkorrelations"-Methode.

(ix) Ein großer Vorteil der hier vorgestellten Methode besteht darin, daß als chemisches Signal zur quantitativen Kompositionsbestimmung über den gesamten Kompositionsbereich nur die Amplitude einer einzigen Bildfrequenz $\vec{g} = \vec{g}_1$ verwendet wird. Da die kompositionsabhängigen Variationen in $|\vec{g}_1|$ maximal nur 4.2 % betragen, führen Strahlverkipnungen nur zu vernachlässigbar kleinen relativen Verschiebungen der relevanten Bildkontrastmuster zwischen Probenbereichen unterschiedlicher Komposition. Deshalb wird bei Anwendung unserer Methode die quantitative Kompositionsbestimmung durch Strahlverkipnungen grundsätzlich nicht negativ beeinflusst (Kap. 5.2.2). Im Gegensatz dazu verursachen Strahlverkipnungen im Fall von Grenzflächen zwischen III-V-Halbleitern wie z.B. GaAs/AlAs betonte Asymmetrien im Bildkontrastmuster, was zu beträchtlichen Fehlern in der lokalen Kompositionsbestimmung führen kann, und zwar insbesondere im - interessanten - kompositionellen Übergangsbereich der Grenzfläche (Kap. 5.2.3).

(x) Von Hull und Kollegen [88] wurde bereits vor einigen Jahren eine quantitative Methode zur lokalen Kompositionsbestimmung an Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen anhand hochaufgelöster 7-Strahl-Gitterabbildungen in der [110]-Projektion vorgeschlagen, die auf der photodensitometrischen Messung der lokalen Bildhintergrundintensität $I(000)$ beruht. Im Vergleich zu unserer Methode besitzt diese Methode jedoch einige signifikante Nachteile. Für eine verlässliche Kompositionsbestimmung mit dieser Methode ist

z.B. der nutzbare Bereich der Probendicke, in dem ein monotoner Zusammenhang zwischen $I(000)$ und x besteht, jeweils nur sehr klein. In solchen Dickenbereichen, die für 400 keV direkt aus den Kurvenverläufen für $I(000)$ in Abb. 3.4 abgelesen werden können, betragen dabei die relativen Änderungen in $I(000)$ nur maximal 18 %, im Gegensatz zu relativen Änderungen von etwa 200 % für das bei unserer Methode verwendete chemische Signal. Darüber hinaus ist insbesondere die lokale Bildhintergrundintensität sehr stark von statistischem Bildrauschen betroffen, was zu einem nur vergleichsweise kleinen Signal-zu-Rauschverhältnis dieser Methode führt. Dadurch wird das räumliche wie auch das kompositionelle Auflösungsvermögen dieser Methode grundsätzlich eingeschränkt. Ferner nehmen die Autoren in Ref. [88] keine Stellung zu möglichen Einflüssen nichtlokaler Effekte auf ihre Methode, wie z.B. der Fresnel-Beugung. Die Rolle solcher Effekte hinsichtlich der erzielbaren Genauigkeit in der Kompositionsbestimmung mit dieser Methode bleibt deshalb unklar.

(xi) Die für geordnete Si-Ge-Phasen durchgeführten Bildsimulationen haben gezeigt, daß Ordnungsphasen vom RS1- und RS2-Typ [53,56] durch die Wahl optimierter Abbildungsbedingungen in hochaufgelösten [110]-Gitterabbildungen eindeutig anhand charakteristischer Bildkontrastdetails identifiziert werden können. Diese Ergebnisse stehen damit in Gegensatz zu Ergebnissen aus früheren Studien von Müller und Kollegen [54] über das Bildkontrastverhalten von geordneten Si-Ge-Phasen. In diesen Studien konnten in simulierten [110]-Gitterabbildungen von geordneten Si-Ge-Phasen keine signifikanten Bildkontrastunterschiede im Vergleich zu ungeordneten Legierungen beobachtet werden. Die in diesen Studien verwendeten Abbildungsbedingungen waren dabei jedoch verschieden von den von uns gewählten optimierten Abbildungsbedingungen. Experimentelle Anzeichen für geordneten Si-Ge-Phasen wurden in der vorliegenden Arbeit bei kurzperiodischen MBE-gewachsenen Übergitterstrukturen (Proben B2212–B2215) in Form von speziellen Überstruktureflexen in Elektronenbeugungsbildern beobachtet (Abb. 6.9). Aufgrund einer unzureichenden Schichtqualität konnte jedoch die Anwesenheit geordneter Si-Ge-Phasen in diesen Proben bislang nicht mittels hochauflösender Gitterabbildung überprüft werden.

7.2 Schichtqualität, Relaxation und Interdiffusion

Die detaillierten elektronenmikroskopischen Untersuchungen an unterschiedlichen Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen in Form zweidimensionaler Si_xGe_{1-x}-Quantentopf-Strukturen, lang- und kurzperiodischer Si_mGe_n-Übergitter, sowie dünner epitaktische Si_xGe_{1-x}-Filme haben gezeigt, daß mit Hilfe moderner Wachstumsmethoden Heterostrukturen hoher Perfektion hergestellt werden können. Von besonders hoher Qualität hinsichtlich kompositioneller Abruptheit, Grenzflächenrauigkeit und -welligkeit, sowie hinsichtlich einer geringen Dichte struktureller Defekte erweisen sich dabei insbesondere kurzperiodische Übergitterstrukturen, die mit MBE entweder direkt auf das Si-Substrat (pseu-

domorphes Wachstum) oder aber auf einen teilrelaxierten Gradientenpuffer gewachsen wurden. Durch Anwendung unserer quantitativen Charakterisierungsmethode konnten an inneren Si/Ge-Grenzflächen solcher Übergitterstrukturen kompositionelle Übergänge im Bereich einer Atomlage zum erstenmal sicher nachgewiesen werden. Diese extrem hohe kompositionelle und strukturelle Schichtqualität wurde auch durch andere Methoden wie XRD [80], Raman- und PL-Messungen [2,89] bestätigt, wobei die mittels dieser Methoden bestimmten Daten jeweils Mittelwerte über räumlich ausgedehnte Probenbereiche darstellen. Da bei diesen Methoden, insbesondere im Fall solcher kurzperiodischen Übergitterstrukturen, stets bestimmte Modellannahmen über die Grenzflächenstruktur auf atomarer Skala gemacht werden müssen [52], stellt unsere Methode eine ideale Ergänzung zu diesen Charakterisierungsmethoden dar. Durch Kombination dieser Methoden lassen sich detaillierte Aussagen über die kompositionelle Zusammensetzung und über die Struktur von $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen von einer Längenskala im Millimeterbereich bis herab zu interatomaren Abständen formulieren.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden elektronenmikroskopische Charakterisierungen an pseudomorphen und an relaxierten $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heteroschichtsystemen durchgeführt (Kap. 6.2). Im Gegensatz zu den pseudomorph gewachsenen Proben, die in allen Fällen keine ein- oder zweidimensionalen Gitterdefekte aufwiesen, konnten in allen relaxierten Proben stets Gitterdefekte beobachtet werden. Daraus ist zunächst der Schluß zu ziehen, daß die beobachteten Gitterdefekte mit der Relaxation des epitaktisch gewachsenen Schichtsystems korreliert waren. Insgesamt wurden bei allen relaxierten Proben (mit Ausnahme dünner $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Filme, vgl. Kap. 6.3) zwei unterschiedliche Relaxationsmechanismen beobachtet, die entweder gemeinsam oder einzeln zur Relaxation beitrugen. Bei dem ersten Mechanismus wurde die Gitterfehlpassung zwischen dem epitaktischen Schichtsystem und dem Si-Substrat durch ein dichtes Netzwerk aus Fehlpassungsversetzungen mit $\langle 110 \rangle$ -Linienrichtungen (Lomer-Versetzungen) in der Grenzfläche zwischen dem Si-Substrat und dem (dicken oder dünnen) homogenen Legierungspuffer ausgeglichen. Dieser Mechanismus des Fehlpassungsausgleichs durch Ausbildung solcher Versetzungsnetzwerke wurde auch bereits in zahlreichen anderen elektronenmikroskopischen Studien beobachtet [90–92]. Ein sicherer Nachweis für die Entstehungsgeschichte des zu beobachtenden Netzwerks aus Lomer-Versetzungen steht jedoch trotz umfangreicher geleisteter Forschungsarbeit auf diesem Gebiet bis heute noch aus. Das an Gradientenpuffern beobachtete Phänomen, wonach sich das Netzwerk aus Fehlpassungsversetzungen nicht allein auf die Substrat-Puffer-Grenzfläche, sondern auf mehrere Schichtebenen im Bereich des Puffers mit variierender Komposition verteilt, wurde auch von LeGoues und Kollegen beobachtet [93]. Im Einklang mit dieser Studie steht u.a. auch die von uns gemachte Beobachtung, daß einzelne Versetzungsschleifen bis herab in den Bereich des Si-Substrats verlaufen. Die exakte Orientierung dieser Versetzungsschleifen auf kristallographischen $\{111\}$ -Ebenen deutet dabei insbesondere darauf hin, daß diese Versetzungen durch Gleitprozesse in diese tiefliegenden Kristallbereiche gelangt sind. Als ein zweiter Relaxationsmechanismus konnten in dieser Arbeit in druckver-

spannten Übergitterstrukturen auf dünnen homogenen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Puffern ($x > 0.5$) planare Gitterdefekte in Form einzelner Stapelfehler oder Mikrozwillinge auf $\{111\}$ -Ebenen nachgewiesen werden. Diese planaren Gitterdefekte liefern dabei einen vergleichbaren Anteil zum Fehlpassungsausgleich wie die beobachteten Fehlpassungsversetzungen in der Substrat-Puffer-Grenzfläche (Kap. 6.2). Über das Auftreten solcher Defekte wurde bislang nur in Studien über zugverspannte Si_mGe_n -Übergitter auf Ge(001) [94] und über druckverspannte, aber dünne Ge-Filme auf Si(001) [95] berichtet.

Im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen zur Interdiffusion in Si/ $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Heterostrukturen wurden temperaturbehandelte langperiodische Übergitterstrukturen untersucht. Ein aus elektronenmikroskopischen Messungen gewonnener Wert für den Diffusionskoeffizienten von $D = (8.2 \pm 1.3) \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ ist dabei mit einem durch RBS ermittelten Wert von $D = 1.5 \times 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$ (gemäß Abb. 4.18 in [85]) größenordnungsmäßig in Einklang. Für den Fall der unbehandelten Probe (d.h. vor dem Tempern) zeigt das durch TEM ermittelte Kompositionsprofil einen kastenförmigen (Abb. 6.18a), das durch RBS ermittelte Kompositionsprofil hingegen einen sinusförmigen Verlauf (Abb. 4.16 u. 4.17 in [85]). Diese Unterschiede im ermittelten Kompositionsprofil werden dadurch hervorgerufen, daß im Fall der Messung durch TEM aufgrund der im Vergleich zu RBS höheren Ortsauflösung auch noch Fourier-Koeffizienten C_n (Gl. (6.4b)) höherer Ordnung ($n > 1$) aufgelöst werden. Im Hinblick auf geplante Interdiffusionsuntersuchungen mit Hilfe der entwickelten Methode zur quantitativen Grenzflächencharakterisierung haben die experimentellen Untersuchungen gezeigt, daß die Probengeometrie langperiodischer Übergitterstrukturen grundsätzlich für eine Anwendung der Methode geeignet ist. Die Temperbedingungen müssen dabei jedoch so gewählt werden, daß Kompositionsplateaus innerhalb der Einzelschichten auch nach der Temperbehandlung noch vorhanden sind. Unter dieser Bedingung sollten durch Anwendung der Methode Diffusionskoeffizienten bis herab zu einer Größenordnung von $10^{-20} \text{ cm}^2/\text{s}$ ermittelt werden können. Bei geeigneter Wahl der Temperzeit würden für solch kleine Diffusionskoeffizienten insbesondere auch höhere Kompositions-Fourier-Koeffizienten zu der Fourier-Summe in Gl. (6.4a) beitragen. Da die Methode, im Gegensatz zu RBS und anderen Untersuchungsmethoden, auch die Auflösung sehr hoher Kompositions-Fourier-Koeffizienten mit zugehörigen Raumwellenlängen im Bereich interatomarer Abstände ermöglicht, könnte anhand möglicher Diskrepanzen zwischen dem experimentell gewonnenen Kompositionsprofil $x_{\text{temp}}(z)$ und dem auf der Basis eines linearen Interdiffusionsansatzes simulierten Kompositionsprofils $x_{\text{temp}}^{\text{sim}}(z)$ (Gl. (6.4)) auf Nichtlinearitäten des Interdiffusionsvorgangs geschlossen werden. Solche Nichtlinearitäten wurden bereits in III-V- und II-VI-Heterosystemen beobachtet [96,97].

Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung und Anwendung einer hochauflösenden Methode zur Charakterisierung von inneren Grenzflächen und Gitterbaufehlern verspannter Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie. Die in der Arbeit vorgestellte Methode ermöglicht eine quantitative Analyse kohärenter Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen auf atomarer Skala mittels hochauflösender Gitterabbildung in der [110]- und [100]-Kristallprojektion und die Bestimmung kompositioneller Übergangsbreiten und Grenzflächenrauhigkeiten im Bereich einzelner Atomlagen [98–101, und Anhang C]. Die Grundlage der Methode bilden systematische Untersuchungen des Elektronenstreuverhaltens und des Bildkontrastverhaltens hochaufgelöster 5- und 9-Strahl-Gitterabbildungen von Si_xGe_{1-x}-Legierungen ($0 \leq x \leq 1$) und von Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen für unterschiedliche Schichtverspannungen bei einer Elektronenenergie von 400 keV. Diese Untersuchungen wurden unter voller Berücksichtigung von Mehrfachstreuung und unter Einbeziehung nichtlinearer Bildkontrastbeiträge durchgeführt. Hierdurch konnten Bereiche optimierter Probendicken t und Defokuswerte Δf ermittelt werden, für die sich ein quasilinearer funktionaler Zusammenhang zwischen einzelnen Fourier-Koeffizienten der Bildintensitätsverteilung und der Komposition x ergibt. Unter solchen optimierten Abbildungsbedingungen zeigen hochaufgelöste Gitterabbildungen eine systematische Bildkontrastumkehr bei einer Variation der Komposition von $x = 0$ bis 1. Dieses charakteristische Bildkontrastverhalten hängt nur sehr schwach von tetragonalen Gitterverzerrungen und von Fresnel-Beugungseffekten im Nahbereich von abrupten Grenzflächen ab. Die Ermittlung dieser Bild-Fourier-Koeffizienten aus experimentellen Gitterabbildungen ermöglicht somit eine eindeutige und verlässliche Kompositionsbestimmung auf atomarer Skala.

Zur quantitativen Kompositionsbestimmung anhand experimenteller, unter optimierten Abbildungsbedingungen aufgenommener Gitterabbildungen wurden zwei neue Bildverarbeitungsalgorithmen entwickelt. Mit Hilfe des ersten Algorithmus wird an der zuvor digitalisierten Gitterabbildung zunächst eine geometrische Bildentzerrung vorgenommen, wodurch Bildmusterasymmetrien, die durch tetragonale Gitterverspannungen entstehen, korrigiert werden. Anschließend werden dann mit Hilfe des zweiten Algorithmus die relevanten Bild-Fourier-Koeffizienten in lokalen Bildbereichen der korrigierten Gitterabbildung ermittelt und entsprechende Werte für die lokale - über die Probendicke gemittelte - Komposition berechnet. Für Bildbereiche, die der Fläche der jeweils kleinsten projizierten Einheitszelle in der [110]- bzw. [100]-Projektion entsprechen, ist die Kompositionsbestimmung mit einer Unsicherheit von $\Delta x = \pm 0.1$ behaftet. Hierdurch kann die geometrische Position abrupter Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen auf eine Atomlage genau bestimmt werden. Neben der Anwendung auf gitterfehlgepaßte Heterosysteme wie Si/Si_xGe_{1-x} eignen sich die entwickelten Algorithmen ebenfalls für quantitative Kompositionsbestimmungen anhand hochaufgelöster Gitterabbildungen gitterangepaßter Heterosysteme, wie z.B. GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

Im experimentellen Teil dieser Arbeit wurde die Methode auf die Charakterisierung innerer Grenzflächen und zur Bestimmung der Schichtkomposition verspannter Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen unterschiedlichen Schichtaufbaus und unterschiedlicher kompositioneller Zusammensetzung angewendet. Die untersuchten Proben umfaßten zweidimensionale Si_xGe_{1-x}-Quantentopf-Strukturen, lang- und kurzperiodische Si_mGe_n-Übergitter, sowie dünne epitaktische Si_xGe_{1-x}-Filme, die jeweils auf Si(001)-Substraten deponiert worden waren. Durch die experimentell gewonnenen Ergebnisse wurden zum einen die theoretischen Vorhersagen bezüglich des Bildkontrastverhaltens von Si_xGe_{1-x}-Legierungen und Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen vollständig bestätigt. Darüber hinaus wurde die Verlässlichkeit der aus hochaufgelösten Gitterabbildungen bestimmten Kompositionswerte durch Vergleiche mit Werten, die mit anderen Methoden bestimmt worden waren, überprüft und verifiziert. Durch den Einsatz der Methode konnten an kohärenten Si/Si_xGe_{1-x}-Grenzflächen erstmals kompositionelle Übergangsbreiten bis herab zu einer Atomlage und Grenzflächenstufen mit Stufenhöhen von ein bis zwei Atomlagen verlässlich nachgewiesen werden. Ferner konnten in Si/Si_xGe_{1-x}-Vielschichtsystemen Kompositionen einzelner dünner Si_xGe_{1-x}-Schichten quantitativ ermittelt werden.

Die Untersuchungen der für die Schichtrelaxation verantwortlichen Gitterbaufehler wurde an Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen mit unterschiedlichem Schichtaufbau und unterschiedlicher Schichtverspannung durchgeführt. Pseudomorphe Schichtsysteme, in denen die Anpassung der unterschiedlichen Gitterparameter allein durch tetragonale Gitterverspannungen ausgeglichen werden sollte, erwiesen sich in der Tat als defektfrei. Im Gegensatz dazu konnten in allen relaxierten Si/Si_xGe_{1-x}-Heterostrukturen Gitterbaufehler beobachtet werden. Zu diesen Gitterbaufehlern zählten zweidimensionale Grenzflächennetzwerke aus Lomer-Fehlpassungsversetzungen mit Linienrichtungen vom $\langle 110 \rangle$ -Typ und Burgersvektoren $\vec{b} = a/2 \langle 110 \rangle$, zur Oberfläche verlaufende Fadenversetzungen gemischten Versetzungstyps, sowie planare Gitterdefekte nahe der Grenzflächen. Durch Detailanalysen konnte das Auftreten von Netzwerken aus Lomer-Fehlpassungsversetzungen als einer von zwei Mechanismen zum Fehlpassungsausgleich identifiziert werden. Ein zweiter Mechanismus zum Fehlpassungsausgleich wurde in dieser Arbeit erstmals in druckverspannten kurzperiodischen Übergitterstrukturen beobachtet und bestand aus der Bildung planarer Gitterdefekte an der Substrat-Puffer-Grenzfläche. Die Natur dieser planaren Gitterdefekte konnte durch hochauflösende Gitterabbildungen aufgeklärt werden. Danach handelt es sich bei diesen Defekten um einzelne Stapelfehler und um Scharen engbenachbarter Stapelfehler in Form von Mikrozwillingen auf $\{111\}$ -Gitterebenen, die im Mittel einen gleichen Beitrag zum Fehlpassungsausgleich liefern wie eine Lomer-Fehlpassungsversetzung.

Die Interdiffusion von Si und Ge an inneren Grenzflächen wurde an langperiodischen Si/Si_{0,73}Ge_{0,27}-Übergitterstrukturen mit einer Übergitterperiode von 20 nm und für eine Diffusionstemperatur von 1075° C untersucht. Die strukturelle Charakterisierung der un-

getemperten Übergitterstruktur durch hochauflösende Gitterabbildungen ergab, daß alle Grenzflächen kohärent und kompositionell abrupt waren und laterale Grenzflächenrauigkeiten im Bereich von 6–8 Atomlagen aufwiesen. Als Folge der Temperbehandlung bei 1075° C wurde eine meßbare Si-Ge-Durchmischung an allen Si/Si_{0.73}Ge_{0.27}-Grenzflächen beobachtet. Diffusionsinduzierte Defekte oder kompositionelle Inhomogenitäten im Bereich der Grenzflächen konnten nicht beobachtet werden. Für die Breite der Interdiffusionszonen an den Grenzflächen ergab sich ein vom Abstand von der Oberfläche unabhängiger Wert. Aus den durch quantitative Bildanalysen ermittelten Kompositionsprofilen wurde für den Diffusionskoeffizienten ein Wert von $D = (8.2 \pm 1.3) \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ bestimmt, der in guter Übereinstimmung mit Werten aus Ionenstreuemessungen ist. Diese Anwendung der entwickelten hochauflösenden Methode zeigte außerdem, daß es bei geeigneter Wahl der Diffusionsparameter möglich sein sollte, noch sehr viel kleinere (um vier bis fünf Größenordnungen) Diffusionskoeffizienten zu bestimmen.

Literaturverzeichnis

- [1] E. Kasper und F. Schäffler, *Group-IV Compounds*, in *Semiconductors and Semimetals*, Vol. 33, AT & T Bell Laboratories Inc. (1991) 223
- [2] H. Presting, H. Kibbel, M. Jaros, R.M. Turton, U. Menczgar, G. Abstreiter und H.G. Grimmeiss, *Semicond. Sci. Technol.* 7 (1992) 1127
- [3] A. Bourret und J.M. Penisson, *JEOL News* 25 E No. 1 (1987) 2
- [4] A. Bourret, J. Thibault-Desseaux, C. D'Anterrosches, J.M. Penisson und A. De Crecy, *J. Microscopy* 129 (1983) 337
- [5] A. Ourmazd, D.W. Taylor, J. Cunningham und C.W. Tu, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 933
- [6] A. Ourmazd, F.H. Baumann, M. Bode und Y. Kim, *Ultramicroscopy* 34 (1990) 237
- [7] A.F. de Jong und D. Van Dyck, *Ultramicroscopy* 33 (1990) 269
- [8] S. Thoma und H. Cerva, *Ultramicroscopy* 38 (1991) 265
- [9] J.C.H. Spence, *Experimental High-Resolution Electron Microscopy*, Oxford University Press, New York (1988)
- [10] L. Reimer, *Transmission Electron Microscopy*, Springer-Verlag, Berlin (1984)
- [11] P.R. Buseck, J.M. Cowley und L. Eyring, *High-Resolution Electron Microscopy and Associated Techniques*, Oxford University Press, New York (1988)
- [12] W. Friedrich, P. Knipping und M. von Laue, *Proc. Bavarian Acad. Sci.* (1912) 303
- [13] P.B. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D.W. Pashley und M.J. Whelan, *Electron Microscopy of Thin Crystals*, Krieger Publishing Co., Malabar (1977)
- [14] A.R. Wilson, A.E.C Spargo und D.J. Smith, *Optik* 61 (1982) 63
- [15] O. Scherzer, *J. Appl. Phys.* 20 (1949) 20
- [16] H. Bethe, *Ann. Phys.* 87 (1928) 55
- [17] C.J. Humphreys, *The scattering of fast electrons by crystals*, *Rep. Prog. Phys.* 42 (1979) 1825
- [18] J.M. Cowley und A.F. Moodie, *Acta Cryst.* 10 (1957) 609
- [19] P. Goodman und A.F. Moodie, *Acta Cryst.* A 30 (1974) 280
- [20] D. Van Dyck, *J. Microscopy* 119 (1980) 141
- [21] R. Kilaas und R. Gronsky, *Ultramicroscopy* 11 (1985) 289
- [22] P.G. Self, M.A. O'Keefe, P.R. Buseck und A.E.C. Spargo, *Ultramicroscopy* 11 (1983) 35
- [23] J. Frank, *Optik* 38 (1973) 519
- [24] P. Stadelmann, *Ultramicroscopy* 21 (1987) 131
- [25] W. Greiner, *Theoretische Physik Band 4: Quantenmechanik I*, Verlag Harri Deutsch, Thun (1984) 120
- [26] P.A. Doyle und P.S. Turner, *Acta Cryst.* A 24 (1968) 390
- [27] *International Tables for X-Ray Crystallography*, Vol. III, Kynoch Press, Birmingham (1974)
- [28] S. Thoma und H. Cerva, *Ultramicroscopy* 35 (1991) 77
- [29] G. Radi, *Acta Cryst.* A 26 (1970) 41

- [30] H. Yoshioka, J. Phys. Soc. Japan 12 (1957) 618
- [31] H. Ibach und H. Lüth, *Festkörperphysik*, Springer-Verlag, Berlin (1990) 105
- [32] K. Ishizuka und N. Uyeda, Acta Cryst. A 33 (1977) 740
- [33] M. Born und E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon Press, Oxford (1980)
- [34] I.N. Bronstein und K.A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch, Thun (1984)
- [35] K. Ishizuka, Acta Cryst. A 38 (1982) 773
- [36] G.R. Anstis, Acta Cryst. A 33 (1977) 844
- [37] J.W. Cooley und J.W. Tukey, Mathematics of Computation 19 (1965) 297
- [38] K. Ishizuka, Ultramicroscopy 5 (1980) 55
- [39] J. Frank, Optik 44 (1975) 379
- [40] O.L. Krivanek, C.C. Ahn und G.J. Wood, Ultramicroscopy 33 (1990) 177
- [41] J.P. Dismukes, L. Ekstrom und R.J. Paff, J. Phys. Chem. 68 (1964) 3021
- [42] A. Zunger und D.M. Wood, J. Cryst. Growth 98 (1989) 1
- [43] W.A. Brantley, J. Appl. Phys. 44 (1973) 534
- [44] R.W. Glaisher, A.E.C. Spargo und D.J. Smith, Ultramicroscopy 27 (1989) 19, ibidem 27 (1989) 35
- [45] R.W. Glaisher und A.E.C. Spargo, Ultramicroscopy 18 (1985) 323
- [46] H. Boersch, Phys. Z. 44 (1943) 202
- [47] A.R. Wilson, L.A. Bursill und A.E.C. Spargo, Optik 52 (1978) 313
- [48] K. Urban und N. Yoshida, Radiat. Eff. 42 (1979) 1
- [49] D. Van Dyck, J. Danckaert, W. Coene, E. Selderslaghs, D. Broddin, J. Van Landuyt und S. Amelinckx, in *Computer Simulation of Electron Microscope Diffraction and Images* (W. Krakow und M.A. O'Keefe, Hrsg.), The Minerals, Metals and Materials Society (1989) 107
- [50] C.B. Boothroyd, C.S. Baxter, E.G. Bithell, M.J. Hytch, F.M. Ross, K. Sato und W.M. Stobbs, Ultramicroscopy 29 (1989) 18
- [51] F.M. Ross und W.M. Stobbs, Ultramicroscopy 36 (1991) 331
- [52] H. von Känel, E. Müller, H.-U. Nissen, W. Basca, M. Ospelt, K.A. Mäder, R. Stalder und A. Baldereschi, J. Cryst. Growth 111 (1991) 889
- [53] A. Ourmazd und J.C. Bean, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 765
- [54] E. Müller, H.-U. Nissen, M. Ospelt, H. von Känel und P. Stadelmann, Thin Solid Films 183 (1989) 165
- [55] E. Müller, H.-U. Nissen, K.A. Mäder, M. Ospelt und H. von Känel, Phil. Mag. Lett. 64 (1991) 183
- [56] P.B. Littlewood, Phys. Rev. B 34 (1986) 1363
- [57] D. E. Jesson, S. J. Pennycook und J.M. Baribeau, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 750
- [58] T. Walther, Diplomarbeit, RWTH Aachen (1993)
- [59] T. Walther und D. Gerthsen, erscheint in: Proc. of the IIXth Int. Conf. on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford (1993)
- [60] T. Walther und D. Gerthsen, eingereicht bei: Appl. Phys. A (1993)

- [61] D. Bimberg, F. Heinrichsdorff, R.K. Bauer, W. Wittke, D. Gerthsen, D. Stenkamp, D.E. Mars und J.N. Miller, J. Vac. Sci. Technol. B10 (1992) 1793
- [62] D. Bimberg, J. Christen, W. Wittke, D. Gerthsen, D. Stenkamp, D.E. Mars und J.N. Miller, erscheint in: Phys. Rev. Lett (1993)
- [63] H.D. Lücke, *Signalübertragung*, Springer-Verlag, Berlin (1990)
- [64] R.W. Ramirez, *The FFT - Fundamentals and Concepts*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1985)
- [65] P. Rez, Ultramicroscopy 41 (1992) 115
- [66] D. Marr und E. Hildreth, *Theory of edge detection*, Proc. R. Soc. B 207 (1980) 187
- [67] J.S. Lim, *Two-Dimensional Signal and Image Processing*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1990)
- [68] D.J. Smith, W.O. Saxton, M.A. O'Keefe, G.J. Wood und W.M. Stobbs, Ultramicroscopy 11 (1983) 263
- [69] A. Romano, J. Vanhellemont, H. Bender und J.R. Morante, Ultramicroscopy 31 (1989) 183
- [70] T. Schuhrke, M. Mändl, J. Zweck und H. Hoffmann, Ultramicroscopy 41 (1992) 429
- [71] H. Kakibayashi und F. Nagata, Jpn. J. Appl. Phys. 24 (1985) L905, ibidem 25 (1986) 1644
- [72] P.A. Buffat, J.D. Ganiere und P. Stadelmann, Mat. Res. Symp. Proc. 139 (1989) 111
- [73] D. Stenkamp, Diplomarbeit, RWTH Aachen (1990)
- [74] J.W. Edington, Monographs in Practical Electron Microscopy in Materials Science Vol. 2, *Electron Diffraction in the Electron Microscope*, Macmillan Philips Technical Library, Eindhoven (1975)
- [75] J.P. Hirth und J. Lothe, *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill, New York (1968)
- [76] J.W. Edington, Monographs in Practical Electron Microscopy in Materials Science Vol. 3, *Interpretation of Transmission Electron Micrographs*, Macmillan Philips Technical Library, Eindhoven (1975)
- [77] K. Leifer, Diplomarbeit, RWTH Aachen (1991)
- [78] D.J.H. Cockayne, J. Physique Colloq. 12 (1974) C7-141
- [79] A. Rocher, M.N. Charasse, B. Bartenlian und J. Chazelas, J. Physique Colloq. 51 (1990) C1-915
- [80] W. Jäger, D. Stenkamp, P. Ehrhart, K. Leifer, W. Sybertz, H. Kibbel, H. Presting und E. Kasper, Thin Solid Films 222 (1992) 221
- [81] A. Rocher und C. Raisin, in *Polycrystalline Semiconductors II* (J.H. Werner und H.P. Strunk, Hrsg.), Springer Proceedings in Physics Vol. 54, Springer-Verlag, Berlin (1991)
- [82] J.H. von der Merwe, Surf. Sci. 31 (1972) 198
- [83] M. Albrecht, D. Stenkamp, H.P. Strunk, W. Jäger, P.O. Hansson und E. Bauser, erscheint in: Proc. of the IIXth Int. Conf. on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford (1993)

- [84] M. Albrecht, H.P. Strunk, D. Stenkamp und W. Jäger, erscheint in: phys. stat. sol. (a) 137 (1993)
- [85] B. Holländer, Dissertation, RWTH Aachen (1991)
- [86] R.M. Flemig, D.B. McWhan, A.C. Gossard, W. Wiegmann und R.A. Logan, J. Appl. Phys. 51 (1980) 357
- [87] M.M. Treacy und J.M. Gibson, J. Vac. Sci. Technol. B 4 (1986) 1458
- [88] R. Hull, J.M. Gibson und J.C. Bean, Appl. Phys. Lett. 46 (1985) 179
- [89] H. Presting und U. Menczgar, eingereicht bei: Appl. Phys. Lett. (1993)
- [90] A.T. Fiory, J.C. Bean, R. Hull und S. Nakahara, Phys. Rev. B 31 (1985) 4063
- [91] R. Hull und J.C. Bean, J. Vac. Sci. Technol. A 7 (1989) 2580
- [92] D.C. Houghton, D.D. Perovic, J.M. Baribeau und G.C. Weatherly, J. Appl. Phys. 67 (1990) 1850
- [93] F.K. LeGoues, B.S. Meyerson und J.F. Morar, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 2903
- [94] W. Wegscheider, Dissertation, TU München (1991)
- [95] F.K. LeGoues, M. Copel und R.M. Tromp, Phys. Rev. Lett. 42 (1990) 11690
- [96] A. Ourmazd, Mat. Res. Soc. Bull. (1990) 58
- [97] Y. Kim, A. Ourmazd, M. Bode und R.D. Feldman, Phys. Rev. Lett. 63 (1989) 636
- [98] D. Stenkamp und W. Jäger, Electron Microscopy 1 (1992) 545
- [99] D. Stenkamp und W. Jäger, erscheint in: Ultramicroscopy (1993)
- [100] D. Stenkamp und W. Jäger, erscheint in: Proc. of the IIXth Int. Conf. on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford (1993)
- [101] D. Stenkamp und W. Jäger, erscheint in: Appl. Phys. A (1993)

A Programmänderung zu TF1EMS, TF3EMS und LI1EMS

Für die Dämpfungenveloppen $E_t(g, h)$ und $E_s(\vec{g}, \vec{h})$ im Gleichungsterm für den Transmissionskoeffizienten $\tau(\vec{g}, \vec{h})$ (Gl. (2.36)) werden in der Literatur z.T. unterschiedliche Definitionen für die Parameter Δ (Defokusstreuung) und α (Semikonvergenzwinkel) verwendet (vgl. z.B. Ref. [10] und Ref. [38]). Diese Parameter sind ein Maß für die jeweilige Breite der in den Gleichungstermen für $E_t(g, h)$ und $E_s(\vec{g}, \vec{h})$ enthaltenen Gauß-Funktion.

Ausgehend von der üblichen Darstellung der normierten Gauß-Funktion [34]

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) \quad (41)$$

entspricht der Gauß-Parameter σ der halben Breite der Gauß-Funktion beim $1/e$ -ten Teil des Maximalwertes $f(0)$: $\sigma = \sigma_{1/e}$. Daneben wird eine zweite Darstellung der Gauß-Funktion verwendet, in welcher der Gauß-Parameter der vollen Breite der Gauß-Funktion beim halben Maximalwert entspricht (engl. full-width at half maximum, FWHM). Hierfür gilt die Umrechnung $\sigma_{\text{FWHM}} = 2\sqrt{\ln 2}\sigma_{1/e}$. In einer dritten Darstellung wird für den Gauß-Parameter an Stelle von σ_{FWHM} nur die halbe Breite $\sigma_{\text{HWHM}} = \sigma_{\text{FWHM}}/2$ beim halben Maximalwert verwendet.

In dieser Arbeit werden Δ und α gemäß Ref. [38] einheitlich als jeweils halbe Breite einer normierten Gauß-Funktion beim $1/e$ -ten Teil des Maximalwertes verwendet: $\Delta = \Delta_{1/e}$ und $\alpha = \alpha_{1/e}$. Dieser Festlegung entsprechend werden die Werte für Δ und α auch vom EMS-Programm IM1EMS interpretiert, welches die Fourier-Synthese der Strahlen in der Bildebene berechnet. Im Gegensatz dazu werden jedoch die Werte für Δ und α von den EMS-Programmen TF1EMS, TF3EMS (Berechnung der sog. Kontrasttransferfunktion $\sin \chi$) und LI1EMS (lineare Bildentstehung) als volle bzw. halbe Breite der Gauß-Funktion bei $f(0)/2$ interpretiert: $\Delta = \Delta_{\text{FWHM}}$ bzw. $\alpha = \alpha_{\text{HWHM}}$. Eine irrtümliche Verwendung von $\Delta_{1/e}$ bzw. $\alpha_{1/e}$ führt bei diesen Programmen zu einem zusätzlichen Faktor $1/(4\ln 2) = 0.37$ im Argument der Exponentialfunktion für $E_t(g, h)$ und zu einem zusätzlichen Faktor $1/\ln 2 = 1.44$ im Argument der Exponentialfunktion für $E_s(\vec{g}, \vec{h})$. Die daraus resultierenden Funktionswerte sind demnach systematisch zu groß für $E_t(g, h)$ (zu schwache Dämpfung) bzw. systematisch zu klein für $E_s(\vec{g}, \vec{h})$ (zu starke Dämpfung). Diese uneinheitliche Interpretation der Parameter Δ und α muß unbedingt durch Verwendung entsprechend korrigierter Eingabewerte berücksichtigt werden, damit (unwissentliche) Fehlinterpretationen vermieden werden. Eine Korrektur der Eingabewerte kann unterbleiben, wenn die Definitionen für Δ und α durch geringfügige Programmänderungen vereinheitlicht werden. Dazu sind in den FORTRAN-

Programmkodes zu TF1EMS, TF3EMS und LI1EMS folgende Änderungen vorzunehmen:

	Originalkode	Änderung
W2	=PI*DFNM*WLNМ	
A2	=ALOG(2.)	Zeile Löschen
S1	=PI*CSMM*WLNМ**2	
S2	=PI*DFNM	
S3	=(0.001*SDMR)**2/A2	=(0.001*SDMR)**2
C1	=PI*WLNМ*DSNM/(4.*SQRT(A2))	=PI*WLNМ*DSNM/2.

B Der "Laplace-of-Gaussian"(LoG)-Operator

Zur Bestimmung von Kontrastschwerpunkten in der Bildintensitätsverteilung hochaufgelöster Gitterabbildungen wird der "Laplace-of-Gaussian"(LoG)-Operator $\text{LoG}(k, l)$ eingesetzt (Kap. 5.2.1). Dieser zweidimensionale Faltungsoperator wurde ursprünglich von Marr und Hildreth zur Detektion von Bildkanten entwickelt [66]. Eine Bildkante ist allgemein als eine Bildkontur definiert, an der sich die Bildintensität $I(k, l)$ signifikant ändert. Im hier betrachteten Fall experimenteller Gitterabbildungen werden solche Intensitätsänderungen zum einen durch Kontrastbeiträge erzeugt, die von Periodizitäten des abgebildeten Kristallgitters herrühren, und zum zweiten durch Kontrastbeiträge, die durch Bildrauschen entstehen. Jedoch enthält nur der erste Kontrastbeitrag Informationen, die für eine Bestimmung von Kontrastschwerpunkten relevant sind. Der LoG-Operator hat nun den Vorzug, daß die Empfindlichkeit der Bildkantendetektion gezielt auf die relevanten Bildfrequenzen abgestimmt werden kann. Dies wird dadurch erreicht, daß das Fourier-Spektrum der Bildintensitätsverteilung vor dem eigentlichen Prozeß der Bildkantendetektion durch eine Ortsraumfaltung mit einem Gauß-Tiefpaßfilter $h(k, l)$ [67] raumfrequenzselektiv gedämpft wird:

$$\begin{aligned} I'(k, l) &= I(k, l) \otimes h(k, l) \\ &= I(k, l) \otimes \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{k^2 + l^2}{2\sigma^2}\right). \end{aligned} \quad (B1)$$

Der Gauß-Parameter σ in Gl. (B1) entspricht dem Reziprokwert einer mittleren Bildfrequenz $\bar{g}$, oberhalb derer die Bild-Fourier-Koeffizienten zunehmend stark gedämpft werden:

$$\bar{g} = \frac{\max_k h(k, 0)}{2 \sum_k h(k, 0)} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}\sigma}. \quad (B2)$$

Zur Bestimmung der Kontrastzentren wird $\sigma = 1/\sqrt{8\pi}\bar{g}$ so gewählt, daß $\bar{g}$ gerade der Bildfrequenz $|\bar{g}_1|$ der Bildgrundmodulation entspricht. Nachfolgend wird auf die resultierende Bildintensitätsverteilung $I'(k, l)$ (Gl. (5.3)) ein zweidimensionaler Laplace-Operator [67] angewendet:

$$\begin{aligned} I''(k, l) &= \nabla^2 \left(I(k, l) \otimes h(k, l) \right) = I(k, l) \otimes \left[\frac{\partial^2 h(k, l)}{\partial k^2} + \frac{\partial^2 h(k, l)}{\partial l^2} \right] \\ &= I(k, l) \otimes \underbrace{\left[\frac{k^2 + l^2 - 2\sigma^2}{2\pi\sigma^4} \exp\left(-\frac{k^2 + l^2}{2\sigma^2}\right) \right]}_{\text{LoG}(k, l)}. \end{aligned} \quad (B3)$$

Entsprechend Gl. (B3) können die beiden Teiloperationen Tiefpaßfilterung und Anwendung von ∇^2 rechtechnisch simultan durch Anwendung des Operators $\text{LoG}(k, l)$ ausgeführt werden. Bildkanten in der Intensitätsverteilung $I(k, l)$ werden schließlich anhand der Nullstellen des resultierenden Faltungsproduktes $I''(k, l) = I(k, l) \otimes \text{LoG}(k, l)$ bestimmt. Für den hier verwendeten Parameter σ entsprechen diese Nullstellen genau den Wendepunkten der lokalen Grundmodulation der Bildintensität.

C Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit

1. D. Stenkamp und W. Jäger, *The determination of composition profiles and interface structure in strained Si/SiGe multilayers by HREM*, Electron Microscopy 1 (1992) 545
2. W. Jäger, D. Stenkamp, P. Ehrhart, K. Leifer, W. Sybertz, H. Kibbel, H. Presting und E. Kasper, *Characterization of short-period Si_mGe_n superlattices by high-resolution transmission electron microscopy and X-ray diffraction*, Thin Solid Films 222 (1992) 221
3. D. Bimberg, F. Heinrichsdorff, R.K. Bauer, W. Wittke, D. Gerthsen, D. Stenkamp, D.E. Mars und J.N. Miller, *Binary AlAs/GaAs versus ternary GaAlAs/GaAs interfaces: A dramatic difference of perfection*, J. Vac. Sci. Technol. B10 (1992) 1793
4. D. Bimberg, J. Christen, W. Wittke, D. Gerthsen, D. Stenkamp, D.E. Mars und J.N. Miller, *How smooth is smooth, how abrupt is abrupt: A prototype study of the AlAs/GaAs/AlAs interfaces*, erscheint in: Phys. Rev. Lett (1993)
5. D. Stenkamp und W. Jäger, *Compositional and structural characterization of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys and heterostructures by high-resolution electron microscopy*, erscheint in: Ultramicroscopy (1993)
6. D. Stenkamp und W. Jäger, *Compositional and structural analysis of strained Si/SiGe multilayers and interfaces by high-resolution TEM*, erscheint in: Proc. of the IIXth Int. Conf. on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford (1993)
7. M. Albrecht, D. Stenkamp, H.P. Strunk, W. Jäger, P.O. Hansson und E. Bauser, *Structure of dislocations formed in Ge(Si) by glide on secondary glide planes*, erscheint in: Proc. of the IIXth Int. Conf. on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford (1993)
8. D. Stenkamp und W. Jäger, *Compositional and structural characterization of strained Si/Si_xGe_{1-x} multilayers and interfaces by high-resolution transmission electron microscopy*, erscheint in: Appl. Phys. A (1993)
9. M. Albrecht, H.P. Strunk, D. Stenkamp und W. Jäger, *Dislocations in the $1/2\langle 110 \rangle\{110\}$ glide system in the diamond structure*, erscheint in: phys. stat. sol. (a) 137 (1993)

Danksagung

Mein großer Dank gilt Herrn Prof. Dr. K. Urban für die Möglichkeit, ein hochaktuelles und anspruchsvolles Thema mit großen persönlichen Freiräumen an seinem Institut bearbeiten zu können. Sein wertvoller wissenschaftlicher und persönlicher Rat hat maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. W. Jäger für seine engagierte und kompetente Betreuung während der Durchführung dieser Arbeit. Insbesondere ist es seinem persönlichen Einsatz und seinem effizienten Arbeitsstil zu verdanken, daß bereits vor Abschluß dieser Arbeit ein Großteil der Ergebnisse zur wissenschaftlichen Veröffentlichung eingereicht werden konnten.

Für die Bereitstellung von qualitativ hochwertigem Probenmaterial bedanke ich mich herzlich bei Herrn Dr. H. Kibbel und Herrn Dr. E. Kasper vom Daimler-Benz Forschungszentrum Ulm, bei Herrn Dr. H. von Känel und Frau Dr. E. Müller von der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich, bei Herrn Dr. P.O. Hansson und Frau Dr. E. Bauser vom Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart, sowie bei Frau Dr. L. Vescan und Herrn Dr. R. Butz vom Forschungszentrum Jülich. Ferner bedanke ich mich für die freundliche Überlassung temperaturbehandelter Proben bei Herrn Dr. B. Holländer vom Forschungszentrum Jülich und bei Herrn Dipl.-Phys. U. Menczigar von der TU München.

Außer für die Bereitstellung von Probenmaterial gilt allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe um Herrn Dr. E. Kasper im Daimler-Benz Forschungszentrum Ulm, insbesondere Herrn Dr. H. Presting, Herrn Dr. H.J. Herzog, Herrn Dr. H. Kibbel und Herrn Dr. F. Schäffler, mein herzlicher Dank für die Möglichkeit, das Daimler-Benz Forschungszentrum in Ulm mehrmals besuchen zu dürfen und dabei in gastfreundlicher Arbeitsatmosphäre viel über das Materialsystem Silizium-Germanium und über die Art der Forschung in einem Industrielabor lernen zu können.

Zu einigen wichtigen theoretischen Überlegungen wurde ich durch intensive Diskussionen mit Herrn Dipl.-Phys. A. Thust, Frau Dr. D. Gerthsen und Herrn C.L. Jia angeregt, wofür ich mich sehr bedanken möchte.

Herrn Dipl.-Phys. M. Albrecht von der Universität Erlangen-Nürnberg danke ich für die erfolgreiche experimentelle Zusammenarbeit und für die zahlreichen interessanten Diskussionen über die Relaxation epitaktischer Schichtsysteme.

Ein großer Dank gilt Herrn Dipl.-Ing. T. Aach und Herrn J.B. Rudelle von der RWTH Aachen für die umfangreiche Hilfestellung bei der Programmentwicklung.

Bei Frau G. Waßenhoven möchte ich mich für die allzeit schnelle und perfekte Ausführung von Fotoarbeiten herzlich bedanken.

Zum Dank verpflichtet bin ich auch Frau W. Sybertz, Frau D. Meertens und Frau C. Scholz für die präzise Präparation eines Teils der untersuchten Proben.

Bedanken möchte ich mich ebenfalls bei Herrn Dipl.-Ing. J. Hanßen, der die benutzten Elektronenmikroskope stets fachkundig in tadellosem Zustand gehalten hat.

Schließlich möchte ich mich bei allen Gästen, Mitarbeitern, Doktoranden und Diplomanden des Institutes für Mikrostrukturforschung für die geleistete Unterstützung und die angenehme persönliche Atmosphäre bedanken.

The first part of the report describes the current state of the system and the problems that have been identified. It also outlines the objectives of the study and the methods that will be used to collect and analyze data. The second part of the report presents the results of the study and discusses the implications of the findings. The third part of the report provides recommendations for improving the system and concludes with a summary of the key points.

The first part of the report describes the current state of the system and the problems that have been identified. It also outlines the objectives of the study and the methods that will be used to collect and analyze data. The second part of the report presents the results of the study and discusses the implications of the findings. The third part of the report provides recommendations for improving the system and concludes with a summary of the key points.

The first part of the report describes the current state of the system and the problems that have been identified. It also outlines the objectives of the study and the methods that will be used to collect and analyze data. The second part of the report presents the results of the study and discusses the implications of the findings. The third part of the report provides recommendations for improving the system and concludes with a summary of the key points.

The first part of the report describes the current state of the system and the problems that have been identified. It also outlines the objectives of the study and the methods that will be used to collect and analyze data. The second part of the report presents the results of the study and discusses the implications of the findings. The third part of the report provides recommendations for improving the system and concludes with a summary of the key points.

The first part of the report describes the current state of the system and the problems that have been identified. It also outlines the objectives of the study and the methods that will be used to collect and analyze data. The second part of the report presents the results of the study and discusses the implications of the findings. The third part of the report provides recommendations for improving the system and concludes with a summary of the key points.

JÜI-2839
November 1993
ISSN 0944-2952