

Simulation von Elektronenbeugungsmustern für mesoskopische Halbleiterheterostrukturen

Vom Fachbereich Elektrotechnik der
Gerhard-Mercator-Universität - Gesamthochschule Duisburg

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktor-Ingenieurs
genehmigte Dissertation

von

Andreas Radefeld

aus

Rhede

Referent: Prof. Dr.-Ing. E. Kubalek
Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. K. Heime
Tag der mündlichen Prüfung: 14. 03. 2000

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	V
1 Einleitung und Problemstellung	1
2 Grundlagen	8
2.1 Physikalische Grundlagen der Elektronenbeugung	8
2.1.1 Elastische Streuung	10
2.1.2 Inelastische Streuung	12
2.1.3 Die quasielastische oder thermisch diffuse Streuung	14
2.1.4 Streuung an kristallinen Proben	16
2.1.4.1 Die kinematische Beugungstheorie	17
2.1.4.2 Die dynamische Beugungstheorie	22
2.1.4.2.1 Die Blochwellentheorie	23
2.1.4.2.2 Der Multislice-Ansatz	26
2.1.5 Die Entstehung von Elektronenbeugungsmustern	28
2.2 Physikalische Grundlagen der Abbildungstechniken	29
2.2.1 Hellfeldabbildung und Dunkelfeldabbildung	29
2.2.2 Der Ordnungszahl-Kontrast	30
2.2.3 Die Kontrasttransferfunktion	30
2.3 Meßtechnische Grundlagen und die experimentellen Methoden	31
2.3.1 Das Funktionsprinzip des RTEM	31
2.3.2 Experimentelle Elektronenbeugungstechniken im RTEM	33
2.3.3 Experimentelle Abbildungstechniken im RTEM	35

2.4	Ansätze zur Simulation von Elektronenbeugungsmustern	40
2.4.1	Der kinematische Simulationsansatz	40
2.4.2	Dynamische Simulationsansätze	41
2.4.2.1	Der auf der Blochwellentheorie basierende Simulationsansatz	41
2.4.2.2	Der Multislice-Ansatz	42
2.4.2.3	Der Multislice-Ansatz und die thermisch diffuse Streuung .	47
2.5	Materialspezifische Grundlagen	49
2.5.1	Quaternäre III-V- und II-VI-Halbleitermaterialien	49
2.5.2	Gruppe III-Nitride	55
3	Leistungsstand und Defizite in der Elektronenbeugungssimulation	59
4	Weiterentwicklung der Simulationstechniken	64
4.1	Hard- und Software	64
4.1.1	Verwendete Rechnersysteme und Software	64
4.1.2	Die optimierte Vorgehensweise für Untersuchungen mit dem Multislice-Ansatz	65
4.1.3	Die Parallelisierung des Multislice-Ansatzes	66
4.2	Weiterentwicklungen und Neuerungen für die Simulationsansätze	67
4.2.1	Die Einbeziehung der thermisch diffusen Streuung in den Multislice-Ansatz	67
4.2.2	Die Implementierung der Wurtzitstruktur in den Multislice-Ansatz . .	72
4.2.3	Die Implementierung des Static Atomic Displacements in den Multislice-Ansatz	73
4.2.4	Die Implementierung eines Oberflächenrelaxationsmodells in den Multislice-Ansatz	74
4.2.5	Die ringförmige Integration von Elektronenbeugungsmustern und die Bestimmung des Ordnungszahl-Kontrastsignals	77
4.2.6	Die Implementierung eines nicht abrupten Grenzflächenmodells . . .	78

5	Demonstration der Leistungsfähigkeit	80
5.1	Die Vergrößerung des Simulationsbereichs und die Simulationsoptimierung . . .	80
5.2	Die Parallelisierung des Multislice-Ansatzes	83
5.3	Einbeziehung der thermisch diffusen Streuung in den Multislice-Ansatz . . .	84
5.4	Einbeziehung der Wurtzitstruktur in den Multislice-Ansatz	86
5.5	Einbeziehung des Static Atomic Displacement in den Multislice-Ansatz . . .	88
5.6	Die Leistungsfähigkeit weiterer Analysemethoden	88
6	Anwendungen in der Charakterisierung mesoskopischer Halbleiter	91
6.1	Die Asymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen . . .	92
6.1.1	Die physikalische Ursache der asymmetrischen Intensitäten in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen	99
6.1.2	Ausnutzung der Intensitätsasymmetrien zur Grenzflächencharakterisierung	105
6.2	Verspannungsbestimmung mittels dynamischer Elektronenbeugungssimulationen	109
6.2.1	Der Einfluß der Verspannung auf dynamisch simulierte Elektronenbeugungsmuster	109
6.2.2	Verspannungsbestimmung mittels des Multislice-Ansatzes für einen Heteroübergang	110
6.2.3	Die Verspannungsbestimmung in quaternären Halbleitermaterialien . . .	114
6.3	Entmischungsphänomene in quaternären Halbleitermaterialien	116
6.3.1	Der Effekt des Static Atomic Displacements	116
6.3.2	Der Effekt der Oberflächenrelaxationen	118
6.4	Simulation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen	127
6.4.1	Charakterisierung von Heteroübergängen mittels hochauflösender Ordnungszahl-Kontrastabbildungen	128
6.4.2	Der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast von Heteroübergängen	133

6.4.3	Der Einfluß der elektronenmikroskopischen Parameter (Beschleunigungsspannung) auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast . .	138
6.4.4	Die Orientierungsabhängigkeit des Ordnungszahl-Kontrastes der Gruppe III-Nitride	145
6.4.5	Der Einfluß der Materialvariation auf den Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride	153
6.4.6	Der Einfluß der Auflösungsverbesserung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride	158
7	Ausblick	162
8	Zusammenfassung	164
	Literaturverzeichnis	170

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

Δf	Defokus der Objektivlinse
$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$	Gittervektoren des realen Kristallgitters
$\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*$	reziproke Gittervektoren
$\vec{C}^{(j)}$	Eigenvektor der Schrödingergleichung
\vec{d}_{hkl}	Netzebenenabstand
\vec{g}_{hkl}	reziproker Gittervektor
\vec{k}	Wellenvektor
$\vec{k}^{(j)}$	Wellenvektor einer Blochwelle
$\vec{k}_t^{(j)}$	Tangentialkomponente des Blochwellenvektors
\vec{k}_0	Wellenvektor für einfallende Elektronen / Elektronenwellen
\vec{k}_t	Tangentialkomponente des Wellenvektors
$\vec{k}_{0,t}$	Tangentialkomponente des Wellenvektors der einfallenden Elektronenwelle
\vec{k}_{sc}	Wellenvektor für gestreute Elektronen / Elektronenwellen
\vec{n}	Einheitsvektor in Bewegungsrichtung der Elektronen / Elektronenwellen
\vec{n}	Richtungsvektor für die gestreute Elektronenwelle
\vec{n}_0	Einheitsvektor in Bewegungsrichtung der einfallenden Elektronen / Elektronenwellen
\vec{n}_0	Richtungsvektor für die ungestreute Elektronenwelle
\vec{n}_K	Oberflächennormale des Kristalls
\vec{q}	Impuls
\vec{r}	Abstandsvektor zwischen zwei streuenden Atomen
\vec{r}_g	Ort der Einheitszellen innerhalb des Kristallgitters
\vec{r}_k	Position von Atom k innerhalb der Einheitszelle
\vec{S}	Anregungsfehler
\vec{x}_p	Meßpunkt
A	Normierungsfaktor
a_i, b_i	Koeffizienten für die Streuamplitudenberechnung
b	Bowlingparameter
B	Debye-Waller-Faktor
c	Lichtgeschwindigkeit
$c^{(j)}$	Konstante zur Berechnung der Elektronenwelle
C_s	Aberrationskonstante

$C_{\vec{g}}^{(j)}$	Anregungsamplitude der Teilwelle eine Blochwelle
D	Detektorfunktion
$D_{i,j}$	diskrete Detektorfunktion
e	Atomnummer
e	Elektronenladung, Elementarladung
E	Elektronenenergie
$E(\vec{r})$	Energie des einfallenden Elektrons
E_{kin}	kinetische Energie
F	Strukturamplitude
f_e	Elektronenstreuamplitude
G	Gitteramplitude
$g(\vec{x}_p)$	RTEM-Bildsignal
h	Plancksches Wirkungsquantum
h, k, l	Millersche Indizes
h_i	Zahl aus den positiven und negativen ganzen Zahlen
I	Intensität
i, j	ganzzahliger Laufindex
I_0	Intensität des Primärelektronenstrahls
$I_{\vec{g}}$	Intensität eines angeregten Braggreflexes
K	Grad Kelvin
K	Wellenzahl
k_0	Wellenvektor der einfallenden Elektronenwelle
k_B	Boltzmannkonstante
k_x, k_y, k_z	Komponenten eines Wellenvektors
k_{xc}, k_{yc}	x, y -Wellenvektorkomponenten des Primärelektronenstrahls
l_a, l_b	Kantenlängen der Scheibe im Realraum
m	relativistische Elektronenmasse
m_0	Ruhemasse eines Elektrons
m_e	Elektronenmasse
n_i	Anzahl der einfallenden Teilchen pro Einheitsvolumen
n_t	Anzahl der Streuzentren pro Einheitsfläche
N_x, N_y	Pixelanzahl in x - und y -Richtung
N_{EZ}	Anzahl der Einheitszellen in der Verschiebungsrichtung
N_{probe}	Zahl der Scheiben in der gesamten Probe
N_{satz}	Anzahl der Scheiben in einem Satz
N_{slice}	Zahl der verschiedenen Scheiben
N_{st}	Anzahl der Streuprozesse pro Einheitsvolumen

p	Anzahl der Atome pro Einheitszelle
$P(\vec{k}, \Delta z)$	Fouriertransformierte der Ausbreitungsfunktion
$p(x, y, \Delta z)$	Ausbreitungsfunktion
s	halber Betrag der Differenz zwischen dem Wellenvektor der einfallenden und der gestreuten Elektronenwelle
S_p	Anregungsfehler in Transmissionsrichtung
$S_{\vec{g}}$	Betrag des Anregungsfehlers
t	Probendicke
T	Temperatur
$t(x, y)$	Transmissionsfunktion
T_D	Debye-Temperatur
u	mittlere Vibrationsamplitude
U_0	mittleres Kristallpotential
u_e, v_e, w_e	Atompositionen innerhalb der Einheitszelle
$U_{\vec{g}}$	dynamischer Strukturfaktor
v	Elektronenausbreitungsgeschwindigkeit, Elektronengeschwindigkeit
v	dreidimensionale Potentialfunktion
$V(\vec{r})$	Kristallpotential
$v_z(x, y)$	in die Ebene projizierte Potentialfunktion
$v_z(x, y)$	projiziertes Atompotential
$V_{\vec{g}}$	Fourierkoeffizient des Kristallpotentials
V_{EZ}	Volumen der Einheitszelle
Z	Ordnungszahl

Griechische Buchstaben

α	Laufindex
χ	Aberrationsfunktion
Δz	Scheibendicke
ϵ_0	Dielektrizitätskonstante
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$	differentieller Streuquerschnitt
$\gamma^{(j)}$	Eigenwert der Schrödingergleichung
λ	Wellenlänge
λ_0	nicht relativistische Wellenlänge
ϕ	Phasenunterschied zweier Elektronenwellen
ϕ_{Blende}	Öffnungswinkel der Objektivblende
ψ	Wellenfunktion aller in einer Richtung gestreuten Elektronenwellen
ψ_0	Wellenfunktion der einfallenden Elektronenwelle

Ψ_0	Ruhezustand eines Atoms
ψ_B	Blochwelle
Ψ_n	angeregter Zustand eines Atoms
$\psi_t(\vec{x}, \vec{x}_p)$	transmittierte Elektronenwelle
σ	Streuquerschnitt
Θ	Streuungswinkel
Θ_B	Braggwinkel
ε_n	inelastischer Formfaktor
$\xi_{\vec{g}}$	Extinktionslänge
$d\Omega$	differentielles Raumwinkelement

Abkürzungen

FT	Fouriertransformation
FT_{2D}^{+1}	zweidimensionale Fouriertransformierte
$I(Z - Kontrast)$	Intensität für das Ordnungszahl-Kontrastsignal für einen Bildpunkt
$I_{i,j}(CBED_{mittel})$	mittlere Ordnungszahl-Kontrastintensität für einen Bildpunkt
$I_{i,j}(CBED_{phonon})$	Ordnungszahl-Kontrastintensität für einen Bildpunkt für eine Phononenkonfiguration
T_{CPU}	Rechenzeit für die Fast-Fouriertransformation in einen Iterationsschritt pro Scheibe
ADF	Annular-Dark-Field
CBED	Convergent Beam Electron Diffraction
CTF	Contrast Transfer Function
Flops	Floting point operations
HOLZ	High Order Laue Zone
RTEM	Raster-Transmissionselektronenmikroskop
SAD	Selected Area Diffraction
SD	Static Atomic Displacement
SDA	Displacementamplitude des Static Atomic Displacement Effektes
TDS	thermisch diffuse Streuung
TEM	Transmissionselektronenmikroskop

1. Einleitung und Problemstellung

In der modernen Informations- und Kommunikationstechnik sowie in der Unterhaltungselektronik werden vielfach optoelektronische Bauelemente und Schaltungen für den Datenaustausch, die Datenvisualisierung und die Datenspeicherung eingesetzt. Typische optoelektronische Bauelemente und Schaltungen sind elektrooptische Modulatoren, Detektor-, Leucht- und Laserdioden.

Diese optoelektronischen Bauelemente und Schaltungen basieren in der Regel auf mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen. Zur Realisierung dieser Halbleiterheterostrukturen werden Halbleiterschichten mit unterschiedlichen Eigenschaften, Schichtdicken usw. auf ein Substratmaterial epitaktisch aufgebracht. Die Schichtdicken reichen von wenigen Nanometern bis zu ca. 100 nm. Hierdurch spielen quantenmechanische Effekte innerhalb der optoelektronischen Bauelemente und Schaltungen eine entscheidende Rolle [1]. Auf die Realisierung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen und den damit realisierten und realisierbaren Bauelementen und Schaltungen sowie auf deren Eigenschaften wird u. a. in [2, 3] eingegangen.

Es existieren mehrere Halbleitermaterialsysteme mit denen diese optoelektronischen Bauelemente und Schaltungen realisiert werden. Aktuell werden hierzu vielfach die quaternären III-V-Halbleitermaterialsysteme $InAlGaAs$ und $InGaAsP$ verwendet. Die mit diesen Halbleitermaterialsystemen realisierten Bauelemente und Schaltungen emittieren Strahlung vom nahen Infrarotbereich bis in den Rotbereich. Die Bandlücke (bzw. Wellenlänge) und die Gitterkonstante sind dabei in weiten Bereichen unabhängig voneinander einstellbar. Die neuartigen Halbleitermaterialien des II-VI-Halbleitermaterialsystems, wie z. B. das quaternäre $ZnMgSSe$, und der Gruppe III-Nitride [4, 5] eignen sich insbesondere für die Realisierung von Leucht- und Laserdioden, die das komplette Spektrum des sichtbaren Lichts von rot bis violett und sogar ultraviolette Strahlung emittieren können [6–9]. Die große Bandbreite bei der Einstellung der Wellenlänge des emittierbaren Lichtes ermöglicht eine deutliche Verbesserung für bestehende und eine Vielzahl von neuartigen Anwendungen. Sie reichen von der deutlichen Vergrößerung der Speicherdichte auf optischen Speichermedien bis zum Einsatz der Leucht- bzw. Laserdioden zur Realisierung von digitalen Großbildschirmen.

Trotz der hervorragenden optischen Bauelementeigenschaften der Gruppe III-Nitride sind die Forschungen auf diesem Gebiet noch sehr jung. Erst im Jahr 1997 wurde die erste violette Laserdiode vorgestellt [9]. Deshalb sind noch viele Arbeiten für die Optimierung des Herstellungsprozesses bei der Epitaxie von Bauelementen aus den Gruppe III-Nitriden notwendig.

Dieses kann nur durch ein 'Feedback' von Ergebnissen aus der Bauelementcharakterisierung in den Herstellungsprozeß erfolgen. Bis jetzt existiert für die Gruppe III-Nitride kein geeignetes Substratmaterial, welches ein gitterangepaßtes Wachstum ermöglicht [6]. Deshalb ist das wichtigste Ziel für die Herstellung von $(Al, Ga, In)N/GaN$ -Heterostrukturen die Minimierung der gravierenden Defektdichte, die durch die Gitterfehlانpassung hervorgerufen wird.

Nach theoretischen Voraussagen sollen in den genannten technisch relevanten Verbindungshalbleitermaterialsystemen Mischungslücken und Ordnungseffekte auftreten [10]. Unter der Mischungslücke versteht man das Zerfallen einer homogenen Phase während des Wachstumsprozesses in zwei stabile Phasen mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung. Dieser Prozeß ist abhängig von der Wachstumstemperatur sowie der Materialzusammensetzung und wird auch als Phasenseparation oder Entmischung bezeichnet. Die Entmischung führt zu lokalen Schwankungen in der chemischen Zusammensetzung der Materialien in Abhängigkeit vom Herstellungsprozeß [11, 12]. Diese lokalen Schwankungen können für sehr dünne Schichten zu einer elastischen Relaxation lokaler Verspannungsfelder, und in Abhängigkeit von der Probendicke, zu Oberflächenrelaxationen in den entmischten Bereichen führen [13, 14]. Die Variation der chemischen Zusammensetzung verhindert zudem eine gezielte Materialzüchtung, da hierdurch die Materialeigenschaften im atomaren Bereich unkontrollierbar werden. In entmischten Proben wird auch der Effekt des Static Atomic Displacements beobachtet [15, 16]. Bei diesem Effekt handelt es sich um eine Verschiebung der Gitteratome von deren Gitterplatz aufgrund von veränderten Bindungslängen. Durch die lateralen Schwankungen in den Gitterparametern kommt es daher zu starken Einschränkungen bei der Verwendbarkeit mesoskopischer Halbleiterheterostrukturen als Grundstruktur für optoelektronische Bauelemente und Schaltungen. Experimentelle Indizien für die Entmischung von quaternären III-V-Halbleitern finden sich in [17–19]. Auch in quaternären II-VI-Halbleitermaterialien werden Entmischungseffekte für höhere Mg - und S -Anteile beobachtet [20]. Das entscheidende Problem bei der Entmischung ist aber, daß für diese bis heute eine umfassende Erklärung fehlt. Unter dem Ordnungseffekt versteht man die streng periodische Bildung von Untergittern für bestimmte Elemente. Hierdurch entsteht eine örtlich streng periodische Variation der chemischen Zusammensetzung. Diese führt im atomaren Bereich zu unkontrollierbaren Materialeigenschaften und verhindert eine gezielte Materialzüchtung. In verschiedenen experimentellen Untersuchungen sind Ordnungseffekte in III-V-Halbleitermaterialien nachgewiesen worden [21–24].

Die wichtigsten Parameter bei der Herstellung leistungsfähiger optoelektronischer Bauelemente aus mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen sind die Einhaltung mikrostruktureller Schlüsselparameter wie die Schichtdicken und die lokale chemische Zusammensetzung der

einzelnen Schichten der Halbleiterheterostrukturen, ihre Grenzflächenbeschaffenheit (atomar scharfe oder graduelle Schichtübergänge), ihre Kristallperfektion (Defekte, Ordnungseffekte, Übergitter, Gitterverspannungen bzw. -relaxationen, Entmischungseffekte) und ihre Dotierstoffkonzentrationsverteilung. Durch die Variation dieser Schlüsselparameter können problemorientiert maßgeschneiderte Bauelementeigenschaften, basierend auf gezielt einstellbaren Bandstrukturen, realisiert werden. Gerade die Herstellung dieser maßgeschneiderten Bauelementeigenschaften bzw. Bandstrukturen erfordert eine sehr genaue Kenntnis über den Einfluß der verschiedensten Wachstumsparameter auf den Wachstumsprozeß von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen. Ein äußerst entscheidender Punkt für optoelektronische Bauelemente und Schaltungen ist deren Lebensdauer. Diese wird entscheidend von der Herstellungsqualität der einzelnen Bauelemente und Schaltungen beeinflusst und kann nur durch die systematische Optimierung des Herstellungsprozesses unter Berücksichtigung der oben genannten Parameter verbessert werden. Erst hierdurch sind leistungsfähige Bauelemente wie Laserdioden realisierbar. Diese Prozeßoptimierung führte z. B. in [9] zur Realisierung der ersten violetten Laserdiode basierend auf den Gruppe III-Nitriden.

Zur Bestimmung der Herstellungsqualität von realisierten Bauelementen und Schaltungen sind diese zu charakterisieren. Für die Prozeßoptimierung werden die Charakterisierungsergebnisse mittels 'Feedback' wieder in den Herstellungsprozeß eingebracht. Die hierzu notwendigen Informationen können nur durch den Einsatz von Mikro- und Nanocharakterisierungsmethoden gewonnen werden. In der Regel sind diese Informationen nur mit hochauflösenden Analysemethoden erzielbar. Diese müssen in der Lage sein, neben qualitativen insbesondere auch quantitative Informationen über den Kristallaufbau und die Materialzusammensetzung der zu untersuchenden Schichten und Grenzflächen von Halbleiterheterostrukturen zu liefern, und zwar bis zu einer atomaren Ortsauflösung. Transmissionselektronenmikroskope (TEM) und Raster-Transmissionselektronenmikroskope (RTEM) ermöglichen die Charakterisierung von Materialien mit Subnanometer-Ortsauflösung und sind daher für den genannten Einsatzbereich geradezu prädestiniert.

Das entscheidende Problem dieser beiden Analysegeräte ist, daß sich deren Meßergebnisse weitestgehend einer einfachen qualitativen und vor allem quantitativen Interpretation entziehen. TEM liefern von den zu untersuchenden Proben zwar Strukturabbildungen mit atomarer Auflösung, aber gerade die quantitative Bestimmung der Materialzusammensetzung ist nur in wenigen Spezialfällen für günstige Probenorientierungen und unter Verwendung von Bildverarbeitungsalgorithmen möglich [25, 26]. Mit einem RTEM ist die Charakterisierung einschließlich der Bestimmung der Materialzusammensetzung ohne größere Probleme bis zur atomaren Auflösung möglich [27–30]. Für diesen Zweck stellt ein RTEM mehrere Meßtechniken zu Verfügung. Die Wichtigsten für diese Arbeit sind die

- Elektronenbeugung im konvergenten Bündel, die auch unter dem Begriff Convergent Beam Electron Diffraction (CBED) bekannt ist,
- sowie die Ordnungszahl-Kontrastabbildung (Z-Kontrastabbildung).

Die zu untersuchenden Proben werden für die Charakterisierung mittels dieser Meßtechniken vorbereitet. Sie können so präpariert werden, daß sie im Querschnitt (cross section) charakterisiert werden. Sie können aber auch so präpariert werden, daß sie in Aufsicht (plane view) charakterisiert werden. Hierbei durchstrahlt der Primärelektronenstrahl alle Materialschichten der Probe gleichzeitig.

Die Elektronenbeugung im konvergenten Bündel ist eine äußerst leistungsfähige Charakterisierungsmethode, mit der eine Vielzahl von Informationen über die zu untersuchende Halbleiterprobe gewonnen werden können. Dieses sind Informationen über die Gitterkonstante, die Verspannungsänderung, die Veränderung der Materialzusammensetzung [29, 31, 32], die Kristallpolarität [33, 34], die Dotierung [35] und vieles mehr. Die Elektronenbeugung im konvergenten Bündel kann auch zur Grenzflächencharakterisierung eingesetzt werden [29]. Die Elektronenbeugungsmuster entstehen, indem die in der Probe gestreuten und gebeugten Elektronen aus der Probe austreten und auf einen Phosphorschirm treffen. Von diesem Phosphorschirm wird die Energie der auftreffenden Elektronen in Licht umgewandelt und das Elektronenbeugungsmuster wird sichtbar.

Für die Ordnungszahl-Kontrastabbildung wird nur eine Untermenge der in der Probe gestreuten und gebeugten Elektronen, die in einem bestimmten Winkelbereich die Probe verlassen, von einem ringförmigen Detektor aufintegriert [36–38]. Dieser wird auch als Annular-Dark-Field-Detektor (ADF-Detektor) bezeichnet. Auch mit der Ordnungszahl-Kontrastabbildung können eine Vielzahl von Informationen über die zu untersuchende Probe gewonnen werden. Dieses betrifft sowohl die Bestimmung von Schwankungen in der Materialzusammensetzung einzelner Halbleiterschichten, als auch die Veränderung der Materialzusammensetzung in Halbleiterheterostrukturen [11, 29, 39]. Darüber hinaus ist mittels des hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastes, der ein Spezialfall des Ordnungszahl-Kontrastes ist, auch eine direkte Bestimmung der atomaren Struktur von Halbleiterheteroübergängen möglich [28, 40]. Bei Halbleiterheteroübergängen handelt es sich um Materialübergänge zwischen einzelnen Heteroschichten, die im Folgenden auch als Heteroübergänge bezeichnet werden. In verschiedenen Veröffentlichungen [11, 39, 41] werden Ergebnisse vorgestellt, die auf den Einfluß von strukturellen Veränderungen auf Ordnungszahl-Kontrastabbildungen hinweisen. Hierzu existieren bislang aber noch keine systematischen Untersuchungsergebnisse.

Quantitative Aussagen über eine zu untersuchende Probe mit RTEM-Meßergebnissen sind

nur mittels des Vergleichs von Simulation und Experiment möglich. Die hierzu verwendeten Simulationsprogramme müssen in der Lage sein, die Intensitätsverteilung innerhalb eines Elektronenbeugungsmusters nach Ort und Betrag genau zu berechnen. Die Simulationsprogramme basieren auf der kinematischen oder der dynamischen Streutheorie und simulieren die Elektronenbeugung und -streuung innerhalb der zu untersuchenden Probe. Materialverspannungen sind mittels des Vergleichs von kinematisch simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern bis zu einer Genauigkeit von $\frac{\Delta a}{a} = 2 \cdot 10^{-3}$ bestimmbar [11]. Zusätzlich ist die Probenorientierung anhand der kinematischen Simulation sehr genau bestimmbar. Mittels der kinematischen Elektronenbeugungssimulation ist nur die Position von signifikanten Intensitäten in einem Elektronenbeugungsmuster ermittelbar. Erst die dynamische Elektronenbeugungssimulation ermöglicht eine korrekte Berechnung der Intensitätsverteilung nach Betrag und Ort innerhalb eines Elektronenbeugungsmusters. Damit eignet sich nur die dynamische Elektronenbeugungssimulation zur vollständig quantitativen Analyse von RTE-Meßergebnissen. Die am weitest verbreiteten dynamischen Simulationsansätze sind der Blochwellenansatz [42] und der Multislice-Ansatz [43]. Für den Blochwellenansatz wird der zu untersuchende Kristall als ein in zwei Raumrichtungen unendlich ausgedehntes, periodisches Objekt betrachtet. In diesem Kristall breiten sich die sogenannten Blochwellen aus, die mittels der Schrödingergleichung berechnet werden. Der Nachteil dieses Simulationsverfahrens ist die begrenzte Anzahl von simulierbaren Blochwellen und daß aperiodische Effekte, wie Materialübergänge, nur unter sehr hohem Aufwand simuliert werden können. Für den Multislice-Ansatz wird der zu untersuchende Kristall in einzelne Scheiben, die sogenannten Slices, zerlegt. Der Einfluß dieser Scheiben auf die sich im Kristall ausbreitende Elektronenwelle ist berechenbar. Damit ist die aus dem Kristall austretende Elektronenwelle mittels einer sukzessiven Propagation der Elektronenwelle von Scheibe zu Scheibe und der Berechnung der Veränderung der Elektronenwelle aufgrund der jeweiligen Scheibe berechenbar. Die entscheidenden Vorteile dieses Verfahrens sind, daß alle Blochwellen zur Berechnung berücksichtigt werden und daß vor allem auch nicht periodisch aufgebaute Kristalle ohne großen Aufwand berechnet werden können. Für die quantitative Elektronenbeugungssimulation ist die Berücksichtigung von inelastischen Effekten unumgänglich. Es existieren verschiedene Ansätze um diese inelastischen Effekte in dynamischen Simulationen zu berücksichtigen. Sowohl für den Blochwellenansatz als auch für den Multislice-Ansatz werden von einigen Gruppen sogenannte Absorptionspotentiale für die Berücksichtigung inelastischer Effekte verwendet [32, 44–47]. Andere Gruppen versuchen inelastische Effekte mittels analytischer Funktionen in die Multislice-Simulationen einzubringen [48, 49]. Für die quantitative Simulation von energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern eines RTE ist der Ansatz aus [50], basierend auf dem Multislice-Ansatz aus [51], hervorragend geeignet. Dieser Ansatz berücksichtigt für die Simulation von Elektronenbeugungsmustern als inela-

stischen Effekt die thermisch diffuse Streuung (TDS). Diese wird durch die thermischen Schwingungen der einzelnen Atome innerhalb des Kristallgitters verursacht. Mit diesem Ansatz kann eine hervorragende Übereinstimmungen zwischen Simulation und Experiment erzielt werden [50, 52]. Darüber hinaus ist dieser Simulationsansatz schon äußerst erfolgreich für quantitative Ordnungszahl-Kontrastsimulationen von anderen Gruppen eingesetzt worden [53–55]. Damit steht durch die Kombination von RTEM-Meßtechnik und Multislice-Ansatz, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, eine äußerst leistungsfähige und erprobte Charakterisierungsmethode zur Verfügung. Diese ermöglicht die quantitative Bestimmung der Kristallstruktur und der Materialzusammensetzung bis in den atomaren Bereich und führt sowohl zu einem besseren physikalischen Verständnis als auch zu einer besseren Interpretierbarkeit von Meßergebnissen.

Es existieren bereits einige Arbeiten, in denen mesoskopische Halbleiterheterostrukturen aus den III-V- bzw. II-VI-Halbleitermaterialsystemen sowie aus den Gruppe III-Nitriden unter Verwendung von RTEM-Messungen charakterisiert wurden [29, 41, 56, 57]. Trotzdem gibt es für diese Materialsysteme und deren Halbleiterheterostrukturen eine Vielzahl ungeklärter Fragestellungen, die bis jetzt noch nicht oder nur ansatzweise beantwortet sind. Um diese Fragestellungen zu beantworten müssen verschiedenste Effekte, wie z. B. Asymmetrien im Materialaufbau und andere aperiodische Effekte, ohne größeren Aufwand simuliert werden können. Für die Lösung dieser Fragestellungen eignet sich daher insbesondere der Multislice-Ansatz. Im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik wurde der Multislice-Ansatz aus [51] schon mehrfach eingesetzt [56, 58]. Es sind aber bis zu Beginn dieser Arbeit keinen inelastischen Effekte, wie die thermisch diffuse Streuung, für die Simulationen mit dem Multislice-Ansatz berücksichtigt worden. Aber erst die Berücksichtigung von inelastischen Effekten in den Elektronenbeugungssimulationen ermöglicht einen quantitativen Vergleich zwischen simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsergebnissen. Das Ziel dieser Arbeit ist es daher, den verwendeten Multislice-Ansatz dahingehend zu erweitern, daß auch die thermisch diffuse Streuung für die Elektronenbeugungssimulation berücksichtigt wird. Anhand dieser Erweiterung werden dann die Möglichkeiten aufgezeigt, die dieser Ansatz für die quantitative Untersuchung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen eröffnet. Hierzu ist es aber notwendig geeignete Multislice-Simulationsmodelle für Entmischungseffekte in quaternären Halbleitermaterialien, wie den Effekt des Static Atomic Displacements und den Oberflächenrelaxationseffekt, und für die Gruppe III-Nitride zu finden bzw. zu entwickeln. Basierend auf diesen Neuerungen und Weiterentwicklungen wird dann auf Fragestellungen eingegangen, die sowohl die Charakterisierung von technisch relevanten Halbleiterheterostrukturen als auch die verwendeten dynamischen Simulationsansätze betreffen. Diese sind:

- In [29, 59] wird von Asymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Materialüber-

gängen in Halbleiterheterostrukturen berichtet, deren Ursache bis heute noch völlig unklar ist.

- Für die Simulation von Materialverspannungen in Halbleiterheterostrukturen sind bislang fast nur kinematische Simulationen und Blochwellensimulationen eingesetzt worden. Bis jetzt existieren aber wahrscheinlich noch keine Informationen über den Einfluß von Materialverspannungen in Halbleiterheterostrukturen auf die Elektronenbeugungssimulationsergebnisse des Multislice-Ansatzes.
- Bei der Untersuchung von entmischten Proben wird häufig von dem Effekt der Oberflächenrelaxation und dem Effekt des Static Atomic Displacement berichtet. Nahezu unklar ist bis jetzt der Einfluß dieser Effekte auf die konvergente Elektronenbeugung. Insbesondere fehlen gesicherte Ergebnisse über den Einfluß der Oberflächenrelaxationen auf den Ordnungszahl-Kontrast.
- Für II-VI-Halbleiter existieren Arbeiten, die Materialgrenzflächen mittels hochauflösender Ordnungszahl-Kontrastsimulationen charakterisieren [56, 58]. Für III-V-Halbleiter ist dieses wahrscheinlich noch nicht durchgeführt worden. Bis jetzt ist aber in keinem Fall der Einfluß der thermisch diffusen Streuung und der Einfluß der Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast von Materialübergängen in Halbleiterheterostrukturen genauer analysiert worden.
- Für die Gruppe III-Nitride existieren bis jetzt fast ausschließlich TEM-Ergebnisse, mit denen die Kristallstruktur bis in den atomaren Bereich untersucht wurde. Aufgrund des sehr neuen Materialsystems existieren bislang fast keine hochaufgelösten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Deshalb fehlen auch Untersuchungen die für den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride genauer auf den Einfluß der Probenorientierung, der Materialvariation und der Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter eingehen.

2. Grundlagen

Im Rahmen dieser Arbeit sollen Elektronenbeugungsmuster (CBED-Muster) für mesoskopische Halbleiterheterostrukturen, deren Schichtdicken von wenigen Nanometern bis hin zu ca. 100 *nm* reichen, simuliert werden.

Für diese Simulationen sind insbesondere Halbleiterheterostrukturen von Interesse die aus III-V- und II-VI-Halbleitermaterialien, sowie aus dem neuartigen Halbleitermaterialsystem der Gruppe III-Nitride bestehen. Die Einheitszellengröße für diese Halbleiter liegt im Subnanometerbereich. Deshalb wird für die Charakterisierung der Materialien und Schichten dieser Halbleiterheterostrukturen ein RTEM mit einer kalten Feldemissionsquelle vom Typ VG HB501 verwendet. Dieses besitzt eine Beschleunigungsspannung von 100 *keV*, eine maximale Ortsauflösung von ca. 0,3 *nm* [38] und vor allem einen nahezu monochromatischen Elektronenstrahl. Diese Leistungsdaten prädestinieren das RTEM geradezu für die Charakterisierung von Halbleiterheterostrukturen. Die Meßergebnisse des RTEM sind z.T. höchst komplizierte Abbildungen und Muster, die sich weitestgehend einer einfachen quantitativen und z.T. selbst einer qualitativen Interpretation entziehen. Aus diesem Grund kann ohne geeignete Simulationswerkzeuge keine korrekte Interpretation dieser Meßergebnisse erfolgen.

In diesem Kapitel wird zuerst auf die physikalischen Grundlagen der Elektronenbeugung und der für diese Arbeit relevanten Meßtechniken eingegangen. Anschließend werden meßtechnische Grundlagen und experimentelle Methoden vorgestellt, sowie auf die in dieser Arbeit verwendeten Simulationsansätze genauer eingegangen. Abgeschlossen wird dieses Kapitel durch die materialspezifischen Grundlagen der für diese Arbeit relevanten Halbleitermaterialsysteme.

2.1 Physikalische Grundlagen der Elektronenbeugung

Für die Untersuchung von Halbleiterheterostrukturen mittels des RTEM wird eine im Querschnitt (cross section) präparierte Probe mit einem sehr fein fokussierten Elektronenstrahl abgetastet. Die Elektronen des primären Elektronenstrahles treffen mit der Energie E_0 auf die Probe und treten mit ihr in Wechselwirkung. Die für diese Arbeit relevanten Wechselwirkungsprodukte treten in Transmissionsrichtung aus der Probe aus und sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Dieses sind die ungestreuten, die inelastisch gestreuten, die gebeugten und die elastisch gestreuten Elektronen. Entsprechend der Art des Beugungs- bzw. Streuprozesses

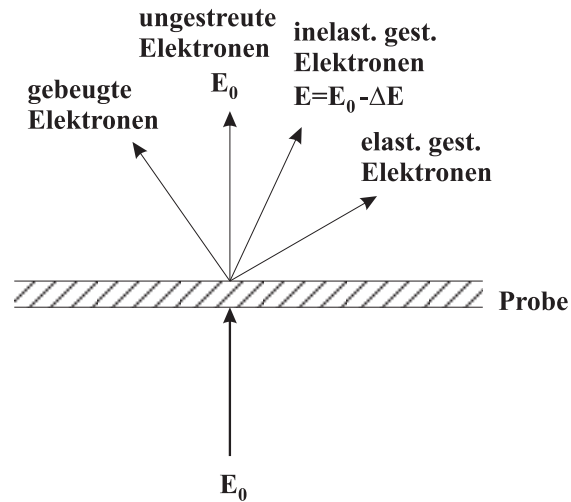


Abbildung 2.1: Wechselwirkungsprodukte der Elektron-Festkörper-Wechselwirkung

können diese Elektronen jeweils einer speziellen Meßtechnik zugeordnet werden. Für diese Arbeit sind das:

- Die ungestreuten Elektronen für die Hellfeldabbildung,
- die gebeugten Elektronen für die Elektronenbeugungsmessung,
- die elastisch gestreuten Elektronen für die Ordnungszahl-Kontrastabbildung.

Die inelastisch gestreuten Elektronen sind nur aufgrund ihres z. T. nachteiligen Einflusses auf die Meßergebnisse für diese Arbeit von Interesse. Auf die speziellen meßtechnischen Grundlagen wird in den Kapiteln 2.2 und 2.3 genauer eingegangen. Die sich mittels dieser Meßtechniken ergebenden Charakterisierungsmöglichkeiten werden in diesen Kapiteln genauer erläutert.

Zur Beschreibung des Streuprozesses wird der sogenannte Streuquerschnitt σ verwendet. Dieser gibt quantitativ die Wahrscheinlichkeit für das Stattfinden eines bestimmten Streuprozesses an. Der Streuquerschnitt ist wie folgt definiert:

$$\sigma = \frac{N_{st}}{n_t n_i} \quad (2.1)$$

N_{st} ist die Anzahl der Streuprozesse in Abhängigkeit vom Typ (z. B. elastisch) pro Einheitsvolumen, n_t ist die Anzahl der Streuzentren (z.B. Atome) pro Einheitsvolumen und n_i ist die Anzahl der einfallenden Teilchen (Primärelektronen) pro Einheitsfläche. Aufgrund der Radialsymmetrie der Streuprozesse läßt sich die Wahrscheinlichkeit für die Streuung eines Elektrons des Primärelektronenstrahls in das differentielle Raumwinkelement $d\Omega = 2\pi \sin \Theta d\Theta$

(Θ = Streuwinkel bzgl. des primären Elektronenstrahls) mit dem differentiellen Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ beschreiben.

2.1.1 Elastische Streuung

Im Idealfall wird ein Elektron beim elastischen Streuprozess ohne Abgabe von Energie im Coulombfeld des Atomkerns gestreut und erfährt nur eine Richtungsänderung. In der Realität wird selbst bei der sogenannten elastischen Streuung Energie vom gestreuten Elektron an das streuende Atom abgegeben. Aus der sehr hohen Massendifferenz zwischen dem streuenden Atom, welches in einem Kristallgitter fest eingebunden ist, und dem gestreuten Elektron resultiert aber nur ein sehr geringer Energieverlust. Dieser liegt unter dem energetischen Auflösungsvermögen eines RTEM, welches bei dem hier verwendeten RTEM kleiner als $0,3 \text{ eV}$ ist [38]. In der Praxis wird von elastischer Streuung gesprochen, wenn der Energieverlust für diesen Streuprozess unter dem energetischen Auflösungsvermögen des Elektronenmikroskops liegt.

Um quantitativ die elastische Elektronenstreuung zu beschreiben und diese auch mit Simulationsprogrammen berechnen zu können, wird auf den Zusammenhang zwischen dem differentiellen Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ und der Elektronenstreuamplitude $f(\Theta)$ zurückgegriffen. Dieser lautet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_e(\Theta)|^2 \quad (2.2)$$

Für die Beschreibung der Weitwinkelstreuung läßt sich dieser Ausdruck noch weiter vereinfachen. Der Grund dafür ist, daß die im großen Winkel gestreuten Elektronen sehr nahe am Atomkern vorüberfliegen und somit keine starke Beeinflussung durch die abschirmende Wirkung der Elektronenhülle des Atoms erfahren. Damit werden die Elektronen nur im Coulombpotential des Atomkerns gestreut. Diese Art der Streuung wird auch Rutherford-Streuung genannt. Gleichung 2.2 vereinfacht sich hierdurch zu:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v^4 \sin^4\left(\frac{\Theta}{2}\right)} \quad (2.3)$$

Z ist die Ordnungszahl, e ist die Elementarladung, v ist die Elektronengeschwindigkeit und m ist die relativistische Elektronenmasse. Die quadratische Abhängigkeit der Gleichung 2.3 von der Ordnungszahl des streuenden Atoms zeigt, wieso insbesondere die weitwinklig, elastisch gestreuten Elektronen für die Materialcharakterisierung von besonderem Interesse sind. Darüber hinaus ist mittels dieses Streuprozesses die exakte Position des streuenden Atoms mit hoher Genauigkeit bestimmbar [38].

Im Gegensatz zur Streuung im großen Winkel passiert das Elektron bei der Streuung im kleinen Winkel den Atomkern in einem größeren Abstand. Dadurch kommt die abschirmende Wirkung der Elektronenhülle zum Tragen und der einfache quadratische Zusammenhang zwischen dem Streuquerschnitt und der Ordnungszahl geht verloren. Für die Beschreibung der Streuung im kleinen Winkel ist es daher zwingend notwendig, diesen Abschirmungseffekt mit zu berücksichtigen. Dieses erreicht man nur mittels einer quantenmechanischen Berechnung der Wellenfunktion für Elektronen.

Zur Beschreibung der Elektronenstreuung und für deren Simulation wird die sogenannte Elektronenstreuamplitude verwendet, die die dreidimensionale Fouriertransformierte der Atompotentialfunktion eines Elementes ist. In [60] sind die Elektronenstreuamplituden für viele Elemente tabellarisch aufgeführt. Zur Bestimmung dieser Streuamplituden ist ein relativistisches Hartree Fock Modell verwendet worden, welches zur Berechnung der Wellenfunktion von gebundenen Elektronen dient. Die in [60] tabellierten Elektronenstreuamplituden können für die Elektronenbeugungssimulation mit einer Beschleunigungsspannung von 100 keV für Atome mit einer Ordnungszahl $Z < 75$ verwendet werden [61]. Diese Begrenzung resultiert aus dem Versagen der Bornschen Näherung im Fall von $Z \geq 137\frac{v}{c}$ [61], wobei c die Lichtgeschwindigkeit und v die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Elektronen ist. In [60] werden die Elektronenstreuamplituden $f_e(s)$ für einen Bereich von $s = 0 - 60\text{ nm}^{-1}$ angegeben. Die sich daraus ergebenden Streuwinkel liegen für die Beschleunigungsspannung des verwendeten RTEEM (100 keV) im Bereich von $\Theta = 0\text{ mrad}$ bis $\Theta = 224\text{ mrad}$. Die Elektronenstreuamplituden sind in [60] nur für einige spezielle Streuwinkel angegeben. Liegt der Streuwinkel für die gesuchte Elektronenstreuamplitude in dem Winkelbereich von $\Theta = 0 - 224\text{ mrad}$ und stimmt dieser nicht mit den in [60] angegebenen Streuwinkeln überein, so kann diese Elektronenstreuamplitude mittels der Funktion

$$f_e(s) = \sum_{i=1}^4 [a_i \exp(-b_i s^2)] \quad (2.4)$$

berechnet werden [60]. Für s gilt in [60] $[s] = \frac{10}{\text{nm}}$, da dort die Wellenlänge noch in Angström angegeben wird. Die Koeffizienten a_i und b_i können aus [60] entnommen werden. Allgemein gilt für s die Funktion [32]:

$$s = \frac{1}{2} \left| \vec{k}_0 - \vec{k}_{sc} \right| \quad (2.5)$$

\vec{k}_0 ist der Wellenvektor der einfallenden Elektronen und \vec{k}_{sc} ist der Wellenvektor der gestreuten Elektronen. Nach [60] läßt sich s auch als

$$s = \frac{\sin \Theta}{\lambda} \text{nm}^{-1} \quad (2.6)$$

ausdrücken. λ ist die Wellenlänge des gestreuten Elektrons und hat die Einheit nm . Für Elemente deren Elektronenstreuamplituden nicht in [60] aufgeführt sind bzw. $s \geq 60 nm^{-1}$ ist, können die Elektronenstreuamplituden nach [32] mittels der Mott-Formel und den zu den Elektronenstreuamplituden korrespondierenden Röntgenstreuamplituden $f_x(s)$ zu

$$f_e(s) = \frac{m_e e^2}{8\pi\epsilon_0 h^2} \frac{Z - f_x(s)}{s^2} \quad (2.7)$$

bestimmt werden. m_e ist die Elektronenmasse, e ist die Elektronenladung, ϵ_0 ist die Dielektrizitätskonstante und h ist das Plancksche Wirkungsquantum. Die Mott-Formel berücksichtigt, daß für kleine Streuwinkel die Röntgenstreuamplitude nahezu gegen Z und die Elektronenstreuamplitude gegen 0 geht. Für große Streuwinkel berücksichtigt sie, daß die Röntgenstreuamplitude sehr gering wird und die Elektronenstreuamplitude eine Abhängigkeit hat die annähernd proportional zu $\frac{Z}{s^2}$ ist.

Nach [62] ist die Berechnung der Elektronenstreuamplitude mit Hilfe der Röntgenstreuamplitude für große Streuwinkel genauer. Aufgrund der Ungenauigkeit der tabellierten Röntgenstreuamplituden, die zu $f_x(0) \neq Z$ führen kann, würde Gleichung 2.7 für $s = 0 nm^{-1}$ singulär werden [63]. Es wird daher eine modifizierte Mott-Formel zur Berechnung der Elektronenstreuamplitude vorgeschlagen, die berücksichtigt das $f_e(s = 0) = Z$ ist. Diese lautet [63]:

$$f_e(s) = \frac{8\pi^2 m_e e^2}{h^2} \frac{\sum_i a_i [1 - \exp(-b_i^2 s^2)]}{S^2} \quad (2.8)$$

Bei den Koeffizienten a_i und b_i in der Gleichung 2.8 handelt es sich um die Koeffizienten zur Berechnung der Röntgenstreuamplitude aus [64] und nicht um die Koeffizienten für die Berechnung der Elektronenstreuamplitude. Beispielhaft zeigt Abbildung 2.2 den Verlauf der Elektronenstreuamplitude von Indium (*In*), Gallium (*Ga*) und Stickstoff (*N*).

Ein wichtiger Punkt für die quantitative Berechnung der Elektronenstreuung ist die Genauigkeit der Elektronenstreuamplituden, die in [60] und [64] tabelliert sind. In [65] wird bewiesen, daß diese Elektronenstreuamplituden äußerst genau sind und Unterschiede zwischen Simulation und Experiment eher auf Unterschiede in der Wahl der Simulationsparameter und der dazu korrespondierenden Einstellung des Elektronenmikroskops zurückzuführen sind.

2.1.2 Inelastische Streuung

In vielen Veröffentlichungen konnte der deutliche Einfluß der inelastischen Streuung auf Meß- und Simulationsergebnisse demonstriert werden [32, 48, 53]. Deshalb ist für die quantitative Simulation der Elektronenstreuung die Berücksichtigung der inelastischen Streuung

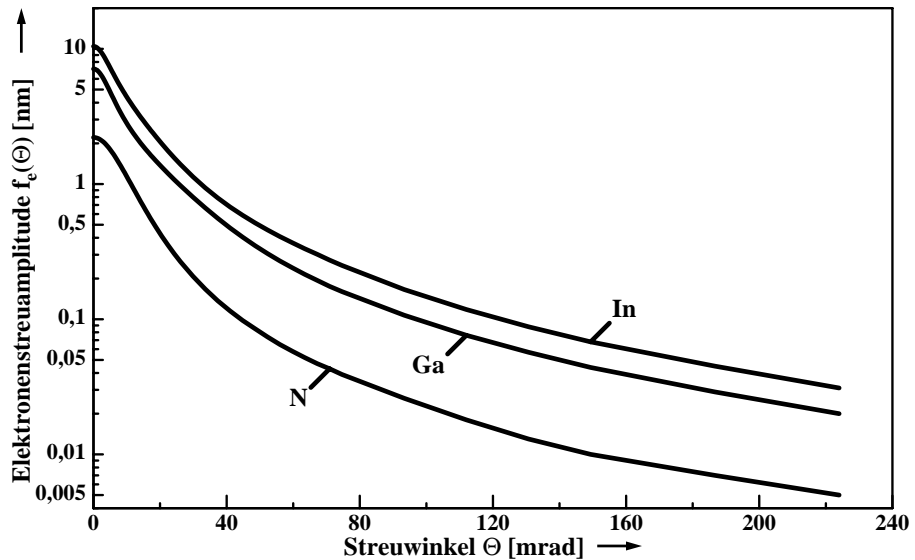


Abbildung 2.2: Verlauf der Elektronenstreuamplitude für *In*, *Ga* und *N*

unerlässlich. Im Gegensatz zur elastischen Streuung wird bei der inelastischen Streuung das Elektron unter Abgabe von Energie (ΔE) gestreut. Diese Art des Streuprozesses wird auch als Coulomb-Streuung bezeichnet. Zwei Energiebereiche sind hierbei von besonderem Interesse:

- $1 \text{ eV} \leq \Delta E \leq 10 \text{ eV}$: In diesem Energiebereich finden Plasmonenanregungen und Interbandübergänge in den Probenatomen statt.
- $100 \text{ eV} \leq \Delta E \leq 1000 \text{ eV}$: In diesem Energiebereich werden die inneren Schalen der Probenatome ionisiert.

Die inelastische Streuung erfolgt größtenteils an den inneren Atomschalen. Hierdurch ist der Streuprozess wie die Streuung an einem einzelnen Atom interpretierbar. Eine korrekte quantitative Beschreibung der inelastischen Streuung berücksichtigt den Energieverlust und die Winkeländerung des gestreuten Elektrons. Das führt zur Verwendung eines quantenmechanischen Modells, welches auf den folgenden Annahmen basiert:

1. Alle einfallenden und gestreuten Elektronen werden im großem Abstand vom Atom als ebene Welle beschrieben.
2. Nur ein einziges Elektron empfängt die durch die Coulombwechselwirkung übertragene Impulsänderung.

Durch Annahme 1 wird es möglich, die sich in der zu untersuchenden Probe ausbreitenden Elektronen mit Hilfe des Wellenvektors \vec{k} zu beschreiben. Dieses führt zu einer besseren Vergleichbarkeit zwischen Simulation und Experiment, da mit diesem Wellenvektor prinzipiell auch die Überlagerung von kohärenten Elektronenwellen beschreibbar wird. Für die Berechnung von kohärenten Elektronenbeugungsmustern ist das von besonderer Bedeutung. Kohärente Elektronenwellen sind Elektronenwellen mit einer festen Phasenbeziehung, die sich aufgrund der festen Phasenbeziehung überlagern können. Im Gegensatz dazu besitzen inkohärente Elektronenwellen keine feste Phasenbeziehung und können sich daher auch nicht überlagern. Die Annahme 2 vereinfacht die Berechnung der Wellenfunktion, woraus eine vereinfachte Berechnung des inelastischen Streuquerschnittes resultiert. Mit diesen Annahmen ist der inelastische Streuprozess über die Rutherford-Streuung und einen Korrekturfaktor, der die Bindungsenergie des angeregten Elektrons berücksichtigt, einfacher zu berechnen. Dieser Korrekturfaktor wird allgemein inelastischer Formfaktor ε_n genannt. Mit diesem Faktor läßt sich die Übergangswahrscheinlichkeit eines Atoms vom Ruhezustand Ψ_0 in den angeregten Zustand Ψ_n beschreiben. Dieser Übergang wird durch den vom Elektron des Primärelektronenstrahls übertragenen Impuls \vec{q} verursacht. Die Berechnung der inelastischen Streuamplitude kann dann in der folgenden Art erfolgen [61]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{4\gamma^2}{a_0^2 q^4} \right) \frac{k_1}{k_0} |\varepsilon_n(\vec{q})|^2 \quad (2.9)$$

Der inelastische Formfaktor ε_n bestimmt sich zu:

$$\varepsilon_n = \langle \Psi_n | \sum_j \exp(i\vec{q}\vec{r}_j) | \Psi_0 \rangle \quad (2.10)$$

Dabei ist $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0$, $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0^2}{m_0e^2}$ und $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(\frac{v}{c})^2}}$. Basierend auf den Gleichungen 2.9 und 2.10 können dann für dynamische Simulationen, die inelastische Effekte berücksichtigen, die inelastischen Formfaktoren berechnet werden.

2.1.3 Die quasielastische oder thermisch diffuse Streuung

Ein wichtiger Spezialfall der inelastischen Streuprozesse ist die quasielastische Streuung. Die Ursache dieses Streuprozesses ist die Wechselwirkung der Elektronen mit den aufgrund ihrer thermischen Energie um die Ruhelage schwingenden Kristallgitteratomen. Dieser Wechselwirkungsprozess wird durch die Absorption bzw. die Erzeugung eines Phonons beschrieben. Die Phononenenergie liegt in der Größenordnung von $k_B T$ und überschreitet den Wert $k_B T_D$ nicht. k_B ist die Boltzmannkonstante, T ist die absolute Temperatur und T_D ist die Debye-Temperatur. Die Begrenzung auf die maximale thermische Energie $k_B T_D$ resultiert aus der Tatsache, daß die Debye-Temperatur auch ein Maß für die maximale elastische Schwingfrequenz von Gitteratomen ist [66]. Für quasielastische Streuprozesse bleibt der Energieverlust

unter $\Delta E = 0,1 eV$, womit er deutlich unter dem energetischen Auflösungsvermögen des verwendeten RTEEM liegt [38]. Im Elektronenbeugungsmuster führt dieser Streuprozess zu einem diffusen Untergrund. Deshalb wird dieser auch als thermisch diffuse Streuung (TDS) bezeichnet. Die Stärke des thermischen Untergrundes hängt hauptsächlich von zwei Faktoren ab [67]:

1. Die Ordnungszahl des streuenden Probenatoms.
2. Die Probentemperatur.

Mit zunehmender Ordnungszahl der streuenden Probenatome wird der thermische Untergrund stärker. Mit abnehmender Probentemperatur nimmt die Vibrationsstärke der einzelnen Atome und damit der thermische Untergrund ab. Im Elektronenbeugungsmuster macht sich die thermisch diffuse Streuung, im Vergleich zur rein elastischen Elektronenbeugung, durch den zusätzlichen thermischen Untergrund und durch die Reduktion der Intensität der einzelnen Braggreflexe, um den Faktor $\exp(-2B)$ (B : Debye-Waller-Faktor), in den Elektronenbeugungsmustern bemerkbar. Der Debye-Waller-Faktor B ergibt sich zu [32]:

$$B = 8\pi^2 \langle u^2 \rangle \quad (2.11)$$

$\langle u^2 \rangle$ ist das Quadrat der mittleren Vibrationsamplitude des streuenden Atoms. Diese kann wie folgt berechnet werden [32]:

$$u^2 = \frac{3 h^2}{4 \pi^2 M k_B T_D} \left(\frac{1}{4} + \frac{T^2}{T_D^2} \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{x}{\exp(x) - 1} dx \right) \quad (2.12)$$

M ist die Atommasse und x ist eine Variable zur Berechnung des Integrals aus Gleichung 2.12. Die Berechnung der thermisch diffusen Streuung, insbesondere für große Streuwinkel ($> 50 \text{ mrad}$), basiert vielfach auf dem Einstein Modell [32,38,48]. Dieses interpretiert jedes Atom als einen harmonischen Oszillator, bei dem die Atome unabhängig voneinander schwingen. Im Vergleich zur rein elastischen Streuung, deren Intensitätsabnahme als Funktion des Streuwinkels Θ proportional zu Θ^{-4} ist, nimmt die Intensität der quasielastisch gestreuten Elektronen deutlich langsamer ab [68]. Hierdurch wird dem rein elastischen Elektronenbeugungsmuster mit zunehmendem Streuwinkel ein inelastischer Untergrund hinzugefügt. Für die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung in numerischen Simulationen existieren zwei wichtige Ansätze. Der eine Ansatz berücksichtigt deren Einfluß, indem für die Berechnung der Elektronenstreuamplitude für ein Probenatom zusätzlich der Debye-Waller-Faktor in der Form

$$f_e(s) = \frac{m_e e^2}{8\pi\epsilon_0 h^2} \frac{Z - f_x(s)}{s^2} \exp(-Bs^2) \quad (2.13)$$

berücksichtigt wird [32]. Dieser Ansatz wird vorwiegend für die Blochwellensimulation, aber auch für Multislice-Simulationen, eingesetzt. Der zweite wichtige Ansatz ist der sogenannte "Frozen Phonon"-Ansatz [48, 50, 69]. Dieser beruht auf der Tatsache, daß die mittlere Schwingungsdauer des Probenatoms gegenüber der Durchflugzeit der einfallenden Primärelektronen deutlich geringer ist. Deshalb sieht das einfallende Primärelektron nur ruhende Atome in einer Probe, was einer Momentaufnahme der Probe entspricht. Aufgrund der Tatsache, daß die Zeit für eine Messung im RTEM deutlich größer ist als die Durchflugzeit eines Elektrons, ist eine Mittelung über mehrere dieser Momentaufnahmen mit unterschiedlichen, statistischen Auslenkungen für alle Probenatome erforderlich. Nur dadurch ergibt sich ein korrektes Berechnungsergebnis. Auf die Implementierung des "Frozen Phonon"-Ansatzes in einen dynamischen Simulationsansatz wird in Kapitel 2.4 genauer eingegangen.

2.1.4 Streuung an kristallinen Proben

Für die Streuung der Elektronen an kristallinen Proben ist nicht deren Teilchencharakter sondern deren Wellencharakter entscheidend. Aus diesem Grund wird auch in Analogie zur Wellenoptik von der Elektronenbeugung gesprochen. Die Wellenlänge λ der Elektronen kann nach de Broglie mittels der Funktion

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2m_0c^2E_{kin} + E_{kin}^2}} \quad (2.14)$$

berechnet werden. E_{kin} ist die kinetische Energie, h ist das Plancksche Wirkungsquantum, c ist die Lichtgeschwindigkeit und m_0 ist die Ruhemasse des Elektrons. Anhand der Gleichung 2.14 zeigt sich sowohl der Teilchen- als auch der Wellencharakter der Elektronen. Die Wellenlänge der Primärelektronen des für die Messungen verwendeten 100 keV RTEM ist 0,0037 nm.

Aufgrund ihres Wellencharakters kann die Elektronenwelle im Kristall mit der Schrödingergleichung berechnet werden. Eine wichtige Grundlage für Berechnungen mit der Schrödingergleichung ist die Kenntnis über den Aufbau des Kristallgitters, welcher durch die 14 Bravais-Gittertypen beschrieben wird. Der Aufbau einer Einheitszelle wird bei den Bravais-Gittern durch 3 voneinander unabhängige Gittervektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 definiert. Der Ort \vec{r}_g der Einheitszelle innerhalb des Kristallgitters ist durch

$$\vec{r}_g = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + o\vec{a}_3 \quad (2.15)$$

festgelegt. Die Werte m , n , o stammen aus der Menge der positiven und negativen ganzen Zahlen. Jede Einheitszelle enthält mindestens ein Atom. Es können aber auch mehrere (p)

Atome in einer Einheitszelle enthalten sein. Der Ort \vec{r}_e der einzelnen Atome innerhalb einer Einheitszelle wird durch

$$\vec{r}_e = u_e \vec{a}_1 + v_e \vec{a}_2 + w_e \vec{a}_3 \quad (2.16)$$

definiert. Die Werte u_e , v_e und w_e geben die Position des Atoms e in der Einheitszelle an. u_e , v_e und w_e sind ≤ 1 und e kann die Werte $e = 1, \dots, p$ annehmen. Für die Berechnung der Elektronenbeugung wird in vielen Fällen nicht auf den Ortsraum sondern auf den hierzu reziproken Frequenzraum zurückgegriffen. Dazu wird das Kristallgitter im Ortsraum auf ein dazu reziprokes Gitter im Frequenzraum abgebildet. Hierzu werden die reziproken Gittervektoren \vec{a}_1^* , \vec{a}_2^* und \vec{a}_3^* definiert. Unter Berücksichtigung des Volumens der Einheitszelle $V_{EZ} = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ ergeben sich diese zu

$$\begin{aligned} \vec{a}_1^* &= \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_{EZ}} \\ \vec{a}_2^* &= \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_{EZ}} \\ \vec{a}_3^* &= \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_{EZ}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Mit diesen reziproken Vektoren läßt sich der reziproke Gittervektor \vec{g}_{hkl} zu

$$\vec{g}_{hkl} = h \vec{a}_1^* + k \vec{a}_2^* + l \vec{a}_3^* \quad (2.18)$$

bestimmen. h , k und l sind die Millerschen Indizes. Der Betrag des reziproken Gittervektors ist der Kehrwert des Netzebenenabstandes

$$|\vec{g}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (2.19)$$

und der Netzebenenabstand kann mit der Gitterkonstante a wie folgt berechnet werden:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2.20)$$

Aufbauend auf diesen Definitionen werden im Folgenden die kinematische und die dynamische Beugungstheorie genauer erläutert.

2.1.4.1 Die kinematische Beugungstheorie

Der einfachste Ansatz zur Beschreibung der Elektronenbeugung, von in Transmissionsrichtung gestreuten Elektronen, und der Entstehung von Elektronenbeugungsmustern ist die kinematische Beugungstheorie. Diese beruht auf den folgenden kurz aufgezeigten und diskutierten Annahmen:

1. Alle relativistischen Effekte werden vernachlässigt. Deshalb ergibt sich die relativistisch nicht korrigierte Wellenlänge λ_0 der Elektronen zu:

$$\lambda_0 = \frac{h}{\sqrt{2 m_0 E_{kin}}} \quad (2.21)$$

Diese Annahme führt zu einem Fehler in der Berechnung der Wellenlänge. Für eine Beschleunigungsspannung von 100 kV beträgt dieser ca. 5% [70].

2. Es findet eine rein elastische Streuung der Elektronen im Kristallgitter statt.
Ein großer Anteil der gestreuten Elektronen wird aber inelastisch gestreut. Deshalb ist mittels der kinematischen Beugungstheorie keine quantitative Analyse der Elektronenbeugung möglich.
3. Alle Elektronen werden nur einmal gestreut.
Aufgrund der Vernachlässigung von Mehrfachstreuungen in der kinematischen Beugungstheorie ist nur für sehr dünne Probedicken eine qualitative Intensitätsberechnung möglich [71].
4. Thermische Effekte wie z. B. Gitterschwingungen sind vernachlässigbar.
Dieses führt dazu, daß Effekte wie die Veränderung der Intensitäten in den Elektronenbeugungsmustern aufgrund der thermisch diffusen Streuung für die Analyse der Elektronenbeugung nicht berücksichtigt werden können.
5. Der Halbleiterkristall hat einen idealen Aufbau.
Damit sind, basierend auf der kinematischen Beugungstheorie, keine Asymmetrien in Halbleiterkristallen wie z. B. Materialübergänge oder Kristalldefekte berechenbar.

Im Folgenden wird die kinematische Beugungstheorie genauer erläutert. Eine auf ein Kristall treffende Elektronenwelle ψ_0 mit dem Wellenvektor \vec{k}_0 wird an einem Atom elastisch gestreut. Die um den Streuwinkel θ gestreute Elektronenwelle hat den Wellenvektor \vec{k} . Findet dieser Streuprozess an zwei unterschiedlichen Atomen mit dem Abstandsvektor \vec{r} statt, so hat die gestreute Elektronenwelle des einen Atoms und die ungestreute Elektronenwelle des anderen Atoms einen Phasenunterschied ϕ . Mit den Variablen

$$\vec{k}_0 = \frac{\vec{n}_0}{\lambda_0}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{n}}{\lambda}, \quad |\vec{k}_0| = |\vec{k}| = \frac{1}{\lambda} \quad (2.22)$$

läßt sich der Phasenunterschied ϕ zu

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{n} - \vec{n}_0) \cdot \vec{r} = 2\pi (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r} \quad (2.23)$$

bestimmen. Die Variablen \vec{n}_0 bzw. \vec{n} sind die Richtungsvektoren für die ungestreute bzw. die gestreute Elektronenwelle. Die Überlagerung aller in einer Richtung gestreuten Elektronenwellen von allen Gitteratomen führt zu einer resultierenden Elektronenwelle mit der Wellenfunktion ψ . Diese lautet:

$$\psi = \psi_0 \sum_{m=1}^{N_1} \sum_{n=1}^{N_2} \sum_{o=1}^{N_3} \sum_{k=1}^P \exp \left[2 \pi j \left(\vec{k} - \vec{k}_0 \right) \left(\vec{r}_g + \vec{r}_k \right) \right] \quad (2.24)$$

m , n , o und k sind Laufindizes und N_1 , N_2 und N_3 geben die Anzahl der Einheitszellen in den drei Raumrichtungen an. Die Gleichung 2.24 ist in zwei Anteile, die Strukturamplitude F und die Gitteramplitude G , zerlegbar:

$$\psi = \psi_0 F G \quad (2.25)$$

mit

$$F = \sum_{k=1}^P f_k(s) \exp \left[2 \pi j \left(\vec{k} - \vec{k}_0 \right) \vec{r}_k \right] \quad (2.26)$$

$$G = \sum_{m=1}^{N_1} \sum_{n=1}^{N_2} \sum_{o=1}^{N_3} \exp \left[2 \pi j \left(\vec{k} - \vec{k}_0 \right) \vec{r}_g \right] \quad (2.27)$$

Die Strukturamplitude F ist nur von den Positionen der einzelnen Atome in der Einheitszelle abhängig. Die Gitteramplitude G hängt nur von der Form der Einheitszelle ab. Eine konstruktive Interferenz der gestreuten Elektronenwellen findet nur dann statt, wenn der Exponent der Gitteramplitude ein ganzzahliges Vielfaches von 2π ist. Aus den Gleichungen 2.15, 2.26 und 2.27 resultiert die vektorielle Form der Laueschen Gleichung:

$$\left(\vec{k} - \vec{k}_0 \right) \vec{a}_i = h_i \quad (2.28)$$

h_i ist Element der positiven und negativen ganzen Zahlen und $i = 1, 2, 3$. Die Lauesche Gleichung ist nur dann erfüllt, wenn gilt:

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} \quad (2.29)$$

Dieses ist aber gerade das Braggsche Gesetz in der vektoriellen Form. Über die Gleichungen 2.19 und 2.22 ist dann das Braggsche Gesetz in der allgemein bekannten Form

$$2 d_{hkl} \sin \Theta_B = n\lambda \quad (2.30)$$

herleitbar. Sowohl mit der Gleichung 2.28 als auch mit der Gleichung 2.30 kann die Position der Intensitätsmaxima, die auch als Braggreflexe bezeichnet werden, bestimmt werden. Es

tragen nicht alle Gitterebenen zur Elektronenbeugung bei. Daraus resultiert eine Vereinfachung für die Berechnung der Streuamplitude [72]. Hier soll diese Vereinfachung anhand der Strukturamplitude F von $GaAs$ gezeigt werden.

$$F_{GaAs} = \left\{ f_{Ga} + f_{As} \exp \left[\pi j \frac{h + k + l}{2} \right] \right\} \quad (2.31)$$

$$\{ 1 + \exp[\pi j (h + k)] + \exp[\pi j (h + l)] + \exp[\pi j (k + l)] \}$$

f_{Ga} und f_{As} sind die Elektronenstreuamplituden für Ga und As . Zur Berechnung der Strukturamplitude von $GaAs$ resultieren aus Gleichung 2.32 die folgenden vier Fälle:

$$\begin{aligned} F_{GaAs} &= 4 (f_{Ga} \pm j f_{As}) & h, k, l \text{ geradzahlig} \\ F_{GaAs} &= 4 (f_{Ga} + f_{As}) & h, k, l = 4n \\ F_{GaAs} &= 4 (f_{Ga} - f_{As}) & h + k + l = 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ F_{GaAs} &= 0 & h, k, l \text{ geradzahlig oder ungeradzahlig} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Die Gleichung 2.32 bestätigt das nicht alle Gitterebenen zur Elektronenbeugung beitragen. Die Intensität der einzelnen Braggreflexe ist proportional zum Quadrat des Betrages der Strukturamplitude [71]. Damit zeigt die Gleichung 2.32, daß die Intensität der einzelnen Braggreflexe von der Streuamplitude der einzelnen Materialien abhängt.

Für Untersuchungen im RTEEM werden sehr dünne Kristalle verwendet, um diese noch durchstrahlen zu können. Dieses führt zu einer Aufweitung der reziproken Gitterpunkte. Deshalb ist eine Anregung von Braggreflexen auch bei einer geringen Abweichung \vec{S} von der Braggbedingung möglich, die Anregungsfehler genannt wird. Die so modifizierte Braggbedingung lautet:

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} + \vec{S} \quad (2.33)$$

Für die Untersuchung mittels des RTEEM, bei dem eine sehr dünne, scheibenförmige Probe untersucht wird, ergibt sich im reziproken Raum ein nadelförmiger Bereich. Die Ausrichtung des nadelförmigen Bereichs entspricht der Transmissionsrichtung der Elektronen im Ortsraum und dessen Länge ist proportional zur Probendicke [71]. Wird dieser Anregungsfehler für die Berechnung der Intensität des angeregten Braggreflexes berücksichtigt so ergibt sich diese mit $I_{\vec{g}} = \psi_{\vec{g}} \psi_{\vec{g}}^*$ zu [71]:

$$I_{\vec{g}} = I_0 \frac{\pi^2 \sin^2 (\pi t S_p)}{\xi_{\vec{g}}^2 (\pi S_p)^2} \quad (2.34)$$

I_0 ist die Intensität des Primärelektronenstrahls, t ist die Probendicke, S_p ist die Komponente des Anregungsfehlers in Transmissionsrichtung und $\xi_{\vec{g}}$ ist die Extinktionslänge des Braggreflexes. Die Extinktionslänge ist ein Maß für die Zunahme der Intensitätsamplitude des Braggreflexes. Berücksichtigt man in Gleichung 2.34 den sehr geringen Wert des

Anregungsfehlers und daß die Intensität eines Braggreflexes maximal die Intensität des Primärelektronenstrahls annehmen kann, so ist die maximale Probendicke gleich der Extinktionslänge des Braggreflexes.

Ein Elektronenbeugungsmuster enthält zwei weitere wichtige Anteile. Die sogenannten High-Order-Laue-Zone- oder auch kurz HOLZ-Linien und die Kikuchilinen bzw. Kikuchibänder. Gerade die Verteilung der Linienmuster ist charakteristisch für die Gitterstruktur der zu untersuchenden Probe. Daher eignen sich diese Linien insbesondere für die Bestimmung der Probenorientierung und der Gitterverspannung der zu untersuchenden Probe. Die HOLZ-Linie ist der Ort im Elektronenbeugungsmuster, an dem die Braggbedingung für einen Braggreflex höherer Ordnung erfüllt ist. Die Position dieser Linie läßt sich mittels des Braggschen Gesetzes aus Gleichung 2.30 ermitteln. Der Braggreflex höherer Ordnung entartet zu einer Linie mit maximaler Intensität. Ein linienförmiges Intensitätsmaximum wird auch als Überschußlinie bezeichnet. Da die Überschußlinie nach dem Braggschen Gesetz ihre Intensität aus der zentralen Braggscheibe erhält, ist in der zentralen Braggscheibe ein Intensitätsminimum sichtbar, welches zu dem Braggreflex höherer Ordnung korrespondiert. Ein linienförmiges Intensitätsminimum wird auch als Defizitlinie bezeichnet. Die Entstehung der Kikuchilinen ist ähnlich der Entstehung der Braggreflexe höherer Ordnung. Der Unterschied ist, daß die Elektronen erst inelastisch am Kristallgitter gestreut werden, bevor sie dann elastisch gestreut werden. Die inelastische Streuung ändert die Flugrichtung von einem Großteil der gestreuten Elektronen nur schwach. Die restlichen Elektronen werden stärker abgelenkt. Aufgrund des Energieverlustes bei der inelastischen Streuung verändern alle inelastisch gestreuten Elektronen ihre Wellenlänge. Nur wenn die inelastisch gestreuten Elektronen unter dem Braggwinkel Θ auf die Gitterebenen treffen und elastisch gestreut werden, entstehen die Kikuchilinen. Aus den schwach abgelenkten Elektronen resultiert die Überschußlinie und aus den stärker abgelenkten Elektronen resultiert die Defizitlinie. Trifft der Primärelektronenstrahl parallel zu den Gitterebenen auf die Probe, so entstehen statt einer Defizit- und einer Überschußlinie zwei Überschußlinien. Die Bestimmung der Position der Kikuchilinen und der HOLZ-Linien basiert auf der Gleichung 2.30 und der Gleichung

$$k_z \approx -\sqrt{k^2 - k_{xc}^2 - k_{yc}^2} \quad (2.35)$$

aus [32]. Dabei sind k_{xc} und k_{yc} die x - und y -Wellenkomponenten des zentralen, ungestreuten Primärelektronenstrahls, k ist der Betrag des einfallenden Wellenvektors und k_z ist der Veränderung des Wellenvektors in z -Richtung aufgrund des Anregungsfehlers. Für die Bestimmung der Position der Kikuchilinen in der kinematischen Beugungstheorie wird allgemein der Energieverlust aufgrund der inelastischen Streuung vernachlässigt [32]. Damit reduziert sich der Unterschied zwischen der Bestimmung der Kikuchilinen und der HOLZ-Linien auf die Unterscheidung des Ursprungs der elastisch gestreuten Elektronen. Für die

HOLZ-Linien ist das der fein fokussierte Primärelektronenstrahl und für die Kikuchilinen ist das eine, im weiten Winkel ausstrahlende, Elektronenquelle (inelastisches Streuzentrum) innerhalb des Kristalls [32].

Mittels der kinematischen Beugungstheorie ist es also möglich die Positionen von Braggreflexen, HOLZ-Linien und Kikuchilinen zu bestimmen und diese auch zu indizieren. Sie liefert auch Informationen über die Einstrahlrichtung des Primärelektronenstrahls sowie über die Orientierung und die Verspannung des Kristallgitters. Aufgrund der großen Probendicke für die RTEM-Untersuchungen, im Vergleich zum Gültigkeitsbereich der kinematischen Simulationsergebnisse, ist mit den gemachten Einschränkungen kein quantitativer Vergleich von Intensitäten in simulierten und gemessenen Elektronenbeugungsmustern möglich. Die korrekte Berechnung der Intensitäten von Elektronenbeugungsmustern kann nur mittels dynamischer Simulationen erfolgen.

2.1.4.2 Die dynamische Beugungstheorie

Die kinematische Beugungstheorie setzt die Einfachstreuung voraus. Dadurch können nur für sehr dünne Proben, mit einer Probendicke von wenigen Nanometern, die Intensitäten in den Elektronenbeugungsmustern qualitativ bestimmt werden. Nur mit der dynamischen Beugungstheorie ist die korrekte Berechnung der Intensitätsverteilung in Elektronenbeugungsmustern, nach Betrag und Position, möglich. Deshalb ist erst durch den Einsatz der dynamischen Beugungstheorie ein vollständig quantitativer Vergleich von experimentellen und simulierten Elektronenbeugungsmustern möglich. Auch die dynamische Beugungstheorie basiert auf einigen Annahmen:

1. Relativistische Effekte werden berücksichtigt.

Damit ergibt sich die Wellenlänge zu:

$$\lambda = \lambda_0 \left(\sqrt{1 + \frac{e E}{2 m_0 c^2}} \right)^{-1} \quad (2.36)$$

Die Wellenlänge λ_0 ist die nicht relativistisch korrigierte Wellenlänge eines Elektrons, die in Gleichung 2.21 berechnet wird. m_0 ist die Ruhemasse eines Elektrons, E ist die Energie des Elektron, e ist die Elementarladung und c ist die Lichtgeschwindigkeit.

2. Elektronenenergieverluste im Kristallgitter werden berücksichtigt.

Somit ist auch der Einfluß von Effekten wie den Plasmonenanregungen, den Interbandübergängen sowie der Ionisation von Probenatomen auf die Elektronenbeugung bestimmbar. Damit sind auch für spezielle Energiebereiche Elektronenbeugungsmuster berechenbar.

3. Die Mehrfachstreuung von Elektronen ist erlaubt.

Diese Festlegung berücksichtigt die Tatsache, daß selbst in Proben mit einer Probendicke von nur wenigen Nanometern durchaus Mehrfachstreuungen von Elektronen auftreten. Damit ist dann im Gegensatz zur kinematischen Beugungstheorie auch die Elektronenbeugung in dickeren Proben berechenbar.

4. Thermische Effekte werden berücksichtigt.

Damit ist der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf die Elektronenbeugung bestimmbar. Im Speziellen läßt sich damit der thermische Untergrund in den Elektronenbeugungsmustern und die daraus resultierende Intensitätsreduktion der Braggreflexe berechnen.

5. Rückgestreute Elektronen können vernachlässigt werden.

Diese Einschränkung ist insofern zulässig, da die zu untersuchenden Proben sehr dünn sind und die Beschleunigungsspannung der Primärelektronen sehr groß ist. Hierdurch ist der Anteil an rückgestreuten Elektronen äußerst gering.

Es existieren mehrere Berechnungsansätze für die dynamische Beugungstheorie. Die am häufigst verwendeten Ansätze sind die Blochwellentheorie und der Multislice-Ansatz. Auf diese beiden Ansätze wird im Folgenden eingegangen.

2.1.4.2.1 Die Blochwellentheorie

Die Blochwellentheorie beruht auf einem Berechnungsansatz von Bethe [42]. In diesem Ansatz wird die sich im Kristall ausbreitende Elektronenwelle aus der Superposition der Blochwellen im Kristall gebildet. Ausgangspunkt für die Elektronenbeugungsberechnung ist die eindimensionale Schrödingergleichung:

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} (E + eU(\vec{r})) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.37)$$

$U(\vec{r})$ ist das Kristallpotential und E ist die Energie des einfallenden Elektrons. Das Kristallpotential ist die Superposition aller Atompotentiale eines Kristallgitters. Für diesen Ansatz wird das Kristallgitter in zwei Raumrichtungen als unendlich ausgedehntes periodisches Kristallgitter vorausgesetzt. Daher ist das Kristallpotential periodisch und läßt sich als Fourierreihe entwickeln [32]:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} U_{\vec{g}} \exp(2\pi j \vec{g} \vec{r}) \quad (2.38)$$

$U_{\vec{g}}$ ist der dynamischen Strukturfaktor. Dieser ergibt sich zu [32]:

$$U_{\vec{g}} = \frac{2me}{h^2} \sum_{\alpha} V_{\vec{g}}(s) \exp(2\pi j \vec{g} \vec{r}_{\alpha}) \quad (2.39)$$

$V_{\vec{g}}$ ist der Fourierkoeffizient des Kristallpotentials, α ist ein Laufindex und $s = \frac{|\vec{g}|}{2}$. Der Fourierkoeffizient des Kristallpotentials bestimmt sich zu [32]:

$$V_{\vec{g}} = \frac{e}{16\pi^3\epsilon_0 V_{EZ}} \sum_k f_{e,k}(s) \exp(-B_k S^2) \exp(-2\pi j \vec{g} \vec{r}_k) \quad (2.40)$$

V_{EZ} ist das Volumen der Einheitszelle, k ist der Laufindex für die Atome in der Einheitszelle, B_k ist der Debye-Waller-Faktor von Atom k , $f_{e,k}(s)$ ist die Elektronenstreuamplitude von Atom k und \vec{r}_k ist die Position von Atom k innerhalb der Einheitszelle. Durch den Debye-Waller-Faktor wird der Einfluß der thermischen Bewegung der einzelnen Atome im Kristallgitter berücksichtigt. Die Lösung der Schrödingergleichung ist eine Superposition aller sich im Kristall ausbreitenden Blochwellen $\psi_B(\vec{r})$ und kann mittels der Gleichung

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j c^{(j)} \psi_B^{(j)}(\vec{r}) \quad (2.41)$$

bestimmt werden [42]. Die Anregungsamplitude $c^{(j)}$ der Blochwellen läßt sich aus den Grenzbedingungen ermitteln, die sich durch den Kristallaufbau ergeben. Die Blochwellentheorie geht von einem periodischen Aufbau des Kristallgitters aus. Daher sind auch die Blochwellen als Fourierreihe in der Form

$$\psi_B^{(j)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\left[-2\pi i \left(\vec{k}^{(j)} + \vec{g}\right) \vec{r}\right] \quad (2.42)$$

entwickelbar. $C_{\vec{g}}^{(j)}$ ist die Anregungsamplitude der Teilwelle einer Blochwelle. Der Einfluß des Übergangs der Elektronenwelle vom Vakuum in das Kristallgitter wird durch die Wellenzahl K berücksichtigt. Diese ergibt sich wie folgt:

$$K = \frac{\sqrt{2m(E_0 + eU_0)}}{h} \quad (2.43)$$

E_0 ist die Energie der Elektronen des Primärelektronenstrahls und U_0 ist das mittlere Kristallpotential. Werden die Gleichungen 2.38, 2.39, 2.42 und 2.43 in die Gleichung 2.37 eingesetzt, so ergibt sich die grundlegende Gleichung für die dynamische Beugungstheorie, basierend auf der Blochwellentheorie [32]:

$$\left[K^2 - \left(\vec{k}^{(j)} + \vec{g}\right)^2 \right] C_{\vec{g}}^{(j)} + \sum_{\vec{h}} U_{\vec{g}-\vec{h}} C_{\vec{h}}^{(j)} = 0 \quad (2.44)$$

Die Blochwellen sind Eigenwertlösungen der Schrödingergleichung. Für die Lösung von Eigenwertproblemen spielen die Randbedingungen eine wichtige Rolle. Die wichtigste Randbedingung ist die Stetigkeitsbedingung für die Teilchenwelle an der Kristalloberfläche. Aus dieser Bedingung resultiert, daß die Tangentialkomponenten der Wellenvektoren

$$\vec{k}_t^{(j)} = \vec{k}_t = \vec{k}_{0,t} \quad (2.45)$$

übereinstimmen müssen [32]. $\vec{k}^{(j)}$ ist der Wellenvektor einer Blochwelle. Die Definition

$$\vec{k}^{(j)} = \vec{k} + \gamma^{(j)} \vec{n}_K \quad (2.46)$$

berücksichtigt die Stetigkeitsbedingung aus Gleichung 2.45. \vec{n}_K repräsentiert die Oberflächennormale des Kristalls und entspricht der Einfallrichtung des Primärelektronenstrahls. Wegen der endlichen Dicke der zu untersuchenden Proben ist auch für die Blochwellentheorie die Einführung eines Anregungsfehlers unumgänglich [32].

$$2K S_{\vec{g}} = K^2 - \left(\vec{k} + \vec{g}\right)^2 \quad (2.47)$$

$S_{\vec{g}}$ ist der Betrag des Anregungsfehlers. Mit den Gleichungen 2.45, 2.46, 2.47, der Beziehung $k_n = \vec{k} \vec{n}_K$, der Näherung $\vec{g} \vec{n}_K \approx 0$ und der Vernachlässigung der rückgestreuten Elektronen $(\gamma^{(j)})^2 \approx 0$ ergibt sich [32]:

$$2K S_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)} + \sum_{\vec{h}} U_{\vec{g}-\vec{h}} C_{\vec{h}}^{(j)} = 2K_{\vec{n}} \gamma^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j)} \quad (2.48)$$

In der Matrixform lautet Gleichung 2.48:

$$\begin{pmatrix} 0 & \cdots & U_{-\vec{g}} & U_{-\vec{h}} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ U_{\vec{g}} & \cdots & 2K S_{\vec{g}} & U_{\vec{g}-\vec{h}} & \\ U_{\vec{h}} & \cdots & U_{\vec{h}-\vec{g}} & 2K S_{\vec{h}} & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\vec{g}}^{(j)} \\ C_{\vec{h}}^{(j)} \\ \vdots \end{pmatrix} = 2k_{\vec{n}} \gamma^{(j)} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\vec{g}}^{(j)} \\ C_{\vec{h}}^{(j)} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

Diese Gleichung ist vom Typ:

$$\mathbf{A} \vec{C}^{(j)} = 2K_{\vec{n}} \gamma^{(j)} \vec{C}^{(j)} \quad (2.50)$$

Zur Lösung der Schrödingergleichung müssen die Eigenwerte $\gamma^{(j)}$ und die Eigenvektoren $\vec{C}^{(j)}$ der Gleichung 2.49 bestimmt werden.

Die hier vorgestellte Blochwellentheorie für die dynamische Elektronenbeugungstheorie berücksichtigt nur die rein elastische Streuung von Elektronen und den Einfluß von thermischen Effekten auf die Elektronenbeugung. Es existieren verschiedene Ansätze, mit denen auch Effekte wie die Absorption [32, 73] und inelastische Effekte [32, 47] in der Blochwellentheorie berücksichtigt werden können. Erst dadurch werden quantitative Vergleiche zwischen experimentellen und berechneten Elektronenbeugungsergebnissen möglich.

Ein Vorteil der Blochwellentheorie ist, daß sie sehr einfach in ein Simulationsprogramm umgesetzt werden kann. Die einzige Schwierigkeit ist dabei die Eigenwertberechnung, für die es aber genügend numerische Ansätze gibt [74]. Darüber hinaus sind mittels der Blochwellentheorie auch viele physikalische Effekte, wie die Abhängigkeit der Intensität von der

Einstrahlrichtung und der Materialdicke, erklärbar [32]. Der Nachteil der Blochwellentheorie ist, daß für die Berechnung der Blochwellen ein periodisches Kristallgitter vorausgesetzt wird. Dieses macht die Berücksichtigung von aperiodischen Effekten im Kristallgitter, wie Materialübergänge, Gitterfehler, usw., sehr kompliziert und aufwendig, wenn nicht sogar unmöglich.

2.1.4.2.2 Der Multislice-Ansatz

Die Blochwellentheorie setzt den zu untersuchenden Kristall als periodisches, dreidimensionales Objekt voraus, wofür die dreidimensionale Potentialfunktion aus der Überlagerung der Atompotentialfunktionen berechnet wird. Der von Cowley und Moodie in [43] vorgestellte Multislice-Ansatz geht einen völlig anderen Weg. Im Rahmen dieses Ansatzes wird ein Kristall senkrecht zur Transmissionsrichtung in dünne Scheiben, die sogenannten Slices, mit einer Dicke Δz zerlegt. Zur korrekten Berechnung der Ausbreitung hochenergetischer Elektronen innerhalb einer Probe sollte Δz maximal die Dicke einer Atomlage (Monolage) haben. Durch die sehr geringe Scheibendicke wirkt diese Scheibe für die einfallenden Elektronenwellen wie ein zweidimensionales Phasenobjekt. Deshalb kann die sich aus der Überlagerung der Atompotentiale ergebende dreidimensionale Potentialfunktion der Scheibe auf eine zweidimensionale Potentialfunktion projiziert werden. Die zweidimensionale Potentialfunktion ist für jede Scheibe berechenbar. Es wird vorausgesetzt, daß der Raum zwischen den einzelnen Atomlagen potentialfrei ist. Wird der Grenzfall betrachtet, d. h. der Kristall wird in unendlich viele dünne Scheiben zerlegt, so liefert der Multislice-Ansatz die gleichen Ergebnisse wie andere auf der dynamischen Beugungstheorie basierende Ansätze [48].

Die Beschreibung der Elektronenbeugung mittels des Multislice-Ansatzes kann in zwei grundsätzliche Schritte unterteilt werden:

1. Die Elektronenwelle trifft auf eine Scheibe und die Veränderung der Elektronenwelle wird mittels der zweidimensionalen Potentialfunktion dieser Scheibe berechnet.
2. Die Elektronenwelle breitet sich zwischen den Scheiben aus.

Diese Schritte werden solange wiederholt, bis die Elektronenwelle aus dem Kristall austritt.

Die Wirkung einer Scheibe als zweidimensionales Phasenobjekt wird von dem Multislice-Ansatz mittels der Transmissionsfunktion $t(x, y)$ beschrieben. Diese ergibt sich zu:

$$t(x, y) = \exp(-iv_z(x, y)) \quad (2.51)$$

$v_z(x, y)$ ist die in die Ebene projizierte Potentialfunktion. Diese ergibt sich zu [51]:

$$v_z(x, y) = -\frac{2\pi}{E\lambda_0} \frac{E + m_0c^2}{E + 2m_0c^2} \int v(x, y, z) dz \quad (2.52)$$

E ist die Energie der sich ausbreitenden Elektronen, m_0 ist deren Ruhemasse und $v(x, y, z)$ ist die dreidimensionale Atompotentialfunktion der Scheibe. Für die zweidimensionale Fouriertransformierte der projizierten zweidimensionalen Potentialfunktion $V_z(\vec{k})$ gilt [51]:

$$V_z(\vec{k}) = \lambda_0 \frac{m}{m_0} \frac{1}{l_a l_b} \sum_j \left[f_{e,j}(k) \exp\left(2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}_j\right) \right] \quad (2.53)$$

j ist der Laufindex für die Atome einer Scheibe, \vec{x}_j ist die Koordinate von einem Atom in der Scheibe, $|\vec{k}| = k = \frac{s}{\lambda}$ und l_a, l_b sind die Kantenlängen der Scheiben im Realraum. Die auf die Scheibe treffende Elektronenwelle erfährt durch die Transmissionsfunktion eine Phasenänderung. Die Ausbreitung der Elektronenwelle zwischen den einzelnen Scheiben, mit dem Abstand Δz , wird mit der Ausbreitungsfunktion $p(x, y, \Delta z)$ beschrieben [51]:

$$p(x, y, \Delta z) = \exp\left(-j\pi \frac{x^2 + y^2}{\lambda \Delta z}\right) \quad (2.54)$$

Die Ausbreitung der Elektronenwelle im Ortsraum entspricht einer Phasenänderung, die im Ortsraum als Faltung beschrieben wird. Durch den Übergang in den Fourierraum kann diese Faltung in eine einfache Multiplikation umgewandelt werden. Für die Berechnung der Faltung wird die Fouriertransformierte der Ausbreitungsfunktion $P(\vec{k}, \Delta z)$ verwendet:

$$P(\vec{k}, \Delta z) = \exp\left(-i\pi \Delta z \lambda |\vec{k}|^2\right) \quad (2.55)$$

Damit kann die Elektronenwelle nach Verlassen der n -ten Scheibe mit der folgenden, für den Multislice-Ansatz grundlegenden Gleichung beschrieben werden:

$$\psi_{n+1}(x, y) = [\psi_n(x, y) * p(x, y)] t_n(x, y) \quad (2.56)$$

Durch den Einsatz der Fouriertransformation ergibt sich die Gleichung 2.56 zu:

$$\Psi_{n+1}(x, y) = \left[\Psi_n(\vec{k}) \cdot P(\vec{k}, \Delta z) \right] * T_n(x, y) \quad (2.57)$$

Hierbei sind T , Ψ und P die Fouriertransformierten von t , ψ und p .

Der hier vorgestellte Multislice-Ansatz für die dynamische Elektronenbeugungstheorie berücksichtigt nur die rein elastische Streuung von Elektronen. Auch für diesen theoretischen Ansatz und seine spätere Umsetzung in ein Simulationsprogramm ist der Einfluß von thermischen Effekten und Absorptionseffekten, sowie der Einfluß der inelastischen Streuung auf die Elektronenbeugung, zu berücksichtigen. Denn erst dadurch ist ein quantitativer Vergleich zwischen Simulation und Experiment möglich. Für den Multislice-Ansatz können hierzu verschiedene Ansätze verwendet werden. Einerseits sind dies Ansätze die Absorptionspotentiale für die Berücksichtigung inelastischer Effekte verwenden [32, 44–47]. Diese inelastischen Effekte können aber auch mittels analytischer Funktionen in den Multislice-Ansatz eingebunden werden [48, 49]. Ein äußerst erfolgreicher Ansatz ist der Ansatz aus [50]. Dieser basiert

auf dem sogenannten "Frozen Phonon"-Ansatz und berücksichtigt den Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf die Elektronenbeugung. Die mit diesem Ansatz berechenbaren Elektronenbeugungsmuster entsprechen energiegefilterten RTEM-Elektronenbeugungsmustern. Die mit diesem Ansatz erzielten Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Es ist z. B. mit diesem Ansatz die Vibrationsamplitude von Siliziumatomen mit einer Abweichung von nur 2 % im Vergleich zu Röntgenbeugungsergebnissen bestimmt worden [52]. Dieses Ergebnis ist auch aufgrund der mit einem RTEM erzielbaren Ortsauflösung, die im Vergleich zu Röntgenbeugungsmessungen um einige Zehnerpotenzen besser ist, hervorragend. Dieser Ansatz wird auch zur Ordnungszahl-Kontrastsimulation eingesetzt [54, 55]. Auch hierbei ergeben sich sehr gute Übereinstimmungen zwischen Simulation und Experiment.

Die oben gemachten Einschränkungen und die gezeigte Vorgehensweise bei der Elektronenbeugungsberechnung weisen bei genauerer Betrachtung auf die besonderen Vorteile des Multislice-Ansatzes hin. Durch die Aufteilung des Kristalls in einzelne Scheiben ist es möglich, z. B. die Abstände einzelner Scheiben (Δz) zu variieren oder die Scheiben eines Kristalls in aperiodischer Reihenfolge zu sortieren um Stapelfehler zu untersuchen [58]. Für die Berechnung der Atompotentialfunktionen der Scheiben erfolgt eine Superposition der einzelnen Atompotentiale innerhalb der Scheiben. Es wird aber keine periodische Kristallstruktur, wie bei der Blochwellentheorie, vorausgesetzt. Dieses bedeutet, daß auch aperiodische Effekte wie Materialübergänge und Defekte ohne größeren Aufwand in den Berechnungen berücksichtigt werden können. Auch für den Multislice-Ansatz sind die obigen formellen Grundlagen sehr einfach in ein Simulationsprogramm umsetzbar. Für die Berechnung der Fouriertransformation stehen eine Vielzahl von numerischen Berechnungsansätzen zur Verfügung [74].

2.1.5 Die Entstehung von Elektronenbeugungsmustern

In Abbildung 2.1 sind die für diese Arbeit entscheidenden Elektron-Festkörper-Wechselwirkungsprodukte dargestellt. Dieses sind die ungestreuten, sowie die elastisch und inelastisch gestreuten Elektronen. Diese treffen auf ein Medium, den sogenannten Leuchtschirm, auf dem das Elektronenbeugungsmuster sichtbar wird. Dieser Leuchtschirm besteht ganz oder zu Teilen aus einem Material, welches durch die auftreffenden Elektronen zur Abgabe von Licht angeregt wird. Im Einzelnen geschieht dabei folgendes: Zuerst trifft ein von der Probe kommendes Elektron auf ein Atom des Leuchtschirmmaterials und gibt daran seine kinetische Energie ab. Durch die vom Elektron abgegebene Energie werden ein oder mehrere Elektronen in eine höhere Atomschale angehoben und das Atom gelangt in einen angeregten Zustand. Die so angehobenen Elektronen kehren nach einer vom Material abhängigen

Zeit, auf die ursprüngliche Atomschale unter Abgabe von Energie in Form von Licht zurück. Durch den regelmäßigen kristallinen Aufbau der Probe, und der daraus resultierenden Häufigkeit mit der Elektronen unter einem bestimmten Winkeln gestreut werden, kommt es zu einer Häufung von auf den Leuchtschirm treffenden Elektronen in bestimmten Bereichen des Leuchtschirms. Dadurch nimmt in diesen Bereichen die Intensität des Lichtes zu. Als leuchtendes Material für diesen Leuchtschirm wird Phosphor in dem vom Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik eingesetzten RTEM verwendet.

2.2 Physikalische Grundlagen der Abbildungstechniken

Im Folgenden wird auf die für diese Arbeit relevanten physikalischen Grundlagen und Ursachen der Abbildungstechniken eingegangen, die für diese Arbeit von Interesse sind.

2.2.1 Hellfeldabbildung und Dunkelfeldabbildung

Für die Hellfeldabbildung werden nur die ungestreuten Elektronen detektiert. Sie dient zur Bestimmung von Defekten im Kristallaufbau. Jede Veränderung im Kristallaufbau führt zu einer Veränderung im Kristallpotential. Dieser Zusammenhang ist deutlich anhand der Gleichungen 2.40 und 2.53 zu erkennen. Das Kristallpotential ist aber von entscheidender Bedeutung für die Flugbahn der Elektronen bzw. die Ausbreitung einer Elektronenwelle innerhalb des Kristallgitters, was die eindimensionale Schrödingergleichung in Gleichung 2.37 sehr gut veranschaulicht. Damit führt die lokale Veränderung in der Kristallstruktur zu einer Veränderung in der Ausbreitungsrichtung der Elektronen bzw. der Elektronenwelle im Kristallgitter. Jeder Defekt im Kristall führt zu einer lokalen Veränderung der Kristallstruktur. Aus dieser folgt eine Veränderung im lokalen Kristallpotential, wodurch sich die Ausbreitungsrichtung der Elektronen an dieser Stelle im Kristallgitter ändert. Diese Veränderung führt zu einer Veränderung in der Intensitätsverteilung der Hellfeldabbildung. Anhand dieses einfachen, prinzipiellen Beispiels ist besonders deutlich die Eignung der Hellfeldabbildung zur Defektcharakterisierung erkennbar.

Im Gegensatz zur Hellfeldabbildung werden für die Dunkelfeldabbildung nicht die ungestreuten Elektronen sondern die in einem bestimmten Winkel gestreuten Elektronen detektiert. Die so detektierten Elektronen liefern Informationen über Defekte in der Kristallrichtung die dem Streuwinkel der gestreuten Elektronen entspricht. Ansonsten gelten die gleichen Gesetzmäßigkeiten wie bei der Hellfeldabbildung.

2.2.2 Der Ordnungszahl-Kontrast

Mittels Ordnungszahl-Kontrastabbildungen können Veränderungen in der Materialzusammensetzung und zum Teil auch die Materialien direkt bestimmt werden. Der Ordnungszahl-Kontrast beruht auf der Tatsache, daß Elektronen von Atomen mit unterschiedlichen Ordnungszahlen unterschiedlich stark gestreut werden. Der Grund hierfür ist, daß sich die Atome jeweils aus einem positiv geladenen Atomkern und der negativ geladenen Atomhülle zusammensetzen. In Abhängigkeit von der Ordnungszahl variiert die Anzahl der Protonen im Atomkern und die Anzahl der Elektronen in der Atomhülle sowie die Struktur der Atomhülle. Da jedes geladene Teilchen ein Potentialfeld besitzt, ergibt sich aus der Superposition der Potentialfelder der Protonen und Elektronen eines Atoms, eine für jedes Atom spezifische Potentialverteilung. Besonders anschaulich ist diese Abhängigkeit für weitwinklig gestreute Elektronen. Diese passieren den Atomkern in einem sehr kleinen Abstand und werden nur durch das Coulombpotential des Atomkerns abgelenkt. In diesem Fall wird von der Rutherford-Streuung gesprochen, die mit dem differentiellen Streuquerschnitt aus Gleichung 2.3 berechnet werden kann. Entscheidend für den Ordnungszahl-Kontrast sind die weitwinklig elastisch gestreuten Elektronen. Dieses ist von besonderem Vorteil, da mit zunehmendem Streuwinkel der Anteil der inelastisch gestreuten Elektronen stetig abnimmt und der Anteil der elastisch gestreuten Elektronen stetig zunimmt. In einem Kristallgitter befinden sich eine Vielzahl von Atomen. Die Atompotentiale der einzelnen Atome überlagern sich zu dem sogenannten Kristallpotential. Dieses führt bei Messungen in Abhängigkeit vom Primärelektronenstrahldurchmesser quasi zu einer Mittelung der Ordnungszahl. Damit ist aber nicht mehr unbedingt die jeweilige Ordnungszahl sondern nur noch die Variation der Materialzusammensetzung bestimmbar. Sind jedoch die Materialien aus denen die Probe besteht und der prinzipielle Aufbau der Probe bekannt, so kann aufgrund der Intensitätsverteilung in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung durchaus auf die Materialzusammensetzung geschlossen werden.

2.2.3 Die Kontrasttransferfunktion

Für hochauflösende Abbildungen ist die genaue Kenntnis der Abbildungsbedingungen von entscheidender Bedeutung. Dazu wird die Kontrasttransferfunktion verwendet, die eine Probe in erster Näherung als ein kohärentes Phasenobjekt betrachtet. Somit ist diese Näherung prinzipiell nur für sehr dünne Proben zulässig. Mit der Kontrasttransferfunktion ist der Phasenunterschied bestimmbar, welcher zwischen einer sich nahe der Atomsäule ausbreitenden und einer sich weiter entfernt von der Atomsäule ausbreitenden Elektronenwelle besteht. Dieser Phasenunterschied ist entscheidend für die Entstehung des Bildkontrastes. Mittels

der Kontrasttransferfunktion kann eine Aussage über die theoretisch maximale Auflösung einer elektronenmikroskopischen Anordnung, wie einem RTEM, gemacht werden. Für deren Berechnung werden verschiedene physikalische Einflußgrößen berücksichtigt. Diese werden vor allem von dem für die Messungen verwendeten Elektronenmikroskop und von der Struktur der zu untersuchenden Probe beeinflusst [38]. Die in dieser Arbeit untersuchten Proben haben in der Regel eine periodische Kristallstruktur, deren Einfluß auf die Kontrasttransferfunktion vernachlässigbar ist [58]. Daher ist nur der Einfluß des Elektronenmikroskops auf die Kontrasttransferfunktion von Bedeutung. Dessen Eigenschaften werden im Speziellen von den Eigenschaften des Linsensystems und vom Elektronenstrahl bestimmt. Das Linsensystem beeinflusst durch Linsenfehler, wie dem sphärischen und dem chromatischen Linsenfehler und durch die Defokussierung die Kontrasttransferfunktion [38]. Der Elektronenstrahl wird durch die Stabilität der Spannungsversorgung der Elektronenquelle und dessen Art beeinflusst. Insbesondere für hohe Auflösungen haben die oben genannten Einflußgrößen eine große Bedeutung, da sie das erzielbare maximale Signal dämpfen und somit einen negativen Einfluß auf das erzielbare Signal-Rausch-Verhältnis ausüben.

2.3 Meßtechnische Grundlagen und die experimentellen Methoden

2.3.1 Das Funktionsprinzip des RTEM

In der Abbildung 2.3 ist der schematische Aufbau eines RTEM mit den wichtigsten Funktionsgruppen dargestellt. Das RTEM wird unter Ultra-Hoch-Vakuum (UHV) betrieben. Nur unter dieser Bedingung kann die Elektronenquelle optimal arbeiten.

Der in Abbildung 2.3 dargestellte schematische RTEM-Aufbau kann in zwei Bereiche unterteilt werden. Der erste Bereich ist der Bereich der elektronenoptischen Säule, der von der Elektronenquelle bis zur Probe reicht. Im zweiten Bereich, der von der elektronenoptischen Säule aus gesehen hinter der Probe liegt, befinden sich die Meßeinrichtungen.

Als erstes wird auf die wichtigsten Komponenten der elektronenoptischen Säule eingegangen.

Die Elektronenquelle ist eine kalte Feldemissionsquelle, die aus einer einkristallinen, in der {310}-Orientierung orientierten Wolframspitze besteht. Diese ist einem sehr starken elektrischen Feld ($10^5 \frac{V}{m}$) ausgesetzt und wird bei Raumtemperatur betrieben. Die kalte Feldemissionsquelle zeichnet sich gegenüber einer thermischen Elektronenquelle, insbesondere für kleinere Primärelektronenstrahldurchmesser, durch ein deutlich besseres Signal-Rausch-

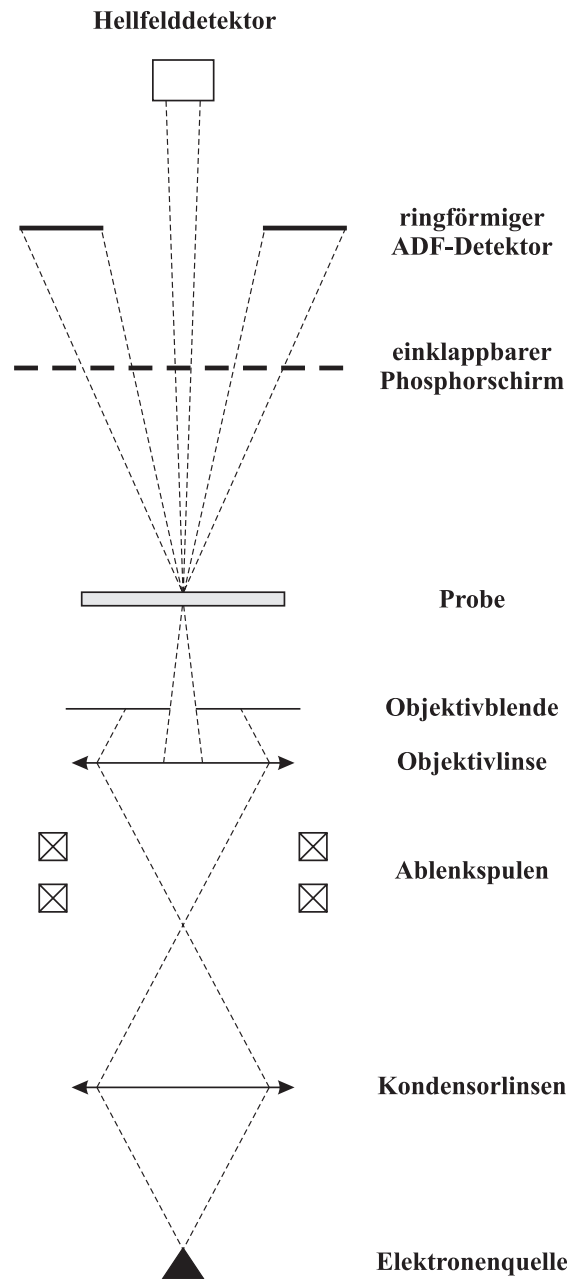


Abbildung 2.3: Schematischer Aufbau des RTEM

Verhältnis aus [75]. Gleichzeitig besitzen die von der kalten Feldemissionsquelle emittierten Elektronen eine sehr kleine Aufweitung der Energieverteilung, die aber mit steigender Temperatur proportional zu $k_B \cdot T$ zunimmt. Der entscheidende Vorteil dieser Elektronenquelle ist der annähernd monochromatische Primärelektronenstrahl, durch den erst die kohärente Überlagerung von Elektronenwellen ermöglicht wird. Das ist von entscheidender Bedeutung für die RTEM-Beugungs- und Abbildungstechniken.

Der von der Elektronenquelle emittierte Primärelektronenstrahl wird mit den magnetischen

Kondensorlinsen und der Objektivlinse auf die Probe fokussiert. Mittels der Ablenkspulen kann die Probe im Zeilensprungverfahren mit dem Primärelektronenstrahl gerastert werden. Der Öffnungswinkel des Primärelektronenstrahls wird durch den Durchmesser der Objektivblendenöffnung bestimmt. Das verwendete RTEM stellt vier verschiedene Objektivblenden mit einem Öffnungswinkel von $\phi_{Blende} = 26,6/18,5/13,3/6,65 \text{ mrad}$ zur Verfügung.

In den Strahlengang des Elektronenmikroskops ist hinter der Probe ein Phosphorschirm (Leuchtschirm) einklappbar. Auf diesen Schirm treffen die von der Probe emittierten Elektronen auf. Die Energie der auftreffenden Elektronen wird in Licht umgewandelt und auf dem Phosphorschirm wird ein sogenanntes Elektronenbeugungsmuster sichtbar, welches der Winkelverteilung der von der Probe gebeugten und gestreuten Elektronen entspricht. Im Folgenden Kapitel wird auf die experimentellen Elektronenbeugungstechniken genauer eingegangen.

Der ringförmige Dunkelfelddetektor (Annular-Dark-Field-Detektor $\hat{=}$ ADF) dient zur Ordnungszahl-Kontrastmessung. Er besteht aus einer Szintillator-Photomultiplier-Kombination. Mit diesem Detektor sind in einem großen Winkel gestreute Elektronen detektierbar und können aufintegriert werden. Das Resultat der Aufintegration ist das Ordnungszahl-Kontrastsignal. Der Detektionswinkel des verwendeten ringförmigen Dunkelfelddetektors in dem verwendeten RTEM reicht von $\beta_{min} = 60 \text{ mrad}$ bis $\beta_{max} = 180 \text{ mrad}$ [58].

2.3.2 Experimentelle Elektronenbeugungstechniken im RTEM

Alle experimentellen Elektronenbeugungstechniken im RTEM basieren auf ein und demselben Funktionsprinzip. Der mehr oder weniger stark fokussierte Primärelektronenstrahl trifft auf eine Probe und dessen Elektronen treten in Wechselwirkung mit der Probe. Es sind drei Fokussierungsarten denkbar:

1. Der Primärelektronenstrahl ist auf die Probe fokussiert.
2. Der Brennpunkt des Primärelektronenstrahls befindet sich vor der Probe, dann treffen divergierende Elektronen auf die Probe, d. h. der Primärelektronenstrahl trifft mit einem bestimmten Divergenzwinkel auf die Probe.
3. Der Brennpunkt des Primärelektronenstrahls befindet sich hinter der Probe, dann treffen konvergierende Elektronen auf die Probe, d. h. der Primärelektronenstrahl trifft mit einem bestimmten Konvergenzwinkel auf die Probe.

Dieses zeigt, daß für den Primärelektronenstrahl prinzipiell der Divergenzwinkel äquivalent zum Konvergenzwinkel ist, da der einzige Unterschied zwischen diesen beiden Winkeln nur die Position des Brennpunktes im Verhältnis zur Probe ist. Deswegen wird im Fall der Elektronenbeugung im Allgemeinen auch von der konvergenten Elektronenbeugung gesprochen.

Alle Elektronen, die in Transmissionsrichtung die Probe verlassen und auf den Leuchtschirm treffen, werden entsprechend ihrem Beugungswinkel aufgezeichnet. Die Aufzeichnung kann mittels lichtempfindlichen Films oder mit einer TV-Kamera erfolgen. Verwertbare Elektronenbeugungsmuster können nur von räumlich periodischen Objekten gemacht werden. Diese enthalten Informationen über die Symmetrie und die Periodizität des zu untersuchenden Objektes. Die mit einem RTEM gemachten Elektronenbeugungsaufnahmen basieren auf zwei unterschiedlichen Betriebsarten:

1. Der Primärelektronenstrahl ist fokussiert, d. h. der Divergenzwinkel ist groß bzw. die einzelnen Elektronen treffen in stark unterschiedlichen Richtungen auf die Probe. In diesem Fall spricht man von der konvergenten Elektronenbeugung (Convergent Beam Electron Diffraction $\hat{=}$ CBED).
2. Der Primärelektronenstrahl weist einen geringen Divergenzwinkel auf, d. h. die einzelnen Elektronen treffen nahezu parallel auf die Probenoberfläche. Dann spricht man von der Feinbereichsbeugung (Selected Area Diffraction $\hat{=}$ SAD).

Die Fokussierung des Primärelektronenstrahls bzw. dessen Divergenzwinkel ist fast beliebig einstellbar. Deshalb ist der Übergang zwischen der konvergenten Elektronenbeugung und der Feinbereichsbeugung fließend. Für diese Arbeit ist aber nur die konvergente Elektronenbeugung von Interesse.

Abbildung 2.4 zeigt die Entstehung von zwei unterschiedlichen Elektronenbeugungsmustern. Der fokussierte Primärelektronenstrahl trifft auf die zu untersuchende Probe. In der Probe werden die Elektronen des Primärelektronenstrahls gestreut und gebeugt. Anschließend verlassen die Elektronen die Probe und treffen auf einen Phosphorschirm. Die Energie der Elektronen wird durch den Phosphor in Licht umgewandelt und auf dem Phosphorschirm wird das Elektronenbeugungsmuster sichtbar. In der Abbildung 2.4 sind von den Elektronenbeugungsmustern nur die zentralen Braggreflexe dargestellt. Durch die Fokussierung sind die Braggreflexe scheibenförmig. Die Abbildung 2.4 zeigt Elektronenbeugungsmuster mit überlappenden 2.4.b und nicht überlappenden 2.4.a Braggscheiben. Handelt es sich bei dem Primärelektronenstrahl um einen kohärenten oder teilweise kohärenten Elektronenstrahl, so kommt es in den Überlappungsbereichen der Braggscheiben in Abbildung 2.4.b zu einer kohärenten Überlagerung der Elektronenstrahlen. Diese ist unter anderem

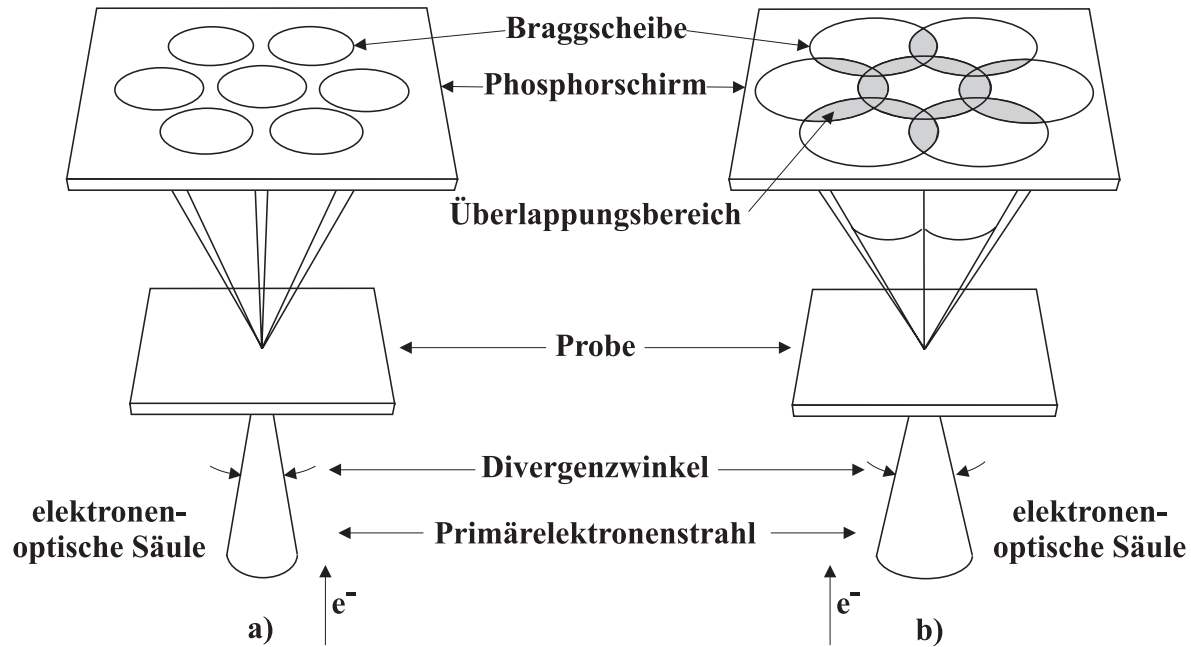


Abbildung 2.4: Elektronenbeugungsmuster mit a) nicht überlappenden und b) überlappenden Braggscheiben

für die hochauflösende Hellfeldabbildung wichtig, auf die in Kapitel 2.3.3 noch genauer eingegangen wird. Die Elektronen des Primärelektronenstrahls können in der Probe elastisch und inelastisch gestreut werden. Die inelastisch gestreuten Elektronen liefern einen diffusen Untergrund in den Elektronenbeugungsmustern, der bei deren Interpretierung störend ist. Die inelastisch gestreuten Elektronen können sich aufgrund ihrer Winkel- und Energie-/Wellenlängenänderung nicht kohärent mit elastisch gestreuten Elektronen überlagern. Aufgrund der inkohärenten Überlagerung der elastisch und inelastisch gestreuten Elektronen in den Elektronenbeugungsmustern, kann der inelastische Untergrund mittels einer Energiefilterung größtenteils aus diesem entfernt werden. Hierdurch wird dann das Elektronenbeugungsmuster deutlich schärfer [32].

2.3.3 Experimentelle Abbildungstechniken im RTEM

Die Bildentstehung für die Abbildungstechniken im RTEM basiert auf der zeilenförmigen Rasterung der Probe mit dem Primärelektronenstrahl, bei gleichzeitiger Detektion bestimmter Wechselwirkungsprodukte. Die Qualität und der Kontrast dieser Abbildungen hängt von verschiedenen Faktoren ab. Insbesondere sind hier die elektronische und magnetische Stabilität des Elektronenmikroskops, die Stabilität des Primärelektronenstrahls, der Detektionsbereich für die gestreuten Elektronen und nicht zuletzt die Struktur sowie die Materi-

alzusammensetzung der zu untersuchenden Probe zu nennen. In dem verwendeten RTEM werden verschiedene Abbildungstechniken zur Probencharakterisierung eingesetzt. Dieses sind:

- Die Ordnungszahl-Kontrastabbildung.
- Die Hellfeldabbildung.
- Die Dunkelfeldabbildung.

Die Ordnungszahl-Kontrastabbildung ist für die schnelle Bestimmung der Materialzusammensetzung die wichtigste Abbildungstechnik [36]. Bei dieser Abbildungstechnik werden Atome mit einer großen Ordnungszahl (Z) heller abgebildet als Atome mit einer niedrigen Ordnungszahl. Das Prinzip der Entstehung der Ordnungszahl-Kontrastabbildung ist in Abbildung 2.5 dargestellt.

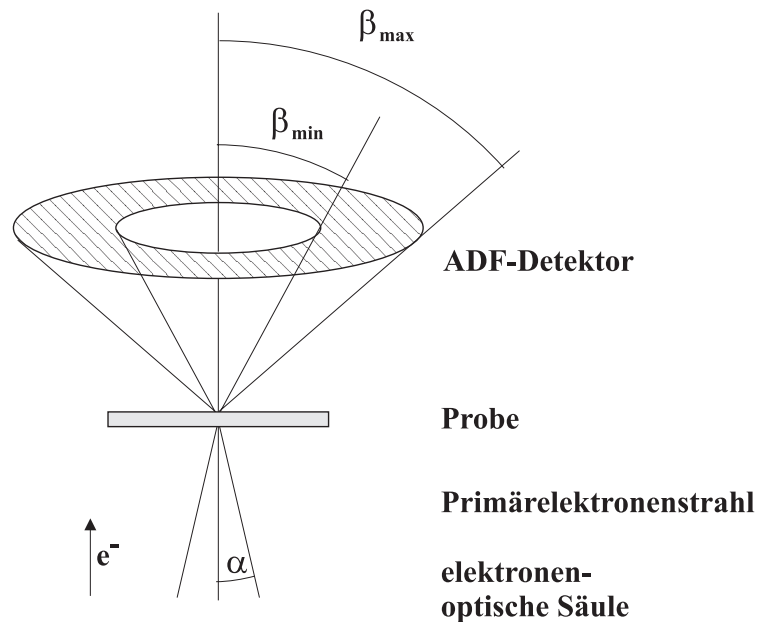


Abbildung 2.5: Prinzip der Ordnungszahl-Kontrastabbildung

Ein fein fokussierter Primärelektronenstrahl trifft auf die zu untersuchende Probe, dessen Elektronen treten in Wechselwirkung mit der Probe. Die transmittierten, weitwinklig gestreuten Elektronen werden von dem ADF-Detektor detektiert und aufintegriert. Durch die Aufintegration der Elektronen kann für jeden Meßpunkt ein Signalwert bestimmt werden, der auch Ordnungszahl-Kontrastsignal genannt wird. Dieser Signalwert wird in ein Bildsignal umgewandelt, das sich aufgrund der zeilenförmigen Rasterung zu einem kompletten Ordnungszahl-Kontrastbild zusammensetzen läßt.

Die Information über die Ordnungszahl kann insbesondere den weitwinklig, elastisch gestreuten Elektronen entnommen werden. Außerdem nimmt mit zunehmendem Streuwinkel der Anteil der inelastisch gestreuten Elektronen ab. Deshalb wird für den ADF-Detektor ein großer Öffnungswinkel verwendet, der zu einer Ordnungszahlabhängigkeit des Ordnungszahl-Kontrastsignals, je nach Detektionswinkel, von $Z^{1,5}$ bis Z^2 führt [58]. Der Detektionswinkel des für die Ordnungszahl-Kontrastmessungen in dieser Arbeit verwendeten RTEEM reicht von $\beta_{min} = 60 \text{ mrad}$ bis $\beta_{max} = 180 \text{ mrad}$. Dieser Detektionswinkelbereich führt zu einer Abhängigkeit des Ordnungszahl-Kontrastsignals von ungefähr $Z^{1,8}$. Durch den hier verwendeten minimalen Detektionswinkel beeinflussen die intensitätsreichen, zentralen Braggreflexe nicht die Ordnungszahl-Kontrastmessungen. Damit ist sichergestellt, daß die detektierten Elektronen von elastisch und quasielastisch gestreuten Elektronen dominiert werden [38].

Die Ordnungszahl-Kontrastabbildung von Kristallen ist nicht einfach zu interpretieren. Einerseits gibt es einen deutlichen Einfluß von Channeling-Effekten auf diese Abbildungen [76], andererseits wird in [58, 77] gezeigt, daß Ordnungszahl-Kontrastabbildungen auch Informationen über die Kristallstruktur der zu untersuchenden Probe enthalten.

Nur für die hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildung muß der Einfallswinkel des Primärelektronenstrahls mit einer Zonenachse des zu untersuchenden Materials übereinstimmen. Für die normale Ordnungszahl-Kontrastabbildung ist dieser Einfallswinkel beliebig einstellbar. In [37] werden erstmalig hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen vorgestellt, in denen Gitterebenen eines Kristalls abgebildet sind. Zu deren Darstellung muß der Kristall aber in Richtung einer Zonenachse orientiert sein und die Braggseiben müssen sich überlagern.

Aufgrund des Detektionswinkelbereichs können einerseits entartete Braggreflexe und andererseits der inelastische Untergrund zum Ordnungszahl-Kontrastsignal beitragen. Die Intensität des inelastischen Untergrundes im Elektronenbeugungsmuster ist gegenüber der Intensität von Braggreflexen um einige Zehnerpotenzen geringer. Da aber alle Intensitäten mittels des ADF-Detektors inkohärent aufintegriert werden, wird im Fall der Ordnungszahl-Kontrastabbildung auch von einer inkohärenten Abbildung gesprochen. Wegen der inkohärenten Aufintegration ist für die erreichbare Ortsauflösung die Intensitätsverteilung der Elektronensonde entscheidend [58].

Die Hellfeldabbildung ist für die Defektcharakterisierung die wichtigste Abbildungstechnik. Für diese werden nur die in einem kleinen Raumwinkel gestreuten und die ungestreuten Elektronen detektiert. Abbildung 2.6 zeigt das Prinzip der Kontrastentstehung in Hellfeldabbildungen. In 2.6.a ist die Ausbreitung der Elektronenstrahlen bei ungestörten Netzebenen und in 2.6.b bei gestörten Netzebenen dargestellt. Es werden nur Elektronenstrahlen de-

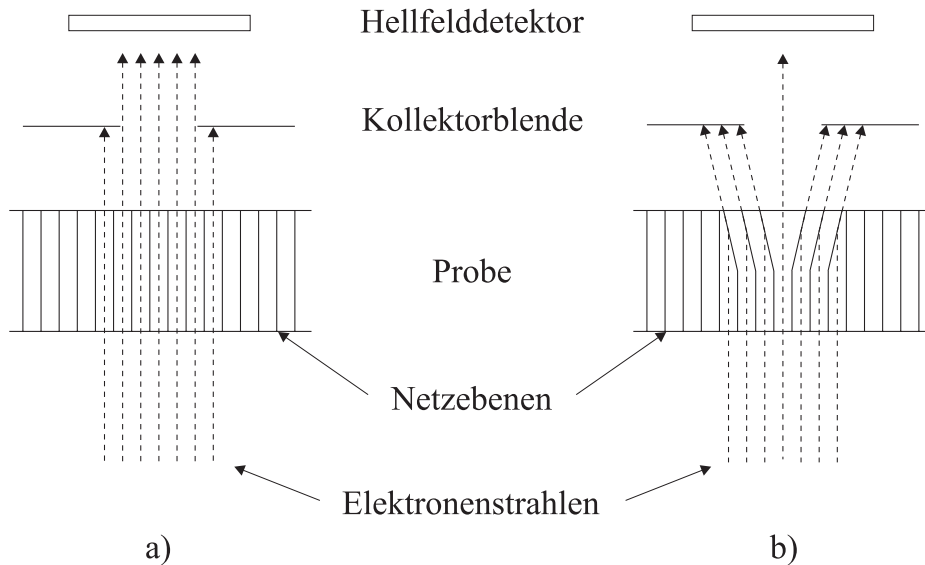


Abbildung 2.6: Erklärung des Prinzips der Kontrastentstehung bei Hellfeldabbildungen anhand einer Versetzung mit a) ungestörte Netzebenen und b) gestörte Netzebenen

tektiert, die die Kollektorblende passieren. Im ungestörten Fall ist deren Anzahl deutlich größer als im gestörten Fall. Dieses einfache Beispiel zeigt bereits sehr deutlich den Einfluß von Gitterfehlern auf den Kontrast in Hellfeldabbildungen. Die Abbildung 2.6 zeigt die konventionelle Hellfeldabbildung. Hierfür wird der Konvergenzwinkel des Primärelektronenstrahls so eingestellt, daß die einzelnen Braggseiben sich nicht überlappen ($\alpha < 2\Theta_B$). Für Hellfeldmessungen werden nur die Elektronenstrahlen der zentralen Braggseibe verwendet. Alle anderen Braggseiben werden durch die Kollektorblende ausgeblendet. Damit werden aber nur ungebeugte Elektronen detektiert. Existieren lokale Störungen in der Kristallstruktur, so ändern sich die lokalen Braggbedingungen, woraus die Intensitätsmodulation in der Hellfeldabbildung resultiert. Die erzielbare Ortsauflösung ist größer als der Abstand der Netzebenen im Kristallgitter [58]. Trotzdem ist diese Art der Abbildung von großem Interesse, da Störungen im Kristallgitter deutliche Intensitätsveränderungen hervorrufen. Eine zur Hellfeldabbildung komplementäre Abbildung ist die Dunkelfeldabbildung. Für diese Art der Abbildung wird anstelle des zentralen Braggreflexes ein anderer Braggreflex für die Messungen verwendet. Dafür wird der Elektronenstrahl so abgelenkt, daß der ausgewählte Braggreflex vom Hellfelddetektor detektiert wird. Die Abbildung 2.7 zeigt den Unterschied zwischen der konventionellen Hellfeldabbildung (2.7.a) und der hochauflösenden Hellfeldabbildung (2.7.b). Im Gegensatz zur normalen Hellfeldabbildung ist für die hochauflösende Hellfeldabbildung der Konvergenzwinkel des Primärelektronenstrahls so eingestellt ($\alpha > 2\Theta_B$), daß sich die einzelnen Braggseiben überlappen. Im Überlappungsbereich kann es für kohärente Elektronenstrahlen zu einer kohärenten Überlagerung der einzelnen

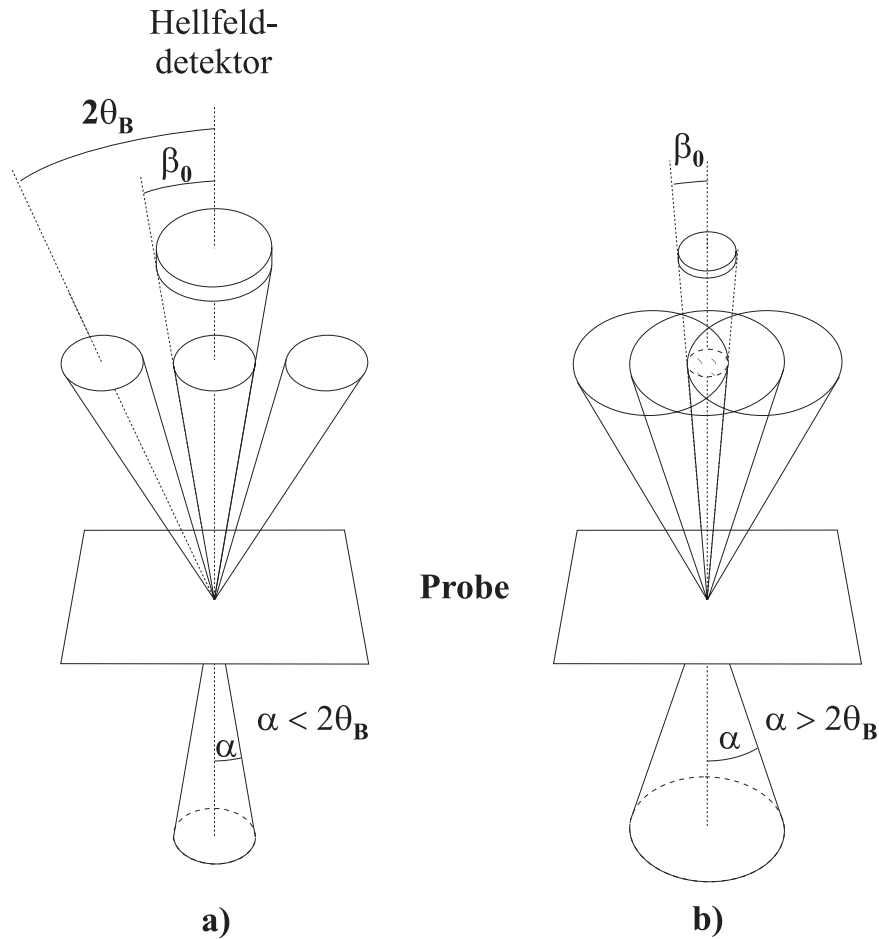


Abbildung 2.7: Prinzip der a) Hellfeldabbildung und b) der hochauflösenden Hellfeldabbildung

Braggreflexe kommen. Durch diese kohärente Überlagerung wird nicht nur der Amplitudenunterschied sondern auch der Phasenunterschied zwischen den einzelnen Braggreflexen bei den Messungen berücksichtigt. Erst hierdurch ist es möglich einzelne Gitterebenen abzubilden [78].

Für die Abbildungstechniken spielt das erzielbare Auflösungsvermögen eine wichtige Rolle. Eine genau so wichtige Rolle hat bei diesen Abbildungstechniken die Kontrastübertragungsfunktion (CTF: Contrast Transfer Function). Diese Funktion gibt an, inwieweit ein elektronenoptisches System das vorhandene Signal nach Betrag und Phase beeinflusst. Die Phasenabhängigkeit ist wichtig, da sich die Phase in Abhängigkeit vom Ort stark ändern kann. Hierdurch ist die elektronenoptische Wellenlänge zwischen den Atomsäulen kleiner als entlang der Atomsäulen [70]. Für sehr dünne Proben wird nur die Phase des Elektronenstrahls beeinflusst. Nur durch die Detektion dieser Phasenänderung sind im Elektronenmikroskop die einzelnen Netzebenen als Bildkontrast (Intensitätsunterschied) abbildbar.

Aus der Veränderung der Mikroskopparameter kann eine zusätzliche Phasenveränderung resultieren, die zu einer Kontrastumkehr im Bildkontrast führt. Dieser spezielle Effekt ist vor allem für die hochauflösende Hellfeldabbildung von Interesse. Die wichtigsten Parameter, die einen Einfluß auf die Abbildungseigenschaften des RTEM haben, sind die Brennweite und die Aberration der Objektivlinse sowie der Konvergenzwinkel des Primärelektronenstrahls. Durch Instabilitäten in dem elektronenoptischen System und durch die Energieverteilung der Primärelektronen wird die Kontrasttransferfunktion gedämpft. Dieses führt zu einem schlechteren Kontrast für kleine Objektdetails. Für noch kleinere Objektdetails wird das Signal-Rausch-Verhältnis so schlecht, daß diese nicht mehr abbildbar sind.

2.4 Ansätze zur Simulation von Elektronenbeugungsmustern

Für die Simulation von Elektronenbeugungsmustern existieren eine Vielzahl von Simulationsansätzen, auf denen noch mehr Simulationsprogramme basieren [48, 51, 79, 80]. Von großer Bedeutung für die Wahl des Simulationsansatzes ist die gegebene Problemstellung und die Genauigkeit der hierfür benötigten Informationen [32]. Außerdem beeinflussen die zur Verfügung stehenden Rechnerplattformen die Wahl des Simulationsprogrammes und somit die verwendete Implementierung eines Simulationsansatzes. Im Folgenden wird auf die für diese Arbeit relevanten Simulationsansätze genauer eingegangen.

2.4.1 Der kinematische Simulationsansatz

Der kinematische Simulationsansatz basiert auf der kinematischen Beugungstheorie, die schon in Kapitel 2.1.4.1 vorgestellt wurde. Für die Simulation von Elektronenbeugungsmustern werden grundsätzlich die Lauesche Gleichung 2.30 und die Berechnung der Strukturamplitude aus Gleichung 2.29 benötigt. Mit der Laueschen Gleichung kann die Position der Braggreflexe in einem Elektronenbeugungsmuster bestimmt werden. Mittels der Strukturamplitude werden die im simulierten Elektronenbeugungsmuster erscheinenden Braggreflexe identifiziert. Weiterhin enthalten die Elektronenbeugungsmuster HOLZ- und Kikuchilinen, die mit den Gleichungen 2.30 und 2.35 berechnet werden können. Die HOLZ-Linien sind mit diesen Gleichungen sofort bestimmbar. Die Kikuchilinen resultieren aus inelastisch gestreuten Elektronen, die nach dem inelastischen Streuprozess auch elastisch gestreut werden. Zu deren Bestimmung wird der in Kapitel 2.1.4.1 vorgeschlagene Ansatz zur Berücksichtigung von inelastischen Effekten in der kinematischen Beugungstheorie verwendet. Für die kine-

matischen Simulationsergebnisse in dieser Arbeit werden Simulationsprogramme verwendet, die auf dem Programm "HOLZ" basieren [32].

Der kinematische Simulationsansatz für die Simulation von Elektronenbeugungsmustern basiert auf sehr stark vereinfachten physikalischen Grundlagen. Aus diesen Vereinfachungen resultiert eine sehr geringe Simulationsdauer. Dieser Simulationsansatz vernachlässigt relativistische Effekte, die Mehrfachstreuung von Elektronen, thermische Effekte und Elektronenenergieverluste. Mit diesem Ansatz sind darüber hinaus nur ideal aufgebaute Kristalle simulierbar. Durch diese Einschränkungen ist die quantitative Simulation von Elektronenbeugungsmustern nur für sehr dünne Proben möglich. Sobald die Probendicke so groß wird, daß mindestens einer der oben genannten Punkte eine wichtige Rolle spielt, sind mit dem kinematischen Simulationsansatz nur noch qualitative Simulationen möglich.

2.4.2 Dynamische Simulationsansätze

Es existieren verschiedene dynamische Simulationsansätze zur Berechnung von Elektronenbeugungsmustern. In [48] werden die wichtigsten dynamischen Simulationsansätze vorgestellt und verglichen. Das Resultat dieses Vergleiches ist, daß prinzipiell alle Simulationsansätze die gleichen Ergebnisse liefern. Die am weitest verbreiteten Simulationsansätze sind die Blochwellentheorie und der Multisllice-Ansatz. Diese beiden dynamischen Simulationsansätze werden auch für die hier vorliegende Arbeit verwendet.

2.4.2.1 Der auf der Blochwellentheorie basierende Simulationsansatz

Die Blochwellentheorie beruht auf einem Berechnungsansatz von Bethe [42] und wurde in Kapitel 2.1.4.2.1 schon vorgestellt. Mittels der Blochwellentheorie kann die Wellenfunktion einer sich im Kristall ausbreitenden Elektronenwelle durch die Superposition von Blochwellen berechnet werden.

Der Simulationsansatz zur Berechnung von Elektronenbeugungsmustern mit der Blochwellentheorie aus den Gleichungen 2.37 bis 2.50 geht von einem idealen, in zwei Raumrichtungen unendlich ausgedehnten, periodisch aufgebautem Kristallgitter aus und berücksichtigt nur rein elastisch gestreute Elektronen. Um auch inelastische Effekte und die Absorption von Elektronen für die Berechnung von Elektronenbeugungsmustern zu berücksichtigen, werden zu dem Fourierkoeffizienten des Kristallpotentials aus Gleichung 2.40 weitere komplexwertige Anteile hinzuaddiert [32, 72, 81]. Für die Berechnung der Matrixgleichung 2.49 müssen deren Eigenwerte bestimmt werden. Für die Eigenwertberechnung existieren verschiedene

Berechnungsansätze, die z.B. aus [74] entnommen werden können. Mit der so berechneten Eigenwertlösung lassen sich dann die Intensitäten $I(\vec{k})$ eines Elektronenbeugungsmusters zu

$$I(\vec{k}) = \left| \psi(\vec{k}) \psi^*(\vec{k}) \right| \quad (2.58)$$

bestimmen.

Der entscheidende Vorteil für Simulationen mittels des Blochwellensimulationsansatzes ist:

- Ausgewählte Braggreflexe können mit einer sehr hohen Auflösung berechnet werden.

Die Nachteile dieses Verfahrens sind:

- Der Blochwellensimulationsansatz geht, wie schon in Kapitel 2.1.4.2.1 beschrieben, von einem idealen, in zwei Raumrichtungen unendlich ausgedehnten, periodisch aufgebauten Kristallgitter aus. Daher sind Asymmetrien im Kristallaufbau, wie Materialgrenzflächen, wenn überhaupt, nur mit einem sehr hohen Aufwand unter Verwendung einer sehr großen Einheitszelle simulierbar.
- Aufgrund der in zwei Raumrichtungen unendlich ausgedehnten, periodischen Kristallstruktur sind aperiodische Effekte, wie Oberflächenrelaxationen, nicht simulierbar.
- Da es mit dem Blochwellensimulationsansatz nur möglich ist ausgewählte Braggreflexe zu berechnen, sind nur unvollständige Elektronenbeugungsmuster simulierbar.
- Die Simulation von hochaufgelösten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen ist mittels des Blochwellenansatzes nicht möglich. Dieses liegt in der Tatsache begründet, daß nur einzelne Braggreflexe eines Elektronenbeugungsmusters simuliert werden können. Für die Ordnungszahl-Kontrastsimulation wird aber das vollständige Elektronenbeugungsmuster benötigt.

Simulationsprogramme, die die Elektronenbeugung anhand der Blochwellentheorie simulieren, werden z.B. in [32] und [82] vorgestellt. Das für diese Arbeit verwendete Blochwellensimulationsprogramm basiert auf dem Simulationsprogramm aus [32].

2.4.2.2 Der Multislice-Ansatz

Das von Cowley und Moodie in [43] entwickelte Multislice-Verfahren zur dynamischen Beschreibung der Elektronenbeugung in Kristallen wurde schon in Kapitel 2.1.4.2.2 vorgestellt

und erläutert. Jetzt wird darauf eingegangen, wie die in den Kristall einfallende Elektronenwelle und abschließend das Elektronenbeugungsmuster berechnet werden.

Die Grundvoraussetzung für die korrekte Berechnung von Elektronenbeugungsmustern ist die möglichst realistische Beschreibung der einfallenden Elektronenwelle ψ_0 . Dazu sind die "optischen" Eigenschaften des Elektronenmikroskops, wie z. B. die Objektivblende und die Objektivlinse, zu berücksichtigen. Ferner wird in dieser Arbeit von einer kohärenten, punktförmigen Elektronenquelle ausgegangen. Darüber hinaus ist der Punkt \vec{x}_p , an dem der Primärelektronenstrahl bzw. die Elektronenwelle auf den Kristall trifft, auszuwählen. Mit diesen Vorgaben kann die einfallende Elektronenwelle wie folgt berechnet werden [51]:

$$\psi_0(\vec{x}, \vec{x}_p) = A \int_{k_{\alpha_{min}}}^{k_{\alpha_{max}}} \exp \left[-i \chi(\vec{k}) - 2\pi j \vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_p) \right] d\vec{k} \quad (2.59)$$

Für die Wahl des Normierungsfaktors A muß die Gleichung

$$\int |\psi_0(\vec{x}, \vec{x}_p) d\vec{x}| = 1 \quad (2.60)$$

erfüllt sein [51]. Die Aberrationsfunktion $\chi(\vec{k})$ bestimmt sich zu [51]:

$$\chi(\vec{k}) = \chi(k) = \pi \lambda \left| \vec{k} \right|^2 \left(\frac{C_s \lambda^2 k^2}{2} - \Delta f \right) \quad (2.61)$$

Die Aberrationsfunktion ist von der Wellenlänge der Elektronen λ , der sphärischen Aberrationskonstante C_s und dem Defokus der Objektivlinse Δf abhängig. Für den Winkel α_{min} der Objektivblende gilt in der Regel $\alpha_{min} = 0$. Aufgrund der Beziehung $\alpha = \lambda \left| \vec{k} \right|$ entspricht die Integration über \vec{k} der Integration über die gesamte Objektivblende.

Die den Kristall in Transmissionsrichtung verlassende Elektronenwelle $\psi_t(\vec{x}, \vec{x}_p)$ trifft auf den Leuchtschirm, auf dem das Elektronenbeugungsmuster sichtbar wird. Bei einem Elektronenbeugungsmuster handelt es sich um die Fouriertransformierte der Elektronenwelle. Diese ergibt sich zu:

$$\psi_t(\vec{k}, \vec{x}_p) = FT[\psi_t(\vec{x}, \vec{x}_p)] \quad (2.62)$$

Die Intensitätsverteilung im Elektronenbeugungsmuster läßt sich dann mittels der Gleichung

$$I(\vec{k}, \vec{x}_p) = \psi_t(\vec{k}, \vec{x}_p) \cdot \psi_t^*(\vec{k}, \vec{x}_p) = \left| \psi_t(\vec{k}, \vec{x}_p) \right|^2 \quad (2.63)$$

berechnen.

Für die mit dem Multislice-Ansatz erzielbare Auflösung von Elektronenbeugungsmustern sind vor allem die Größe der verwendeten Scheiben im Realraum, mit den Kantenlängen

l_a/l_b , und die Anzahl der verwendeten Pixel in x - und y - Richtung (N_x/N_y) von großer Bedeutung. Die Auflösung im Realraum bestimmt sich zu $\frac{l_a}{N_x}$ in x -Richtung und $\frac{l_b}{N_y}$ in y -Richtung. Im reziproken Raum ergibt sich die Auflösung zu $\frac{1}{l_a}$ und $\frac{1}{l_b}$. Die Anzahl der simulierbaren Bildpunkte ist eine Potenz von 2. Typische Werte für Multislice-Simulationen sind 256×256 , 512×512 und 1024×1024 Bildpunkte.

Für den Multislice-Ansatz existiert eine Einschränkung bzgl. der maximal simulierbaren Materialdicke. Diese ist über das Verhältnis der Gesamtintensität der austretenden Elektronenwelle zur Gesamtintensität der einfallenden Elektronenwelle definiert. Wenn dieses Verhältnis $\leq 0,9$ ist, so ist das Simulationsergebnis nur noch bedingt verwendbar [83]. Die Grenze wird um so schneller erreicht, je unsymmetrischer die zu simulierenden Scheiben sind.

Die Simulationsdauer von Elektronenbeugungsmustern mit dem Multislice-Ansatz hängt entscheidend von der Anzahl der zu simulierenden Bildpunkte ab, da für jeden Bildpunkt in jedem Berechnungsschritt eine Fast-Fouriertransformation durchgeführt werden muß. Die benötigte Rechenzeit für die Fast-Fouriertransformation in einen Iterationsschritt pro Scheibe kann mit der Funktion

$$T_{CPU} \propto N_x N_y \log(N_x N_y) \quad (2.64)$$

abgeschätzt werden [83]. T_{CPU} ist die reine Rechenzeit eines Computers für einen Iterationsschritt. Die Gleichung 2.64 zeigt die starke Abhängigkeit der Berechnungsdauer von der Anzahl der zu simulierenden Bildpunkte.

Alle Abbildungstechniken aus Kapitel 2.3.3, wie die Ordnungszahl-Kontrastabbildung und die Hellfeldabbildung, beruhen auf der Tatsache, daß nur die auf den Detektor fallenden Elektronen inkohärent aufintegriert werden und dadurch das jeweilige RTEM-Bildsignal ermittelt werden kann. Da das Ergebnis einer Multislice-Simulation ein komplettes Elektronenbeugungsmuster ist, kann analog zur Realität durch eine inkohärente Aufintegration der Intensitäten $I(\vec{k}, \vec{x}_p)$ des Elektronenbeugungsmusters, in Abhängigkeit von der Detektorgeometrie, daß entsprechend simulierte RTEM-Bildsignal $g(\vec{x}_p)$ berechnet werden. Zur Berechnung des RTEM-Bildsignals wird das Integral

$$g(\vec{x}_p) = \int \left| \psi_t(\vec{k}, \vec{x}_p) \right|^2 D(\vec{k}) d\vec{k} \quad (2.65)$$

mit der Detektorfunktion

$$D(\vec{k}) = \begin{cases} 1 & k_{min} \leq k \leq k_{max} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.66)$$

verwendet [51]. Die Detektorfunktion aus Gleichung 2.66 ermöglicht nur die Simulation von Hellfeldabbildungen ($k_{min} = 0$) oder die Simulation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen.

Die Vorteile des Multislice-Ansatzes sind:

- Die Gleichungen 2.56, 2.57 und 2.63 zeigen, daß anhand des Multislice-Ansatzes für jede beliebige Position des Primärelektronenstrahls, die Intensitätsverteilung innerhalb des zu simulierenden Elektronenbeugungsmusters berechnet werden kann.
- Mittels des Multislice-Ansatzes wird für jede einzelne Scheibe die Interaktion zwischen Scheibe und Elektronenwelle berechnet. Die hierfür jeweils benötigte Atompotentialfunktion kann für beliebig in der Scheibe positionierte Atome berechnet werden. Die Atome können dabei die unterschiedlichsten Ordnungszahlen haben. Darüber hinaus ist die Reihenfolge der einzelnen Scheiben beliebig einstellbar. Das bedeutet für den Multislice-Ansatz, daß mit diesem Asymmetrien im Kristallaufbau, wie Kristalldefekte und Materialgrenzflächen, ohne großen Aufwand simulierbar sind. Ferner sind hierdurch aperiodische Effekte, wie Oberflächenrelaxationen, simulierbar.
- Die Berechnung der Ausbreitung der Elektronenwelle innerhalb eines Kristalls erfolgt beim Multislice-Ansatz nach Betrag und Phase. Erst nach Verlassen der Probe wird die komplexwertige Darstellung der Elektronenwelle in die Intensitätsverteilung eines Elektronenbeugungsmusters umgewandelt. Da für die Simulationen zusätzlich von einer kohärenten, punktförmigen Elektronenquelle ausgegangen wird, sind mit dem Multislice-Ansatz auch kohärente Elektronenbeugungsmuster simulierbar.
- Die Simulation von Strukturabbildungen und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen ist möglich. Dieses geschieht, indem für eine Vielzahl von Elektronenbeugungsmustern für unterschiedliche Primärelektronenstrahlpositionen die Ordnungszahl-Kontrastintensitäten mittels der Detektorfunktion aus 2.66 berechnet und entsprechend der Primärelektronenstrahlpositionen zusammengesetzt werden. Die Detektorfunktion muß im Fall der Strukturabbildungen einem Hellfelddetektor und im Fall der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen einem ADF-Detektor entsprechen.

Der größte Nachteil dieses Verfahrens ist:

- Die Simulationen sind sehr zeitaufwendig, da für jede einzelne Scheibe die Elektronenbeugung simuliert werden muß.

Für den Multislice-Ansatz existieren verschiedene Simulationsprogramme oder -programm-pakete [32, 51, 82]. Die Multislice-Simulationen in dieser Arbeit basieren auf einem Pro-

grammpaket von E. J. Kirkland und J. Silcox von der Cornell University Ithaca/New York [51], welches uns für diese Arbeit freundlicherweise zur Verfügung gestellt wurde. Es enthält unter anderem ein Elektronenbeugungssimulationsprogramm und ein Simulationsprogramm für Ordnungszahl-Kontrastsimulationen. Das Simulationspaket nutzt die Tatsache aus, daß ein Kristall periodisch aufgebaut ist und sich deshalb die Reihenfolge der Scheiben periodisch wiederholt. Als Scheiben werden in diesen Simulationsprogrammen einzelne Atomlagen, auch Monolagen genannt, verwendet. So ist es notwendig, für eine Periode dieser Scheiben, die jeweiligen Transmissionsfunktionen zu berechnen und diese für die gesamte Simulationsdauer im Arbeitsspeicher des Computers vorzuhalten. Dieses bringt einen erheblichen Geschwindigkeitsgewinn für die Elektronenbeugungssimulation. Die Abbildung 2.8 gibt den oben genannten Ablauf für die Simulation mit dem Multislice-Ansatz aus [51] grafisch wieder.

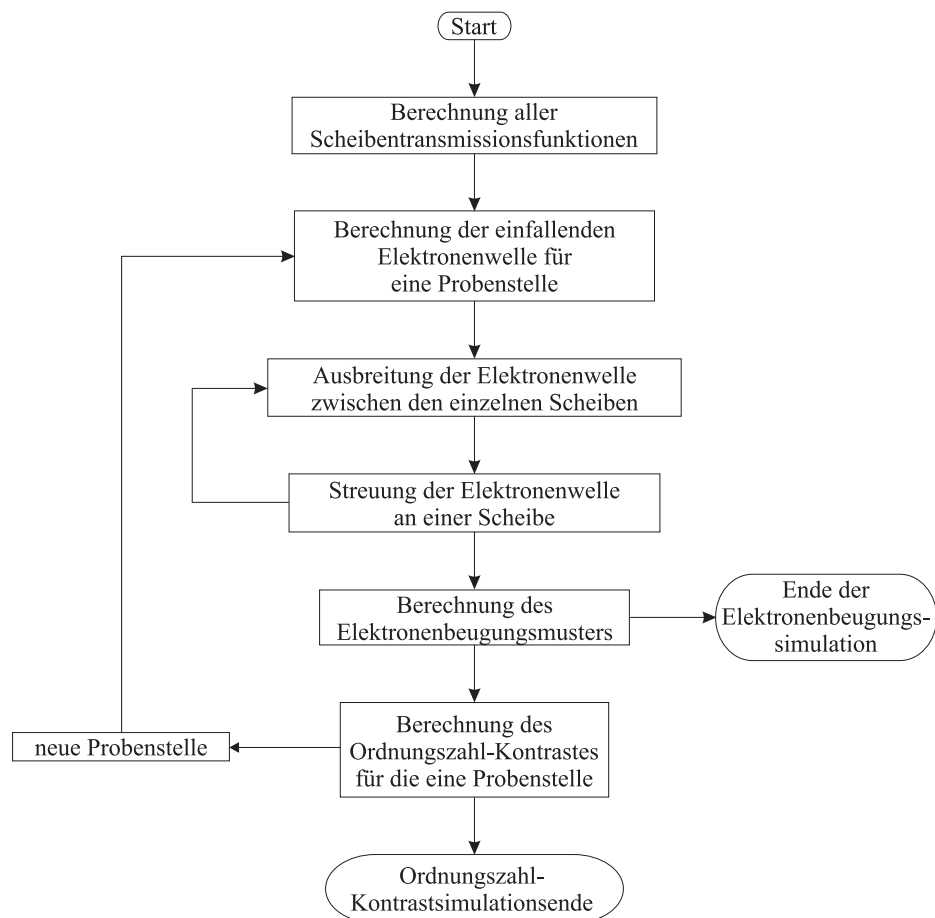


Abbildung 2.8: Funktionsprinzip des Multislice-Ansatzes für die Berechnung von Elektronenbeugungsmustern und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen mit den Simulationsprogrammen des Cornell-Programmpakets

Auch der Multislice-Ansatz bietet die Möglichkeit, inelastische Effekte zu berücksichtigen.

Für die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung wurde in [50] ein Ansatz vorgeschlagen, der auf dem sogenannten "Frozen Phonon"-Ansatz basiert. Dieser wird im Folgenden Kapitel noch genauer vorgestellt, da er für die quantitativen Elektronenbeugungssimulationen in dieser Arbeit verwendet wird. Andere Simulationsansätze verwenden einen modifizierten Multislice-Ansatz [84] oder die inelastischen Effekte werden über analytische Ausdrücke in den Multislice-Ansatz implementiert [49].

2.4.2.3 Der Multislice-Ansatz und die thermisch diffuse Streuung

Zur Berücksichtigung von inelastischen Effekten wird in dieser Arbeit, aufgrund der in Kapitel 2.1.4.2.2 beschriebenen Vorteile, der in [50] vorgestellte "Frozen Phonon"-Ansatz verwendet. Daher wird im Folgenden genauer auf diesen Ansatz eingegangen.

Ausgangsbasis für den "Frozen Phonon"-Ansatz ist die Tatsache, daß die Geschwindigkeit der sich ausbreitenden Elektronen im Kristallgitter gegenüber der Vibrationsgeschwindigkeit der Gitteratome um einige Zehnerpotenzen größer ist. Dadurch wirkt das Gitteratom für ein vorbeifliegendes Elektron wie eingefroren. Weiterhin verwendet dieser Ansatz zur Beschreibung der thermischen Vibration das sogenannte Einsteinmodell. Dieses interpretiert jedes einzelne Gitteratom als einen unabhängigen Oszillator. Aus diesem Grund wird die Auslenkung der Atome aus ihrer Ruhelage mittels eines Zufallszahlengenerators berechnet. Die Amplitude der Auslenkung wird durch die elementspezifische Vibrationsamplitude begrenzt. Um einen eingefrorenen Zustand für das gesamte Kristallgitter (Phononenkonfiguration) für eine Elektronenwelle zu erhalten ist es notwendig, für jedes Atom im Kristallgitter eine zufallsverteilte Auslenkung zu bestimmen. Erst dann kann für jede Scheibe die Scheibentransmissionsfunktion berechnet werden. Mit den so erhaltenen Scheibentransmissionsfunktionen läßt sich dann das Elektronenbeugungsmuster für eine Elektronenwelle berechnen. Ein gemessenes Elektronenbeugungsmuster setzt sich aber aus der Überlagerung vieler Elektronenwellen zusammen. Daher ist dieses auch für die Berechnung eines simulierten, quantitativen Elektronenbeugungsmusters nachzuvollziehen, in dem das oben genannte Verfahren mehrfach wiederholt wird. Dadurch liegen simulierte Elektronenbeugungsmuster von verschiedenen zufälligen Atomverteilungen innerhalb des Kristallgitters vor, die dann inkohärent überlagert werden können.

Die oben vorgestellte Vorgehensweise für die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung in der Elektronenbeugungssimulation vervielfacht den Zeitaufwand für die Simulationen. Daher wurde in [50] ein Ansatz vorgestellt, der die thermisch diffuse Streuung in Elektronenbeugungssimulationen berücksichtigt und trotzdem gegenüber den Simulationen mit dem "Frozen Phonon"-Ansatz eine deutlich geringere Simulationsdauer hat. Für diesen Ansatz

wurde eine zusätzliche, auf dem Einstein Modell basierende Annahme gemacht. Diese geht davon aus, daß wenn die Atome einer Einheitszelle dem Einstein Modell unterliegen, so muß auch die gesamte Einheitszelle diesem Modell gehorchen. Damit ist nicht nur jedes Atom in einer Scheibe zufällig auslenkbar, sondern es kann auch jede Einheitszelle in dieser Scheibe zufällig verschoben werden. Hierbei ist aber die Einbindung der Einheitszelle in das Kristallgitter zu berücksichtigen. Da diese nicht ohne weiteres aus der Atompotentialfunktion heraustrennbar ist, wird anstatt jede einzelne Einheitszelle zu verschieben, in diesem Ansatz die ganze Scheibe verschoben. Der entscheidende Vorteil ist, daß eine Positionsänderung im Ortsraum, einer Phasenverschiebung im Fourierraum entspricht. Dadurch ist die Verschiebung der Scheibe mittels einer einfachen zusätzlichen Phasenverschiebung, bei der Berechnung der Elektronenbeugung, nachbildbar. Durch die Verschiebung der Scheibe können mit einer Scheibentransmissionsfunktion verschiedene zufallsverteilte Atompositionen innerhalb einer Scheibe generiert werden. Hierdurch reduziert sich die Anzahl der benötigten Scheiben deutlich. Theoretisch bräuchten nur noch für eine Periode die Scheibentransmissionsfunktionen berechnet zu werden. Dieses könnte aber zu einer zu geringen Anzahl von zufallsverteilten Atompositionen führen [50]. Deshalb wurde in [50] vorgeschlagen, für jede Scheibe einer Periode eine begrenzte Anzahl (Satz) von Scheibentransmissionsfunktionen mit unterschiedlichen, zufallsverteilte Atompositionen vorzuhalten. Aus diesen wird dann zufällig ein Scheibe für die Berechnung der Elektronenbeugung ausgewählt. Damit ist wiederum ein Elektronenbeugungsmuster berechenbar. Für die Simulation eines quantitativen Elektronenbeugungsmusters ist der obige Vorgang mehrfach zu wiederholen und die resultierenden Elektronenbeugungsmuster müssen inkohärent überlagert werden. Für die Simulation eines quantitativen Elektronenbeugungsmusters reicht es aus, insgesamt 16 Elektronenbeugungsmuster mit der oben beschriebenen Vorgehensweise zu simulieren und inkohärent zu überlagern [50]. Wie sich dieser Ansatz auf die Gleichungen 2.56 und 2.57 auswirkt, zeigen die beiden folgenden Gleichungen:

$$\psi_{n+1}(x, y) = [\psi_n(x, y) * p(x, y)] t_{n,r}(x - j_x |\vec{a}_x|, y - j_y |\vec{a}_y|) \quad (2.67)$$

Durch den Einsatz der Fouriertransformation ergibt sich die Gleichung 2.67 zu:

$$\Psi_{n+1}(x, y) = \left[\Psi_n(\vec{k}) P(\vec{k}, \Delta z) \right] * \left[T_{n,r}(\vec{k}) \exp \{ -2\pi i (j_x |\vec{a}_x|, j_y |\vec{a}_y|) \} \right] \quad (2.68)$$

j_x und j_y sind Zufallszahlen für die Verschiebung der Scheibe in x - bzw. y -Richtung. r ist die Zufallszahl für die Auswahl einer Scheibe aus dem Satz von zufallsverteilten Scheibentransmissionsfunktionen für eine spezielle Scheibe.

2.5 Materialspezifische Grundlagen

Erst moderne Epitaxieverfahren ermöglichen ein maßgeschneidertes Design von Bandstrukturen in mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen. Die Schlüsselparameter für den Herstellungsprozeß sind:

- Die Schichtdicken und die chemische Zusammensetzung der einzelnen Schichten (homogen oder inhomogen) der mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen.
- Die Beschaffenheit der Materialgrenzflächen zwischen den einzelnen Schichten (atomar scharfe oder graduelle Materialübergänge).
- Die Kristallstruktur (Defekte, Ordnungseffekte, Übergitter, Gitterverspannungen bzw. Gitterrelaxationen) der mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen.
- Die Übereinstimmung mit vorgegebenen Dotierstoffprofilen.

In Abhängigkeit von dem verwendeten Materialsystem (quaternäre III-V- oder II-VI-Halbleiter oder Gruppe III-Nitride) ergeben sich spezifische physikalische und chemische Problemstellungen bei der Herstellung dieser mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen.

2.5.1 Quaternäre III-V- und II-VI-Halbleitermaterialien

Die kristalline Struktur der quaternären III-V- und II-VI-Halbleiter ist die Zinkblendestruktur, die in Abbildung 2.9 dargestellt ist. Diese setzt sich aus zwei kubisch flächenzentrierten Untergittern zusammen, die um eine viertel Raumdiagonale gegeneinander verschoben sind. Das eine Untergitter besteht aus Gruppe V- bzw. Gruppe VI-Elementen und das andere Untergitter besteht aus Gruppe III- bzw. Gruppe II-Elementen.

Für die quaternären Halbleitermaterialien ist der Bandabstand über weite Bereiche einstellbar. Anhand des Vegardschen Gesetzes kann sehr genau der Bandabstand und die Gitterkonstante für ein vorgegebenes Mischungsverhältnis ermittelt werden.

Mit den beiden folgenden Gleichungen kann die Gitterkonstante a_0 und der Bandabstand W_g für das Materialsystem $Zn_xMg_{1-x}S_ySe_{1-y}$ berechnet werden.

$$a_0 = xy a_{ZnS} + x(1-y) a_{ZnSe} + (1-x)y a_{MgS} + (1-x)(1-y) a_{MgSe} \quad (2.69)$$

$$W_g = xy W_{g,ZnS} + x(1-y) W_{g,ZnSe} + (1-x)y W_{g,MgS} + (1-x)(1-y) W_{g,MgSe} \quad (2.70)$$

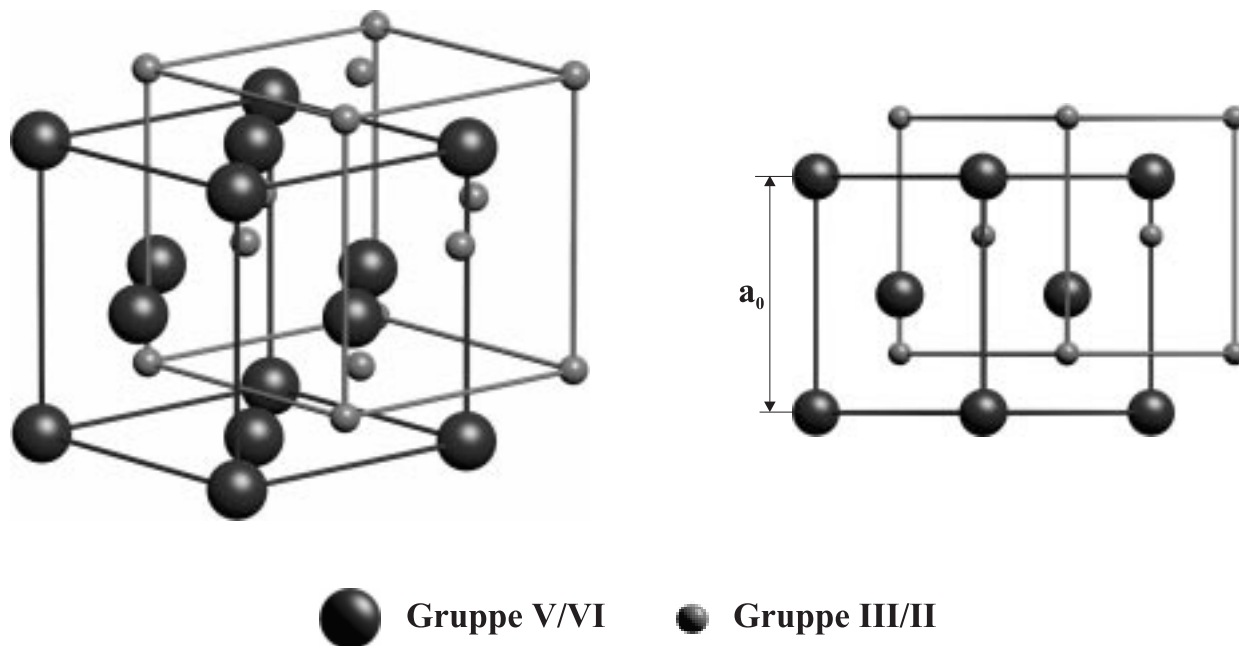


Abbildung 2.9: Kristalliner Aufbau der Zinkblendestruktur.

Die Daten für die Berechnung des Bandabstandes W_g und der Gitterkonstante a_0 für das quaternäre Materialsystem $Zn_xMg_{1-x}S_ySe_{1-y}$ können der Tabelle 2.1 entnommen werden.

Verbindung	Bandabstand W_g [eV]	Gitterkonstante a_0 [nm]
ZnS	3,80 bei 77 K	0,54093 bei 300 K
	3,68 bei 300 K	
$ZnSe$	2,81 bei 77 K	0,56686 bei 300 K
	2,72 bei 300 K	
MgS	4,50 bei 77 K	0,562 bei 77 K
$MgSe$	3,60 bei 77 K	0,596 bei 77 K

Tabelle 2.1: Eckdaten für die Berechnung des Bandabstandes und der Gitterkonstante für das quaternäre Materialsystem $Zn_xMg_{1-x}S_ySe_{1-y}$ mittels des Vegardschen Gesetzes.

Mit den beiden folgenden Gleichungen kann die Gitterkonstante a_0 und der Bandabstand

W_g für das Material $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ berechnet werden.

$$a_0 = xy a_{GaAs} + x(1-y) a_{GaP} + (1-x)y a_{InAs} + (1-x)(1-y) a_{InP} \quad (2.71)$$

$$W_g = xy W_{g,GaAs} + x(1-y) W_{g,GaP} + (1-x)y W_{g,InAs} + (1-x)(1-y) W_{g,InP} - x(1-x)y b_{GaInAs} - x(1-x)(1-y) b_{GaInP} - xy(1-y) b_{GaAsP} - (1-x)y(1-y) b_{InAsP} \quad (2.72)$$

Die Veränderung des Bandabstandes in Abhängigkeit von der Materialzusammensetzung ist generell nichtlinear [85]. Für die Berücksichtigung dieser Nichtlinearität werden bei der Berechnung des Bandabstandes die sogenannten Bowingparameter b verwendet [85]. Mit diesen wird in Gleichung 2.73 für das quaternäre Materialsystem der nichtlineare Einfluß der verschiedenen ternären Komponenten auf den Bandabstand in Abhängigkeit von der Materialzusammensetzung berücksichtigt. Die Daten für die Berechnung des Bandabstandes W_g und der Gitterkonstante a_0 für das quaternäre Materialsystem $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ können der Tabelle 2.2 entnommen werden. Sie stammen aus [86] und wurden für 300 K berechnet.

Material	Bandabstand W_g [eV]	Gitterkonstante a_0 [nm]
<i>GaAs</i>	1,4278	0,56533
<i>InAs</i>	0,3555	0,60584
<i>InP</i>	1,3474	0,58690
<i>GaP</i>	2,7897	0,54512

Tabelle 2.2: Eckdaten für die Berechnung des Bandabstandes und der Gitterkonstante für das quaternäre Materialsystem $InGaAsP$ mittels des Vegardschen Gesetzes für 300 K.

Die Bowingparameter der ternären Materialien sind [86]: $b_{GaInAs} = 0,42 eV$, $b_{GaInP} = 0,70 eV$, $b_{GaAsP} = 0,30 eV$ und $b_{InAsP} = 0,23 eV$.

Für quaternäre II-VI-Halbleiter wird als Substratmaterial *GaAs* und für quaternäre III-V-Halbleiter wird als Substratmaterial *GaAs* oder *InP* verwendet. Um im Epitaxieprozeß die Anzahl der kristallinen Defekte möglichst gering zu halten, sollen die zu realisierenden Halbleiterschichten möglichst gitterangepaßt auf dem Substrat aufwachsen. In vielen Fällen ist auch ein Wachstum von Materialien mit unterschiedlichen Gitterkonstanten möglich. Hierfür existieren aber gewisse Einschränkungen. Liegt die Schichtdicke einer verspannt aufgewachsenen Schicht unterhalb einer vom Material abhängigen, kritischen Schichtdicke, so wird

diese in Wachstumsrichtung elastisch verspannt und übernimmt senkrecht zur Wachstumsrichtung die Gitterkonstante des Substratmaterials. Das Volumen der Einheitszelle bleibt erhalten. Diese Art der Verspannung wird auch als tetragonale Verspannung bezeichnet. Dessen Prinzip ist in Abbildung 2.10 dargestellt.

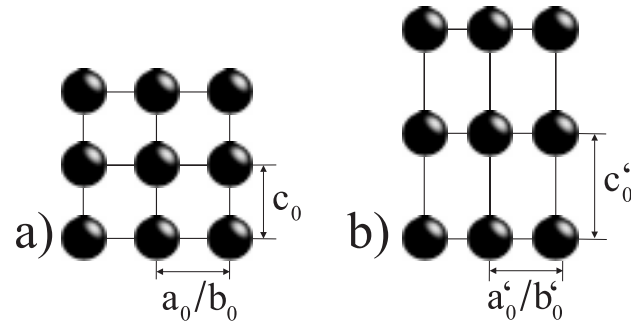


Abbildung 2.10: Prinzip der tetragonalen Verspannung

Abbildung 2.10.a zeigt ein unverspanntes Kristallgitter mit den Gitterkonstanten a_0 , b_0 und c_0 und Abbildung 2.10.b zeigt ein elastisch, tetragonal verspanntes Kristallgitter mit den Gitterkonstanten a'_0 , b'_0 und c'_0 . Die Gitterkonstanten a'_0 und b'_0 entsprechen den Gitterkonstanten des Materials, auf dem das elastisch verspannte Material aufgewachsen ist. Die Gitterkonstante c'_0 stellt sich entsprechend dem Einheitszellenvolumen des unverspannten Kristallgitters ein.

Aus der elastischen Verspannung resultiert eine Veränderung in der Bandstruktur der verspannten Schicht. Damit ist die gezielte Beeinflussung optischer und elektrischer Halbleitereigenschaften möglich. Dieser Effekt wird z.B. zur Realisierung von optischen Modulatoren aus dem Materialsystem $Ga_xIn_{1-x}As(P)/Ga_yIn_{1-y}As(P)$ genutzt [86]. Liegt die Schichtdicke des aufgewachsenen Materials oberhalb der kritischen Schichtdicke, so ist kein gitterangepaßtes Wachstum mehr möglich. Dieses führt zu einer hohen Anzahl von strukturellen Defekten, die sich nachteilig auf das elektrische und optische Verhalten der Halbleiterheterostrukturen auswirken. Zur meßtechnischen Erfassung der Gitterkonstanten bzw. der -verspannung eignet sich insbesondere die Elektronenbeugungsmesstechnik. Ohne geeignete Simulationsprogramme ist aber nur die qualitative und nicht eine quantitative Interpretation von gemessenen Elektronenbeugungsmustern möglich. Zur Charakterisierung struktureller Defekte im Kristallaufbau eignen sich insbesondere die Hellfeld- und die Hochauflösungs-Hellfeldabbildung, auf die schon in Kapitel 2.3.3 eingegangen wurde. Mit diesen Abbildungstechniken sind bis auf Punktdefekte alle Kristalldefekte abbildbar. Der Nachteil der nicht hochauflösenden Hellfeldabbildung ist, daß auch bei maximaler Ortsauflösung die Netzebenen des Kristallgitters nicht aufgelöst werden können. Mit der Hochauflösungs-

Hellfeldabbildung können auch die Netzebenen eines Kristallgitters dargestellt werden. Mit dieser Technik sind unter anderem strukturelle Defekte in $ZnS_xSe_{1-x}/ZnSe$ -Quantentrogstrukturen untersucht worden [58].

Zusätzlich zu dem Problem des gitterangepaßten Wachstums gibt es für quaternäre Halbleitermaterialien noch das Problem der Phasenseparation [10, 20], die auch unter dem Begriff Entmischung bekannt ist. Dabei zerfällt das quaternäre Halbleitermaterial schon während des Wachstumsprozesses, in Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur und der Materialzusammensetzung, in zwei stabile Phasen mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung. Diese Entmischung führt zu deutlich schlechteren Bauelementeigenschaften. Die Untersuchungsergebnisse eines RTEEM von quaternären Halbleiterheterostrukturen zeigen vor allem die folgenden Effekte:

- Kontrastmodulationen in Hellfeld- und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen [11, 14].
- Aufspaltung und Reduktion der Ausprägung von HOLZ-Linien in Elektronenbeugungsmustern [11].

Es wurde z. B. sowohl in den Hellfeld- als auch in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von quaternären Halbleiterproben, aus dem Material $Ga_{0,74}In_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$, eine quasiperiodische Kontrastmodulation mit einer Periodenlänge von ca. 25 nm beobachtet [11]. Prinzipiell weisen Kontrastmodulationen in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen auf eine stärkere Materialvariation hin. Für diese Proben wurde unter anderem mit Elektronenbeugungsmessungen aber nur eine Ga -Variation von $\Delta x = 0,02$ und eine As -Variation von $\Delta y = 0,04$ nachgewiesen [11]. Es wird nicht nur für quaternäre III-V-Halbleiter sondern auch für quaternäre II-VI-Halbleiter mit höheren Mg - und S -Anteilen ($x, y \geq 0,25$) von deutlich entmischten Schichten berichtet [20].

Als Ursache für die oben aufgeführten Effekte gelten vor allem die Oberflächenrelaxation [14, 87] und der Effekt des Static Atomic Displacement [88]. Insbesondere soll die Oberflächenrelaxation die Ursache für die Kontrastmodulationen und die Aufspaltung der HOLZ-Linien sein [14]. Bis jetzt fehlt aber noch der Beweis für diese Annahme. Für den Effekt der Oberflächenrelaxation wurde in [14] ein Modell vorgestellt, welches graphisch in Abbildung 2.11 dargestellt ist. Dieses Modell sagt die Modulation der Abstände der einzelnen, senkrecht zur Oberfläche stehenden Netzebenen voraus. Die Periodenlänge der Netzebenenmodulation stimmt mit der Periodenlänge der beobachteten Kontrastmodulationen überein. Zusätzlich kommt es an der Oberfläche der Halbleiterprobe zu einer Verkipfung der einzelnen Netzebenen, der sogenannten Oberflächenrelaxation. Zur Charakterisierung dieser Effekte werden insbesondere Abbildungstechniken und Elektronenbeugungsmessungen mit

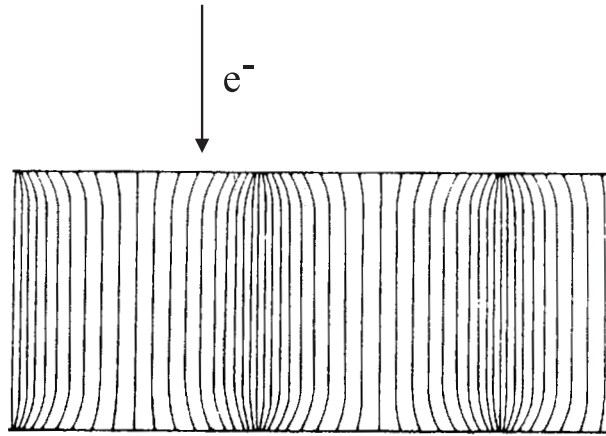


Abbildung 2.11: Modell der Oberflächenrelaxation aus [14]

einer sehr hohen Ortsauflösung benötigt. Denn nur hierdurch ist dieser Effekt nachweisbar.

Abbildung 2.12 stellt das Prinzip des Static Atomic Displacements dar. Abbildung 2.12.a

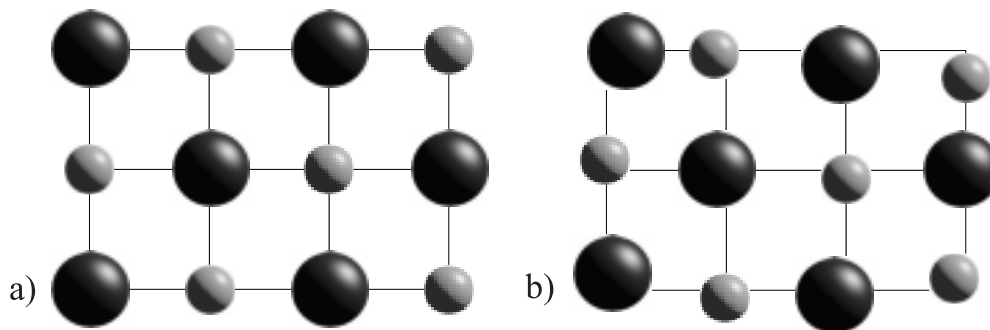


Abbildung 2.12: Prinzip des Static Atomic Displacements, a) Kristallgitter ohne und b) mit Static Atomic Displacement

zeigt ein Kristallgitter ohne und Abbildung 2.12.b zeigt ein Kristallgitter mit Static Atomic Displacement. Der Effekt des Static Atomic Displacement resultiert vor allem aus der veränderten Bindungslänge zwischen den einzelnen Atomen in quaternären Halbleitermaterialien [88]. Hierdurch verschiebt sich die Ruhelage der Atome aus der normalen Position im Kristallgitter. Darüber hinaus kommt durch die quasiperiodische Veränderung der Materialeigenschaften eine Zufallskomponente bei der Realisierung der Bauelemente zum Tragen, die die Reproduzierbarkeit der Bauelementeigenschaften weitestgehend verhindert.

Aus diesen Gründen ist gerade für quaternäre Halbleitermaterialien ein 'Feedback' zwischen Technologie und Meßtechnik unerlässlich. Nur hierdurch können trotz dieser Nachteile noch technisch relevante quaternäre Halbleiterbauelemente mit ausreichender Qualität realisiert und deren Herstellungsprozeß optimiert werden. Die dafür verwendete Meßtechnik bzw.

Meßanordnung muß eine hohe laterale Auflösung im Nanometer- und wenn möglich sogar im Subnanometerbereich mit einer hohen Nachweisempfindlichkeit bei der Bestimmung der lokalen chemischen Zusammensetzung aufweisen. Hierfür ist das verwendete RTEEM hervorragend geeignet. Es stellt für die Probencharakterisierung grundsätzlich zwei Meßtechniken zur Verfügung, die Elektronenbeugungstechniken aus Kapitel 2.3.2 und die Abbildungstechniken aus Kapitel 2.3.3. Je nach Defektart bzw. benötigter Information wird entweder eine der Charakterisierungstechniken oder eine Kombination von beiden verwendet. Aber erst durch den Vergleich zwischen Simulation und Experiment ist eine quantitative Probencharakterisierung möglich.

2.5.2 Gruppe III-Nitride

Die normale kristalline Struktur der Gruppe III-Nitride ist die Wurtzitstruktur. In Abhängigkeit von der Kristallstruktur des Substrats und den Wachstumsparametern ist aber auch das Wachstum einer Zinkblendekristallstruktur für die Gruppe III-Nitride möglich [89, 90]. Abbildung 2.13 zeigt die Wurtzitstruktur der Gruppe III-Nitride. Die Wurtzitstruktur setzt

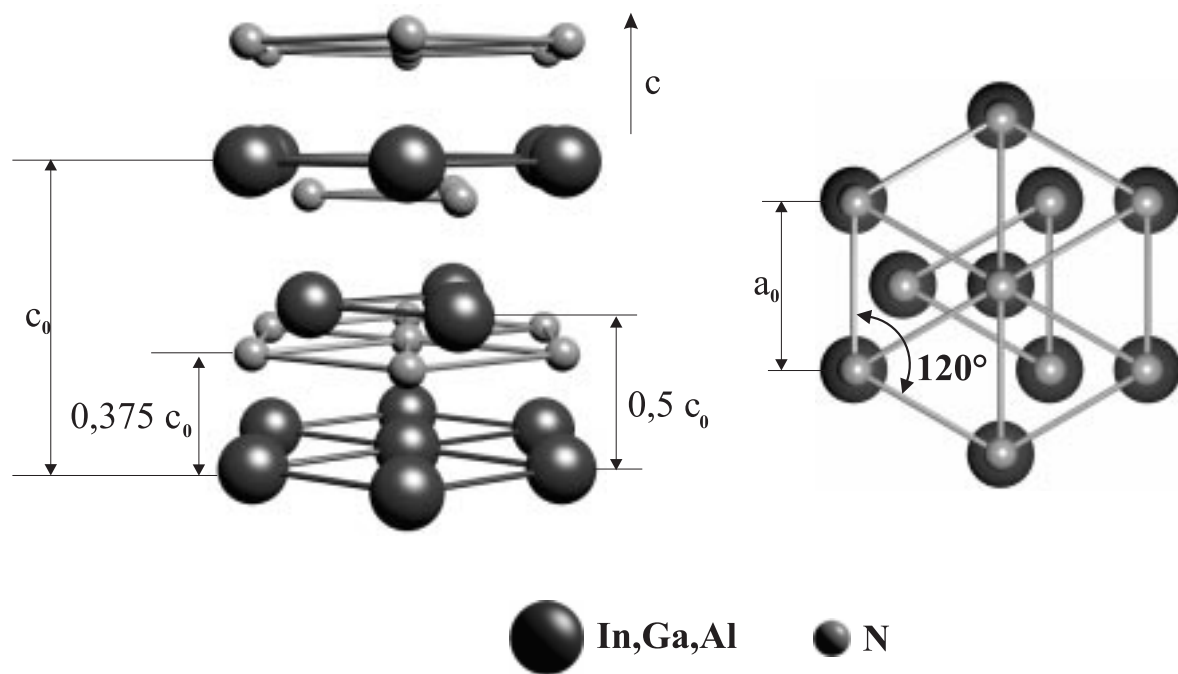


Abbildung 2.13: Kristalliner Aufbau der Wurtzitstruktur.

sich aus zwei senkrecht zueinander um ca. $0,375 c_0$ verschobenen hexagonalen Untergittern zusammen. Diese hexagonalen Untergitter besitzen jeweils die hexagonal-dichteste Kugelpackung und bestehen aus zwei unterschiedlichen Materialien. Im Fall der Gruppe III-Nitride

besteht das eine Untergitter aus den Materialien In , Ga und/oder Al und das andere Untergitter aus dem Material N . Die Kanten der hexagonalen Grundflächen haben jeweils eine Kantenlänge von a_0 und zwischen diesen Kanten existiert jeweils ein Winkel von 120° . In Wachstumsrichtung (c -Richtung) hat die Wurtzitstruktur die Kantenlänge c_0 .

Auch für die Gruppe III-Nitride ist der Bandabstand über weite Bereiche einstellbar. Anhand des Vegardschen Gesetzes kann sehr genau der Bandabstand W_g und die Gitterkonstante a_0 für ein vorgegebenes Mischungsverhältnis ermittelt werden.

$$a_0 = x a_{AlN/InN} + (1 - x) a_{GaN} \quad (2.73)$$

$$W_g = x W_{AlN/InN} + (1 - x) W_{GaN} + x(1 - x) K_{AlGaN/InGaN} \quad (2.74)$$

Die Daten für die Berechnung des Bandabstandes W_g und der Gitterkonstante a_0 für die Gruppe III-Nitride stammen aus [91] und können der Tabelle 2.3 entnommen werden. Zusätzlich ist in der Gleichung 2.74 zur Berechnung des Bandabstandes ein Korrekturfaktor

Verbindung	Bandabstand W_g [eV]	Gitterkonstante a_0 [eV]	Gitterkonstante c_0 [eV]
AlN	6,15	0,3112	4,982
GaN	3,36	0,3189	0,5185
InN	2,0	0,3548	0,576

Tabelle 2.3: Eckdaten für die Berechnung des Bandabstandes und der Gitterkonstanten für die Gruppe III-Nitride mittels des Vegardschen Gesetzes für 300 K.

$K_{AlGaN/InGaN}$ angegeben. Der Wert dieses Faktors ist für das Material $InGaN$ 0,6 eV und für das Material $AlGaN$ 1,2 eV [92]. Da dieser Korrekturfaktor für den nichtlinearen Term der Gleichung 2.74 verwendet wird, handelt es sich prinzipiell um einen Bowingparameter.

Das Hauptproblem der Gruppe III-Nitride ist das Fehlen eines geeigneten Substratmaterials, mit dem ein gitterangepaßtes Wachstum möglich ist. Deshalb ist eine hohe Defektdichte für die zu realisierenden Materialsichten aus den Gruppe III-Nitriden zu erwarten. Es existieren mehrere Ansätze bei der Suche nach einem geeigneten Substratmaterial für die Gruppe III-Nitride. Einerseits sind Substrate mit einer Zinkblendekristallstruktur wie $GaAs$ oder GaP denkbar, auf denen in der $\{111\}$ bzw. $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ -Orientierung die Gruppe III-Nitrid-Schichten epitaktisch aufgewachsen werden [93]. Andererseits sind aber auch hexagonale Kristallgitter oder Wurtzitgitter als Substrat für die Gruppe III-Nitride denkbar. Hierzu werden vor allem die Materialien Silizium-Karbid (SiC) [33] und Saphir (Al_2O_3) [94] verwendet. Mit einem einkristallinen ZnO -Substrat wäre eine perfekte Gitteranpassung für einen großen Bereich der Gruppe III-Nitride möglich, dieses ist zur Zeit aber käuflich noch

nicht erhältlich [6]. Das wichtigste Substratmaterial von den hier aufgeführten ist derzeit das Saphirsubstrat (Al_2O_3). Die Gitterkonstanten dieses Materials sind $a_0 = 0,4758 \text{ nm}$ und $c_0 = 1,2291 \text{ nm}$. Aufgrund der im Vergleich zu den Gruppe III-Nitriden großen Gitterkonstanten erscheint es als Substratmaterial denkbar ungeeignet. Das Material AlN läßt sich trotzdem nahezu gitterangepaßt auf dem Saphirsubstrat aufwachsen. Hierzu wächst das AlN um 30° verdreht auf dem Saphir auf. Ein Teil der AlN -Atome wird dabei auf Zwischengitterplätzen des Saphirsubstrats positioniert. Dieses Prinzip ist noch einmal in der Abbildung 2.14 dargestellt. Die AlN -Schicht wird als Bufferschicht verwendet, auf der

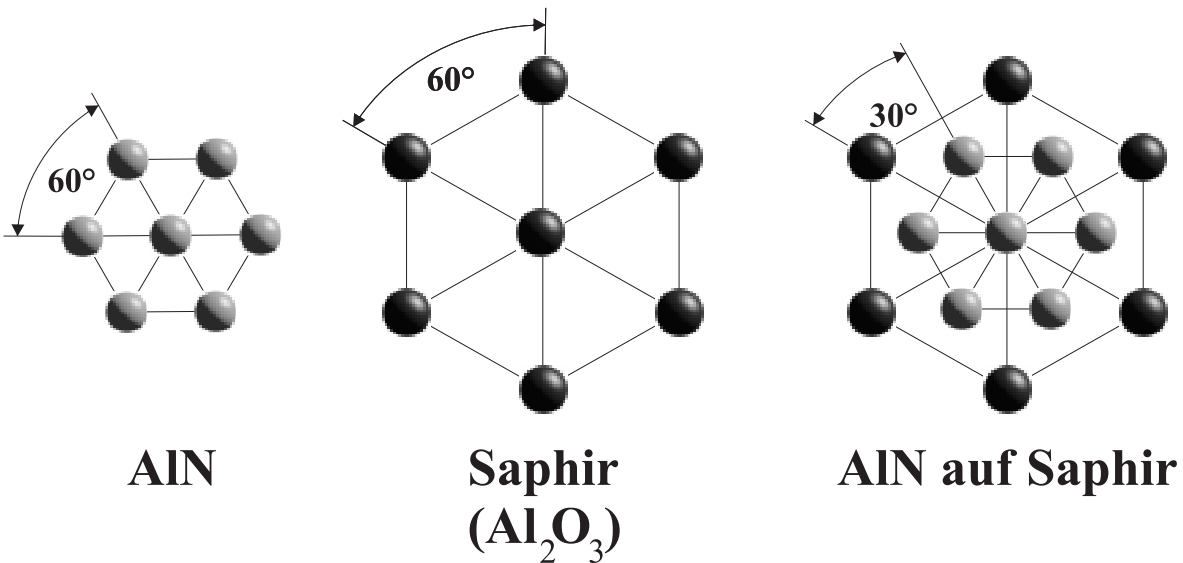


Abbildung 2.14: Prinzip des Kristallwachstums von AlN auf Saphirsubstrat.

dann GaN epitaktisch aufgewachsen wird. Auf dem GaN werden dann die weiteren Gruppe III-Nitrid-Schichten epitaktisch aufgebracht. Für das Wachstum von $AlGaN$ auf GaN existieren nur geringe Probleme, da deren Gitterkonstanten nur kleine Unterschiede aufweisen. Im Gegensatz dazu existieren große Probleme für die Realisierung von $InGaN$ -Schichten auf GaN . Diese resultieren aus dem großen Unterschied der Gitterkonstanten a_0 von InN und GaN . Dadurch ist nur ein elastisch verspanntes Gitterwachstum möglich und es wird mitunter sehr schnell die kritische Schichtdicke erreicht, ab der die aufgewachsene $InGaN$ -Schicht relaxiert [41]. Außerdem existieren stark unterschiedliche Wachstumstemperaturen für das optimale Wachstum von GaN und InN [95]. Trotz dieser Probleme und der hohen Fehlerraten wird von realisierten $InGaN$ - und $AlGaN$ -Halbleiterheterostrukturen immer noch Licht emittiert. Für Laserdioden aus den Gruppe III-Nitriden, mit hoher Lebensdauer, ist aber eine deutliche Reduktion der Defektdichte notwendig. Gleichzeitig ist zu klären, wieso trotz der hohen Fehlerrate, überhaupt noch Licht emittiert werden kann. Deshalb sind Untersuchungen erforderlich, die die atomare Defektstruktur und deren Einfluß auf die Bandstruktur

aufklären und zur Optimierung des Herstellungsprozesses beitragen. Auch hier ist das RTEM hervorragend für die Probencharakterisierung geeignet. Zur Untersuchung der Defektstruktur lassen sich sowohl die hochauflösende Hellfeldabbildung als auch die hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildung einsetzen. Damit können dann unter anderem genauere Aussagen über pyramidenförmige Defektstrukturen gemacht werden, die in auf Saphir aufgewachsenen *GaN*-Schichten gefunden wurden [96]. Bis jetzt existieren aber nur wenige Arbeiten, in denen hochauflösende Hellfeld- und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen vorgestellt werden. Daher sind für die korrekte Interpretation dieser Abbildungen, im Speziellen für die hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, noch grundlegende Arbeiten erforderlich, in denen diese genauer untersucht werden. Die Elektronenbeugungsmessungen in dem verwendeten RTEM ermöglichen darüber hinaus die Bestimmung der Polarität von *GaN*-Schichten mit einer besonders hohen Ortsauflösung. Mit Polarität ist die Abfolge der Atomebenen innerhalb des Kristallgitters gemeint, die sich unter bestimmten Umständen umkehren kann. Die Bestimmung der Polarität kann z. B. zur Klärung der Ursache für die pyramidenförmigen Strukturen beitragen, da in diesen eine spezielle Polarität überwiegend vorliegt [96].

3. Leistungsstand und Defizite in der Elektronenbeugungssimulation

Für die Materialcharakterisierung im Nanometer- und Subnanometerbereich werden heutzutage Elektronenmikroskope eingesetzt. Aus den damit erzielbaren Meßergebnissen sind unter anderem Informationen über die dreidimensionale Kristallstruktur, die Materialzusammensetzung oder sogar die Bandstruktur der zu untersuchenden Probe herleitbar. Da diese Meßergebnisse in Form höchst komplizierter Abbildungen und Muster gewonnen werden, entziehen sie sich vielfach einer einfachen Interpretation, so daß Simulationen zu deren Deutung unerlässlich sind. Schon 1973 sind daher Multislice-Simulationen durchgeführt worden [97, 98]. Aufgrund der begrenzten Rechenleistung der damals zur Verfügung stehenden Computer, waren aber nur prinzipielle und unsystematische quantitative Untersuchungen möglich.

Mit zunehmender Miniaturisierung in der Halbleitertechnik wurde die zur Verfügung stehende Rechnerleistung immer größer. Gleichzeitig stieg der Bedarf an qualitativ hochwertigen Halbleitermaterialien und -bauelementen. Dieses erfordert zunehmend quantitative, systematische elektronenmikroskopische Materialuntersuchungen. Für die quantitative Materialuntersuchung wird vor allem der Blochwellenansatz eingesetzt [99–101], der in Kapitel 2.4.2.1 vorgestellt wurde. Der entscheidende Nachteil des Blochwellenansatzes ist, daß Asymmetrien im Aufbau von Halbleiterkristallen, wie z. B. Materialgrenzflächen, wenn überhaupt, nur unter sehr hohem Aufwand simuliert werden können. Mit dem Multislice-Ansatz ist dieses jedoch ohne größeren Aufwand möglich. Aufgrund der benötigten hohen Rechnerleistung wurde dieser Ansatz erst sehr spät zur quantitativen Materialanalyse eingesetzt. In dem Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik, der Gerhard Mercator Universität, wurde dieser Ansatz schon erfolgreich zur Analyse von $ZnSSe/ZnSe$ -Heterostrukturen mittels Ordnungszahl-Kontrastsimulationen [56, 58], zur Simulation von Elektronenbeugungsmustern von Halbleitergrenzflächen [59] und zur Bestimmung der C -Dotierung von $GaAs$ [35] eingesetzt. Der entscheidende Nachteil dieser Arbeiten ist die Vernachlässigung von inelastischen Effekten in den Multislice-Simulationen. Für die quantitative Analyse von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen ist die Berücksichtigung von inelastischen Effekten aber unerlässlich. Daher sind in dem Multislice-Ansatz, der im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik verwendet wird, inelastische Effekte zur Simulation von Elektronenbeugungsmustern und zur Ordnungszahl-Kontrastsimulation zu berücksichtigen. Hierzu eignet

sich insbesondere der Ansatz aus [53], der auf dem sogenannten "Frozen Phonon"-Ansatz basiert. Dieser Ansatz ist schon erfolgreich im Zusammenhang mit dem Multislice-Ansatz aus [51], der im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik verwendet wird, von R. F. Loane und Peirong Xu, unter anderem zur Berechnung der Vibrationsamplitude von Silizium eingesetzt worden [52, 53]. Auf das Prinzip des Ansatzes aus [53] und dessen Vor- und Nachteile wurde schon in den Kapiteln 2.1.4.2.2 und 2.4.2.3 genauer eingegangen. Für die quantitative Untersuchung von Halbleiterheterostrukturen ist es notwendig, auch Elektronenbeugungsmuster und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für Halbleiterheteroübergänge unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung zu simulieren. Mit dem Ansatz aus [53] können aber nur Proben ohne Asymmetrien im Kristallaufbau, d. h. keine Materialgrenzflächen, simuliert werden. Daher ist im Rahmen dieser Arbeit zu klären, in welcher Form der Ansatz modifiziert werden muß, um auch für Proben mit Materialgrenzflächen die thermisch diffuse Streuung simulieren zu können.

Für mesoskopische Halbleiter wurden bis jetzt nur wenige Untersuchungsergebnisse veröffentlicht, bei denen der Multislice-Ansatz zur Klärung der jeweiligen Fragestellung eingesetzt worden ist. Im Folgenden werden hierzu der Leistungsstand und die Defizite für einige wichtige Fragestellungen genauer dargestellt.

Es existieren einige Arbeiten, in denen Materialgrenzflächen mit einem RTEM genauer untersucht wurden [27, 29, 40, 69]. In einer Arbeit wurde von Asymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Materialgrenzflächen in Halbleiterheterostrukturen berichtet [29]. Zu dieser Problemstellung existiert eine Arbeit mit ersten Multislice-Simulationsergebnissen [59]. Diese Simulationsergebnisse wurden aber unter Vernachlässigung von inelastischen Effekten erzielt. Das entscheidende Problem für diesen Effekt ist aber, daß dessen Ursache bis jetzt noch nicht bekannt ist und erst durch systematische Untersuchungen ermittelt werden kann. Darüber hinaus fehlen auch Erkenntnisse über die Einsetzbarkeit dieses Effektes zur Charakterisierung von Materialgrenzflächen.

Zur schnellen Bestimmung der Verspannung in einem Halbleiterwerkstoff kann der kinematische Simulationsansatz eingesetzt werden. Eine genauere quantitative Verspannungsbestimmung ist mit dem Blochwellenansatz möglich. Der entscheidende Nachteil dieser beiden Ansätze ist, daß der kinematische Simulationsansatz nur Materialien ohne Asymmetrien im Kristallaufbau und der Blochwellenansatz, wenn überhaupt, nur unter sehr hohem Aufwand Materialien mit Asymmetrien im Kristallaufbau simulieren kann. Mit dem Multislice-Ansatz ist dieses ohne größere Probleme möglich. Prinzipiell ist mit dem Multislice-Ansatz auch die Bestimmung von Materialverspannungen möglich. Dieser ist aber im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik, wenn nicht sogar in allen anderen Forschungsgruppen, bis

jetzt noch nicht zur Verspannungsbestimmung in mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen eingesetzt worden. Daher fehlen bis jetzt auch Erkenntnisse über die Verwendbarkeit von Multislice-Simulationsergebnissen zur Verspannungsbestimmung in mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen.

Vielfach wird in der Literatur über Entmischungsphänomene in quaternären Halbleitermaterialien berichtet [10, 20]. Als Resultat dieser Entmischung wird oft von dem daraus resultierenden Effekt des Static Atomic Displacements [88] und dem Effekt der Oberflächenrelaxation [14, 87] berichtet. Bis jetzt existieren aber nur vereinzelte RTEM-Untersuchungen zu diesen Effekten [11, 12]. Für die Interpretierung der RTEM-Meßergebnisse existiert möglicherweise weltweit noch kein geeignetes Multislice-Simulationsmodell für den verwendeten Multislice-Ansatz. Ein solches Modell muß daher noch, basierend auf den in der Literatur vorgestellten Modellen [14, 88], entwickelt werden. Mit diesen Modellen kann dann untersucht werden, inwieweit der Effekt des Static Atomic Displacements und der Effekt der Oberflächenrelaxation in quaternären Proben nachweisbar ist. Insbesondere kann dann auch geklärt werden, ob die Kontrastmodulationen in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von entmischten Proben wirklich das Resultat von Oberflächenrelaxationen sind. Mit den Ergebnissen aus solchen Untersuchungen ist zukünftig eine bessere Interpretation von RTEM-Meßergebnissen und dadurch auch eine optimalere Charakterisierung von Proben aus quaternären Halbleiterheterostrukturen möglich.

Auch für die reine Ordnungszahl-Kontrastabbildung, insbesondere für die Untersuchung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen, besteht noch einiges an Informationsbedarf. Dieses betrifft unter anderem die Material- und Grenzflächencharakterisierung. Es existieren schon einige Arbeiten in denen *Si/Ge*-Grenzflächen mittels eines RTEM charakterisiert wurden [40] und in denen die Grenzflächenstruktur von *ZnSSe/ZnSe*-Halbleiterheterostrukturen anhand des Vergleichs von experimentellen und simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen untersucht wurden [56, 58]. Bis jetzt fehlen aber Untersuchungen, in denen die Grenzflächenstruktur und der Materialaufbau von Heterostrukturen aus dem *InGaAs/InP*-Materialsystem, im Bereich der Materialgrenzfläche, mittels hochauflösender Ordnungszahl-Kontrastsimulationen untersucht wird.

Für die Simulation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung sind bis jetzt nur Untersuchungen durchgeführt worden, die den Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von reinen Materialien wie *InP* [55] und *Si* [102] genauer betrachten. Es ist aber bis jetzt unklar, welchen Einfluß die thermisch diffuse Streuung auf die Ordnungszahl-Kontrastabbildung von Grenzflächen in mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen hat.

In verschiedenen Veröffentlichungen wird von Auflösungsverbesserungen in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, aufgrund der Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter eines RTEM, berichtet [30]. Diese Optimierung sollte prinzipiell auch für mesoskopische Halbleiterheterostrukturen zu einer Verbesserung in der Auflösung führen. Bis jetzt fehlen aber noch jegliche Informationen, ob und vor allem in welchem Maße diese Optimierung zu einer Auflösungsverbesserung führt.

Die Gruppe III-Nitride sind ein neuartiges Materialsystem, das eine vielversprechende Zukunft hat. Die normale kristalline Struktur dieses Materialsystems ist die Wurtzitstruktur. Derzeit existieren noch Probleme bei der Herstellung von Bauelementen aus diesem Materialsystem. Diese resultieren aus den starken Unterschieden für das optimale Wachstum der einzelnen Materialien der Gruppe III-Nitride, dem Fehlen von geeigneten Substraten und der daraus resultierenden hohen Defektdichte. Für die Reduktion der Defektdichte und die Optimierung der Herstellungsprozesse ist ein "Feedback" der Meßergebnisse in den Herstellungsprozeß notwendig. Auch hier eignet sich das RTEM hervorragend zur Erstellung der benötigten Meßergebnisse. Bis jetzt wurden damit für Proben aus den Gruppe III-Nitriden aber nur vereinzelte Untersuchungen durchgeführt. Bei den erzielten Untersuchungsergebnissen handelt es sich vor allem um Elektronenbeugungsmessungen und um nicht hochaufgelöste Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Hochaufgelöste Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von den Gruppe III-Nitriden existieren noch fast gar nicht.

Als Grundlage für die Charakterisierung der Gruppe III-Nitride wird ein geeignetes Simulationsmodell benötigt, das die Wurtzitstruktur in einer für die Simulationen geeigneten Form aufbereitet. Dieses existiert aber im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik bis jetzt noch nicht. Für den verwendeten Multislice-Ansatz ist bis zum Beginn dieser Arbeit wahrscheinlich weltweit noch kein geeignetes Multislice-Simulationsmodell für Halbleiterheterostrukturen aus den Gruppe III-Nitriden entwickelt worden.

Für das Material *GaAs* mit der Zinkblendekristallstruktur sind von einer anderen Gruppe erste Untersuchungen durchgeführt worden, die das Verhalten des hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastes in Abhängigkeit von der Oberflächenverkipfung demonstrieren [30]. Bisher gibt es nur wenige hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Proben aus den Gruppe III-Nitriden. Daher existieren bis jetzt auch keine gesicherten Informationen über den Einfluß der Oberflächenverkipfung auf deren hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Um die Interpretation dieser Meßergebnisse zu vereinfachen, ist es notwendig, schon im Vorfeld diesen Einfluß anhand von simulierten hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zu untersuchen. Hierzu fehlen aber bis jetzt noch syste-

matische Simulationsergebnisse.

Für das Materialsystem $ZnSSe$ wurden Untersuchungen über den Einfluß der Materialvariation, auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast, durchgeführt [58]. Auch hierzu existieren für die Gruppe III-Nitride, wenn überhaupt, nur vereinzelte Untersuchungsergebnisse. Systematische Untersuchungen sind auf diesem Gebiet anscheinend weltweit noch nicht durchgeführt worden. Da diese Ergebnisse aber zukünftig als Grundlage für eine vereinfachte Interpretation von hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitriden benötigt werden, ist eine solche systematische Untersuchung absolut notwendig.

Es ist schon auf das Fehlen von Erkenntnissen über den Einfluß der Optimierung von elektronenmikroskopischen Parametern auf die Verbesserung der Probencharakterisierung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen im Bereich der Materialgrenzflächen hingewiesen worden. Auch für die Gruppe III-Nitride fehlen genauere Kenntnisse über den Einfluß der Optimierung von elektronenmikroskopischen Parametern auf die Verbesserung der Probencharakterisierung. Hierbei ist aber nicht nur der Bereich des Materialübergangs, sondern auch die Charakterisierung einzelner Gruppe III-Nitrid-Schichten betroffen. Zur Klärung dieses Punktes sind daher grundlegende Untersuchungen unerlässlich.

Für die oben aufgeführten Untersuchungen werden eine Vielzahl von Simulationsergebnissen benötigt. Insbesondere der Multislice-Ansatz, der hauptsächlich verwendet werden soll, hat einen sehr großen Rechenzeitbedarf für die Elektronenbeugungssimulation, und einen noch größeren für die Ordnungszahl-Kontrastsimulation. Deshalb ist es aufgrund der Menge der durchzuführenden Simulationen unerlässlich, den Multislice-Ansatz von den bisher verwendeten Rechnerplattformen auf leistungsfähigere Rechnerplattformen, wie den Parallelrechner SPP2000, zu portieren. Dieses ist aber bis zu Beginn dieser Arbeit im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik noch nicht geschehen.

4. Weiterentwicklung der Simulationstechniken

Zur Klärung der in Kapitel 3 dargestellten Defizite und Problemstellungen sind Neu- und Weiterentwicklungen unerlässlich. Dieses betrifft insbesondere den Multislice-Ansatz, der für die meisten Simulationen in dieser Arbeit verwendet wurde. Im Folgenden sind die wichtigsten Neu- und Weiterentwicklungen aufgelistet, die für diese Arbeit benötigt werden.

- Erschließung neuer Rechnerplattformen für den Multislice-Ansatz.
- Erweiterung des elastischen Multislice-Ansatzes um die thermisch diffuse Streuung für die quantitative Elektronenbeugungssimulation.
- Erstellen eines geeigneten Simulationsmodells für die Kristallstruktur der Gruppe III-Nitride, insbesondere für den Multislice-Ansatz.
- Entwicklung von Multislice-Simulationsmodellen für die Simulation des Effektes der Oberflächenrelaxation und des Static Atomic Displacement Effektes.
- Entwicklung eines geeigneten Simulationsmodells für die Elektronenbeugungssimulation an nicht idealen Materialübergängen.
- Realisierung von weiteren Analyseprogrammen für die Auswertung der Simulationsergebnisse.

4.1 Hard- und Software

4.1.1 Verwendete Rechnersysteme und Software

Die Simulationen für diese Arbeit wurden vor allem auf zwei verschiedenen Rechnerplattformen durchgeführt. Dieses sind eine "HP9000/700-C100" Workstation und ein Parallelrechner vom Typ "HP SPP 2000", bei dem es sich um eine Neuanschaffung handelt. Die Workstation ist mit einem 64 MB großen Arbeitsspeicher ausgerüstet. Der Parallelrechner verfügt in seiner maximalen Ausbaustufe über 32 Prozessoren, einen Arbeitsspeicher von 7 GB und eine maximale Rechenleistung von 32 GFlops (Giga Floating point operations). Wegen seiner hohen Rechengeschwindigkeit, seinem großen Arbeitsspeicher und der Möglichkeit zur

Parallelverarbeitung bzw. Parallelisierung von Programmen, eignet sich dieser Rechner insbesondere für quantitative Elektronenbeugungssimulationen. Darüber hinaus war die neue Version des Programmpakets für die Multislice-Simulationen [51] gegenüber der in [58] verwendeten Simulationssoftware nur auf Convex-Rechnern und IBM RS6000 Workstations lauffähig. Deshalb war es für diese Arbeit notwendig, das Programmpaket an die jeweilige Rechnerplattform anzupassen. Dieses betrifft vor allem die Simulationssoftware, aber auch die verwendeten mathematischen Bibliotheken.

4.1.2 Die optimierte Vorgehensweise für Untersuchungen mit dem Multislice-Ansatz

Erst der bildpunktweise Vergleich von simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern ermöglicht eine vollständig quantitative Probencharakterisierung. Diese erfordert eine sehr hohe Auflösung für die zu simulierenden Elektronenbeugungsmuster. Um eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment zu erzielen, ist eine iterative Vorgehensweise bei der Annäherung des Simulationsergebnisses an das experimentelle Ergebnis notwendig. Werden die hierzu notwendigen Simulationen nur mittels des Multislice-Ansatzes durchgeführt, und die gewählte Auflösung entspricht der Auflösung des Meßergebnisses, so ist die Gesamtsimulationsdauer für die Probencharakterisierung nicht mehr akzeptabel. Diese Tatsache ist auch anhand der Gleichung 2.64 abschätzbar. Zusätzlich ist zu berücksichtigen, daß für ein verwertbares Simulationsergebnis das Verhältnis von Ausgangs- zu Eingangsintensität nicht den Wert von 0,9 unterschreiten darf [83]. Um die Gesamtsimulationsdauer so klein wie möglich zu halten, ist daher eine gezielte Vorgehensweise für die Vorbereitung und die Durchführung von Multislice-Simulationen unumgänglich. Die Gesamtsimulationsdauer kann reduziert werden, wenn viele der folgenden Eckdaten im Vorhinein so genau als möglich ermittelt werden. Diese sind:

- Die Beschleunigungsspannung,
- die Strahl- und/oder Probenverkipfung,
- die Gitterverspannung,
- die Materialzusammensetzung,
- die Probendicke
- und der zu vergleichende Bereich des Elektronenbeugungsmusters.

Anhand von kinematischen Simulationen ist die Beschleunigungsspannung, die Probenorientierung und die Gitterverspannung der Probe bestimmbar [32]. Zusätzlich läßt sich mittels der Gitterverspannung und des Vegardschen Gesetzes die Materialzusammensetzung abschätzen. Eingeschränkt wird das Ergebnis der kinematischen Simulationen aber durch die Tatsache, daß unter anderem relativistische Effekte vernachlässigt werden und von einem idealen Kristallaufbau ausgegangen wird.

Mit den oben genannten Einschränkungen kann die Gesamtsimulationsdauer für die Elektronenbeugungssimulation durch die folgende Vorgehensweise minimiert werden:

1. Bestimmung der Materialparameter und der elektronenmikroskopischen Parameter mittels kinematischer Simulationen.
2. Start der Multislice-Simulationen mit einer möglichst geringen Bildpunktzahl und Auflösung.
3. Vergrößerung der Bildpunktzahl und der Auflösung, wenn notwendig.
4. Optimierung aller Materialparameter und der elektronenmikroskopischen Parameter.
5. Abschließende Simulation mit bestmöglicher Auflösung.

4.1.3 Die Parallelisierung des Multislice-Ansatzes

Der zur Verfügung stehende Parallelrechner bietet die Möglichkeit, Simulationsprogramme zu parallelisieren. Eine wichtige Voraussetzung für die Parallelisierung eines Problems ist, sofern dieses überhaupt möglich ist, daß das zu parallelisierende Problem seriell schon hoch optimiert ist. Dieses trifft bei den zur Verfügung stehenden Simulationsprogrammen zu.

Es gibt grundsätzlich zwei Möglichkeiten zur Parallelisierung eines Multislice-Simulationsprogrammes.

1. Das Simulationsprogramm wird mittels des auf dem Parallelrechner zur Verfügung stehenden Compilers parallelisiert.
2. Ein Programm steuert mehrere parallel laufende serielle Simulationsprogramme.

Entsprechend dem gewählten Parallelisierungsansatz ergeben sich spezifische Vor- und Nachteile.

Die Parallelisierung anhand des Compilers bietet eine hohe Flexibilität bei der Wahl der Anzahl der zu verwendenden Prozessoren für die Durchführung der Simulationen. Durch

die Parallelisierung des Programmes sollten mit zunehmender Prozessoranzahl die Berechnungen beschleunigt und somit die Berechnungsdauer reduziert werden. Wird die Anzahl der Prozessoren weiter erhöht, so kann es aber zur Umkehrung dieses Effektes kommen, indem sich die Berechnungen wieder verlangsamen und die Berechnungsdauer wieder erhöht wird [103]. Damit würde ein Maximum in der Beschleunigung der Berechnung für eine bestimmte Anzahl von Prozessoren existieren. Deshalb ist genauer zu untersuchen, inwieweit das oben Gesagte auf die verwendeten Simulationsprogramme zutrifft.

Im Fall der parallel laufenden seriellen Simulationsprogramme, muß die Anzahl der zur Verfügung stehenden Prozessoren schon im voraus genau bekannt sein. Nur dadurch läßt sich die zur Verfügung stehende Prozessorleistung maximal ausnutzen.

4.2 Weiterentwicklungen und Neuerungen für die Simulationsansätze

Im Folgenden werden der verwendete Ansatz für die quantitative Multislice-Simulation und die Lösungsansätze zu den Problemstellungen und Defiziten aus Kapitel 3 genauer beschrieben.

4.2.1 Die Einbeziehung der thermisch diffusen Streuung in den Multislice-Ansatz

Für quantitative Elektronenbeugungssimulationen müssen inelastische Effekte berücksichtigt werden. In [50] wird hierzu ein Ansatz vorgestellt, der in Kapitel 2.4.2.3 genauer beschrieben ist und auf dem sogenannten "Frozen Phonon"-Ansatz basiert. Bis zu Beginn dieser Arbeit sind die Elektronenbeugungssimulationen mittels des Multislice-Ansatzes, im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik, rein elastisch durchgeführt worden. Erst während dieser Arbeit ist der "Frozen Phonon"-Ansatz aus [50] in den Multislice-Ansatz aus [51] implementiert worden. Damit konnte dann, im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik erstmalig, dieser modifizierte Multislice-Ansatz zur quantitativen Elektronenbeugungssimulation eingesetzt werden. Abbildung 4.1 zeigt den Simulationsablauf für den Fall, daß mittels des Multislice-Ansatzes, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, quantitative Elektronenbeugungsmuster simuliert werden sollen. Zusätzlich ist in dieser Abbildung die Vorgehensweise für die quantitative Simulation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen dargestellt.

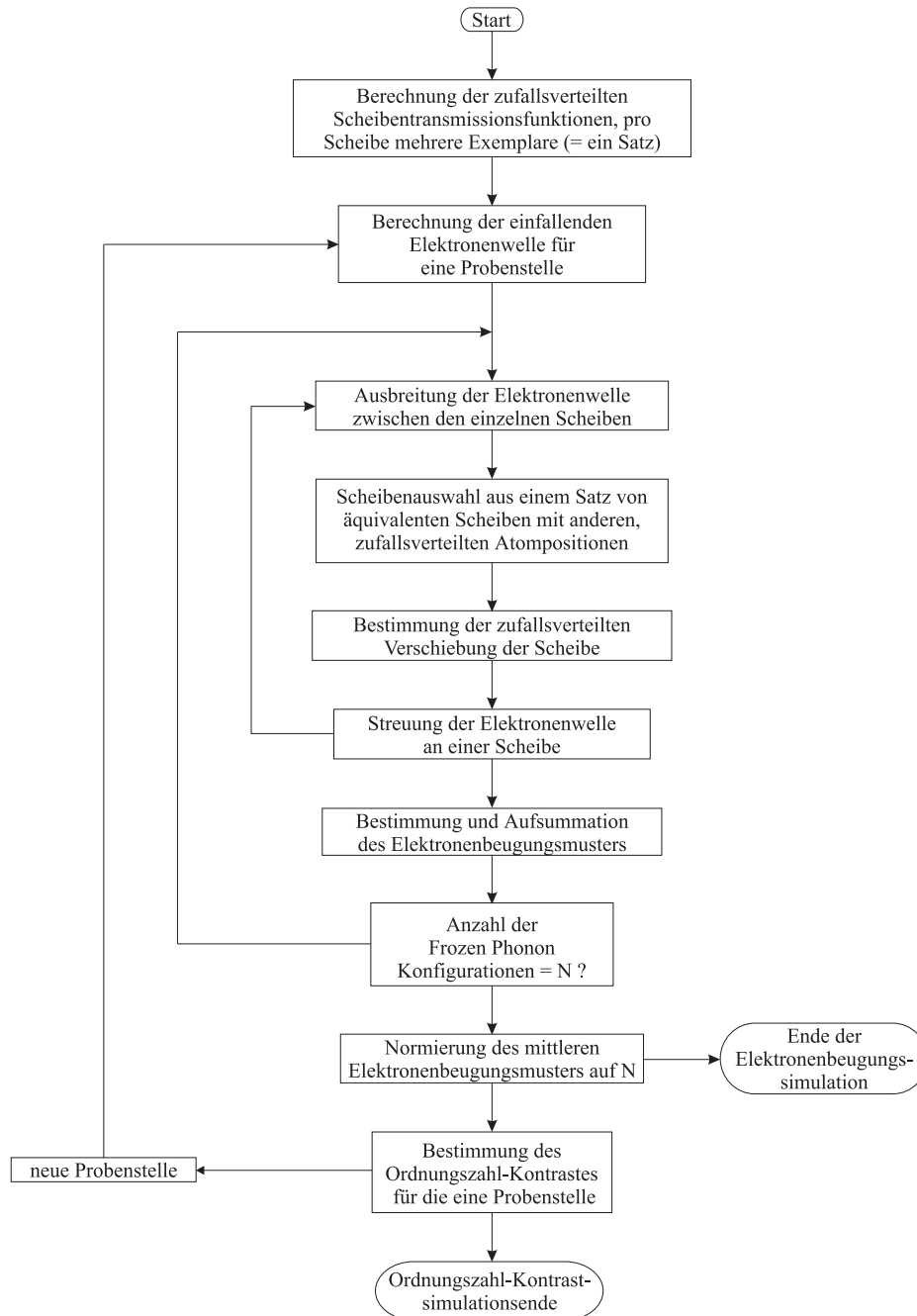


Abbildung 4.1: Modifizierter Multislice-Ansatz für die Simulation von Elektronenbeugungsmustern und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung

Im Folgenden wird kurz die in Abbildung 4.1 dargestellte Vorgehensweise für die Elektronenbeugungs- und Ordnungszahl-Kontrastsimulation erläutert. Als erstes wird für die Scheiben einer Periode jeweils ein Satz von Scheiben mit unterschiedlichen, zufallsverteilten Atompositionen berechnet. Dann wird die einfallende Elektronenwelle für eine vorgegebene Probenstelle berechnet. Danach wird das Elektronenbeugungsmuster für die Probendicke

berechnet. Hierzu wird solange, bis die geforderte Probendicke erreicht ist, für jede zu simulierende Scheibe zufällig eine Scheibe aus dem Satz von Scheiben ausgewählt. Die Scheiben in einem Satz unterscheiden sich nur durch die zufallsverteilten Atompositionen. Diese Scheibe wird dann noch zufallsverteilt verschoben. Abschließend wird die Streuung der Elektronenwelle an der Scheibe berechnet. Ist die geforderte Probendicke noch nicht erreicht, so wird die Ausbreitung der Elektronenwelle zwischen den Scheiben berechnet und der obige Vorgang wird wiederholt. Wenn die Probendicke erreicht ist, wird das berechnete Elektronenbeugungsmuster mit den schon berechneten Elektronenbeugungsmustern aufsummiert. Ist eine ausreichende Anzahl von Elektronenbeugungsmustern berechnet worden, so wird das aufsummierte Elektronenbeugungsmuster auf die Anzahl der simulierten Elektronenbeugungsmuster normiert und das Ende der Elektronenbeugungssimulation ist erreicht. Abschließend kann das Ordnungszahl-Kontrastsignal für die verwendete Probenstelle berechnet werden. Soll ein weiteres Ordnungszahl-Kontrastsignal für eine andere Probenstelle berechnet werden, so wird der obige Vorgang für die neue Probenstelle wiederholt.

In realen Messungen entsteht das Elektronenbeugungsmuster, in dem die von der Probe transmittierten Elektronen auf den Leuchtschirm treffen. Von diesem wird die kinetische Elektronenenergie in Licht umgewandelt. Das leuchtaktive Material gibt die aufgenommene Energie in Form von Licht über einen gewissen Zeitraum ab. Zwischenzeitlich treffen aber weitere Elektronen auf den Leuchtschirm, die wiederum ihre Energie an das leuchtaktive Material abgeben. Hierdurch kommt es zu einer Aufsummation der noch vorhandenen Energie und der neu hinzukommenden Energie im leuchtaktiven Material. Damit ist für diesen Prozeß nur die Energie der Elektronen und nicht deren Phase relevant. Deswegen entspricht dieser Prozeß der inkohärenten Intensitätsüberlagerung. Somit kann ein simuliertes, quantitatives Elektronenbeugungsmuster berechnet werden, indem die Elektronenbeugungsmuster von verschiedenen Phononenkonfigurationen inkohärent überlagert werden. Insgesamt reichen für den "Frozen Phonon"-Ansatz aus [50] 16 Phononenkonfigurationen zur Erstellung eines quantitativen Elektronenbeugungsmusters.

Der Nachteil des Ansatzes aus [50] ist die Tatsache, daß aufgrund der beliebigen Verschiebung der Scheiben Asymmetrien im Kristallaufbau, wie Materialgrenzflächen, nicht simuliert werden können. Für die Untersuchungen in dieser Arbeit müssen aber Materialgrenzflächen simuliert werden. Aus diesem Grund ist der Ansatz aus [50] für diese Arbeit modifiziert worden. Diese Modifikationen setzen voraus, daß die Scheiben eine kontinuierliche Materialgrenzfläche in x - oder y -Richtung aufweisen, zu der die Scheiben parallel verschoben werden. Hieraus resultiert aber eine deutlich geringere Anzahl von zufallsverteilten Atompositionen in den Phononenkonfigurationen. Damit sichergestellt ist, daß eine noch genügende Anzahl von zufallsverteilten Atompositionen für die Berechnungen zur Verfügung steht und sich

keine Wiederholungen ergeben, muß die Anzahl der möglichen, unterschiedlichen Phononenkonfigurationen abgeschätzt werden. Da es hierzu noch keine gesicherten Erkenntnisse gab, sind hierzu in dieser Arbeit Untersuchungen durchgeführt worden. Das Resultat dieser Untersuchungen ist eine Bedingungsgleichung, mit der die Anzahl der Scheiben für einen Satz von Scheiben mit zufallsverteilten, unterschiedlichen Atompositionen, für den in dieser Arbeit modifizierten Ansatz aus [53], abgeschätzt werden kann. Diese ist im Folgenden dargestellt:

$$N_{probe} \ll N_{slice} (N_{satz} N_{EZ})^{N_{slice}} \quad (4.1)$$

N_{probe} ist die Anzahl der Scheiben, in die daß zu untersuchende Kristall zerlegt ist. N_{slice} ist die Anzahl der unterschiedlichen Scheiben. N_{satz} ist die Anzahl der Scheiben in einem Satz, die sich nur durch die zufallsverteilten Atompositionen unterscheiden. N_{EZ} ist die Anzahl der Einheitszellen in Verschiebungsrichtung. Wenn die Gleichung 4.1 erfüllt ist, existiert auf jeden Fall eine genügende Anzahl von zufallsverteilten Atompositionen in einer Phononenkonfiguration.

Eine wichtige Information für die quantitative Elektronenbeugungs- und Ordnungszahl-Kontrastsimulation ist die Kenntnis über den Betrag der Vibrationsamplitude u eines Atoms. Diese kann für verschiedene Elemente aus [50, 52, 54, 104, 105] entnommen werden. Für viele Elemente existieren jedoch keine Informationen über die Vibrationsamplitude bzw. den Debye-Waller-Faktor. Hierfür wird in [50] eine Näherung vorgeschlagen. Diese beruht auf der Tatsache, daß die Vibrationsamplitude umgekehrt proportional zur Wurzel der Masse eines Atoms ist. Damit ist mittels zweier unterschiedlicher Atommassen und der bekannten Vibrationsamplitude für eines der beiden Atome eine Näherungslösung für die unbekannte Vibrationsamplitude des anderen Atoms bestimmbar. Um die Atompotentialfunktion einer Scheibe möglichst korrekt, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, zu simulieren, mußte die Berechnung der Atompotentialfunktion aus [51] für diese Arbeit erweitert werden. Durch die hierzu notwendigen Erweiterungen ist es jetzt möglich, jedem Atom einer Scheibe die spezifische Vibrationsamplitude zuzuweisen, mit der dann die zufallsverteilte Auslenkung der Atome berechnet wird. Außerdem ist hierzu eine Tabelle erstellt worden, die die spezifischen Vibrationsamplituden für die verschiedensten Elemente enthält. Diese sind entweder aus den folgenden Artikeln und Tabellen [50, 52, 54, 104, 105] entnommen worden oder sie wurden mittels der Näherung aus [50] berechnet.

Abbildung 4.1 zeigt den physikalisch richtigen Simulationsablauf für quantitative Ordnungszahl-Kontrastsimulationen. Dieser sieht für die Ordnungszahl-Kontrastsimulation im ersten Schritt die Berechnung des mittleren Elektronenbeugungsmusters für alle Phononenkonfigurationen vor. Erst dann wird daraus das Ordnungszahl-Kontrastsignal für einen Bild-

punkt berechnet. Dieser Vorgang wird solange für andere Elektronenstrahlpositionen wiederholt, bis sich die gewünschte Ordnungszahl-Kontrastabbildung ergibt. Vor allem in der Einführungsphase des "HP SPP 2000" Parallelrechners kam es häufiger zu Systemabstürzen. Der Ansatz aus [51] erlaubt aber nur die Sicherung einer kompletten Ordnungszahl-Kontrastabbildung. Daher hatten die Systemabstürze den kompletten Verlust der bis dahin simulierten und nicht gespeicherten Daten zur Folge. Außerdem sind quantitative Ordnungszahl-Kontrastsimulationen sehr zeitaufwendig. Diese Problematik machte die Entwicklung eines alternativen Ansatzes für die quantitative Ordnungszahl-Kontrastsimulation notwendig, der im Folgenden genauer beschrieben ist.

Aufgrund des instabilen Verhaltens des Parallelrechners sind sinnvollerweise auch Zwischenergebnisse zu sichern. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Simulationsansatz entwickelt, der zuerst für jeweils eine Phononenkonfiguration eine Ordnungszahl-Kontrastabbildung berechnet und abspeichert. Die so berechneten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen werden erst zum Schluß inkohärent überlagert. Diese Vorgehensweise ist eine Veränderung in der Reihenfolge der Aufsummation der einzelnen Intensitäten, die vom mathematischen Standpunkt her korrekt ist. Physikalisch ist diese Vorgehensweise aber verkehrt. Daß diese doch eher mathematische Sichtweise für die Bestimmung der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen trotzdem zu korrekten Ergebnissen führen wird, wird im Folgenden bewiesen.

Die Darstellung in Abbildung 4.1 zeigt den physikalisch korrekten Ablauf der Ordnungszahl-Kontrastsimulation. Zuerst wird ein Elektronenbeugungsmuster für eine Phononenkonfiguration berechnet und dann mit Elektronenbeugungsmustern von anderen Phononenkonfigurationen inkohärent überlagert. Erst dann findet die Aufintegration der Intensitäten zur Bestimmung des Ordnungszahl-Kontrastsignals für einen Bildpunkt, in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung, statt. Die inkohärente Überlagerung der einzelnen Elektronenbeugungsmuster bedeutet für die Simulation, daß die Intensitäten der Elektronenbeugungsmuster von den verschiedenen Phononenkonfigurationen pixelweise aufaddiert werden. Diesen Zusammenhang gibt die folgende Funktion wieder:

$$I_{i,j}(CBED_{mittel}) = \frac{1}{16} \sum_{phonon=1}^{16} I_{i,j}(CBED_{phonon}) \quad (4.2)$$

Die Variablen i und j sind die Laufindizes für die Bildpunkte eines Elektronenbeugungsmusters. $I_{i,j}(CBED_{mittel})$ bezeichnet die gemittelte Intensität für einen Bildpunkt des gemittelten Elektronenbeugungsmusters. $I_{i,j}(CBED_{phonon})$ bezeichnet die Intensität für einen Bildpunkt des Elektronenbeugungsmusters einer Phononenkonfiguration. Die Ordnungszahl-Kontrastintensität für einen Bildpunkt $I(Z - Kontrast)$ der Ordnungszahl-Kontrastabbil-

dung ist mit der diskreten Form der Gleichung 2.65 zu

$$I(Z - Kontrast) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} D_{i,j} I_{i,j} (CBED_{mittel}) \quad (4.3)$$

bestimmbar. $D_{i,j}$ ist die diskrete Detektorfunktion. Wird nun die Gleichung 4.3 in die Gleichung 4.2 eingesetzt, so ergibt sich:

$$I(Z - Kontrast) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} D_{i,j} \frac{1}{16} \sum_{phonon=1}^{16} I_{i,j} (CBED_{phonon}) \quad (4.4)$$

Die Vertauschung der Reihenfolge der Aufsummationen in Gleichung 4.4 führt zu:

$$I(Z - Kontrast) = \frac{1}{16} \sum_{phonon=1}^{16} \left[\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} D_{i,j} I_{i,j} (CBED_{phonon}) \right] \quad (4.5)$$

Die Gleichung 4.5 zeigt, daß die eher mathematische und die physikalische Betrachtungsweise zu den gleichen Ergebnissen in der Ordnungszahl-Kontrastsimulation führen wird. Deshalb kann auch der mathematische Ansatz zur Ordnungszahl-Kontrastsimulation eingesetzt werden.

4.2.2 Die Implementierung der Wurtzitstruktur in den Multislice-Ansatz

In Kapitel 3 wurde schon auf das Fehlen eines geeigneten Modells für die Elektronenbeugungssimulation von Gruppe III-Nitriden in der Wurtzitstruktur hingewiesen. Insbesondere existiert für diesen speziellen Multislice-Ansatz für die Gruppe III-Nitride wahrscheinlich weltweit noch kein geeignetes Simulationsmodell zur Elektronenbeugungssimulation. Die normale kristalline Struktur der Gruppe III-Nitride ist die Wurtzitstruktur. Diese setzt sich aus zwei senkrecht zueinander verschobenen Untergittern zusammen. Diese haben jeweils die hexagonal-dichteste Kugelpackung und bestehen jeweils aus unterschiedlichen Materialien. Abbildung 2.13 zeigt beispielhaft das dreidimensionale Modell der Wurtzitstruktur anhand des Materials *GaN*.

Mit dem verwendeten Multislice-Ansatz ist die Verkippung der Probenoberfläche, bezüglich des Elektronenstrahls, für nur wenige Grad simulierbar [83]. Daher müssen für die Elektronenbeugungssimulation einer Wurtzitstruktur mittels des Multislice-Ansatzes die dazu am besten geeigneten Orientierungen ermittelt werden. Das wichtigste Kriterium für eine möglichst geringe Simulationsdauer ist eine geringe Anzahl von verschiedenen Scheiben. Dieses liegt darin begründet, daß die Berechnung der Atompotentialfunktionen für diese Scheiben

einen nicht unerheblichen Anteil an der Gesamtsimulationsdauer hat, was in Kapitel 5.1 noch demonstriert wird. Zusätzlich vereinfachen Symmetrien im Kristallaufbau die Auswahl der notwendigen Orientierungen. Aufgrund der hexagonalen Grundstruktur der Wurtzitstruktur wiederholt sich nach jeweils 30° der Gitteraufbau, wenn diese um eine senkrecht auf der hexagonalen Grundflächen stehende Achse gedreht wird. Aufgrund der obigen Bedingungen sind für die $\{100\}$ -, die $\{120\}$ - und die $\{001\}$ -Orientierung dann Simulationsmodelle für die Elektronenbeugungssimulationen in dieser Arbeit entwickelt worden. In Abbildung 4.2 sind die ausgewählten Orientierungen nochmals graphisch dargestellt.

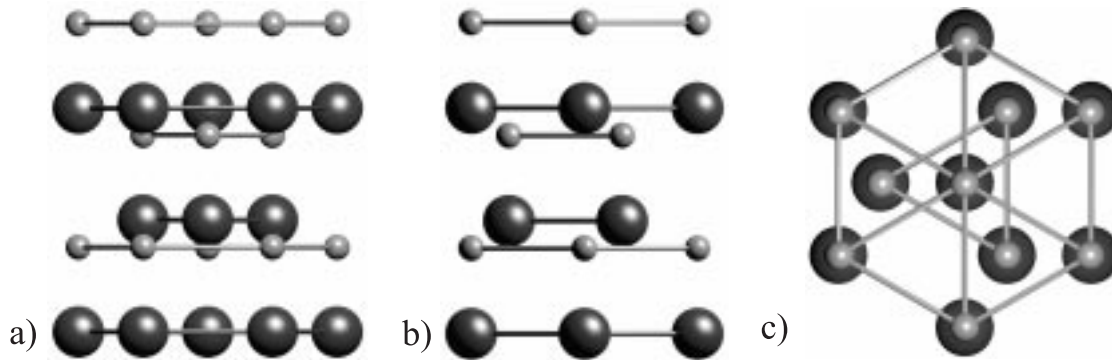


Abbildung 4.2: Ausgewählte Orientierungen zur Simulation des Wurtzitgitters: a) $\{100\}$ -, b) $\{120\}$ - und c) $\{001\}$ -Orientierung

Für die $\{100\}$ -Orientierung werden 2 verschiedene Scheiben und für die $\{120\}$ - sowie die $\{001\}$ -Orientierung werden 4 verschiedene Scheiben für die Elektronenbeugungssimulation benötigt.

4.2.3 Die Implementierung des Static Atomic Displacements in den Multislice-Ansatz

Durch die Entmischung werden Effekte wie das Static Atomic Displacements gefördert. Um diesen Effekt zu simulieren, mußte im Rahmen der Arbeit für den verwendeten Multislice-Ansatz ein geeignetes Simulationsmodell entwickelt werden. Abbildung 2.12 zeigt das Prinzip des Static Atomic Displacements.

In [88] wird als Ursache für das Static Atomic Displacement eine veränderte Bindungslänge zwischen den einzelnen Atomen angenommen. Die Stärke der Verschiebung der Ruhelage der einzelnen Atome aus der normalen Ruhelage im Kristallgitter liegt dabei im Bereich ihrer Vibrationsamplitude [15]. Der Effekt der Veränderung der Bindungslänge wird aber auch in chemisch homogenen Materialien beobachtet [106, 107]. Damit spielen die verän-

dernten Bindungslängen für den Effekt des Static Atomic Displacements zwar eine Rolle, sie sind aber nicht der entscheidende Faktor. Im Fall der Entmischung zerfallen ternäre und quaternäre Halbleitermaterialien in zwei stabile Phasen mit unterschiedlichen chemischen Zusammensetzungen. Dieser Vorgang ist nicht streng periodisch. Die nicht streng periodische Entmischung der einzelnen Phasen ist eher als Resultat eines teilweise zufälligen Entmischungsprozesses anzusehen. Werden Messungen an entmischten Proben durchgeführt, so wird die Probe mit dem Elektronenstrahl durchstrahlt. Dabei wird nicht genau eine chemisch stabile Phase durchstrahlt, sondern es können aufgrund der Probendicke durchaus verschiedene Phasen durchstrahlt werden, die aber wie eine chemisch stabile Phase, mit einer einheitlichen Zusammensetzung wirken.

Damit kann für das Static Atomic Displacement ein relativ einfaches Modell als Berechnungsansatz verwendet werden. Dieses geht von den folgenden Annahmen aus:

- Die in den Multislice-Simulationen verwendete Materialzusammensetzung entspricht der mittels der kinematischen Simulation bestimmten Materialzusammensetzung.
- Es wird ein mittleres Atom für die Elektronenbeugungssimulationen verwendet, welches zufallsverteilt aus seiner Ruhelage ausgelenkt wird.
- Die Auslenkung der Atome liegt im Bereich ihrer Vibrationsamplitude.

Basierend auf diesen Annahmen ist für diese Arbeit das Multislice-Simulationsmodell zur Simulation des Static Atomic Displacements in den Multislice-Ansatz implementiert worden.

4.2.4 Die Implementierung eines Oberflächenrelaxationsmodells in den Multislice-Ansatz

Zu den in der Literatur häufig genannten Effekten, die durch die Entmischung von quaternären Halbleitern hervorgerufen werden, zählt auch der Effekt der Oberflächenrelaxation. Dieser wurde in vielen Fällen als Ursache für die quasiperiodischen Kontrastmodulationen in Hellfeldabbildungen [11, 13] und auch in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen angesehen [11]. Gleichzeitig ist in Elektronenbeugungsmustern von entmischten Proben eine Aufspaltung von HOLZ-Linien festgestellt worden [11]. Auch die dazu korrespondierenden Defizitlinien in der zentralen Braggscheibe weisen diese Aufspaltung auf. Bis jetzt ist aber die genaue Ursache für die Aufspaltung der HOLZ-Linien und die quasiperiodische Kontrastmodulation in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen unklar. Dieses soll mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Oberflächenrelaxationsmodell für den Multislice-Ansatz geklärt werden.

Wie schon beim Static Atomic Displacement fehlte zu Beginn dieser Arbeit, für die Simulation des Oberflächenrelaxationseffektes, ein geeignetes Simulationsmodell für den verwendeten Multislice-Ansatz. Ein prinzipielles Modell für die Oberflächenrelaxationen wird in [14] vorgeschlagen. Dieses Modell ist in Abbildung 2.11 dargestellt. Es sagt die Modulation der Abstände der einzelnen senkrecht zur Oberfläche stehenden Netzebenen voraus. Die Periodenlänge der Abstandsmodulation stimmt dabei mit der Periodenlänge der beobachteten Kontrastmodulationen überein. Zusätzlich kommt es an den Probenoberflächen zu einer Verkipfung der einzelnen Netzebenen, der sogenannten Oberflächenrelaxation. Die direkte Implementierung des Ansatzes aus [14] in den verwendeten Multislice-Ansatz würde zu Problemen führen. Die periodische Modulation der Netzebenenabstände und der Oberflächenverkipfung führt zu einer kontinuierlichen periodischen Veränderung im Kristallaufbau. Gleichzeitig führt der Effekt der Oberflächenrelaxation für die Atome einer Netzebene zu einer Verschiebung der Atompositionen von Scheibe zu Scheibe. Daraus resultiert, daß für jede Scheibe im Kristall die Atompotentialfunktion neu berechnet werden muß. Dieses führt zu einer nicht mehr vertretbaren Gesamtsimulationsdauer. Darüber hinaus ist immer nur ein Ausschnitt eines Kristallgitters mit Oberflächenrelaxationen simulierbar, da sonst Aufgrund der Periodenlänge der Oberflächenrelaxationen die erzielbare Ortsauflösung zu gering wird.

Für die Entwicklung eines für den Multislice-Ansatz geeigneten Oberflächenrelaxationsmodells sind daher die oben genannten Punkte zu berücksichtigen und es müssen weitere Vereinfachungen gemacht werden. Nur hierdurch ist die Dauer von Elektronenbeugungssimulationen für Proben mit Oberflächenrelaxationseffekten auf ein vertretbares Maß reduzierbar. Für das zu entwickelnde Modell kann zusätzlich die maximale Ortsauflösung von ca. $0,3 \text{ nm}$ berücksichtigt werden. Diese Einschränkungen führen zu dem in Abbildung 4.3 dargestellten Oberflächenrelaxationsmodell. Im Folgenden wird das für den verwendeten Multislice-Ansatz neu entwickelte Oberflächenrelaxationsmodell aus Abbildung 4.3 und dessen Prinzip genauer erläutert. Der Primärelektronenstrahl des RTEM, welches eine maximale Ortsauflösung von ungefähr $0,3 \text{ nm}$ hat, trifft auf die Probe mit den relaxierten Oberflächenbereichen. Die Periodenlänge der Netzebenenabstände stimmt mit der Periodenlänge der Kontrastmodulationen in den Hellfeldabbildungen überein und liegt im Bereich von einigen zehn Nanometern. Die Dicke der verkippten Oberflächenbereiche nimmt mit zunehmendem Verkipfungswinkel zu. Aufgrund der im Vergleich zur Periodenlänge der Kontrastmodulationen um fast zwei Zehnerpotenzen besseren Ortsauflösung des RTEM's, wirken die Netzebenen für den Primärelektronenstrahl so, als hätten sie den gleichen Abstand und zusätzlich den gleichen Verkipfungswinkel im Bereich der Probenoberflächen. Dieses vereinfacht die Implementation eines Modells für die Oberflächenrelaxation erheblich. Aus den oben genannten Gründen wird die Probe für die Simulationen in drei Bereiche unterteilt. Dieses sind, wie in

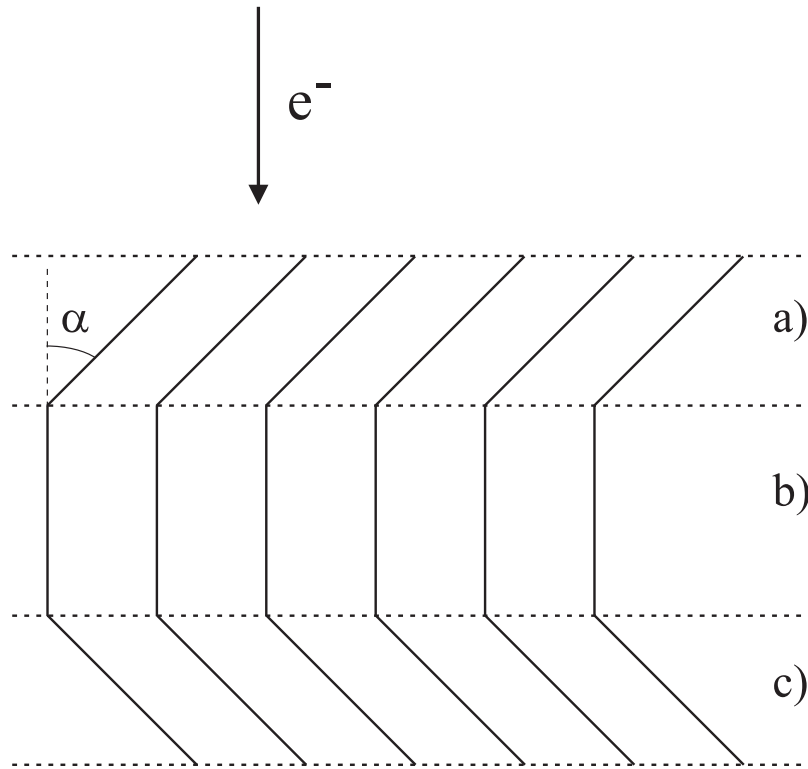


Abbildung 4.3: Prinzip des verwendeten Simulationsmodells für die Oberflächenrelaxation. Das Modell setzt sich aus den zwei Oberflächenbereichen a) und c) sowie aus dem ungestörten Kristallbereich b) zusammen.

Abbildung 4.3 dargestellt, die beiden verkippten Bereiche an den Probenoberflächen (a,c) und der ungestörte Bereich in der Probenmitte (b). Den verkippten Bereichen der Probenoberflächen wird jeweils der gleiche Verkippfungswinkel und die gleiche Dicke zugewiesen. Die Verkipfung der Netzebenen erfolgt, wie in Abbildung 4.3 dargestellt, immer in der gleichen Richtung. Die Abstände der einzelnen Netzebenen werden aber nicht verändert. Deren Verkippfungswinkel beträgt für die Oberflächenrelaxationen nur wenige *mrad*. Daher ist die Verkipfung der einzelnen Netzebenen durch eine einfache Verschiebung der einzelnen Scheiben in Abhängigkeit vom Verkippfungswinkel nachbildbar. Der Nachteil dieses Ansatzes ist, daß für die verkippten Oberflächenbereiche, für jede einzelne Scheibe, die Atompotentialfunktion neu berechnet werden muß. Dadurch kommt es trotzdem zu einer deutlichen Vergrößerung, der benötigten Rechenzeit. Zeitlich sinnvolle Simulationen sind daher nur mit dem rein elastischen Multislice-Ansatz und einer maximalen Bildpunktzahl von 1024×1024 Bildpunkten möglich.

4.2.5 Die ringförmige Integration von Elektronenbeugungsmustern und die Bestimmung des Ordnungszahl-Kontrastsignals

Das für diese Arbeit verwendete Programmpaket stellt ein Simulationsprogramm zur Elektronenbeugungssimulation und eins zur Ordnungszahl-Kontrastsimulation zur Verfügung. Zu Beginn der Arbeit fehlte ein Programm, mit dem nachträglich aus schon simulierten Elektronenbeugungsmustern, das Ordnungszahl-Kontrastsignal bestimmt werden kann. Ordnungszahl-Kontrastsimulationen sind schon für geringe Probendicken sehr zeitaufwendig. Dieser Zeitaufwand wird durch die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung noch einmal drastisch erhöht. Gleichzeitig würden selbst unter Vernachlässigung der thermisch diffusen Streuung Ordnungszahl-Kontrastsimulationen für große Probendicken und/oder die Ordnungszahl-Kontrastsimulation von Effekten wie der Oberflächenrelaxation oder des Static Atomic Displacement, zu einem nicht vertretbar großen Zeitaufwand führen. Darüber hinaus ist das Simulationsprogramm für Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus [51] so aufgebaut, daß nur eine periodische Abfolge von Scheiben simuliert werden kann. Eine aperiodische Reihenfolge, wie sie für die Simulation von Oberflächenrelaxationen benötigt wird, ist damit nicht simulierbar. Um die Simulationen möglichst schnell zu machen, werden alle Atompotentialfunktionen dieser Scheiben, von dem Simulationsprogramm aus [51], im Arbeitsspeicher für die Simulationsdauer vorgehalten. Der begrenzte Arbeitsspeicher ist dabei auch die Grenze für die Anzahl und die Größe der zu simulierenden Scheiben. Daher mußte ein Programm entwickelt werden, das eben die nachträgliche Bestimmung des Ordnungszahl-Kontrastsignals aus Elektronenbeugungsmustern ermöglicht. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit basierend auf der Gleichung 4.3 ein Programm erstellt, das diesen Anforderung genügt.

Eine weitere Möglichkeit zur Analyse eines Elektronenbeugungsmusters ist die ringförmige Aufintegration des Elektronenbeugungsmusters. In [52] wurde diese Technik zur Bestimmung der Vibrationsamplitude von S_i eingesetzt, indem ringförmig aufintegrierte, simulierte und gemessene Elektronenbeugungsmuster verglichen wurden. Mittels dieses Vergleichs ist die Vibrationsamplitude von S_i mit einer nur 2%-igen Abweichung von Röntgenbeugungsergebnissen bestimmt worden. Da bis jetzt für die II-VI-Halbleiter und die Gruppe III-Nitride die korrekten Vibrationsamplituden bzw. Debye-Waller-Faktoren zum Teil noch nicht bekannt sind, ist diese Technik, auch im Bezug auf die quantitative Elektronenbeugungssimulation, für diese Halbleiter wichtig. In dem zur Verfügung gestellten Programmpaket fehlte ein geeignetes Programm und es mußte daher im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelt werden.

4.2.6 Die Implementierung eines nicht abrupten Grenzflächenmodells

In dem Kapitel 4.2.3 wurde auf die Implementierung eines Modells zur Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung in den verwendeten Multislice-Ansatz eingegangen. Es wurde außerdem auf die Problematik der Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung bei der Simulation von Grenzflächen hingewiesen. Außerdem ist der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Ansatz zur Elektronenbeugungssimulation von idealen Materialgrenzflächen mittels des Multislice-Ansatzes unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung vorgestellt worden. Für realitätsnahe Simulationen müssen aber auch nicht abrupte Materialübergänge simuliert werden können.

Die Materialübergänge in den zu untersuchenden Heterostrukturen erstrecken sich vielfach nur über wenige Atomlagen. Gleichzeitig ist es für die schnelle Simulation von Elektronenbeugungsmustern sinnvoll, die Anzahl der verschiedenen Scheiben, für welche die Atompotentialfunktion berechnet werden muß, so gering wie möglich zu halten. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ein einfaches, stufenförmiges Grenzflächenmodell eingeführt, das die oben genannten Punkte berücksichtigt. Die Materialzusammensetzung in den einzelnen Monolagen (Stufen) ändert sich linear. Das Prinzip dieses Grenzflächenmodells ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Abbildung 4.4.a zeigt einen Materialübergang, der aus einer Monolage besteht. Da sich die Materialzusammensetzung linear ändert, besteht die eine Monolage im Übergangsbereich zu 50% aus Material *A* und zu 50% aus Material *B*. Für den Materialübergang in Abbildung 4.4.b, bei dem der Übergangsbereich aus drei Monolagen besteht, besteht die linke Monolage, im Übergangsbereich, zu 75% aus Material *A* und zu 25% aus Material *B*. Die mittlere Monolage, im Übergangsbereich, besteht zu 50% aus Material *A* und zu 50% aus Material *B*. Die rechte Monolage, im Übergangsbereich, besteht zu 25% aus Material *A* und zu 75% aus Material *B*. Entsprechend der Materialzusammensetzung in den einzelnen Monolagen stellt sich dann auch die dementsprechende Streuamplitude ein, deren Verlauf zusätzlich in der Abbildung 4.4 für die jeweilige Monolagenanzahl dargestellt ist.

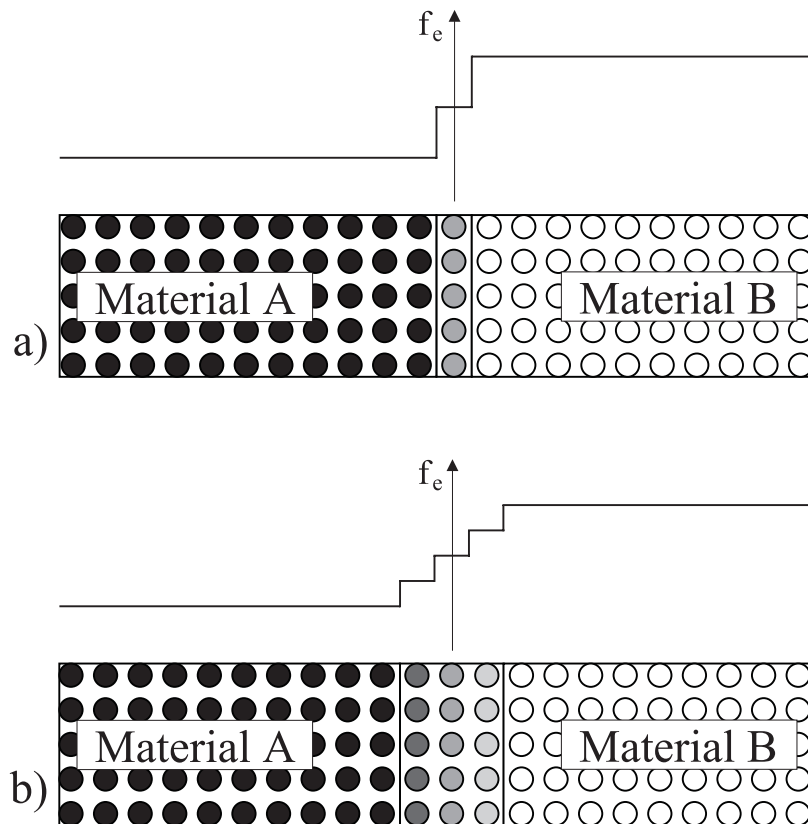


Abbildung 4.4: Simulationsmodell für einen nicht abrupten Materialübergang.

5. Demonstration der Leistungsfähigkeit

In diesem Kapitel wird die Leistungsfähigkeit der Weiterentwicklungen und Neuerungen aus Kapitel 4 demonstriert. Die experimentellen Elektronenbeugungsmuster, die im Folgenden zum Vergleich zwischen Simulation und Experiment verwendet werden, wurden von Mitarbeitern des Fachgebiets Werkstoffe der Elektrotechnik erzielt.

5.1 Die Vergrößerung des Simulationsbereichs und die Simulationsoptimierung

Für die zeitoptimierte Probencharakterisierung, unter Verwendung von Elektronenbeugungssimulationen, wurden bereits in Kapitel 4.1.2 die notwendigen Schritte aufgeführt. Diese Schritte gelten vor allem für den Fall, daß für den Vergleich zwischen Simulation und Experiment der Multislice-Ansatz eingesetzt wird.

Zur Auflösungsverbesserung von simulierten Elektronenbeugungsmustern sind entweder nur die Scheibengröße und/oder die Bildpunktzahl zu vergrößern. Die maximale Auflösung für die Berechnung von Elektronenbeugungsmustern, in dem zur Verfügung gestellten Programmpaket, betrug zu Beginn der Arbeit 1024×1024 Bildpunkte. Um detailliertere Elektronenbeugungsmuster von Proben mit größeren Probendicken zu berechnen, reicht diese Bildpunktzahl häufig nicht aus, da die aufintegrierte Ausgangsintensität das 0,9-fache der Eingangsintensität nicht unterschreiten darf. Dieses Verhältnis sinkt aber mit zunehmender Probendicke.

Daher sind im Rahmen dieser Arbeit die Simulationsprogramme zur Elektronenbeugungssimulation und das Programm zur Berechnung der Atompotentialfunktionen dahingehend erweitert worden, daß auch Elektronenbeugungsmuster mit einer Bildpunktzahl von 2048×2048 oder mehr simuliert werden können. Erst hierdurch wird die Auflösung der simulierten Elektronenbeugungsmuster so gut, daß ein direkter Vergleich zwischen Simulation und Experiment möglich ist.

Um die Leistungsfähigkeit dieser Verbesserung zu demonstrieren, werden die folgenden Punkte genauer untersucht:

- Einfluß der Vergrößerung des Simulationsbereichs auf die Qualität der Multislice-Simulationsergebnisse.

- Einfluß der Vergrößerung des Simulationsbereichs auf die Simulationsdauer.
- Einfluß der optimierten Vorgehensweise aus Kapitel 4.1.2, auf die insgesamt benötigte Simulationsdauer, für eine komplette Probencharakterisierung.

Zu diesem Zweck sind rein elastische Multislice-Simulationen durchgeführt worden. Hierzu sind Elektronenbeugungsmuster für *GaAs*, mit einer Probendicke von ungefähr 60 nm , nahe der $\{320\}$ -Orientierung, mit einer Blendenöffnung von $50\ \mu\text{m}$ und einer Beschleunigungsspannung von 100 kV , für drei unterschiedliche Simulationsbereichsgrößen simuliert worden. Die hierzu verwendete Bildpunktzahl ist 512×512 , 1024×1024 und 2048×2048 Bildpunkte. Die Scheibengröße ist für die Simulationen proportional zur Bildpunktzahl erhöht worden. Die Abbildung 5.1 zeigt die zentralen Braggscheiben der simulierten Elektronenbeugungsmuster.

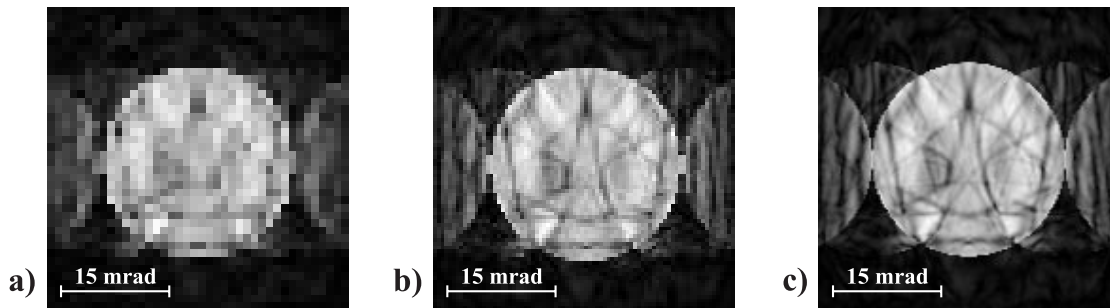


Abbildung 5.1: Zentrale Braggscheiben von simulierten Elektronenbeugungsmustern für *GaAs*, nahe der $\{320\}$ -Orientierung, mit den Auflösungen a) 512×512 , b) 1024×1024 und c) 2048×2048 Bildpunkte.

Die Abbildungen 5.1.a) bis 5.1.c) zeigen mit zunehmender Bildpunktzahl eine deutliche Verbesserung in der Detailliertheit der Darstellung. Somit kann über die verbesserte Darstellung zukünftig auch der pixelweise Vergleich zwischen simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern durchgeführt werden.

Wie schon in Kapitel 4.1.2 dargestellt, resultiert aus der Verbesserung der Auflösung eine Zunahme in der Gesamtsimulationsdauer von Elektronenbeugungsmustern mit dem Multislice-Ansatz. Um zu demonstrieren, wie stark die Gesamtsimulationsdauer zunehmen kann, und wie sich diese auf die reine Elektronenbeugungssimulation und die Berechnung der Atompotentialfunktionen verteilt, wurden die Simulationsdauern der Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 5.1 genauer untersucht. Die Tabelle 5.1 zeigt hierzu die Bildpunktzahl, die Scheibengröße und die Gesamtsimulationsdauer der Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 5.1.

Bildpunkte	Scheibengröße [<i>nm</i>]	Gesamtsimulationsdauer
512 × 512	3, 39198 × 3, 59774	23 <i>min.</i>
1024 × 1024	6, 78396 × 7, 19548	107 <i>min.</i>
2048 × 2048	13, 56792 × 14, 39095	271 <i>min.</i>

Tabelle 5.1: Abhängigkeit der Gesamtsimulationsdauer von der Bildpunktzahl und der Scheibengröße

Tabelle 5.1 zeigt deutlich die starke Zunahme der Gesamtsimulationsdauer mit zunehmender Scheibengröße und Bildpunktzahl. Die Gesamtsimulationsdauer setzt sich aus der Berechnungsdauer für die Atompotentialfunktionen und der Berechnungsdauer für die Multislice-Simulationen zusammen. Diese sind in Tabelle 5.2 für die Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 5.1 dargestellt.

Atompotentialberechnung	Multislice-Simulation	Gesamtsimulationsdauer
9 <i>min.</i>	14 <i>min.</i>	23 <i>min.</i>
43 <i>min.</i>	64 <i>min.</i>	107 <i>min.</i>
191 <i>min.</i>	80 <i>min.</i>	271 <i>min.</i>

Tabelle 5.2: Aufschlüsselung der Gesamtsimulationsdauer nach der Berechnungsdauer für die Atompotentialfunktionen und für die Multislice-Simulationen.

Tabelle 5.2 zeigt, daß für die Multislice-Simulationen, trotz der starken Zunahme der Bildpunktzahl, die Berechnungsdauer nicht proportional zur Bildpunktzahl zunimmt. Im Gegensatz dazu nimmt die Berechnungsdauer der Atompotentialfunktionen annähernd proportional zur Vergrößerung der Bildpunktzahl zu.

Das obige Beispiel veranschaulicht deutlich, welchen Vorteil die Vergrößerung des zu simulierenden Bereichs bringt. Gleichzeitig erhöht sich aber, durch die Vergrößerung des Simulationsbereichs, die Gesamtsimulationsdauer drastisch. Daher sind Elektronenbeugungssimulationen, mit der endgültigen Simulationsbereichsgröße, für den Vergleich von Simulation und Experiment, bei dem eine iterative Annäherung der simulierten an die experimentellen Daten notwendig ist, nicht mehr in einem zeitlich sinnvollen Rahmen durchführbar. Dieses einfache Beispiel und die oben angegebenen Berechnungsdauern lassen erkennen, welchen entscheidenden Vorteil die in Kapitel 5.2 vorgeschlagene optimierte Vorgehensweise, für die Simulationsvorbereitung von Elektronenbeugungssimulationen mit dem Multislice-Ansatz, hat. Dieses ist um so wichtiger, wenn in den Multislice-Simulationen zusätzlich die thermisch diffuse Streuung berücksichtigt werden soll. Hierdurch steigt die Gesamtsimulationsdauer

noch einmal deutlich an.

5.2 Die Parallelisierung des Multislice-Ansatzes

In Kapitel 4.1.3 ist dargestellt worden, daß die Berechnungsdauer eines Programms, das mit dem Compiler parallelisiert wurde, mit zunehmender Prozessoranzahl reduziert wird. Es kann aber in Abhängigkeit von der Problemstellung, für eine spezielle Anzahl von Prozessoren eine minimale Berechnungsdauer existieren, ab der sich, bei weiter zunehmender Prozessoranzahl, die Berechnungsdauer wieder vergrößert. Daher wird im Folgenden untersucht, inwieweit das oben Gesagte auf das verwendete Multislice-Simulationsprogramm zutrifft.

Abbildung 5.2 zeigt die Berechnungsdauer von dem Multislice-Simulationsprogramm, das mit einem Compiler parallelisiert wurde, als Funktion der Prozessoranzahl. Für die Bestimmung der Berechnungsdauer sind Multislice-Simulationen für *GaAs* in der $\{110\}$ -Orientierung mit einer Materialdicke von ca. 16 nm und einer Auflösung von 512×512 Bildpunkten durchgeführt worden.

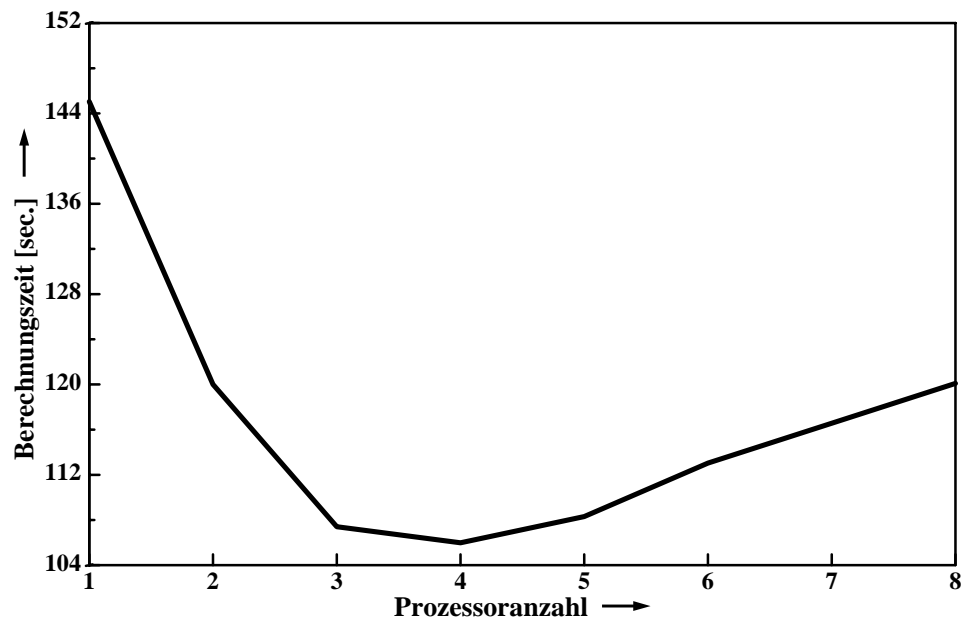


Abbildung 5.2: Die Abhängigkeit der Berechnungsdauer von der Prozessoranzahl für den Fall, daß das Multislice-Programm nur mittels des Compilers parallelisiert wird.

Die Abbildung 5.2 zeigt deutlich mehrere Tendenzen. Die Berechnungsdauer wird für 4 Prozessoren minimal. Diese hat sich aber nur auf die Hälfte reduziert. Damit entspricht

sie der Berechnungsdauer von zwei parallel laufenden, seriell arbeitenden, Multislice-Simulationsprogrammen. In Abhängigkeit von der Problemstellung ist somit mittels parallel laufender, serieller Multislice-Simulationen, für die gleiche Prozessoranzahl, eine deutlich geringere Simulationsdauer zu erwarten. In Abhängigkeit von der Problemstellung kann aber das mit Hilfe des Compilers parallelisierte Multislice-Simulationsprogramm trotzdem die richtige Wahl sein. Um dieses herauszufinden, ist aber die Problemstellung genauer zu analysieren und darauf basierend einer der beiden Ansätze auszuwählen.

5.3 Einbeziehung der thermisch diffusen Streuung in den Multislice-Ansatz

Im Folgenden soll mittels des in dieser Arbeit entwickelten Ansatzes zur Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung demonstriert werden, wie die thermisch diffuse Streuung das Ergebnis von Multislice-Simulationen beeinflusst. Anschließend werden hierzu auch experimentelle und simulierte Elektronenbeugungsmuster verglichen.

Abbildung 5.3 veranschaulicht den Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf simulierte Elektronenbeugungsmuster. Diese wurden unter Berücksichtigung (Abbildung 5.3.b) und unter Vernachlässigung (Abbildung 5.3.a) der thermisch diffusen Streuung für das Material $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ in der $\{100\}$ -Orientierung simuliert. Die Abbildungen 5.3.a und 5.3.b zeigen

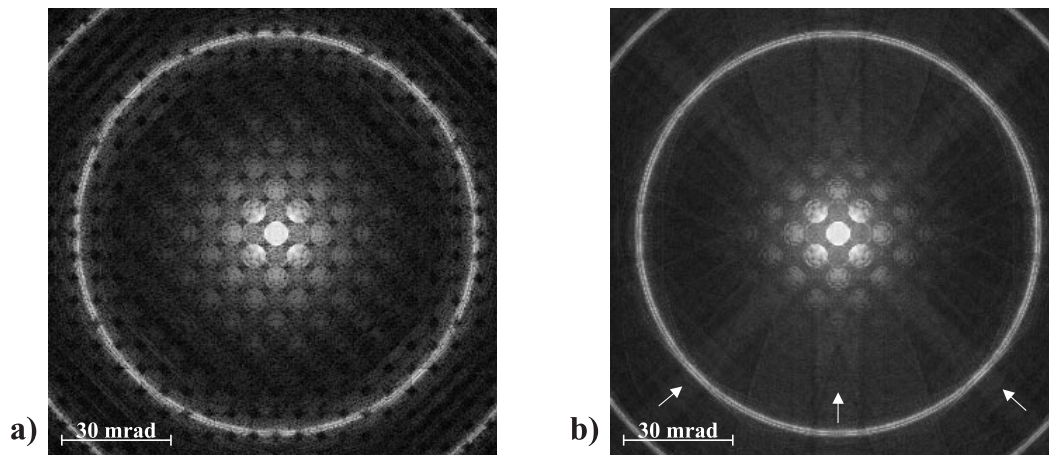


Abbildung 5.3: Unter Vernachlässigung (a) und unter Berücksichtigung (b) der thermisch diffusen Streuung simulierte Elektronenbeugungsmuster für $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ in der $\{100\}$ -Orientierung.

einen deutlichen Unterschied. Dieser resultiert aus der Berücksichtigung der thermisch dif-

fasen Streuung in dem Elektronenbeugungsmuster in Abbildung 5.3.b. Mit zunehmendem Abstand von der zentralen Braggscheibe wirkt das mit der thermisch diffusen Streuung simulierte Elektronenbeugungsmuster immer diffuser. Gleichzeitig erscheinen zusätzliche Linien und Bänder im Elektronenbeugungsmuster, die sogenannten Kikuchilinien und Kikuchibänder. In der Abbildung 5.3.b sind einige Kikuchibänder, die typisch für inelastische Anteile sind, mit weißen Pfeilen markiert.

Abbildung 5.4 zeigt experimentelle und unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierte Elektronenbeugungsmuster für *AlAs*. Diese sind nahe der $\{310\}$ -Orientierung für die Objektivblendendurchmesser $25\ \mu\text{m}$ und $50\ \mu\text{m}$ aufgenommen worden. Die simulier-

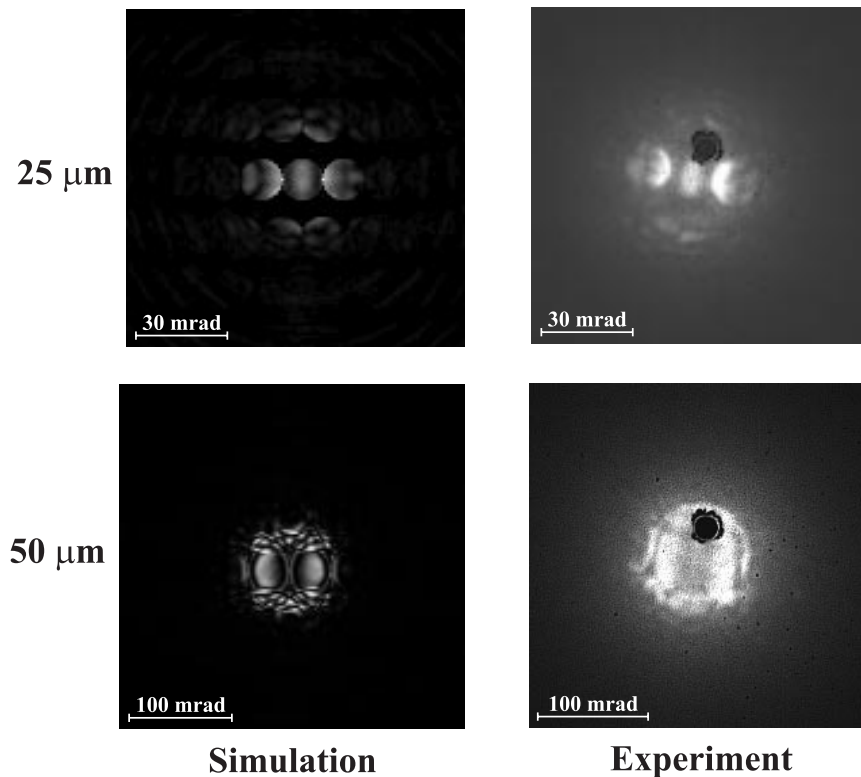


Abbildung 5.4: Simulierte (links) und experimentelle (rechts) Elektronenbeugungsmuster für *AlAs* nahe der $\{310\}$ -Orientierung für zwei unterschiedliche Objektivblendendurchmesser ($25\ \mu\text{m}$ und $50\ \mu\text{m}$).

ten und experimentellen Elektronenbeugungsmuster zeigen in Abbildung 5.4 eine gute Übereinstimmung. Trotzdem sind Unterschiede erkennbar. Diese resultieren aus dem Defekt im Leuchtschirm, der als dunkler Punkt zu erkennen ist. Außerdem resultieren sie auch aus der fehlenden Energiefilterung für die Elektronenbeugungsmessungen, da die simulierten Elektronenbeugungsmuster energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern entsprechen.

5.4 Einbeziehung der Wurtzitstruktur in den Multislice-Ansatz

Mit den Neuentwicklungen in dieser Arbeit ist nun auch die Simulation von Elektronenbeugungsmustern für Kristalle mit der Wurtzitstruktur möglich. Zur Darstellung der Leistungsfähigkeit des neu entwickelten Modells für die Wurtzitstruktur, wurde ein Elektronenbeugungsmuster für *GaN* in der $\{120\}$ -Orientierung, rein elastisch und unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, mit dem Multislice-Ansatz simuliert. Das Ergebnis dieser Simulationen ist in Abbildung 5.5 dargestellt. Auch für die Gruppe III-Nitride zeigt sich

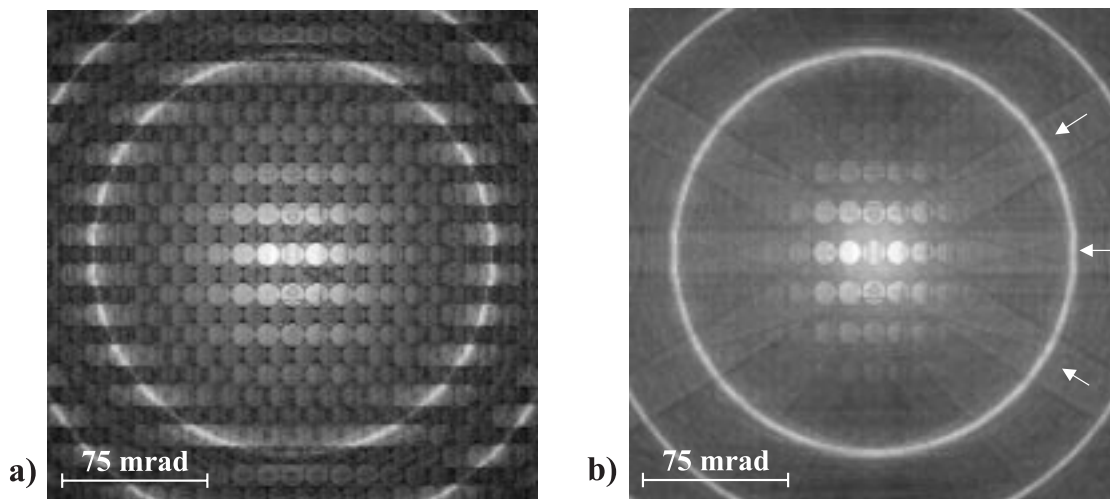


Abbildung 5.5: Simulierte Elektronenbeugungsmuster für *GaN* in der $\{120\}$ -Orientierung, a) rein elastisch und b) unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simuliert.

in Abbildung 5.5 ein starker Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf das Elektronenbeugungsmuster. Das mit der thermisch diffusen Streuung simulierte Elektronenbeugungsmuster wirkt gegenüber dem rein elastisch simulierten deutlich diffuser. Gleichzeitig zeigt das in Abbildung 5.5.b dargestellte Elektronenbeugungsmuster Kikuchilinien und -bänder, wovon 3 Kikuchibänder mit weißen Pfeilen markiert sind. Abbildung 5.6 zeigt die unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierten Elektronenbeugungsmuster für *GaN* in der $\{100\}$ - und der $\{001\}$ -Orientierung. Auch in diesen Orientierungen wirken die Elektronenbeugungsmuster diffus und es sind wieder Kikuchilinien und -bänder erkennbar.

Zur Demonstration der Leistungsfähigkeit, des in dieser Arbeit erstellten Modells für die Simulation der Wurtzitstruktur mittels des Multislice-Ansatzes, ist ein Vergleich zwischen Simulation und Experiment durchgeführt worden. Dieser ist in Abbildung 5.7 dargestellt. Das simulierte und das experimentelle Elektronenbeugungsmuster ist für *GaN* in der $\{120\}$ -

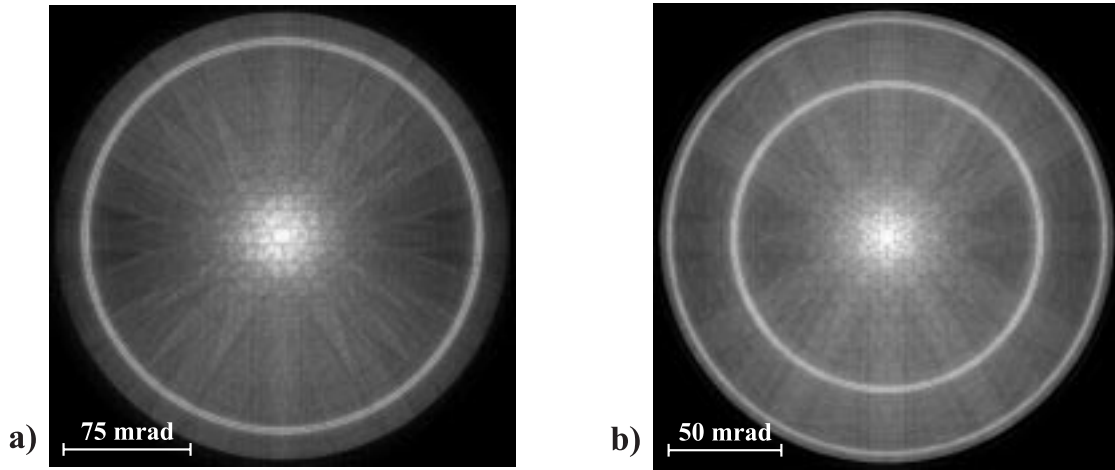


Abbildung 5.6: Unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierte Elektronenbeugungsmuster für GaN in der a) $\{100\}$ - und b) $\{001\}$ -Orientierung.

Orientierung erstellt worden.

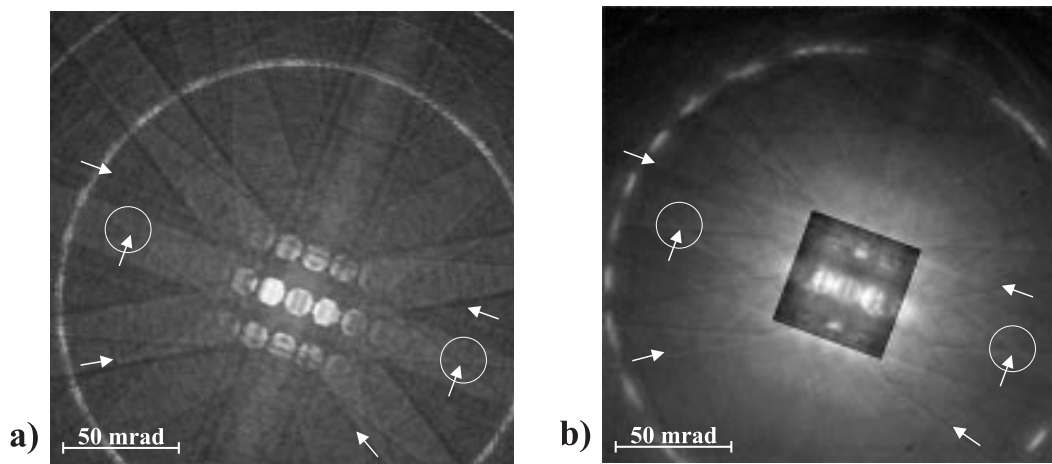


Abbildung 5.7: Vergleich zwischen einem a) unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierten und b) experimentellen Elektronenbeugungsmuster für GaN in der $\{120\}$ -Orientierung.

In dem experimentellen und dem simulierten Elektronenbeugungsmuster der Abbildung 5.7 sind korrespondierende Linien und Schnittpunkte mit Pfeilen oder Kreisen markiert. Der Vergleich der beiden Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 5.7 zeigt die gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment.

5.5 Einbeziehung des Static Atomic Displacement in den Multislice-Ansatz

In Kapitel 4.2.3 wurde das in dieser Arbeit entwickelte Simulationsmodell für den Effekt des Static Atomic Displacement vorgestellt. Die maximale Verschiebung der Atome aus ihrer Ruhelage, die sogenannte Displacementamplitude, liegt für dieses Modell im Bereich der Atomvibrationsamplitude. In der Abbildung 5.8 sind erste Simulationsergebnisse, die mit dem elastischen Multislice-Ansatz erzielt wurden, dargestellt. Es wurden dazu die Displacementamplituden $0,0\text{ nm}$, $0,015\text{ nm}$ und $0,03\text{ nm}$ verwendet.

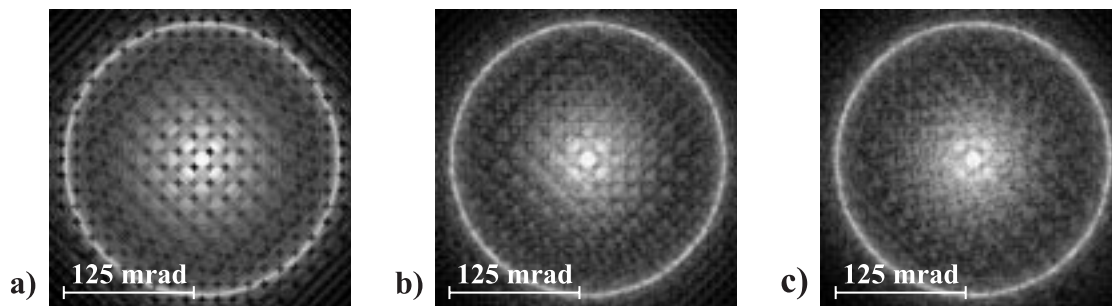


Abbildung 5.8: Elastische Multislice-Simulationsergebnisse für den Effekt des Static Atomic Displacement für einen III-V-Halbleiter mit einer Materialdicke von 22 nm und den Displacementamplituden a) $0,0\text{ nm}$, b) $0,015\text{ nm}$ und c) $0,03\text{ nm}$.

Abbildung 5.8 zeigt sehr gut den grundsätzlichen Einfluß des Static Atomic Displacements auf ein simuliertes Elektronenbeugungsmuster. Mit zunehmender Displacementamplitude wirken diese immer diffuser. Das bedeutet aber, daß für Proben mit dem Effekt des Static Atomic Displacement im Vergleich zu Proben ohne diesen Effekt, die gemessenen Elektronenbeugungsmuster diffuser wirken müßten und z. B. HOLZ-Linienmuster schwächer ausgeprägt sein würden.

5.6 Die Leistungsfähigkeit weiterer Analysemethoden

Für die Ordnungszahl-Kontrastsimulation von großen Probendicken, von Effekten wie der Oberflächenrelaxation oder dem Static Atomic Displacement, wird eine nicht vertretbare Simulationsdauer benötigt. Gleichzeitig stellte das verwendete Programmpaket keine Routine zur Verfügung, mit der auch nachträglich, aus einem simulierten Elektronenbeugungsmuster, das Ordnungszahl-Kontrastsignal bestimmt werden kann. Deshalb wurde im Rahmen dieser

Arbeit eine Routine entwickelt, die das Ordnungszahl-Kontrastsignal aus einem simulierten Elektronenbeugungsmuster unter Verwendung der Gleichung 4.3 berechnet. Diese Gleichung bildet quasi den ADF-Detektor auf das simulierte Elektronenbeugungsmuster ab. Von den unter dem ADF-Detektor befindlichen Bildpunkten werden die Intensitäten zur Bestimmung des Ordnungszahl-Kontrastsignals aufintegriert. Das Prinzip dieser Vorgehensweise ist in Abbildung 5.9 dargestellt. Zur Bestimmung des Ordnungszahl-Kontrastsignals werden

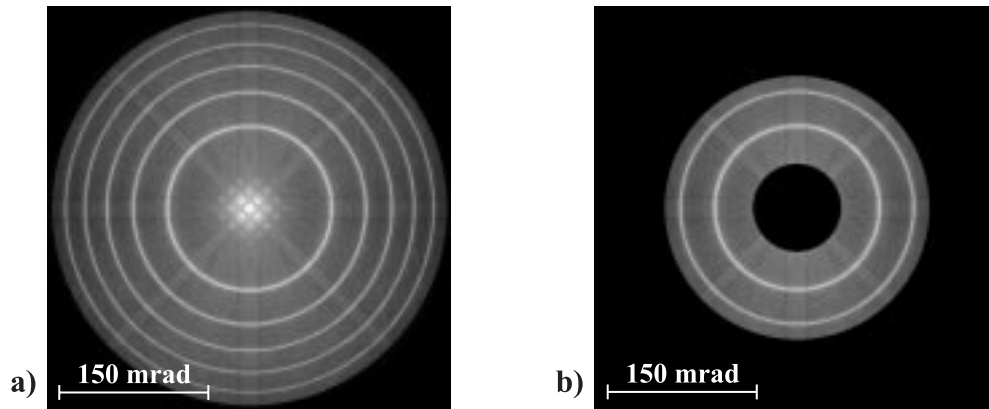


Abbildung 5.9: Simuliertes Elektronenbeugungsmuster für InP in der $\{100\}$ -Orientierung a) vor und b) nach der Abbildung des ADF-Detektors auf dem Elektronenbeugungsmuster.

nur die in der Abbildung 5.9.b) verbliebenen Intensitäten berücksichtigt.

Ein weiterer leistungsfähiger Analyseansatz ist die ringförmige Aufintegration eines Elektronenbeugungsmusters. Dieser Ansatz wurde schon erfolgreich zur Bestimmung der Atomvibrationsamplitude von Si eingesetzt [52]. Auch dieser Ansatz war in dem zur Verfügung gestellten Programmpaket nicht enthalten und wurde für diese Arbeit neu entwickelt. Anhand von rein elastisch und unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierten Elektronenbeugungsmustern für das Material InP , soll die Leistungsfähigkeit dieses Ansatzes demonstriert werden. Diese beiden Elektronenbeugungsmuster wurden mittels des Ansatzes ringförmig aufintegriert und sind in der Abbildung 5.10 dargestellt. Die mit zunehmenden Streuwinkel auftretenden Intensitätsmaxima in Abbildung 5.10 stammen von den HOLZ-Ringen. Zusätzlich ist auch sehr gut der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf die Elektronenbeugungsmuster erkennbar, da der Unterschied zwischen den Intensitätsmaxima und Intensitätsminima deutlich abnimmt, wenn die thermisch diffuse Streuung berücksichtigt wird.

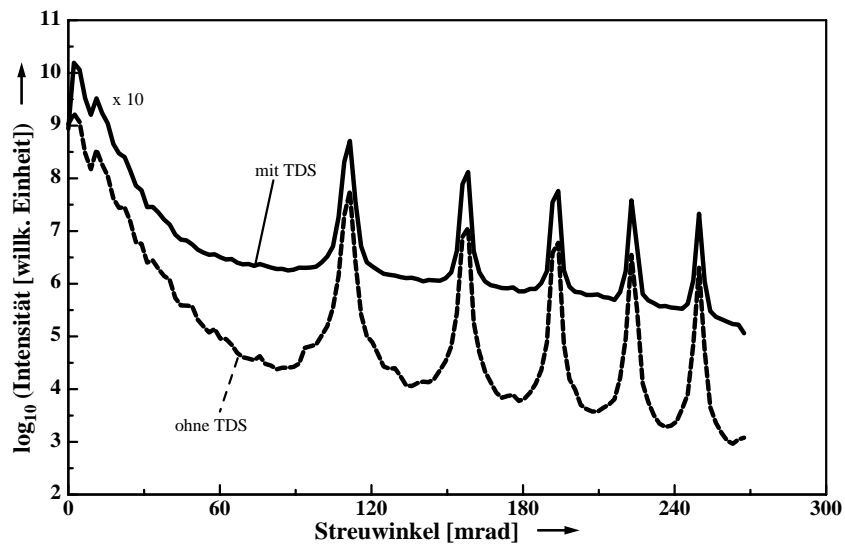


Abbildung 5.10: Ringförmig aufintegrierte, elastisch und unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung (TDS) simulierte, Elektronenbeugungsmuster für *InP* in der {100}-Orientierung.

6. Anwendungen in der Charakterisierung mesoskopischer Halbleiter

In diesem Kapitel sollen die in Kapitel 3 dargestellten Defizite im Bereich der Elektronenbeugungssimulation und der Materialcharakterisierung aufgearbeitet werden. Hierzu werden die für diese Arbeit entwickelten Ansätze, Modelle und Simulationstechniken, welche im Kapitel 4 vorgestellt und im Kapitel 5 zum Teil ihre Leistungsfähigkeit bewiesen haben, eingesetzt. Die in diesem Kapitel verwendeten Meßergebnisse wurden von Mitarbeitern des Fachgebietes Werkstoffe der Elektrotechnik erzielt. Die folgenden Punkte werden in diesem Kapitel genauer betrachtet:

- Klärung der Ursache für die Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Materialgrenzflächen sowie die Nutzbarkeit dieses Effektes zur Grenzflächencharakterisierung.
- Verspannungsbestimmung mittels dynamischer Simulationen.
- Entmischungsphänomene in quaternären Halbleitermaterialien.
- Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Materialgrenzflächen.
- Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitride.

6.1 Die Asymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen

In Abbildung 6.1 ist die Ordnungszahl-Kontrastabbildung einer *AlGaAs/GaAs*-Heterostruktur dargestellt.

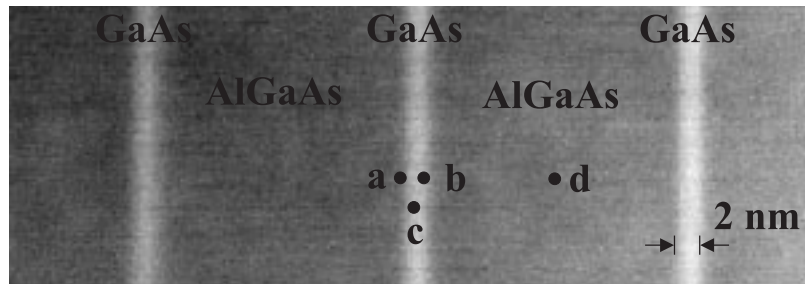


Abbildung 6.1: Ordnungszahl-Kontrastabbildung einer *AlGaAs/GaAs*-Heterostruktur.

Die in Abbildung 6.1 an den Meßpunkten **a** bis **d** aufgenommenen Elektronenbeugungsmuster sind in Abbildung 6.2 dargestellt.

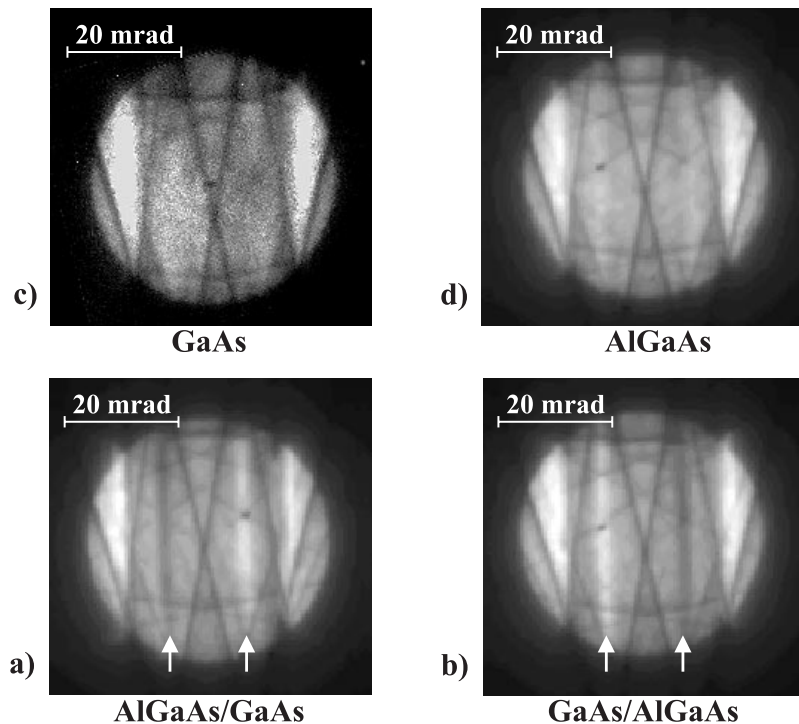


Abbildung 6.2: Zentrale Braggsscheiben von gemessenen Elektronenbeugungsmustern einer *AlGaAs/GaAs*-Heterostruktur nahe der $\{320\}$ -Orientierung. Die Elektronenbeugungsmuster sind an den Meßpunkten **a**, **b**, **c** und **d** in der Abbildung 6.1 aufgenommen worden.

Meßpunkt **a** befindet sich am *AlGaAs/GaAs*-Heteroübergang. Meßpunkt **b** befindet sich am *GaAs/AlGaAs*-Heteroübergang. Meßpunkt **c** befindet sich im *GaAs*. Meßpunkt **d** befindet sich im *AlGaAs*. Die zentralen Braggscheiben der Elektronenbeugungsmuster von den Heteroübergängen (Abbildung 6.2.a und 6.2.b) weisen Asymmetrien in den Intensitätsverteilungen auf, die als helle und dunkle Linien sichtbar und mit Pfeilen markiert sind. Die Intensitätsasymmetrien treten in den zentralen Braggscheiben der Elektronenbeugungsmuster von den heteroübergangsfreien Materialien *GaAs* und *AlGaAs* in den Abbildungen 6.2.c und 6.2.d nicht auf. In Abhängigkeit von der Art des Heteroübergangs, *AlGaAs/GaAs* oder *GaAs/AlGaAs*, wechseln die helle und die dunkle Linie ihre Position. Es sind auch für Heteroübergänge aus anderen Materialsystemen, für die unterschiedlichsten Materialzusammensetzungen, Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern beobachtet worden. Dieses waren unter anderem Heteroübergänge aus dem Materialsystem *InGaAs/InP* [59] und Heteroübergänge der Gruppe III-Nitride, aus dem *InGaN/GaN*-Materialsystem [108]. Die Kristallstruktur der Gruppe III-Nitride war dabei die Wurtzstruktur. Das die Intensitätsasymmetrien nicht nur in Elektronenbeugungsmustern von Materialien mit einer Zinkblendekristallstruktur, sondern auch für Materialien mit der Wurtzstruktur beobachtet wurden, zeigt die allgemeine Natur dieses Effektes.

Vor Beginn dieser Arbeit wurden erste elastische Multislice-Simulationen für Heterostrukturen, im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik, durchgeführt [59]. Die in [59] vorgestellten Elektronenbeugungsmuster von den Heteroübergängen wiesen Intensitätsasymmetrien auf, die in den heteroübergangsfreien Bereichen nicht zu erkennen waren. Bis zum Beginn dieser Arbeit existierten aber keine gesicherten Erkenntnisse über die Ursache der Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen. Mit den für diese Arbeit gemachten Untersuchungen und den daraus resultierenden Ergebnissen soll deren Ursache geklärt werden. Um eine möglichst quantitative Aussage über die Ursache der Intensitätsasymmetrien zu ermöglichen, wurden alle Multislice-Simulationen unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, durchgeführt. Hierzu wurde der in dieser Arbeit entwickelte und in Kapitel 4.2.1 vorgestellte, modifizierte Ansatz zur Simulation der thermisch diffusen Streuung verwendet.

Abbildung 6.3 zeigt simulierte und experimentelle Elektronenbeugungsmuster für einen *InGaAs/InP*-Heteroübergang in der $\{100\}$ -Orientierung. Das experimentelle Elektronenbeugungsmuster vom *InGaAs/InP*-Heteroübergang (Abbildung 6.3.b) weist Intensitätsasymmetrien in den $\{200\}$ -Braggscheiben auf (weiße Pfeile). Die beiden anderen experimentellen Elektronenbeugungsmuster aus den heteroübergangsfreien Bereichen (Abbildung 6.3.a und 6.3.c) zeigen keine Intensitätsasymmetrien. Um zu überprüfen, ob diese Intensitätsasymmetrien auch in, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, simu-

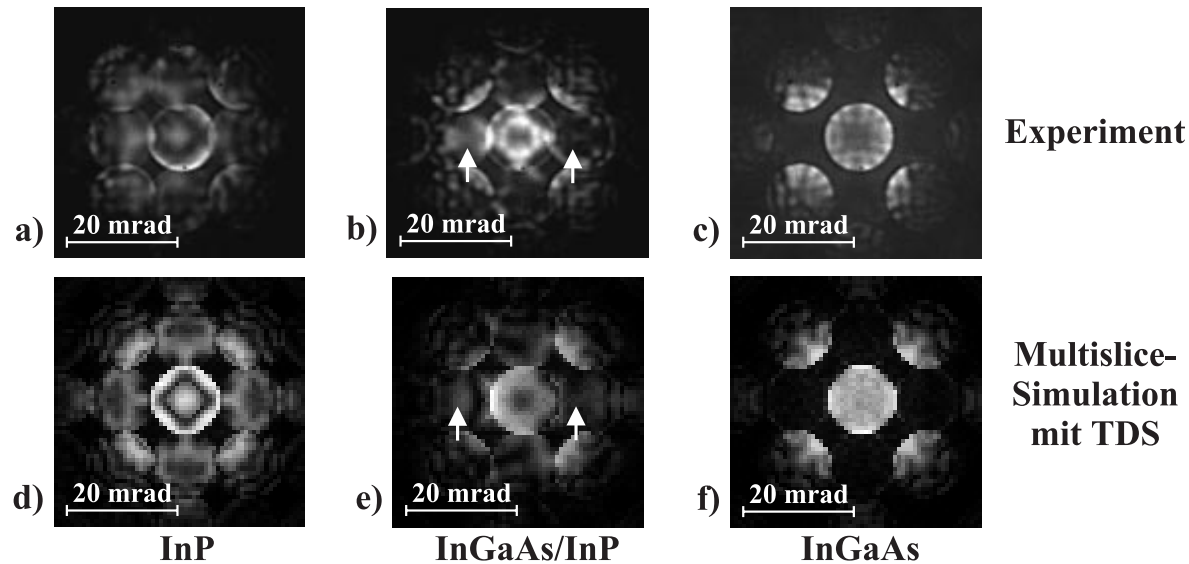


Abbildung 6.3: Experimentelle (a-c) und simulierte Elektronenbeugungsmuster (d-f) für das Materialsystem *InGaAs/InP* in der $\{100\}$ -Orientierung. Die Elektronenbeugungsmuster (a,d) sind im *InP*, (b,e) am Heteroübergang und (c,f) im *InGaAs* aufgenommen worden.

lierten Elektronenbeugungsmuster vorkommen, wurden diese in einem ersten Schritt für einen *InGaAs/InP*-Heteroübergang in der $\{100\}$ -Orientierung simuliert. Das in Abbildung 6.3 dargestellte, simulierte Elektronenbeugungsmuster vom *InGaAs/InP*-Heteroübergang weist wie schon das dazu korrespondierende experimentelle Elektronenbeugungsmuster Intensitätsasymmetrien auf. Diese Intensitätsasymmetrien sind jeweils mit weißen Pfeilen markiert. Wie schon bei den gemessenen Elektronenbeugungsmustern der heteroübergangsfreien Bereiche (*InGaAs* und *InP*), weisen auch die dazu korrespondierenden simulierten Elektronenbeugungsmuster, keine Intensitätsasymmetrien auf. Der Vergleich zwischen den simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern aus Abbildung 6.3 zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment, insbesondere auch für den Heteroübergang.

Um sicherzustellen, daß es sich bei diesen Ergebnissen nicht um ein einmaliges Ergebnis handelt, und auch keine Artefakte in den simulierten Elektronenbeugungsmustern aufgrund der begrenzten Auflösung vorliegen, sind weitere Untersuchungen notwendig gewesen. Als Grundlage für diese Untersuchungen dienen die in Abbildung 6.4 dargestellten experimentellen Elektronenbeugungsmuster für den *GaAs/AlGaAs*-Heteroübergang (Abbildung 6.4.a), für das *AlGaAs* (Abbildung 6.4.b) und für den *AlGaAs/GaAs*-Heteroübergang (Abbildung 6.4.c). Hierzu sind jeweils korrespondierende Elektronenbeugungsmuster mit zwei unterschiedlichen Auflösungen simuliert worden und in Abbildung 6.4 dargestellt. Die Elektronenbeugungsmuster aus den Abbildungen 6.4.a/d/g sind vom *GaAs/AlGaAs*-Heteroübergang.

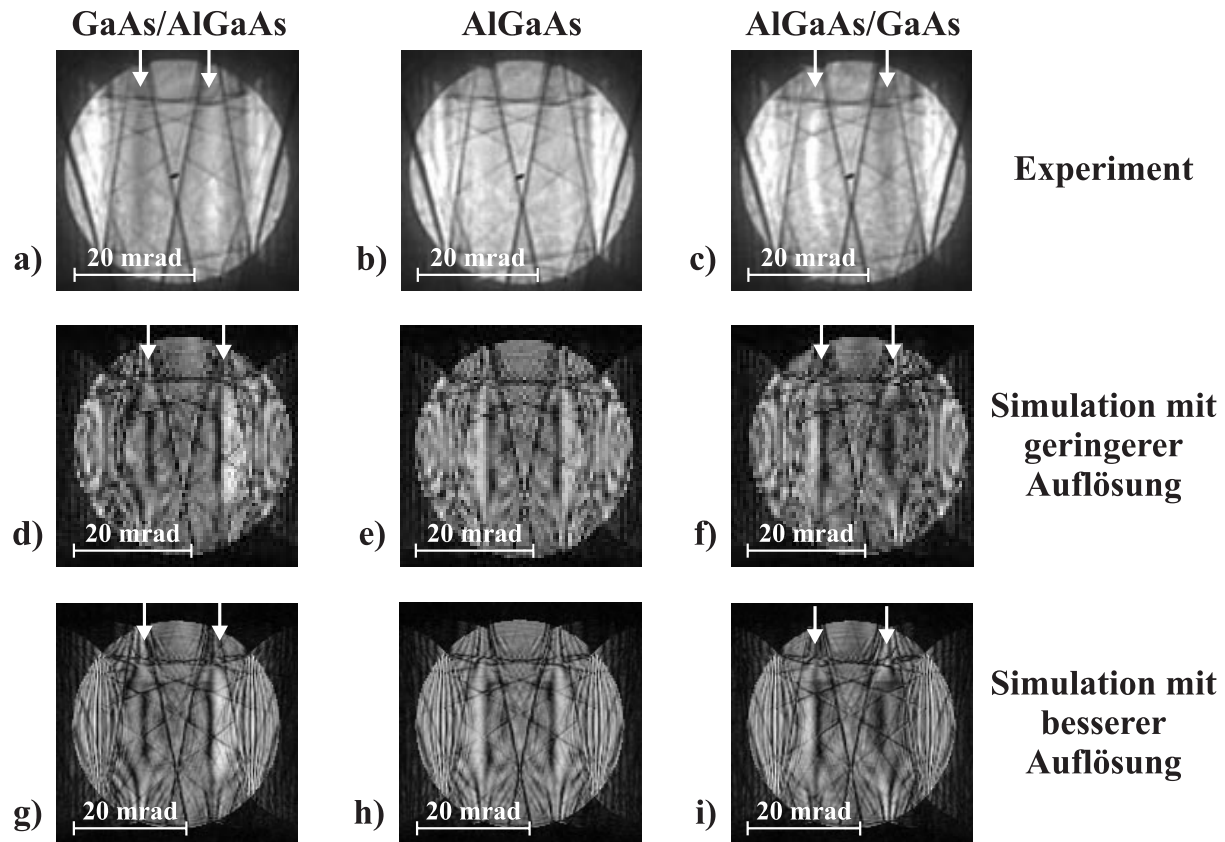


Abbildung 6.4: Experimentelle (a-c) und simulierte Elektronenbeugungsmuster (d-i) für das Materialsystem $AlGaAs/GaAs$ nahe der $\{320\}$ -Orientierung. Die Elektronenbeugungsmuster a, d und g sind vom $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergang, b, e und h sind vom $AlGaAs$ und c, f und i sind vom $AlGaAs/GaAs$ -Heteroübergang. Die Simulationen für die besser aufgelösten Elektronenbeugungsmuster g, h und i erfolgten im Vergleich zu den geringer aufgelösten d, e und i mit der 4-fachen Bildpunktzahl und der doppelten Kantenlänge der Simulationsscheiben.

Die Elektronenbeugungsmuster aus den Abbildungen 6.4.b/e/h sind vom heteroübergangsfreien $AlGaAs$. Die Elektronenbeugungsmuster aus den Abbildungen 6.4.c/f/i sind vom $AlGaAs/GaAs$ -Heteroübergang. Für die besser aufgelösten Elektronenbeugungsmuster in den Abbildungen 6.4.g/h/i sind sowohl die Kantenlänge der zu simulierenden Scheiben verdoppelt, als auch die Anzahl der Bildpunkte vervierfacht worden. Die Abbildung 6.4 zeigt, daß zwischen den simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern eine gute Übereinstimmung besteht. Aufgrund der höheren Auflösung werden die simulierten Elektronenbeugungsmuster in den Abbildungen 6.4.g/h/i gegenüber den in den Abbildungen 6.4.d/e/f detaillierter dargestellt. Die Intensitätsasymmetrien bleiben aber trotz der Auflösungsverbesserung in den Elektronenbeugungsmustern von den Heteroübergängen erhalten.

Damit sind die Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen sowohl in den experimentellen, als auch in den dazu korrespondierenden, simulierten Elektronenbeugungsmustern zu beobachten. Das bedeutet, daß es sich bei den Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen um das Resultat eines physikalischen Effektes handeln muß. Um dieses Ergebnis zu untermauern, werden im Folgenden alle möglichen potentiellen Fehlerquellen kurz erläutert und ausgeschlossen.

Die Elektronenbeugungssimulation basiert generell auf der Berechnung von Elektronenstreuamplituden. Diese beruht auf den diskreten Röntgen- und Elektronenstreuamplituden, die in [64] tabelliert sind. Die Tabellen aus [64] enthalten aber nicht für alle Elemente die Elektronenstreuamplituden. Mittels der Mott-Formel können diese aus den Röntgenstreuamplituden berechnet werden. Aufgrund der begrenzten Genauigkeit der tabellierten Werte, treten für kleine Streuwinkel Fehler in den berechneten Elektronenstreuamplituden auf. Diese Fehler führen für den Streuwinkel von 0 mrad sogar zu einer Polstelle bei der Berechnung der Elektronenstreuamplitude [63]. Daß die in dieser Arbeit verwendeten Elektronenstreuamplituden aber korrekt berechnet werden, wird im Folgenden bewiesen. Abbildung 6.5 zeigt den Verlauf der Elektronenstreuamplituden für die Materialien $GaAs$ und $Al_{0,5}Ga_{0,5}As$ als Funktion des Streuwinkels. Aus diesen Materialien besteht die $AlGaAs/GaAs$ -Halbleiterheterostruktur in Abbildung 6.1, deren Elektronenbeugungsmuster von den Heteroübergängen Intensitätsasymmetrien aufwiesen.

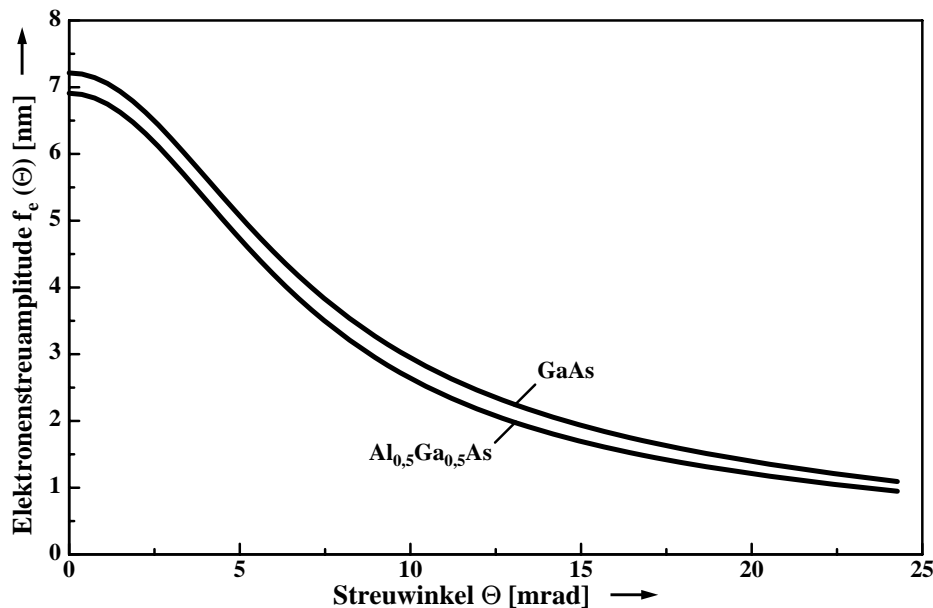


Abbildung 6.5: Verlauf der Elektronenstreuamplituden für $Al_{0,5}Ga_{0,5}As$ und $GaAs$ als Funktion des Streuwinkels.

Der Verlauf der Elektronenstreuamplituden in Abbildung 6.5 zeigt, daß selbst für kleine Streuwinkel die Elektronenstreuamplituden korrekt berechnet werden und für kleiner werdende Streuwinkel gegen einen konstanten Wert konvergieren. Somit existiert für einen Streuwinkel von 0 mrad keine Polstelle. Zusätzlich wurde überprüft, ob die Elektronenstreuamplituden von den Materialsystemen $InGaAs/InP$ und $InGaN/GaN$, deren Elektronenbeugungsmuster von den Heteroübergängen auch die Intensitätsasymmetrien aufwiesen, korrekt berechnet werden. Das Ergebnis dieser Überprüfung ist, daß auch für diese Materialsysteme die Elektronenstreuamplituden korrekt berechnet werden. Damit ist eine fehlerhafte Berechnung der Elektronenstreuamplituden als potentielle Fehlerquelle ausgeschlossen.

Eine weitere mögliche Fehlerquelle ist das Auftreten eines Meßfehlers. Die Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen sind aber für die unterschiedlichsten Proben, Materialien und Materialsysteme, zu zum Teil weit auseinander liegenden Zeitpunkten, beobachtet worden. Damit ist auch ein Meßfehler als potentielle Fehlerquelle ausgeschlossen.

Als letzte mögliche Fehlerquelle bleibt nur noch ein Artefakt in den simulierten und den experimentellen Elektronenbeugungsmustern aufgrund der verwendeten Betriebsparameter des RTEMs über. Die Intensitätsasymmetrien treten sowohl in experimentellen als auch in simulierten Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen auf. Deshalb muß nur der Einfluß der gemeinsam genutzten Betriebsparameter genauer betrachtet werden. Dieses sind die Beschleunigungsspannung, der sphärische Fehler, der Defokus und der Aperturwinkel. Die Beschleunigungsspannung und der Aperturwinkel sind in den Messungen leichten Variationen unterworfen und werden dementsprechend auch in den Simulationen variiert. Aufgrund dieser Variationen und der trotzdem auftretenden Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern sind diese beiden Parameter als Ursache für ein Artefakt auszuschließen. Der sphärische Fehler hat einen konstanten Wert und spielt insofern keine Rolle. Somit bleibt als mögliche Ursache für ein Artefakt nur noch der verwendete Defokuswert über. Für die Messungen wird normalerweise der für das verwendete RTEM optimale Defokuswert von 70 nm benutzt [58]. Anhand von simulierten Elektronenbeugungsmustern wird im Folgenden der Einfluß des Defokus auf die Intensitätsasymmetrien untersucht. Hierzu wurden die Simulationsparameter der simulierten Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.4 verwendet und nur deren Defokuswert variiert. Abbildung 6.6 zeigt die zentralen Braggscheiben der simulierten Elektronenbeugungsmuster für das $AlGaAs$, für den $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergang und für den $AlGaAs/GaAs$ -Heteroübergang mit den Defokuswerten 0 nm , 35 nm , 70 nm und 100 nm . Die Abbildung 6.6 weist zwei signifikante Tendenzen auf:

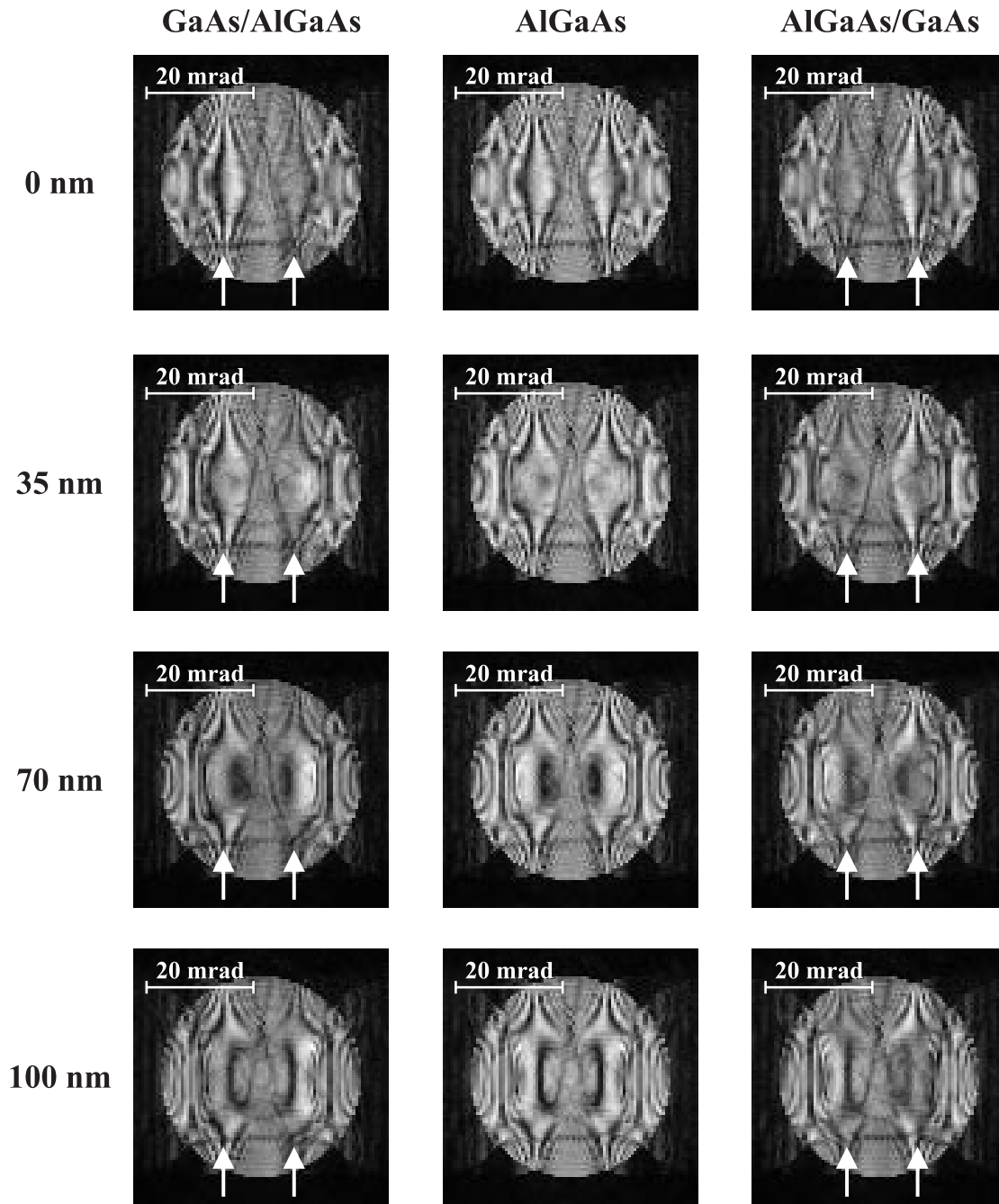


Abbildung 6.6: Demonstration des Defokuseinflusses auf die Intensitätsasymmetrien anhand der simulierten Elektronenbeugungsmuster der *AlGaAs/GaAs*-Heterostruktur aus Abbildung 6.1, die nahe der $\{320\}$ -Orientierung aufgenommen wurden.

- Trotz der Variation des Defokuswertes bleiben die Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern von den Heteroübergängen (weiße Pfeile) erhalten.
- Die Defokuswertveränderung führt zu einer Verschiebung der Intensitätsmaxima und -minima. Besonders signifikant ist dieses für die Defokuswerte 0 nm und 100 nm .

Anhand der obigen Untersuchungen konnten alle potentiellen Fehlerquellen für simulierte und experimentelle Elektronenbeugungsmuster ausgeschlossen werden. Somit sind die beobachteten Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen in jedem Fall physikalischer Natur. Im Folgenden soll daher die genaue Ursache für diesen Effekt untersucht und geklärt werden.

6.1.1 Die physikalische Ursache der asymmetrischen Intensitäten in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen

Theoretisch wurde die Existenz von Asymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Materialgrenzflächen schon vorhergesagt [32, 109]. Es existieren auch TEM-Untersuchungen die von asymmetrischen Intensitätsverteilungen berichten [110], wobei schwache helle Streifen in SAD-Elektronenbeugungsmustern von Materialgrenzflächen zu sehen sind. Diese zeigen immer in Richtung des Materials mit dem größeren inneren Kristallpotential und sind als helle Linien in Dunkelfeldaufnahmen sichtbar. Diese Effekte wurden auch in RTEM-Messungen von *Mo/Si*-Materialübergängen beobachtet [111].

Als Ursache für die beobachteten Effekte aus [110, 111] wird der Brechungseffekt, aufgrund der Differenz der stark unterschiedlichen inneren Kristallpotentiale, angesehen [112]. Die in [112] vorgestellten Elektronenbeugungsaufnahmen wiesen in jedem Fall eine Aufweitung bzw. Aufspaltung der zentralen Braggsscheibe in Richtung des Materials mit dem größeren inneren Kristallpotential auf. Diese Aufweitung wurde in den hier vorliegenden Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen weder im Experiment noch in der Simulation beobachtet. Darüber hinaus zeigen die Elektronenbeugungsmuster von den Heteroübergängen in Abbildung 6.6 eine deutliche Verschiebung der Intensitätsmaxima und -minima in Abhängigkeit vom Defokuswert. Dieses kann sogar zu einem Seitenwechsel der Intensitätsmaxima und -minima führen, wie der Vergleich der Elektronenbeugungsmuster für den Defokuswert von 0 nm und 100 nm in Abbildung 6.6 zeigt. Das Verhalten korrespondiert aber nicht mit dem Brechungseffekt, bei dem die Elektronen nur in Richtung des Materials mit dem größeren inneren Kristallpotential abgelenkt werden und somit kein Seitenwechsel der Intensitätsasymmetrien stattfinden kann.

Als mögliche Ursache für die Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen käme auch Interface-Channeling in Betracht [113]. Dieser Effekt hat aber nur einen relativ schwachen Einfluß auf das Elektronenbeugungsmuster und tritt nur bei sehr abrupten und defektfreien Materialübergängen auf. Darüber hinaus wirkt sich dieser Effekt vor allem auf die Kikuchibänder aus. Da mittels des Multislice-Ansatzes sehr

abrupte Materialübergänge simulierbar sind, wird im Folgenden untersucht, ob es sich bei den Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen, um das Resultat des Interface-Channeling-Effektes handelt. Abbildung 6.7 zeigt für einen *InP/InGaAs*-Heteroübergang das gemessene Elektronenbeugungsmuster. Dieses wurde in Polorientierung aufgenommen. Der mit einer weißen Linie gekennzeichnete Bereich in

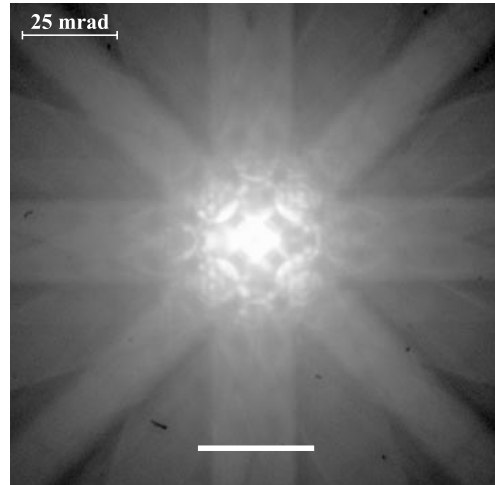


Abbildung 6.7: In Polorientierung gemessenes Elektronenbeugungsmuster für einen *InP/InGaAs*-Heteroübergang.

dem Elektronenbeugungsmuster in Abbildung 6.7 zeigt den Bereich, in dem für das $\{400\}$ -Kikuchiband ein Intensitätslinescan aufgenommen wurde. Dessen Ergebnis ist in Abbildung 6.8 dargestellt. Der Intensitätslinescan in Abbildung 6.8 zeigt für das $\{400\}$ -Kikuchiband

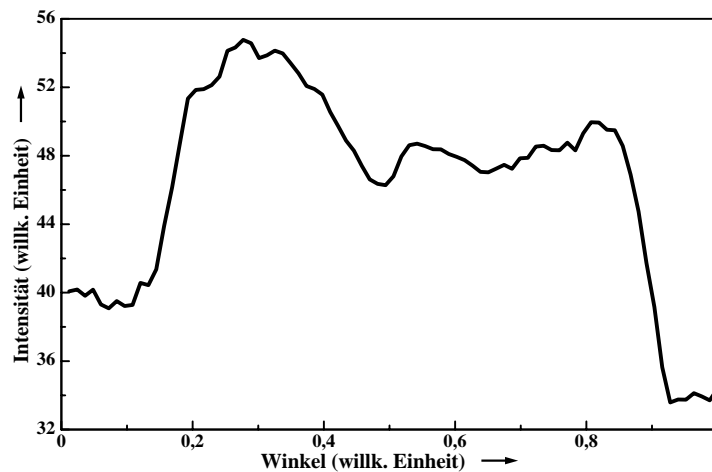


Abbildung 6.8: Intensitätslinescan über das $\{400\}$ -Kikuchiband des gemessenen Elektronenbeugungsmusters vom *InP/InGaAs*-Heteroübergang in Abbildung 6.7.

eine asymmetrische Intensitätsverteilung, die in dem $\{400\}$ -Kikuchiband der Elektronenbeugungsmuster der Materialien InP und $InGaAs$ nicht auftritt. Zur Kontrolle dieses Meßergebnisses wird untersucht, ob auch das simulierte Elektronenbeugungsmuster vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang Asymmetrien in dem $\{400\}$ -Kikuchiband aufweist. Die Abbildung 6.9 zeigt hierzu einen Intensitätslinescan über das $\{400\}$ -Kikuchiband des simulierten Elektronenbeugungsmusters vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang. Wie deutlich anhand

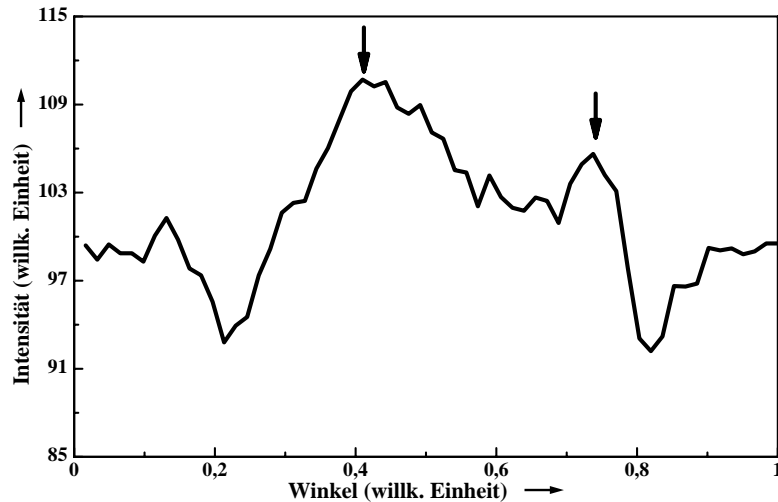


Abbildung 6.9: Intensitätslinescan über das $\{400\}$ -Kikuchiband des simulierten Elektronenbeugungsmusters vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang.

des Intensitätslinescans in Abbildung 6.9 zu erkennen ist, weist auch dieser Intensitätsasymmetrien auf. Diese Intensitätsasymmetrien existieren, wie schon bei den experimentellen Elektronenbeugungsmustern, wiederum nicht in den $\{400\}$ -Kikuchibändern der simulierten Elektronenbeugungsmuster von den heteroübergangsfreien Materialien InP und $InGaAs$.

Es soll im Folgenden untersucht werden, ob es sich bei den beobachteten Intensitätsasymmetrien um das Resultat des normalen Channeling-Effektes, aufgrund der Polorientierung der Halbleiterheterostruktur, oder um das Resultat des Interface-Channeling-Effektes handelt. Hierzu sind Elektronenbeugungssimulationen durchgeführt worden, bei denen der Primärelektronenstrahl mit unterschiedlichen Verkippungswinkeln aus der Polorientierung verkippt wurde. Wenn es sich bei den Intensitätsasymmetrien in den $\{400\}$ -Kikuchibändern um das Resultat des normalen Channeling-Effektes handelt, so sollten diese schon für einen kleinen Verkippungswinkel deutlich reduziert werden. Handelt es sich um den Effekt des Interface-Channeling, so sollten die Intensitätsasymmetrien in den $\{400\}$ -Kikuchibändern keine starke Veränderung aufweisen. Das Ergebnis der Verkippungssimulationen ist in den Abbildungen 6.10 bis 6.13 dargestellt.

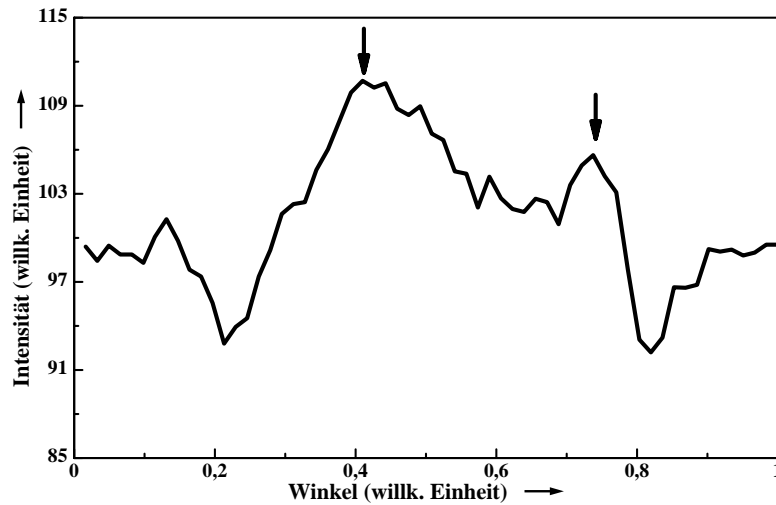


Abbildung 6.10: Intensitätslinescan über das simulierte $\{400\}$ -Kikuchiband des Elektronenbeugungsmusters vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang, in $\{100\}$ -Polorientierung aufgenommen.

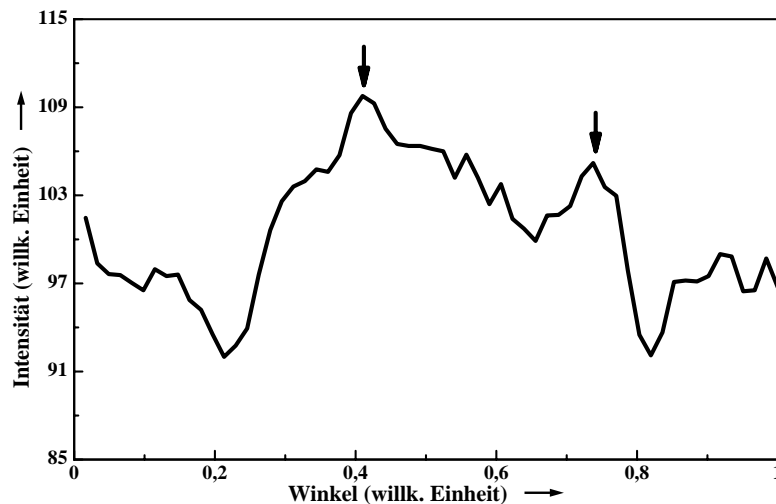


Abbildung 6.11: Intensitätslinescan über das simulierte $\{400\}$ -Kikuchiband des Elektronenbeugungsmusters vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang für eine um ca. $5,2\text{ mrad}$ aus dem $\{100\}$ -Pol entlang des $\{400\}$ -Kikuchibandes verkippte Probe.

Die Abbildungen 6.10 bis 6.13 zeigen schon für verhältnismäßig kleine Verkippungswinkel eine deutliche Reduzierung der Intensitätsasymmetrien in dem $\{400\}$ -Kikuchiband. Damit handelt es sich bei den beobachteten Intensitätsasymmetrien in den Kikuchibändern aber um das Resultat des normalen Channeling-Effektes und nicht um das Resultat des Interface-Channeling-Effektes.

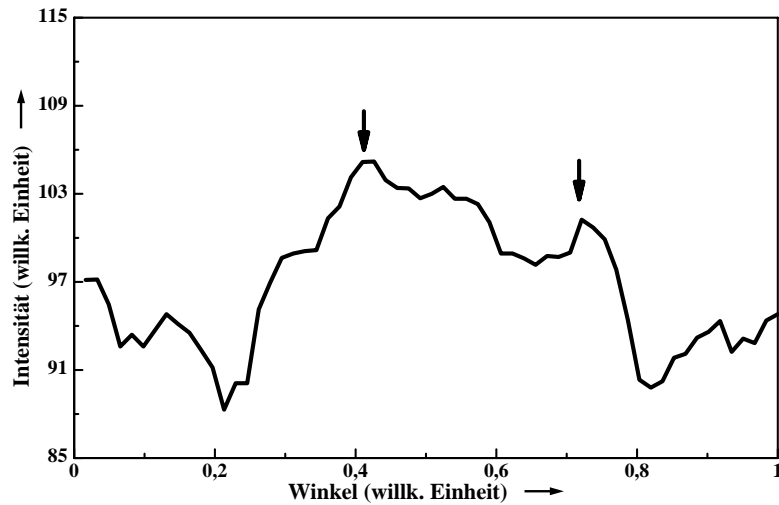


Abbildung 6.12: Intensitätslinescan über das simulierte $\{400\}$ -Kikuchiband des Elektronenbeugungsmusters vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang für eine um ca. $13,0\text{ mrad}$ aus dem $\{100\}$ -Pol entlang des $\{400\}$ -Kikuchibandes verkippte Probe.

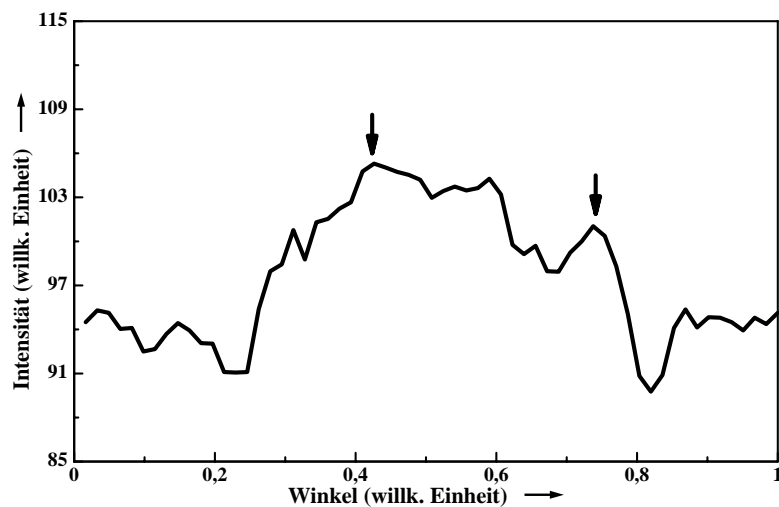


Abbildung 6.13: Intensitätslinescan über das simulierte $\{400\}$ -Kikuchiband des Elektronenbeugungsmusters vom $InP/InGaAs$ -Heteroübergang für eine um ca. $26,0\text{ mrad}$ aus dem $\{100\}$ -Pol entlang des $\{400\}$ -Kikuchibandes verkippte Probe.

Eine weitere Erklärung für die Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen wäre die Reflexion von Elektronen an den inneren Materialgrenzflächen, die auf Unterschiede in den inneren Kristallpotentialen zurückzuführen ist. Dieser Effekt ist schon aus der Lichtoptik bekannt. Wenn es sich tatsächlich um den Reflexionseffekt handelt, so ist dieser Effekt, im Rahmen dieser Arbeit, weltweit erstmalig beobachtet und dessen Existenz nachgewiesen worden. Zur simulativen Verifikation dieses Effektes ist

nur ein relativ einfacher Test notwendig. Wird statt des Materialsystems $AlGaAs/GaAs$ nun $InGaAs/InP$ verwendet, so sollten sich die Intensitätsasymmetrien im Fall des Reflexionseffektes, aufgrund der Zunahme der Kristallpotentialdifferenz, vergrößern. Hierzu sind deshalb die Elektronenbeugungsmuster einer $InP/InGaAs$ -Heterostruktur mit der Orientierung und den Mikroskopparametern simuliert worden, die schon für die Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.4 verwendet wurden. Das Ergebnis der Elektronenbeugungssimulationen für die $InP/InGaAs$ -Heterostruktur, ist zusammen mit den dazu korrespondierenden simulierten Elektronenbeugungsmustern der $AlGaAs/GaAs$ -Heterostruktur aus Abbildung 6.4, in der Abbildung 6.14 dargestellt. Diese zeigt eine deutliche Zunah-

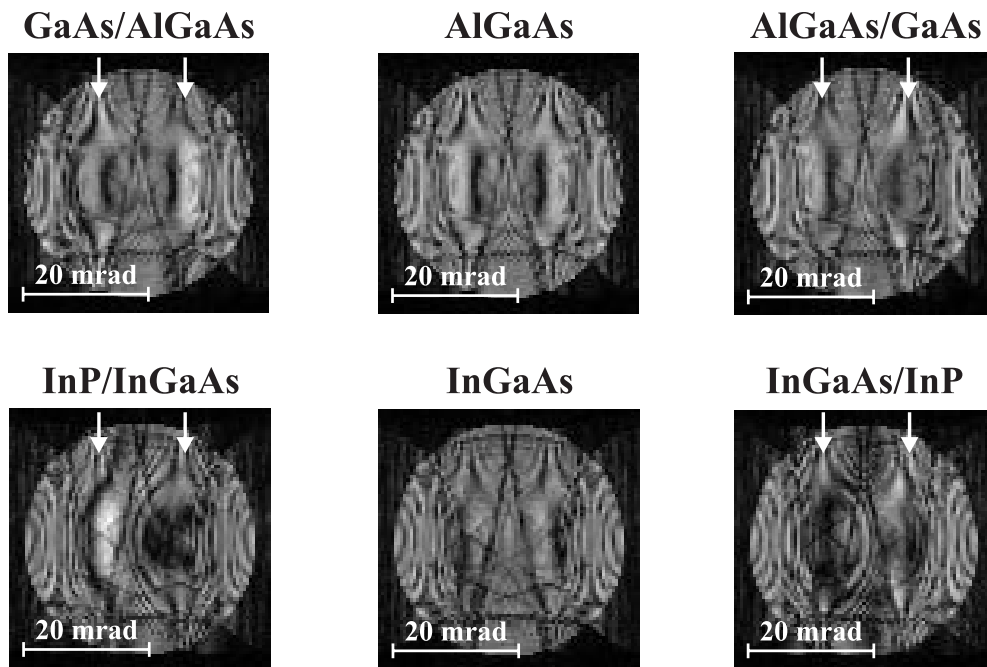


Abbildung 6.14: Simulierte Elektronenbeugungsmuster einer $AlGaAs/GaAs$ - und einer $InGaAs/InP$ -Heterostruktur, die die gleiche Orientierung aufweisen und mit den gleichen Mikroskopparametern simuliert wurden.

me der Intensitätsasymmetrien für den $InP/InGaAs$ -Heteroübergang im Vergleich zum $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergang und für den $InGaAs/InP$ -Heteroübergang im Vergleich zum $AlGaAs/GaAs$ -Heteroübergang. Zusätzlich fallen die vertauschten Positionen der Intensitätsmaxima auf. Diese resultieren aus der Vorzeichenumkehrung für die Kristallpotentialdifferenz des $InP/InGaAs$ -Heteroübergangs gegenüber dem $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergang und des $InGaAs/InP$ -Heteroübergangs gegenüber dem $AlGaAs/GaAs$ -Heteroübergang. Die obigen Ergebnisse beweisen, daß es sich bei den beobachteten Intensitätsasymmetrien, um das Resultat des Reflexionseffektes handelt. Zusätzlich wird dieses Ergebnis auch durch die Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.6 untermauert. In diesen ist für

die asymmetrischen Intensitäten eine Verschiebung der Intensitätsmaxima und -minima als Funktion des Defokuswertes zu erkennen. Der Grund hierfür ist, daß sich durch die Defokussierung sowohl der Konvergenzwinkel als auch die Position des Brennpunktes (Cross Over) vom Elektronenstrahl verändern. Aus diesen Veränderungen resultiert eine andere Winkelverteilung für die, an der Grenzfläche reflektierten Elektronen, die sich auch auf das Elektronenbeugungsmuster auswirkt.

Damit ist mit dieser Arbeit, anhand der obigen Untersuchungsergebnisse, weltweit erstmalig die Existenz des Reflexionseffektes in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen nachgewiesen worden.

6.1.2 Ausnutzung der Intensitätsasymmetrien zur Grenzflächencharakterisierung

Die obigen Simulationsergebnisse beruhen auf einem ideal aufgebauten, abrupten Heteroübergang. In Rahmen dieser Arbeit ist ein Grenzflächenmodell entwickelt und in Kapitel 4.2.6 vorgestellt worden, mit dem auch für nicht abrupte Materialübergänge Elektronenbeugungsmuster, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, simuliert werden können. Erst hierdurch wird die realitätsnahe Simulation von Elektronenbeugungsmustern für nicht abrupte Materialübergänge möglich.

Unter Verwendung des Grenzflächenmodells aus Kapitel 4.2.6 wird im Folgenden auf die Möglichkeit der Grenzflächencharakterisierung, mittels der Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen, genauer eingegangen. Hierzu wurden die gleichen Simulationsparameter verwendet, die schon für die Simulation der Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.4 angewandt wurden. Um die Veränderung der Asymmetrien genauer zu dokumentieren, sind für jede Position des Elektronenstrahls Intensitätslinescans über die zentrale Braggscheibe, wie in Abbildung 6.15 dargestellt, aufgenommen worden.

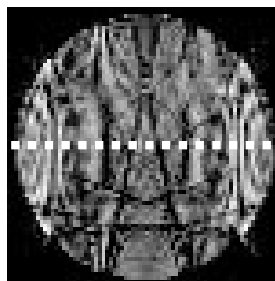


Abbildung 6.15: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe eines Elektronenbeugungsmusters.

Als erstes soll die Abhängigkeit der Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von nicht abrupten Heteroübergängen, als Funktion des Abstandes zwischen dem Primärelektronenstrahl und dem Heteroübergang, untersucht werden. Die Breite des nicht abrupten Heteroübergangs beträgt eine Monolage. Der Primärelektronenstrahl wurde mit einer Schrittweite von jeweils einer Monolage von links an den Heteroübergang herangeführt, bis er sich direkt auf dem Heteroübergang befand. Der Primärelektronenstrahl wurde generell auf der Position der Gruppe V-Atomsäule positioniert. Die Abbildungen 6.16 bis 6.18 zeigen das Ergebnis dieser Untersuchung. Die Abbildungen 6.16 bis 6.18 zeigen eine deutliche Zunahme der Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern, bei der Annäherung des Elektronenstrahls an den Heteroübergang. Diese Intensitätsasymmetrien sind in dem Elektronenbeugungsmuster vom Heteroübergang am stärksten ausgeprägt. Somit ist mittels der Intensitätsasymmetrien sehr genau die Position eines Heteroübergangs bestimmbar. Darüber hinaus fällt auf, daß die Intensitätsasymmetrien in dem Intensitätslinescan der Abbildung 6.16 deutlich geringer sind als in den Abbildungen 6.17 und 6.18.

Für das Materialsystem *GaAs/AlGaAs* in der $\{110\}$ -Orientierung haben die einzelnen Monolagen einen Abstand von etwa $0,28\text{ nm}$. Der Primärelektronenstrahl für den in Abbildung 6.16 dargestellten Intensitätslinescan ist ungefähr $0,5\text{ nm}$ von dem Materialübergang entfernt positioniert. Der Radius des Primärelektronenstrahls für den verwendeten Objektivblendendurchmesser ist ungefähr $0,5\text{ nm}$. Das Elektronenbeugungsmuster in Abbildung 6.16 weist noch fast keine Intensitätsasymmetrien auf. Erst bei Annäherung des Elektronenstrahls an den Heteroübergang nehmen die Intensitätsasymmetrien zu, wie in den Abbildungen 6.17 und 6.18 zu erkennen ist. Das bedeutet, daß bei genauer Kenntnis der Abstände der einzelnen Atomsäulen, in der zu untersuchenden Probe, auch der aktuell eingestellte Durchmesser des Primärelektronenstrahls sehr genau bestimmt werden kann.

Im zweiten Schritt wird die Abhängigkeit der Intensitätsasymmetrien in Elektronenbeugungsmustern von Heteroübergängen, als Funktion der Abruptheit des Heteroübergangs, genauer untersucht. Der Primärelektronenstrahl wird hierzu auf der Gruppe V-Atomsäule in der Mitte des Heteroübergangs positioniert. Die Anzahl der Monolagen für den Heteroübergang wird von ein auf drei und schließlich auf fünf erhöht. Das Ergebnis dieser Untersuchung ist in den Abbildungen 6.19 bis 6.21 dargestellt. Aus dem Vergleich der Intensitätslinescans in den Abbildungen 6.19 bis 6.21 ist das folgende Ergebnis ableitbar: Mit zunehmender Abruptheit des Heteroübergangs nehmen auch die Intensitätsasymmetrien in den Elektronenbeugungsmustern zu. Daraus resultiert, daß anhand des Vergleichs zwischen Simulation und Experiment, sehr gut die Abruptheit eines Heteroübergangs und somit dessen Qualität bestimmbar ist.

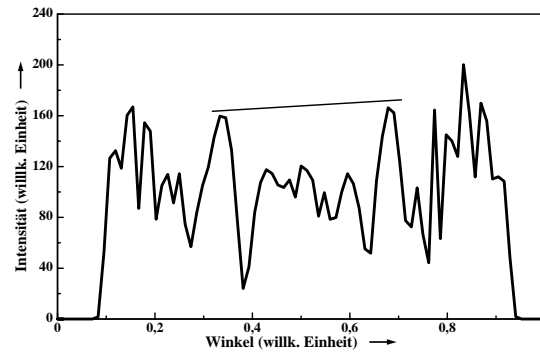


Abbildung 6.16: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe. Der Elektronenstrahl ist zwei Monolagen entfernt, auf der linken Seite des $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergangs.

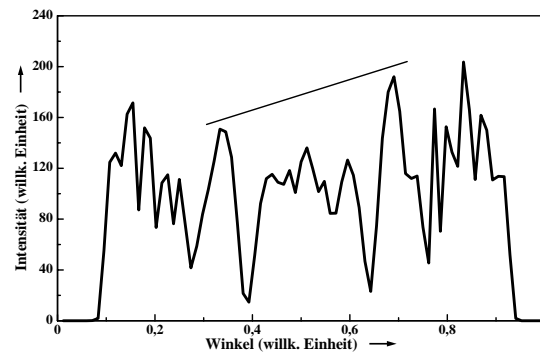


Abbildung 6.17: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe. Der Elektronenstrahl ist eine Monolagen entfernt, auf der linken Seite des $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergangs.

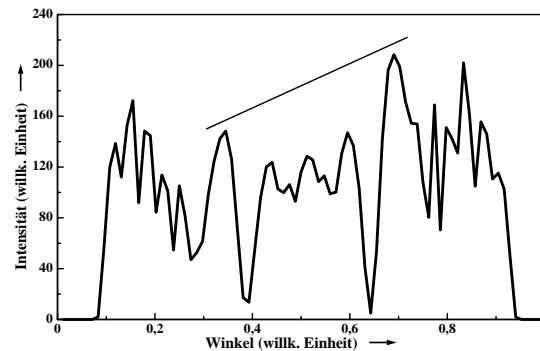


Abbildung 6.18: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe. Der Elektronenstrahl ist direkt auf dem $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergang.

Die obigen Untersuchungsergebnisse demonstrieren, daß durch den Vergleich zwischen simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern sehr gut die Qualität und die Position eines Heteroübergangs bestimmt werden kann. Da ein Heteroübergang nur eine spezielle Form eines Materialübergangs ist, gilt dieses Ergebnis prinzipiell für alle Materialübergänge.

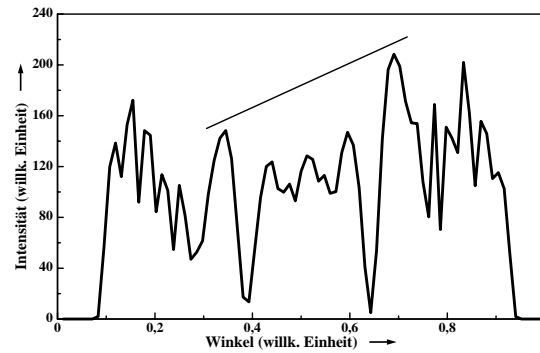


Abbildung 6.19: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe, für den Fall eines $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergangs mit einer Übergangsbreite von einer Monolage.

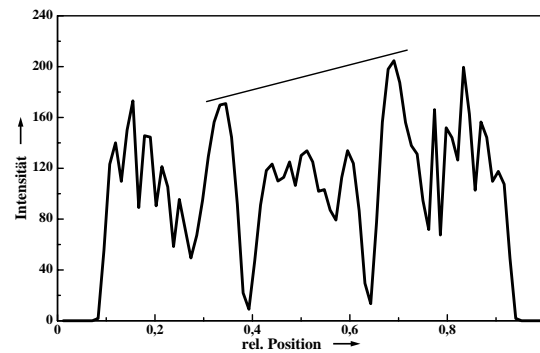


Abbildung 6.20: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe, für den Fall eines $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergangs mit einer Übergangsbreite von drei Monolagen.

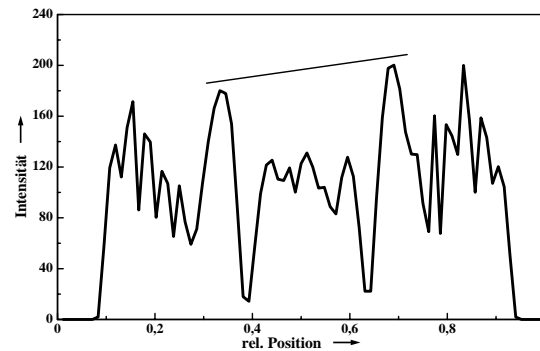


Abbildung 6.21: Intensitätslinescan über die zentrale Braggscheibe, für den Fall eines $GaAs/AlGaAs$ -Heteroübergangs mit einer Übergangsbreite von fünf Monolagen.

Darüber hinaus läßt sich durch den Vergleich von simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern, mit geeigneten Proben, der Durchmesser des Primärelektronenstrahls bestimmen.

6.2 Verspannungsbestimmung mittels dynamischer Elektronenbeugungssimulationen

In diesem Unterkapitel soll der Einfluß der Verspannung auf dynamisch simulierte Elektronenbeugungsmuster demonstriert und deren Verwendbarkeit zur Verspannungsbestimmung genauer untersucht werden. Insbesondere soll die Einsetzbarkeit des Multislice-Ansatzes zur Verspannungsbestimmung untersucht werden.

6.2.1 Der Einfluß der Verspannung auf dynamisch simulierte Elektronenbeugungsmuster

Abbildung 6.22 zeigt sehr genau den Einfluß der Verspannung auf, mittels des Blochwellenansatzes, dynamisch simulierte Elektronenbeugungsmuster. Es sind jeweils die zentralen Bragg-scheiben einer Verspannungsserie für eine *GaN*-Probe, die um 5° aus der $\{120\}$ -Orientierung verkippt ist, dargestellt. Die *GaN*-Probe wurde entlang der *c*-Richtung verspannt. Die verwendeten Verspannungswerte sind: a) -2% , b) 0% und c) $+2\%$. Aus der Verspannung des

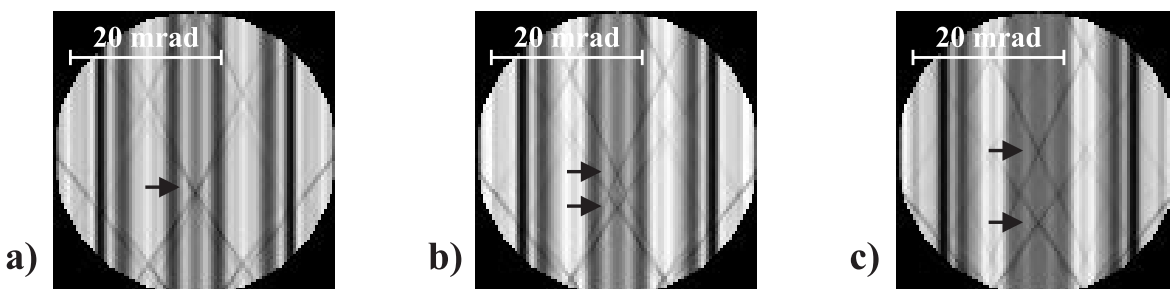


Abbildung 6.22: Mit dem Blochwellenansatz simulierte Elektronenbeugungsmuster, für eine ca. 5° aus der $\{120\}$ -Orientierung verkippte und in *c*-Richtung verspannte *GaN*-Probe. Die Verspannungswerte sind: a) -2% , b) 0% und c) $+2\%$.

GaN-Materials resultieren zwei Effekte, die in Abbildung 6.22 sehr gut zu erkennen sind.

- Die zentralen Bragg-scheiben in Abbildung 6.22 zeigen eine deutliche Verschiebung der, mit Pfeilen markierten, Schnittpunkte der HOLZ-Linien.
- In den zentralen Bragg-scheiben in Abbildung 6.22 ändert sich die Intensitätsverteilung mit zunehmender Verspannung.

Die dynamische Simulation von Elektronenbeugungsmustern erlaubt nicht nur den Vergleich der HOLZ-Linienmuster von simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern,

wie bei der kinematischen Elektronenbeugungssimulation. Sie erlaubt auch den Vergleich der Intensitätsverteilungen in den simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern. Wie bereits oben demonstriert wurde, wirkt sich die Verspannung eines Materials sowohl auf das HOLZ-Linienmuster, als auch auf die Intensitätsverteilung des Elektronenbeugungsmusters aus. Damit ist gegenüber der kinematischen Simulation eine deutlich bessere Verspannungsbestimmung, mittels des Vergleichs von dynamisch simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern, möglich.

6.2.2 Verspannungsbestimmung mittels des Multislice-Ansatzes für einen Heteroübergang

Werden die zur Verspannungsbestimmung verwendeten Elektronenbeugungsmuster in der Nähe eines Heteroübergangs aufgenommen, so muß der Simulationsansatz, der das zum Vergleich zwischen Simulation und Experiment benötigte Elektronenbeugungsmuster berechnet, Asymmetrien im Kristallaufbau wie Heteroübergänge simulieren können. Der Blochwellenansatz setzt für die Elektronenbeugungssimulation ein in zwei Dimensionen unendlich ausgedehntes periodisches Kristallgitter voraus. Daher sind mit diesem Ansatz, wenn überhaupt, Elektronenbeugungssimulationen von Heteroübergängen nur unter sehr hohem Aufwand möglich. Mittels des Multislice-Ansatzes ist die Simulation von Heteroübergängen ohne größere Probleme möglich. Deswegen soll im Folgenden untersucht werden, inwieweit sich Elektronenbeugungsmuster, die mit dem Multislice-Ansatz simuliert wurden, zur Verspannungsbestimmung eignen.

Bisher existieren, wenn überhaupt, nur wenige Untersuchungen, in denen der Multislice-Ansatz zur Verspannungsbestimmung eingesetzt wurde. Vor allem existieren hierzu, soweit bekannt ist, für die Gruppe III-Nitride noch keine Untersuchungsergebnisse. Deshalb soll die Eignung des Multislice-Ansatzes zur Verspannungsbestimmung anhand von elastisch verspannten Materialschichten aus den Gruppe III-Nitriden genauer untersucht werden. Dafür werden auch simulierte und experimentelle Elektronenbeugungsmuster verglichen.

Abbildung 6.23 zeigt hierzu das Ergebnis einer Simulationsreihe. In dieser Abbildung sind die zentralen Braggscheiben der Elektronenbeugungsmuster einer $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ -Schicht dargestellt, für die die Verspannungswerte von 0 % bis auf 10 % erhöht wurden. Alle Elektronenbeugungsmuster sind unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simuliert worden. Für den Verspannungswert von 0 % hat die $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ -Schicht die gleichen Gitterkonstanten wie das GaN -Substrat. Die Abbildung 6.23 zeigt mit zunehmender Verspannung sowohl Veränderungen in dem HOLZ-Linienmuster, als auch in der Intensitätsverteilung. So-

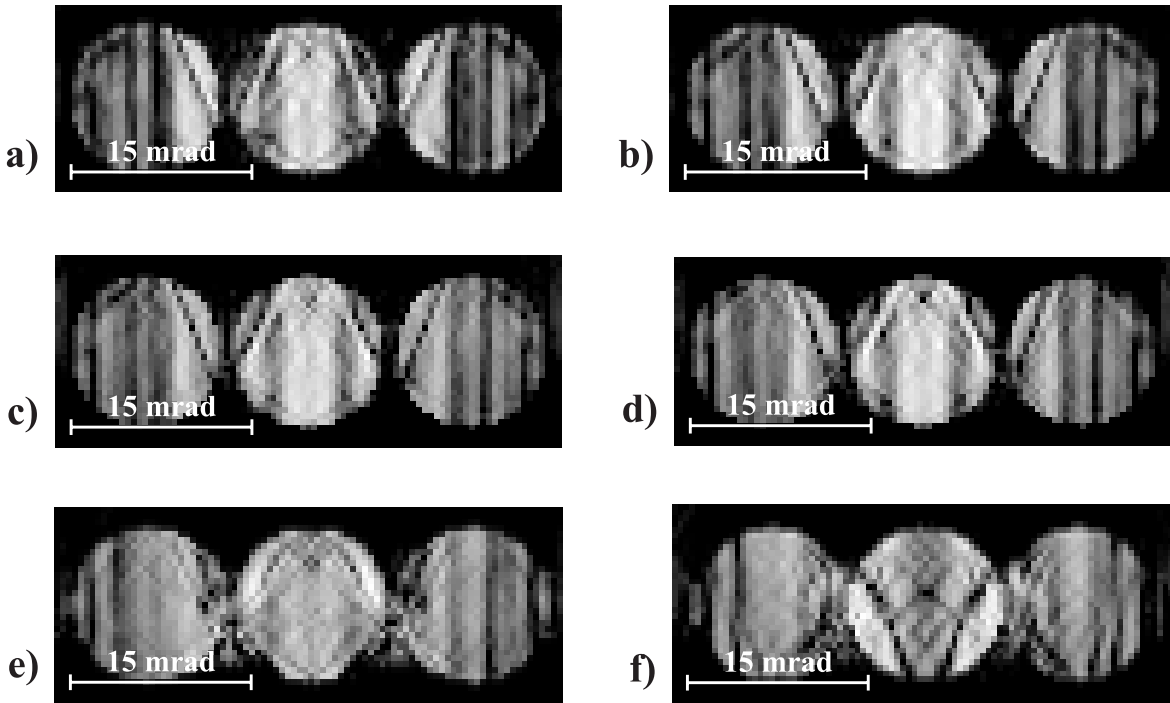


Abbildung 6.23: Zentrale Braggsscheiben für a) das GaN -Substrat und b) bis f) für die verspannte $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ -Schicht. Die verwendeten Verspannungswerte für die $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ -Schicht sind: b) 0 %, c) 1,0 %, d) 2,0 %, e) 5,0 %, und f) 10,0 %.

wohl die Elektronenbeugungsmuster als auch deren Veränderung in Abhängigkeit von der Verspannung erlauben mehrere Schlüsse.

Alle simulierten Elektronenbeugungsmuster in der Abbildung 6.23 weisen eine asymmetrische Intensitätsverteilung in den zentralen Braggsscheiben auf. Diese resultiert aus der nicht zentralsymmetrischen Kristallstruktur der Gruppe III-Nitride, der Wurtzitstruktur. Diese asymmetrische Intensitätsverteilung ist auch schon in experimentellen Elektronenbeugungsmustern der Gruppe III-Nitride beobachtet worden [108]. Die zentralen Braggsscheiben der Elektronenbeugungsmuster für das GaN (Abbildung 6.23.a) und für das $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ (Abbildung 6.23.b-f) weisen selbst für den Fall, daß das GaN und das $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ die gleichen Gitterkonstanten haben, Unterschiede in der Intensitätsverteilung und in den HOLZ-Liniemustern auf. Insbesondere weisen die zentralen Braggsscheiben für das $In_{0,12}Ga_{0,88}N$, mit den Verspannungswerten 5 % und 10 % in den Abbildungen 6.23.e und 6.23.f, im Vergleich zu den anderen zentralen Braggsscheiben des $In_{0,12}Ga_{0,88}N$ mit den Verspannungswerten 0 %, 1 % und 2 % in den Abbildungen 6.23.b, 6.23.c und 6.23.d, besonders signifikante Veränderungen in den Intensitäten auf. Auch die zentralen Braggsscheiben für das $In_{0,12}Ga_{0,88}N$, mit den Verspannungswerten 0 %, 1 %, und 2 % in den Abbildungen 6.23.b, 6.23.c und 6.23.d weisen Unterschiede in den Intensitätsverteilungen und HOLZ-Liniemustern auf. Diese sind

aber nicht besonders signifikant. Erst durch eine verbesserte Auflösung würden diese Unterschiede deutlicher werden.

Abbildung 6.24 zeigt kinematisch simulierte und experimentelle Elektronenbeugungsmuster für einen elastisch verspannten, 2 nm breiten $In_{0,12}Ga_{0,88}N/GaN$ -Quantentopf. Anhand der kinematischen Simulationsergebnisse aus Abbildung 6.24 kann der Spannungswert für den elastisch verspannten $In_{0,12}Ga_{0,88}N/GaN$ -Quantentopf zu $0,7\%$ bestimmt werden. Mit diesem Spannungswert sind dann mittels des Multislice-Ansatzes, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, die Elektronenbeugungsmuster für das unverspannte GaN und das gegenüber dem GaN um $0,7\%$ verspannte $In_{0,12}Ga_{0,88}N$, simuliert worden. Das Ergebnis dieser Elektronenbeugungssimulationen ist in Abbildung 6.25 dargestellt. Aus dem Vergleich zwischen den simulierten und den experimentellen Elektronenbeugungsmustern des $In_{0,12}Ga_{0,88}N/GaN$ -Quantentopfes in den Abbildungen 6.24 und 6.25 können mehrere Schlüsse gezogen werden.

Es existiert eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den HOLZ-Linienmustern der simulierten und der experimentellen Elektronenbeugungsmuster. Daraus resultiert, daß mittels der kinematischen Simulationen der Spannungswert und die Orientierungen annähernd korrekt bestimmt wurden. Die mittels des Multislice-Ansatzes simulierten und die experimentellen Elektronenbeugungsmuster weisen Unterschiede in den Intensitäten der zentralen Braggseiben auf, die aus einer nicht exakten Übereinstimmung der Materialdicken resultieren. Der entscheidende Nachteil der simulierten Elektronenbeugungsmuster ist deren begrenzte Auflösung, durch die die simulierten Elektronenbeugungsmuster nicht so detailliert dargestellt sind, wie die experimentellen Elektronenbeugungsmuster.

Die in dieser Arbeit erzielten Untersuchungsergebnisse zeigen die Problematik bei der Verspannungsbestimmung mittels des Multislice-Ansatzes. Einerseits muß für die möglichst exakte Verspannungsbestimmung die korrekte Materialdicke bestimmt werden. Allein dieses führt für den Multislice-Ansatz, im Vergleich zu dem Blochwellenansatz, schon zu einer sehr großen Berechnungsdauer. Andererseits muß für eine möglichst genaue Verspannungsbestimmung eine möglichst exakte Übereinstimmung zwischen dem simulierten und dem experimentellen Elektronenbeugungsmuster gefunden werden. Dieses führt für den Multislice-Ansatz im Vergleich zum Blochwellenansatz zu einer noch stärkeren Vergrößerung der Simulationsdauer. Aufgrund dieser Ergebnisse ist daher immer abzuwägen, ob für dynamische Elektronenbeugungssimulationen der Multislice-Ansatz oder der Blochwellenansatz eingesetzt wird. Solange die zu untersuchende Probe einen relativ idealen Kristallaufbau hat und die Elektronenbeugungsmuster nicht zu nah an Heteroübergängen aufgenommen werden, bietet der Blochwellenansatz, für den Vergleich von simulierten und experimentellen

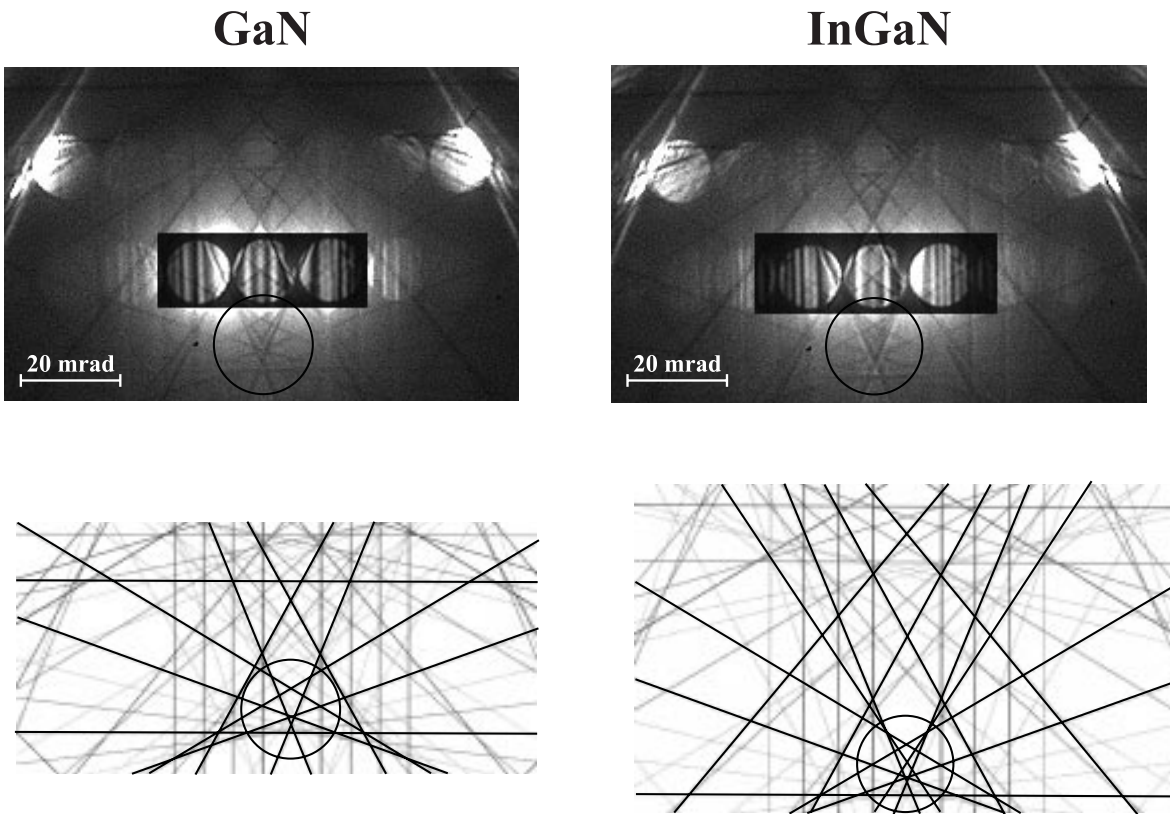


Abbildung 6.24: Experimentelle (oben) und kinematisch simulierte (unten) Elektronenbeugungsmuster für einen elastisch verspannten, 2 nm breiten $In_{0,12}Ga_{0,88}N/GaN$ -Quantentopf.

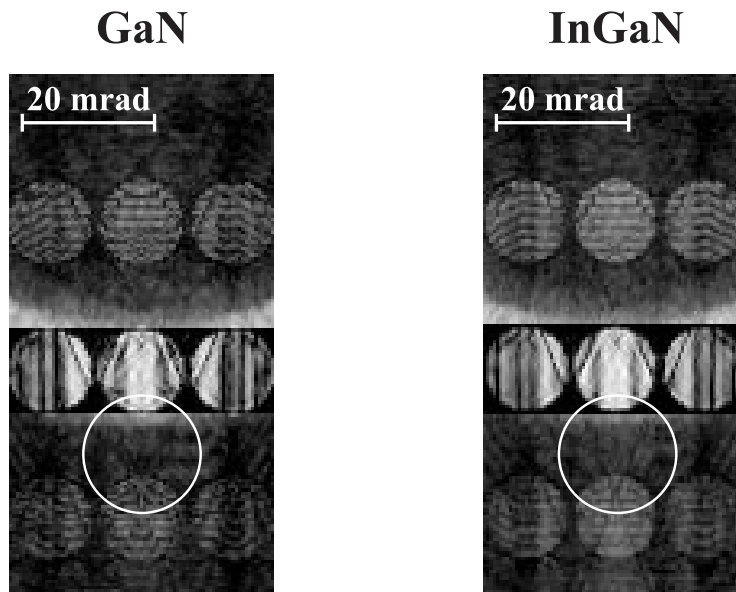


Abbildung 6.25: Mittels des Multislice-Ansatzes dynamisch simulierte Elektronenbeugungsmuster für einen elastisch verspannten, 2 nm breiten $In_{0,12}Ga_{0,88}N/GaN$ -Quantentopf.

Elektronenbeugungsmustern, viele Vorteile im Bezug auf Berechnungsdauer und Intensitätsanpassung. Sobald aber Elektronenbeugungsmuster in unmittelbarer Nähe von Heteroübergängen aufgenommen werden, ist der quantitative Vergleich zwischen dynamisch simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern ohne größeren Aufwand nur mittels des Multislice-Ansatzes möglich.

6.2.3 Die Verspannungsbestimmung in quaternären Halbleitermaterialien

In vielen Veröffentlichungen wird im Fall von entmischten quaternären Halbleitermaterialien von deutlichen Kontrastmodulationen in Hellfeld- und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen berichtet [11, 13, 14], die zueinander korrespondieren. Gerade die Kontrastmodulation in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen würde auf eine Veränderung in der Materialzusammensetzung hinweisen. Nach dem Vegardschen Gesetz resultiert aus der Veränderung in der Materialzusammensetzung eine Veränderung in den Gitterkonstanten. Aus der Veränderung in den Gitterkonstanten sollte wiederum eine Verspannungsänderung resultieren. Mittels kinematischer Simulationen ist aber keine Veränderung in den Gitterkonstanten von entmischten Proben, im Rahmen der Meßgenauigkeit, beobachtet worden [11]. Durch kinematische Simulationen ist die Materialzusammensetzung und die Verspannung einer Probe anhand des Vergleichs von simulierten und experimentellen HOLZ-Linienmustern annähernd genau bestimmbar. Um sicherzustellen, daß dieses auch für entmischte Proben weiterhin gültig ist, wird dieses im Folgenden anhand des Vergleichs von kinematisch und mittels des Multislice-Ansatzes simulierten Elektronenbeugungsmustern untersucht. Zu diesem Zweck sind für zwei Materialschichten einer abwechselnd positiv und negativ verspannten quaternären Probe aus den Schichtmaterialien $In_{0,74}Ga_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$ und $In_{0,8}Ga_{0,2}As_{0,5}P_{0,5}$ die Verspannungswerte kinematisch bestimmt worden. Diese lauten: $-1,8\%$ für das $In_{0,74}Ga_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$ und $+1,5\%$ für das $In_{0,8}Ga_{0,2}As_{0,5}P_{0,5}$. Abbildung 6.26 zeigt hierzu die experimentellen und die dynamisch, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, simulierten Elektronenbeugungsmuster. Diese weisen signifikante HOLZ-Linienmuster auf. Sie sind in Abbildung 6.26 als einfache Linienmuster links bzw. rechts neben den dazugehörigen Elektronenbeugungsmustern dargestellt. Der Vergleich zwischen den simulierten und den experimentellen Elektronenbeugungsmustern aus Abbildung 6.26 zeigt für diese Linienmuster eine gute Übereinstimmung. Das bedeutet, daß auch für quaternäre Materialien, mittels kinematischer Simulationen, eine gute Näherung für den Verspannungswert ermittelt werden kann. Ein direkter Vergleich der Intensitäten von simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern ist aber nicht möglich, da die Experimentellen nicht energiegefiltert, die

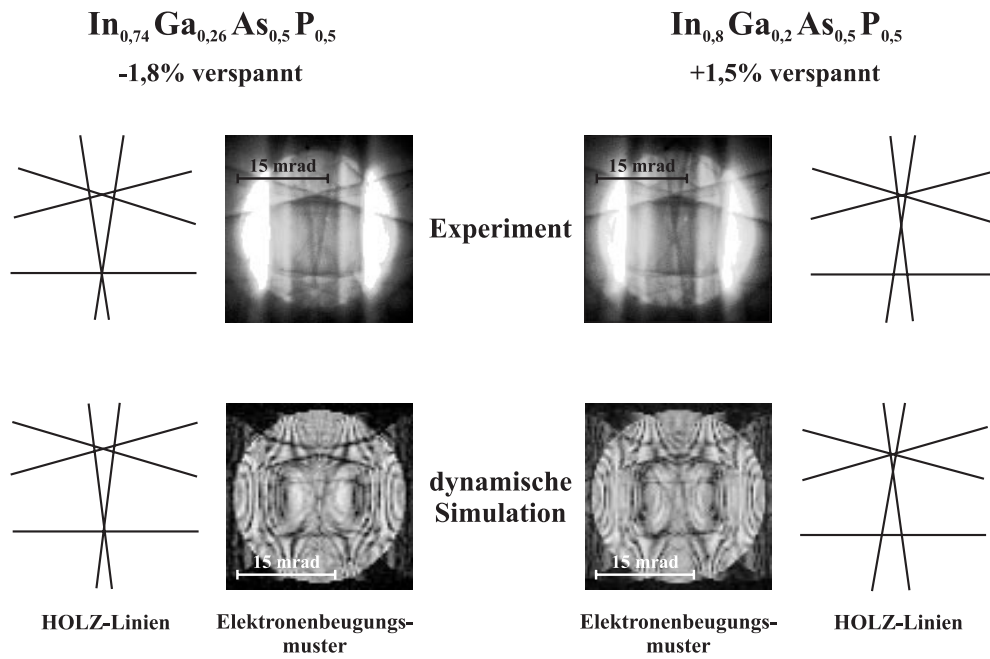


Abbildung 6.26: Vergleich von experimentellen und simulierten Elektronenbeugungsmustern für zwei quaternäre Proben, aus den Materialien $\text{In}_{0,74}\text{Ga}_{0,26}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ und $\text{In}_{0,8}\text{Ga}_{0,2}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$. Die angegebenen Verspannungswerte wurden mittels kinematischer Elektronenbeugungssimulationen bestimmt.

Simulierten aber energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern entsprechen.

6.3 Entmischungsphänomene in quaternären Halbleitermaterialien

In Kapitel 2.5.1 ist auf die Problematik der Entmischung von quaternären Halbleitermaterialien und deren nachteiligen Einfluß auf das Wachstum von Halbleiterschichten für technisch relevante Bauelemente eingegangen worden. Kapitel 3 zeigt den aktuellen Leistungsstand in der Charakterisierung von entmischten Halbleiterschichten. In diesem Kapitel sollen hierzu nun, basierend auf den Neuentwicklungen aus Kapitel 4, Untersuchungen durchgeführt werden.

In entmischten Proben wird vor allem der Effekt des Static Atomic Displacements, die Aufspaltung der HOLZ-Linien in deren Elektronenbeugungsmustern und die quasiperiodische Kontrastmodulation in deren Hellfeld- und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen beobachtet. Insbesondere fehlen bisher genauere Erkenntnisse über die folgenden Punkte:

- Einfluß des Static Atomic Displacements auf Elektronenbeugungsmuster von entmischten Proben.
- Ursache der Aufspaltung von HOLZ-Linien in den Elektronenbeugungsmustern von entmischten Proben.
- Ursache der quasiperiodischen Kontrastmodulation in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von entmischten Proben.

Daher sollen diese Punkte im Folgenden genauer untersucht werden. Anhand der Untersuchungsergebnisse wird auch die Verwendbarkeit, der für diese Arbeit neu entwickelten Simulationsmodelle, diskutiert.

6.3.1 Der Effekt des Static Atomic Displacements

In diesem Abschnitt soll der Effekt des Static Atomic Displacement (SD) genauer untersucht werden. Dieser Effekt tritt in quaternären Halbleitern auf und basiert auf der Veränderung der Bindungslängen der einzelnen Gitteratome [114]. Durch die Entmischung wird dieser Effekt noch verstärkt.

Im Rahmen dieser Arbeit ist ein Simulationsmodell für die Simulation des Static Atomic Displacements entwickelt worden. Dieses Simulationsmodell und dessen Prinzip wird in Kapitel 4.2.3 vorgestellt. Die Displacementamplitude (SDA) gibt in diesem Modell die maximale Verschiebung der Ruhelage der Atome, aus der normalen Position im Kristallgitter, an.

Abbildung 6.27 zeigt für zwei Proben die experimentellen und die dazu korrespondierenden, mit dem Simulationsmodell berechneten, Elektronenbeugungsmuster. Diese Proben bestehen aus den Materialien $In_{0,74}Ga_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$ und $In_{0,8}Ga_{0,2}As_{0,5}P_{0,5}$. Die simulierten Elektronenbeugungsmuster in der Abbildung 6.27 sind mit den Displacementamplituden $0, 0\text{ nm}$, $0, 01\text{ nm}$ und $0, 02\text{ nm}$ berechnet worden. Um eine möglichst quantitative Aussage über die Größe der Displacementamplitude treffen zu können, sind sie unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simuliert worden. Die simulierten Elektronenbeugungsmuster

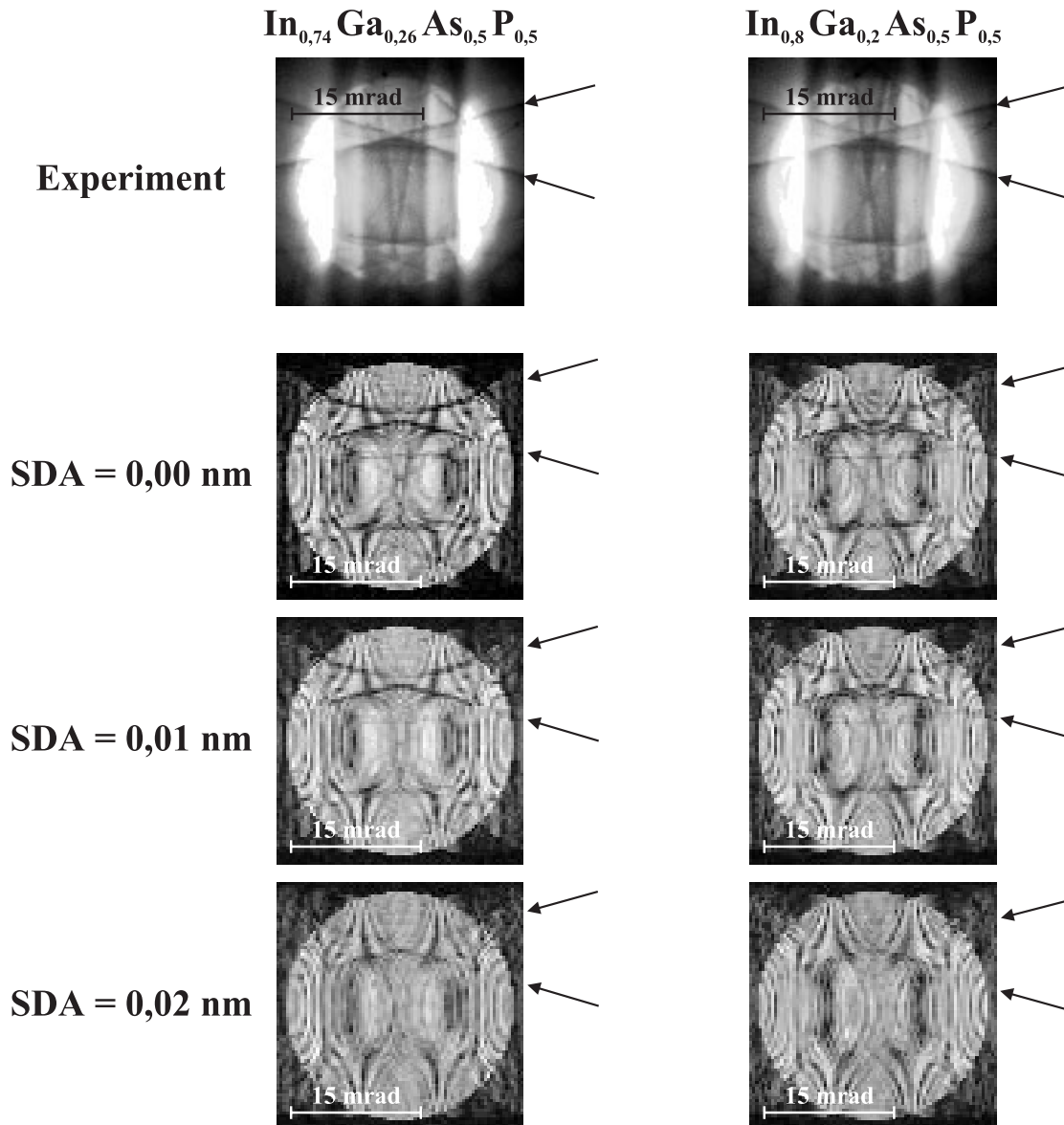


Abbildung 6.27: Experimentelle und, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, simulierte Elektronenbeugungsmuster zweier entmischter Proben aus den Materialien $In_{0,74}Ga_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$ und $In_{0,8}Ga_{0,2}As_{0,5}P_{0,5}$. SDA ist die Displacementamplitude.

in Abbildung 6.27 zeigen deutlich den Einfluß des Static Atomic Displacements. Dieser

nimmt mit zunehmender Displacementamplitude stetig zu. Die HOLZ-Linien (schwarze Pfeile) in den Elektronenbeugungsmustern sind mit zunehmender Displacementamplitude immer schwächer ausgeprägt. Insbesondere sind die HOLZ-Linien für die Displacementamplitude von $0,02\text{ nm}$ fast ausgelöscht. Darüber hinaus wirken die simulierten Elektronenbeugungsmuster mit zunehmender Displacementamplitude immer diffuser. Dagegen haben die experimentellen Elektronenbeugungsmuster in Abbildung 6.27 sowohl für das Material $In_{0,74}Ga_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$ als auch für das Material $In_{0,8}Ga_{0,2}As_{0,5}P_{0,5}$ noch relativ deutlich erkennbare HOLZ-Linien. Da die HOLZ-Linien für die Displacementamplitude von $0,02\text{ nm}$ annähernd ausgelöscht sind, ist dieser Wert als Displacementamplitude für die untersuchten Proben, aus den Materialien $In_{0,74}Ga_{0,26}As_{0,5}P_{0,5}$ und $In_{0,8}Ga_{0,2}As_{0,5}P_{0,5}$, ausgeschlossen. Dieses Ergebnis stimmt sehr gut mit Daten aus der Literatur überein, die die Größe der maximalen Displacementamplitude im Bereich der Vibrationsamplitude der Atome ansetzen [15]. Für das Materialsystem $InGaAsP$ ist diese kleiner als $0,01\text{ nm}$ [50, 54, 64, 115].

Anhand der hier vorliegenden Simulationsergebnisse ist keine eindeutige Bestimmung der Größe der Displacementamplitude möglich. Dieses liegt unter anderem daran, daß die simulierten Elektronenbeugungsmuster energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern entsprechen und die experimentellen nicht. Darüber hinaus stimmt auch die Auflösung der simulierten Elektronenbeugungsmuster nicht mit der Auflösung der experimentellen Elektronenbeugungsmuster überein. Das bedeutet, daß für zukünftige Untersuchungen die experimentellen Elektronenbeugungsmuster energiegefiltert werden müssen und die Auflösung der simulierten Elektronenbeugungsmuster besser an die der experimentellen angeglichen werden muß. Erst dann ist ein genauer Vergleich zwischen Simulation und Experiment möglich.

Die oben gemachten Untersuchungen zeigen, daß trotz der genannten Einschränkungen, mit dem in dieser Arbeit entwickelten Modell zur Simulation des Static Atomic Displacements, eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment zu erzielen ist. Basierend auf diesem Modell wird in Zukunft die Existenz des Static Atomic Displacement Effektes in einer Probe nachweisbar und auch die Größe der Displacementamplitude bestimmbar sein.

6.3.2 Der Effekt der Oberflächenrelaxationen

Ein weiteres, experimentell beobachtetes Entmischungspänomen ist der Effekt der Oberflächenrelaxation. Dieser Effekt ist verantwortlich für quasiperiodische Kontrastmodulationen in Hellfeldabbildungen von entmischten Proben [14].

In Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von entmischten Proben ist auch eine quasiperiodische Kontrastmodulation beobachtet worden, die zu den Kontrastmodulationen in Hell-

feldabbildungen von entmischten Proben korrespondiert [11]. Außerdem ist in Elektronenbeugungsmustern von entmischten Proben die Aufspaltung der HOLZ-Linien beobachtet worden [11].

Abbildung 6.28 zeigt die experimentelle Ordnungszahl-Kontrast- und Hellfeldabbildung einer Heterostruktur, die aus einem 2° -fehlorientierten *GaAs*-Substrat und einer entmischten $In_{0,26}Ga_{0,74}As_{0,5}P_{0,5}$ -Schicht besteht. Wie anhand der Abbildung 6.28 zu erkennen ist,

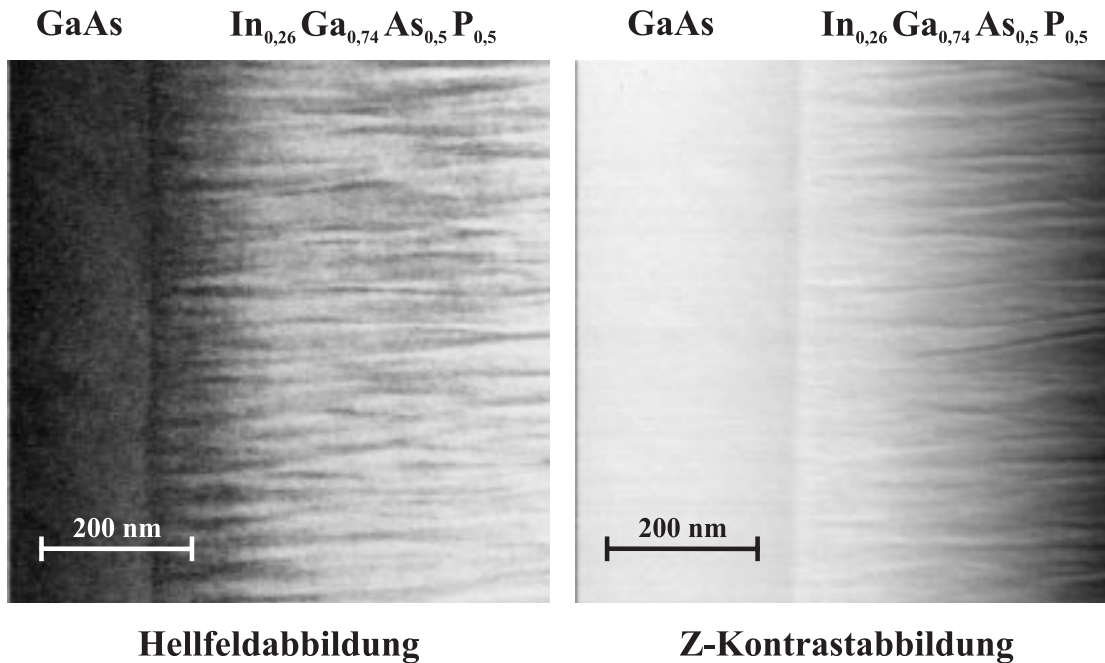


Abbildung 6.28: Experimentelle Hellfeld- und Ordnungszahl-Kontrastabbildung einer Heterostruktur, die aus einem 2° fehlorientierten *GaAs*-Substrat und einer entmischten $In_{0,26}Ga_{0,74}As_{0,5}P_{0,5}$ -Schicht besteht.

existieren sowohl in der Hellfeld- als auch in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung nicht streng periodische Kontrastmodulationen. Diese werden für den Fall der Entmischung einer Probe vorausgesagt [14]. Die Kontrastmodulation in einer Ordnungszahl-Kontrastabbildung deutet prinzipiell auf eine Veränderung in der Materialzusammensetzung hin. Andererseits konnte dies aber anhand von Elektronenbeugungsmessungen widerlegt werden [11]. Für die $In_{0,26}Ga_{0,74}As_{0,5}P_{0,5}$ -Schicht und das *GaAs*-Substrat wurden auch Elektronenbeugungsmuster aufgenommen, die in Abbildung 6.29 dargestellt sind. Anhand der mit Pfeilen markierten HOLZ-Linien ist in Abbildung 6.29 zu erkennen, daß in dem Elektronenbeugungsmuster der entmischten $In_{0,26}Ga_{0,74}As_{0,5}P_{0,5}$ -Schicht eine feine Aufspaltung in den HOLZ-Linien existiert, die auch ein Resultat der Oberflächenrelaxation sein soll. Es wird vermutet, daß es sich sowohl bei den Intensitätsmodulationen in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, als auch bei der Aufspaltung der HOLZ-Linien in Elektronenbeu-

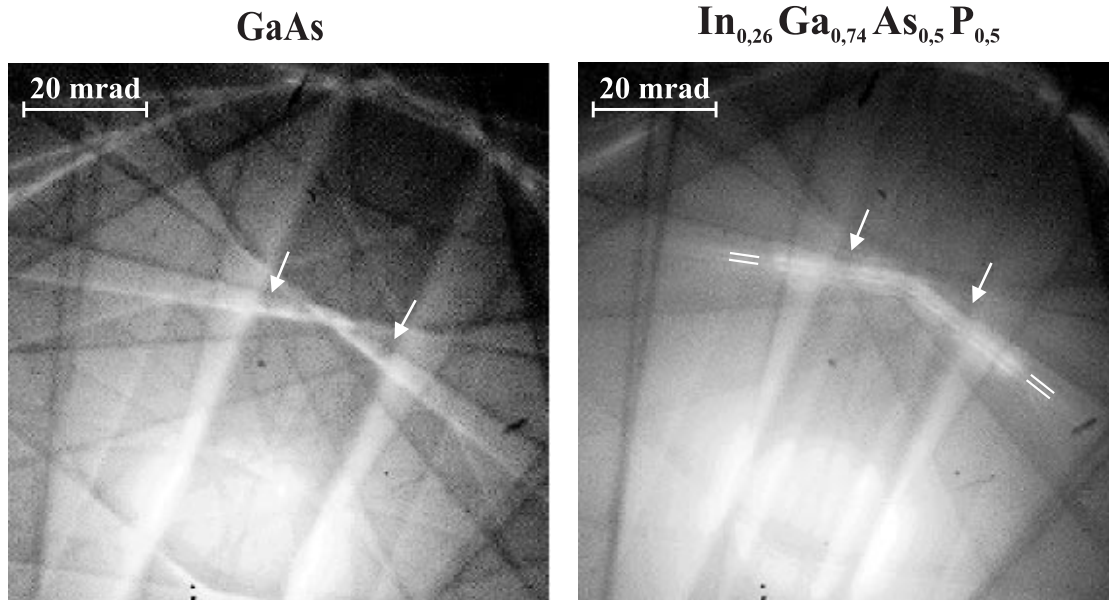


Abbildung 6.29: Elektronenbeugungsmuster für ein 2° fehlorientiertes *GaAs*-Substrat und der auf diesem Substrat entmischt aufgewachsenen $In_{0,26}Ga_{0,74}As_{0,5}P_{0,5}$ -Schicht.

gungsmustern von entmischten Proben, um ein Resultat der Oberflächenrelaxation handelt. Bis jetzt fehlte aber ein endgültiger Beweis für diese Vermutung.

Um diesen Beweis zu erbringen, wird in dieser Arbeit ein relativ einfaches, neu entwickeltes Modell zur Simulation des Oberflächenrelaxationseffektes verwendet, das bereits in Kapitel 4.2.4 vorgestellt wurde. Das Modell teilt die zu untersuchende Probe in drei Bereiche auf: Die zwei Probenoberflächenbereiche und den ungestörten Bereich in der Probenmitte. Für diese Simulationen wird den Probenoberflächenbereichen eine gemeinsame Materialdicke und ein gemeinsamer Verkippungswinkel für die Netzebenen zugewiesen. Die Netzebenenabstände werden nicht verändert.

Mittels des in dieser Arbeit entwickelten Oberflächenrelaxationsmodells soll sowohl der Einfluß der Variation der Oberflächenbereichsdicke als auch der Netzebenenverkippung auf Ordnungszahl-Kontrast und Elektronenbeugung genauer untersucht werden. Basierend auf dem Modell aus [14] sind für das verwendete Oberflächenrelaxationsmodell möglichst realistische Werte, für die maximale Oberflächenverkippung und Dicke der verkippten Oberflächenbereiche, berechnet worden. Für die entmischte $In_{0,26}Ga_{0,74}As_{0,5}P_{0,5}$ -Schicht aus Abbildung 6.28 ergaben sich ein maximaler Netzebenenverkippungswinkel von ca. 3 mrad und eine maximale Dicke der verkippten Oberflächenbereiche von ca. 20 nm . Diese Werte dienen als Grundlage für die Simulation des Oberflächenrelaxationseffektes. Für die Simulationen ist generell eine Probendicke von 80 nm verwendet worden. Die elektronenmikroskopischen

Parameter entsprechen denen, die für die Messung der Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.29 verwendet wurden. Für das in dieser Arbeit entwickelte Oberflächenrelaxationsmodell muß in den verkippten Oberflächenbereichen, für jede einzelne Scheibe die Atompotentialfunktion berechnet werden. Daher sind zeitlich sinnvolle Simulationen mittels des Multislice-Ansatzes nur unter Vernachlässigung der thermisch diffusen Streuung möglich.

Abbildung 6.30 zeigt für eine entmischte III-V-Halbleiterprobe das Ergebnis einer Simulationsreihe mit einem Netzebenenverkippfungswinkel von $2,5 \text{ mrad}$. Die Dicken der verkippten Oberflächenbereiche waren: a) 0 nm , b) 4 nm , c) 8 nm , d) 12 nm , e) 16 nm und f) 20 nm . Die simulierten Elektronenbeugungsmuster in Abbildung 6.30 zeigen mit zunehmender Dicke der verkippten Oberflächenbereiche, eine zunehmende Aufweitung der HOLZ-Linien (weiße Pfeile). Eine genauere Untersuchung dieser aufgeweiteten HOLZ-Linien ergab, daß es sich hierbei um das Resultat der Aufspaltung der HOLZ-Linien in viele feine Linien handelt. Die Aufspaltung ist auch in den Defizitlinien in der zentralen Braggscheibe (weiße Pfeile) zu erkennen. Besonders signifikant ist die Veränderung in den HOLZ-Linien für die Dicke der verkippten Oberflächenbereiche von 16 nm und 20 nm .

Im Rahmen dieser Arbeit ist eine Routine zur Berechnung des Ordnungszahl-Kontrastsignals aus einem schon existierenden Elektronenbeugungsmuster entwickelt worden, welche in Kapitel 4.2.5 vorgestellt wurde. Mittels dieser Routine wurde im Folgenden aus den Elektronenbeugungsmustern jeweils die Ordnungszahl-Kontrastsignale bestimmt. Es wird nun der Einfluß der Dickenvariation für die verkippten Oberflächenbereiche bei konstantem Netzebenenverkippfungswinkel anhand der Ordnungszahl-Kontrastsignale für die Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.30 untersucht. Die verkippten Oberflächenbereiche hatten einen konstanten Oberflächenverkippfungswinkel von $2,5 \text{ mrad}$. Die Dicken der verkippten Oberflächenbereiche waren: a) 0 nm , b) 4 nm , c) 8 nm , d) 12 nm , e) 16 nm und f) 20 nm . Für die mit diesen Dicken berechneten Ordnungszahl-Kontrastsignale ist jeweils die prozentuale Abweichung von dem Ordnungszahl-Kontrastsignal der Probe ohne Oberflächenverkippfung bestimmt worden. Die so berechneten Werte sind in Abbildung 6.31 als Funktion der Dicke der verkippten Oberflächenbereiche dargestellt. Abbildung 6.31 zeigt mit zunehmender Dicke der verkippten Oberflächenbereiche eine äußerst signifikante Zunahme des Ordnungszahl-Kontrastsignals. Diese starke Zunahme kann auch als Veränderung in der Materialzusammensetzung fehlinterpretiert werden.

Im Folgenden wird untersucht, welchen Einfluß die Variation der Netzebenenverkippfung, in den verkippten Oberflächenbereichen, auf das Linesplitting und das Ordnungszahl-Kontrastsignal hat. Diese Untersuchungen wurden für zwei unterschiedliche Oberflächenbereichsdicken mit unterschiedlichen Netzebenenverkippfungswinkeln durchgeführt. Die hier-

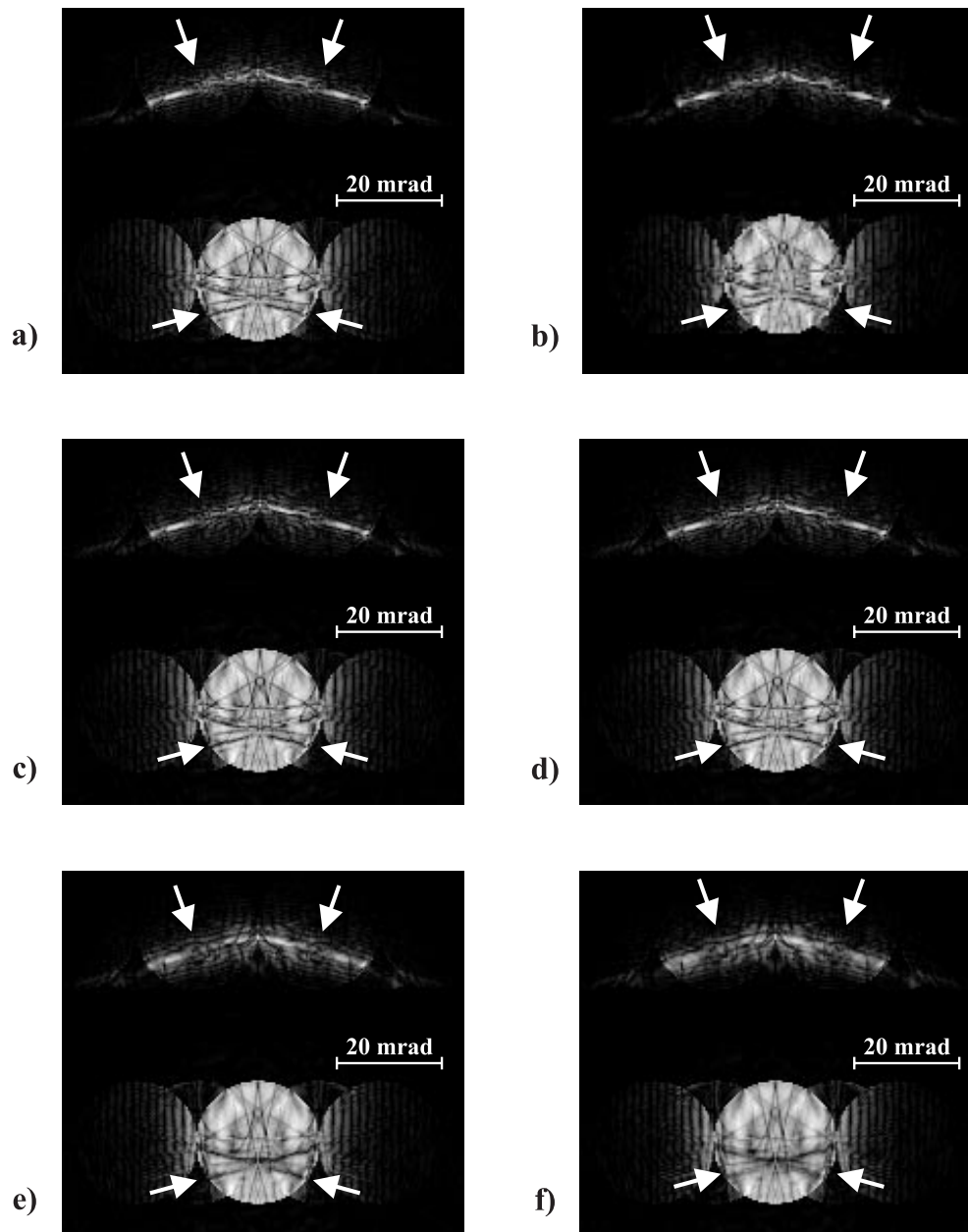


Abbildung 6.30: Simulierte Elektronenbeugungsmuster eines entmischten III-V-Halbleiters mit einer Oberflächenverkipfung von $2,5 \text{ mrad}$. Die Dicken der verkippten Oberflächenbereiche sind: a) 0 nm , b) 4 nm , c) 8 nm , d) 12 nm , e) 16 nm und f) 20 nm .

zu notwendigen Elektronenbeugungssimulationen sind mit den Parametern der entmischten $\text{In}_{0,26}\text{Ga}_{0,74}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ -Schicht durchgeführt worden.

Für die ersten Untersuchungen sind die Verkipfungswinkel $0,0 \text{ mrad}$, $1,0 \text{ mrad}$, $1,5 \text{ mrad}$, $2,0 \text{ mrad}$, $2,5 \text{ mrad}$ und $3,0 \text{ mrad}$ verwendet worden. Die Dicke des verkippten Oberflächenbereichs betrug 4 nm . Die resultierenden, simulierten Elektronenbeugungsmuster wiesen keine signifikanten Veränderungen auf. Trotzdem ist untersucht worden, inwieweit die

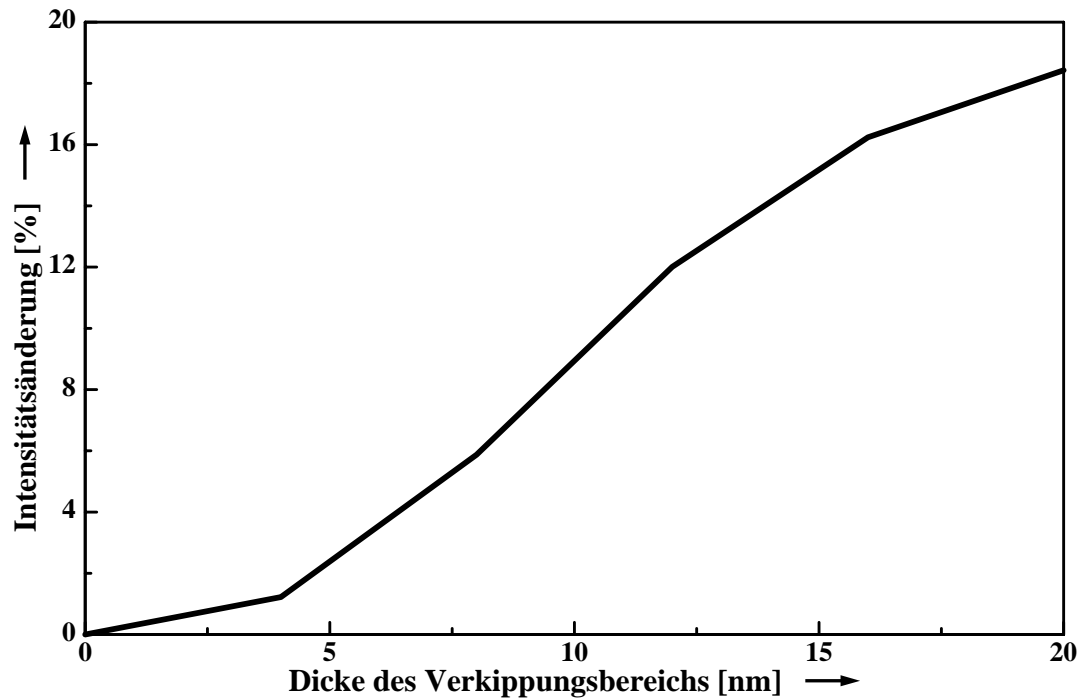


Abbildung 6.31: Prozentuale Abweichung des Ordnungszahl-Kontrastsignals von dem einer Probe ohne Oberflächenverkipfung, für einen entmischten III-V-Halbleiter, als Funktion der Oberflächenbereichsdicke. Die Oberflächenverkipfung betrug $2,5 \text{ mrad}$.

Ordnungszahl-Kontrastsignale dieser Elektronenbeugungsmuster Veränderungen aufweisen. Für diese Untersuchung ist wiederum die prozentuale Abweichung der Ordnungszahl-Kontrastsignale von dem Ordnungszahl-Kontrastsignal einer Probe ohne Oberflächenverkipfung bestimmt worden. Die Ergebnisse sind als Funktion des Verkipfungswinkels der Netzebenen in Abbildung 6.32 dargestellt. Abbildung 6.32 zeigt, daß die Variation der Oberflächenverkipfung einen Einfluß auf das Ordnungszahl-Kontrastsignal hat, auch wenn in den dazugehörigen Elektronenbeugungsmustern keine signifikante Veränderung festgestellt wurde. Die Variation des Ordnungszahl-Kontrastsignals in Abbildung 6.32 ist aber nicht so stark ausgeprägt wie in Abbildung 6.31. Dieses bedeutet für entmischte Proben mit einem nicht sehr dicken Oberflächenbereich, daß der Entmischungseffekt nicht unbedingt als solches erkennbar ist oder durch andere Effekte überlagert wird.

Ferner ist auch der Einfluß einer stärkeren Oberflächenverkipfung auf den Effekt des Linesplittings und auf das Ordnungszahl-Kontrastsignal genauer untersucht worden. Hierzu sind für die Verkipfungswinkel $0,0 \text{ mrad}$, $2,5 \text{ mrad}$, $5,0 \text{ mrad}$ und $10,0 \text{ mrad}$ Multislice-Simulationen durchgeführt worden. Die Dicke der verkippten Oberflächenbereiche betrug 20 nm . Das Ergebnis dieser Simulationen ist in Abbildung 6.33 dargestellt. Sie zeigt den zen-

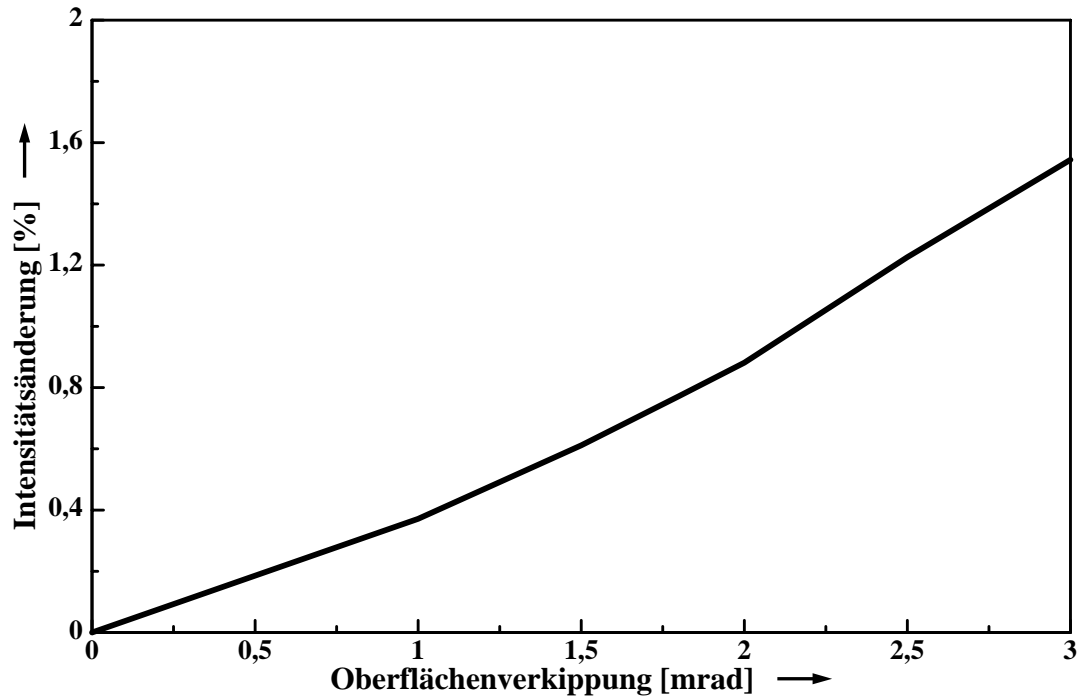


Abbildung 6.32: Prozentuale Abweichung des Ordnungszahl-Kontrastsignals von dem einer Probe ohne Oberflächenverkipfung, für einen entmischten III-V-Halbleiter, als Funktion des Verkipfungswinkels der Netzebenen. Die Verkipfungsbereichsdicke beträgt 4 nm .

tralen Bereich der simulierten Elektronenbeugungsmuster. In Abbildung 6.33 sind deutliche Veränderungen in den Elektronenbeugungsmustern mit zunehmendem Netzebenenverkipfungswinkel zu erkennen. Die Zunahme des Verkipfungswinkels führt zu einer Reduzierung der Defizitlinien innerhalb der zentralen Braggsscheiben. Für den Verkipfungswinkel von 10 mrad verschwinden diese sogar ganz. Mit zunehmendem Verkipfungswinkel verändern sich auch die HOLZ-Ringe. Diese werden deutlich breiter und spalten sich in feine Linien auf.

Auch für die Elektronenbeugungsmuster aus Abbildung 6.32 sind die prozentualen Abweichungen der Ordnungszahl-Kontrastsignale von dem Ordnungszahl-Kontrastsignal einer Probe ohne Oberflächenverkipfung bestimmt worden. Diese sind in Abbildung 6.34 als Funktion des Verkipfungswinkels dargestellt. Abbildung 6.34 zeigt mit zunehmendem Verkipfungswinkel deutliche Veränderungen im Ordnungszahl-Kontrastsignal. Auch diese Veränderungen können als Veränderung in der Materialzusammensetzung fehlinterpretiert werden. Außerdem weist der Funktionsverlauf in Abbildung 6.34 eine Reduzierung des Ordnungszahl-Kontrastsignals für Verkipfungswinkel, die größer als 5 mrad sind, auf. Dieses Verhalten zeigt, daß nicht zwangsläufiger Weise eine Vergrößerung der Oberflächen-

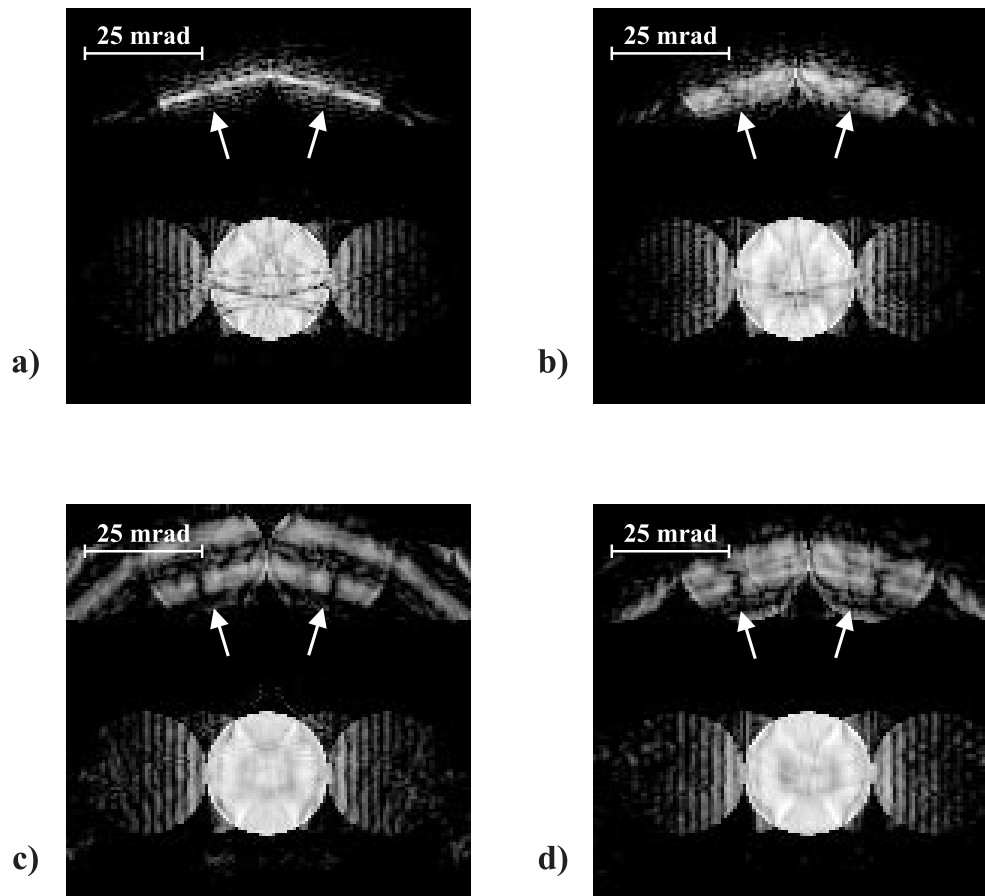


Abbildung 6.33: Simulierte Elektronenbeugungsmuster eines entmischten III-V-Halbleiters für die Netzebenenverkippungswinkel a) $0,0 \text{ mrad}$, b) $2,5 \text{ mrad}$, c) 5 mrad und d) 10 mrad . Die Oberflächenbereichsdicke betrug 20 nm .

verkippung, zu einer Vergrößerung des Ordnungszahl-Kontrasts führen muß.

Aus den oben vorgestellten Untersuchungsergebnissen lassen sich mehrere Aussagen über den Einfluß der Oberflächenverkippung in entmischten Proben auf das Elektronenbeugungsmuster und das Ordnungszahl-Kontrastsignal ableiten:

1. Die in Elektronenbeugungsmustern von entmischten Proben beobachtete Aufspaltung der HOLZ-Linien und der dazu korrespondierenden Defizitlinien in den zentralen Braggseiben ist das Resultat der Oberflächenverkippung.
2. Die Ordnungszahl-Kontrastintensitäten erfahren eine deutliche Veränderung, in Abhängigkeit von dem Verkippungswinkel der Netzebenen, in den Probenoberflächen. Damit ist die quasiperiodische Kontrastmodulation in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von entmischten Proben auch das Resultat von Oberflächenverkippungen.

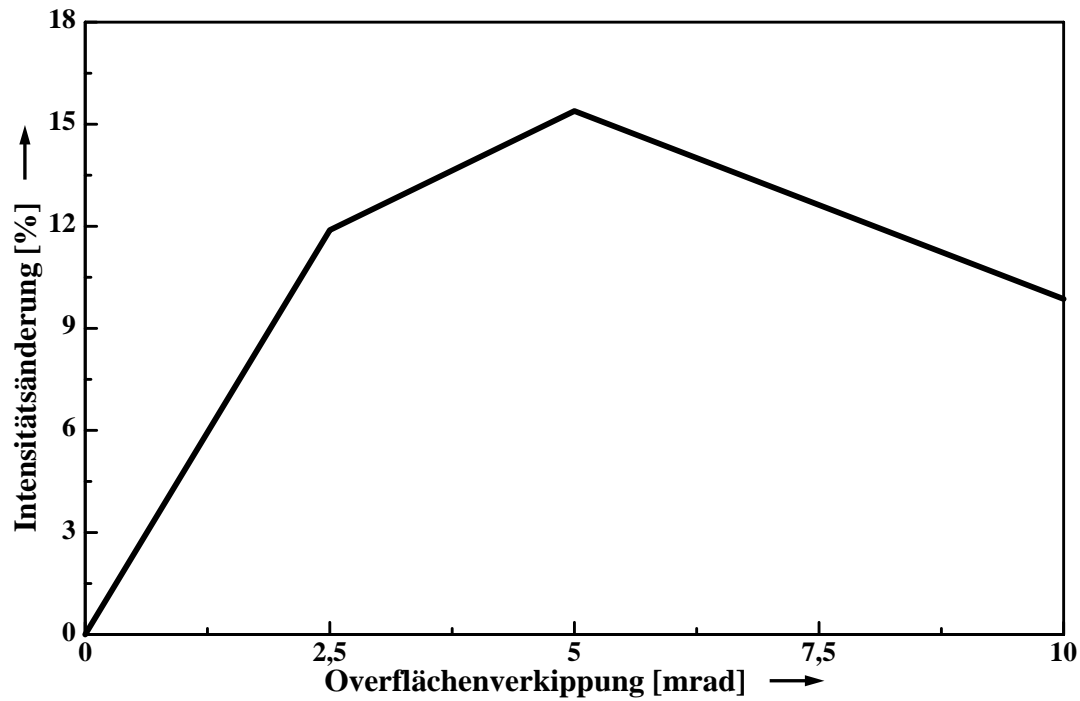


Abbildung 6.34: Prozentuale Abweichung des Ordnungszahl-Kontrastsignals von dem einer Probe ohne Oberflächenverkipfung, für einen entmischten III-V-Halbleiter, als Funktion des Verkipfungswinkels der Netzebenen. Die Verkipfungsbereichsdicke beträgt 20 nm .

3. Erstmals konnte mittels des in dieser Arbeit entwickelten Oberflächenrelaxationsmodells und den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen nachgewiesen werden, daß die Aufspaltung der HOLZ-Linien und die Veränderung des Ordnungszahl-Kontrastsignals in entmischten Proben ein Resultat der Verkipfung der Netzebenen in den Oberflächenbereichen ist. Damit ist die quasiperiodische Kontrastmodulation in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von entmischten Proben auch ein Resultat der Oberflächenrelaxation.

6.4 Simulation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen

Bereits in Kapitel 2.3.3 wurde die Entstehung des Ordnungszahl-Kontrastsignals besprochen. Die damit erzielbaren Ordnungszahl-Kontrastabbildungen sind schon in vielen Arbeiten erfolgreich zur Material- und Grenzflächencharakterisierung eingesetzt worden [28, 29, 40]. Aber wie schon bei den Elektronenbeugungsmustern entziehen sich auch die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zum Teil einer einfachen Interpretation. Hierzu ist ein direkter Vergleich zwischen simulierten und experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen notwendig. Dieser Vergleich ist aber erst seit jüngster Zeit durch die hohe Rechenleistung moderner Computer möglich [54, 55, 58, 69].

In diesem Kapitel sollen verschiedene Problemstellungen im Bezug auf die Interpretationsfähigkeit von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen genauer untersucht werden. Diese sind:

1. Material- und Grenzflächencharakterisierung mittels hochauflösender Ordnungszahl-Kontrastabbildungen.
2. Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Heteroübergängen in Halbleiterheterostrukturen.
3. Einfluß der Optimierung elektronenmikroskopischer Parameter auf die hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, insbesondere für die Charakterisierung von Heteroübergängen in Halbleiterheterostrukturen.
4. Untersuchung des Einflusses minimaler Verkippungen des Primärelektronenstrahls auf die hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitride.
5. Einfluß der Materialvariation auf hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von den Gruppe III-Nitriden.
6. Einfluß der Optimierung elektronenmikroskopischer Parameter auf die hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitride.

6.4.1 Charakterisierung von Heteroübergängen mittels hochauflösender Ordnungszahl-Kontrastabbildungen

Es existieren schon einige Arbeiten, in denen auf die Charakterisierung von Heteroübergängen mittels des Vergleichs von simulierten und experimentellen hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen eingegangen wurde [56, 58]. In den genannten Arbeiten wurden für $ZnSSe/ZnSe$ -Heterostrukturen, die aus dem II-VI-Halbleitersystem bestehen, hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen simuliert und zum Teil mit experimentellen hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen verglichen. Es fehlen aber Erkenntnisse über die Möglichkeit der Heteroübergangscharakterisierung mittels des Vergleichs von simulierten und experimentellen hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für $InGaAs/InP$ -Heterostrukturen, die aus dem III-V-Halbleitersystem bestehen. Die Untersuchungsergebnisse, die im Rahmen dieser Arbeit hierzu erzielt wurden, werden im Folgenden vorgestellt.

Abbildung 6.35 zeigt die experimentelle hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildung eines $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergangs. Dieser Heteroübergang dient als Grundlage für die Untersuchungen in diesem Kapitel und in den Kapiteln 6.4.2 und 6.4.3. Diese Ordnungszahl-Kontrastabbildung ist ohne Energiefilterung aufgenommen worden. In der hochauflösen-

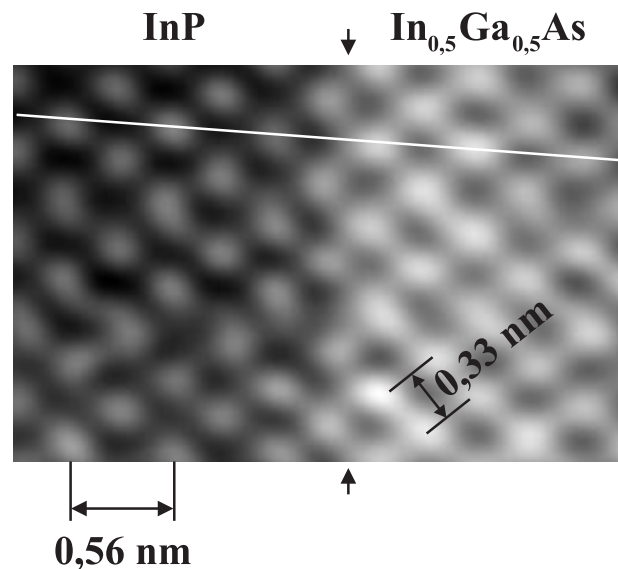


Abbildung 6.35: Hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildung eines $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergangs in der $\{110\}$ -Orientierung. In dieser Orientierung beträgt der minimale Atomsäulenabstand $0,14\text{ nm}$. Die weiße Linie markiert die Position für einen Intensitätslinescan. Die Pfeile markieren die Position des Heteroübergangs.

den Ordnungszahl-Kontrastabbildung des $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergangs in Abbildung

6.35 wirkt das *InP* dunkler als das *InGaAs*. Allein durch die Interpretation der in der Abbildung 6.35 dargestellten hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildung, ist die Klärung des Aufbaus des Kristallgitters und der Struktur des Heteroübergangs nicht möglich. Sowohl der Aufbau des Kristallgitters als auch die Struktur des Heteroübergangs kann durch den Vergleich von simulierten und experimentellen, hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen geklärt werden.

Zur Klärung des Kristallgitteraufbaus und der Struktur des Heteroübergangs wurden für die Simulation der hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zwei verschiedene Modelle verwendet. Diese beiden Modelle sind in Abbildung 6.36 dargestellt. Die zwei Mo-

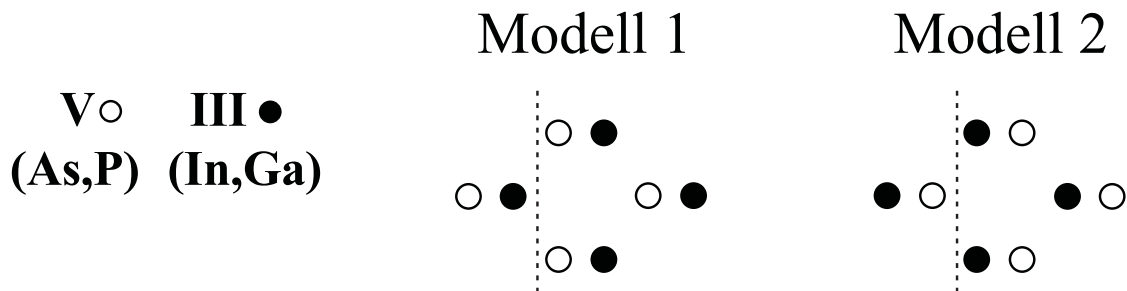


Abbildung 6.36: Zwei Modelle zur Bestimmung des Kristallgitteraufbaus und der Struktur des Heteroübergangs für den *InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As*-Heteroübergang in Abbildung 6.35.

delle für den Aufbau des Kristallgitters in Abbildung 6.36 unterscheiden sich nur durch die vertauschten Positionen der Gruppe III- und Gruppe V-Elemente. Mit diesen beiden Modellen sind Ordnungszahl-Kontrastsimulationen durchgeführt worden. Das Ergebnis dieser Simulationen zeigt Abbildung 6.37. Die für die Simulationen verwendete Proben Dicke ist 6 nm . Die simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zeigen nur geringe Unterschiede. Werden die beiden simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen mit der experimentellen verglichen, so ist anhand des Vergleichs nicht eindeutig entscheidbar, welches der beiden Modelle für den Kristallgitteraufbau korrekt ist. Bei genauerer Betrachtung fällt aber die bessere Korrespondenz zwischen der mit dem Modell 1 aus Abbildung 6.36 simulierten und der experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildung auf. Ob dieser Eindruck zutreffend ist, soll anhand der Intensitätslinescans von den simulierten und experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen untersucht werden. Abbildung 6.38 zeigt den Intensitätslinescan für die gemessene Ordnungszahl-Kontrastabbildung. Abbildung 6.39 zeigt den Intensitätslinescan für die mit dem Modell 1 simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung. Abbildung 6.40 zeigt den Intensitätslinescan für die mit dem Modell 2 simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung. Die Intensitätslinescans der simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen und der experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildung

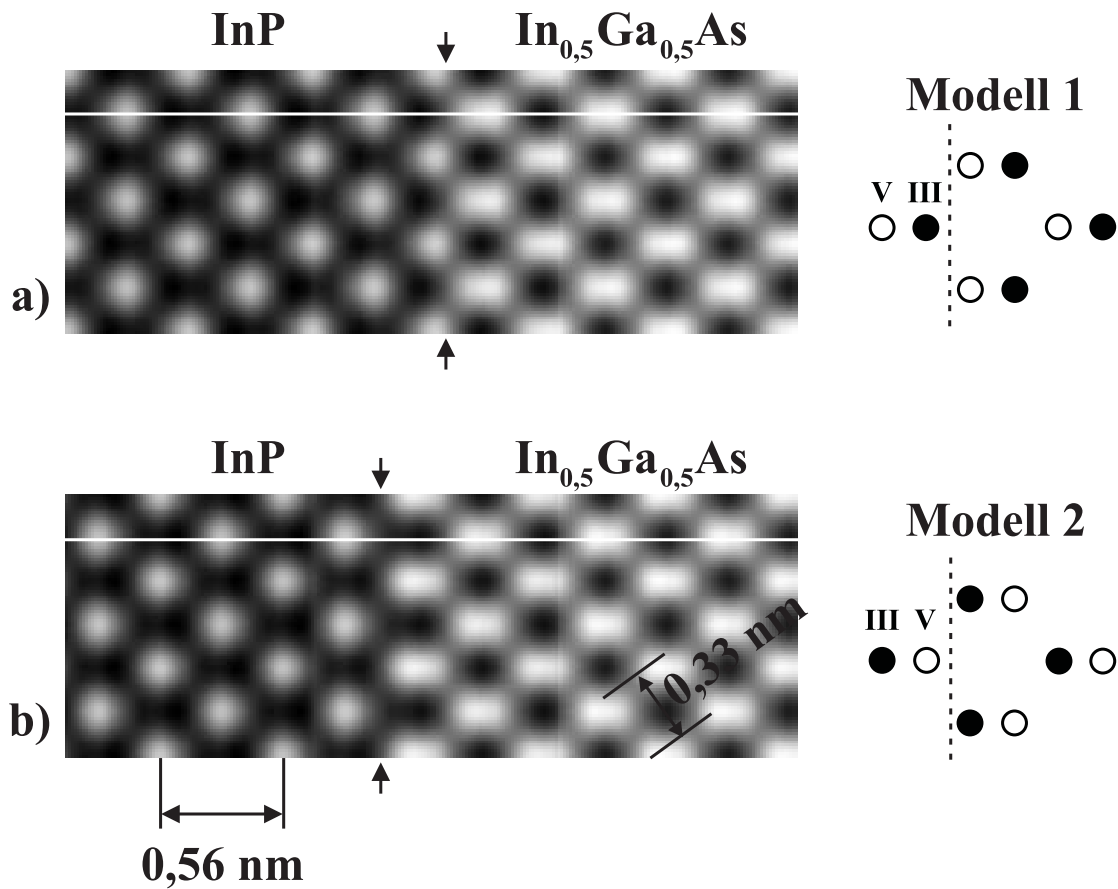


Abbildung 6.37: Für den $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergang in Abbildung 6.35 simulierte hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. a) wurde mit Modell 1 und b) mit Modell 2 aus Abbildung 6.36 simuliert. Die weißen Linien markieren die Position für einen Intensitätslinescan. Die Pfeile markieren jeweils die Position des Heteroübergangs.

in den Abbildungen 6.38, 6.39 und 6.40 weisen einige besonders markante Stellen auf, die mit Pfeilen markiert sind. Sie befinden sich alle im Bereich des InP . An diesen Stellen fällt die verringerte Steigung des Intensitätsverlaufs auf, die möglicherweise das Resultat der Gruppe V-Atomsäule (P) ist. Die Ordnungszahl-Kontrastsimulationen sind rein elastisch durchgeführt worden und die experimentelle Ordnungszahl-Kontrastabbildung wurde nicht energiegefiltert. Daher können die Intensitätslinescans nicht hundertprozentig übereinstimmen. Für die mit dem richtigen Kristallgitteraufbau simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung sollte der Intensitätslinescan aber prinzipiell mit dem der experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildung übereinstimmen. Das muß insbesondere für die mit Pfeilen markierten Bereiche in den Intensitätslinescans gelten. Die Intensitätslinescans für die simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in den Abbildungen 6.39 und 6.40 weisen im direkten Vergleich signifikante Unterschiede auf. Dieses gilt insbesondere für die mit Pfeilen markierten Bereiche in den Intensitätslinescans, da diese quasi ihre Position bzgl. dem dazugehö-

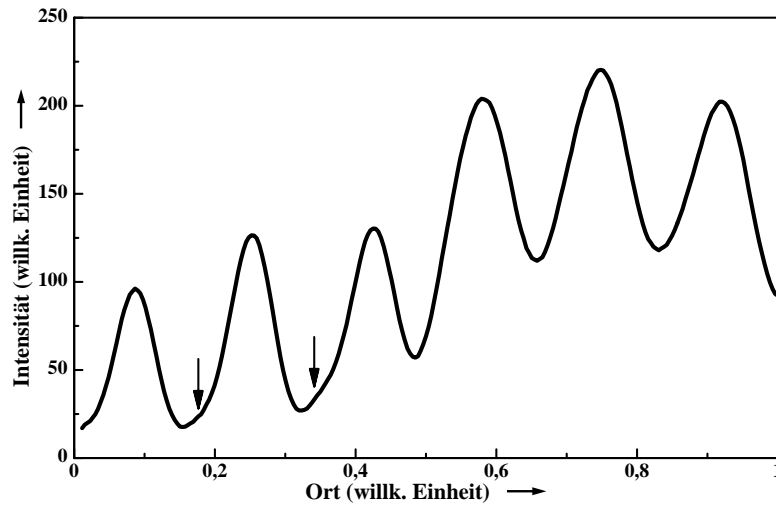


Abbildung 6.38: Intensitätslinescan über die gemessene Ordnungszahl-Kontrastabbildung aus Abbildung 6.35.

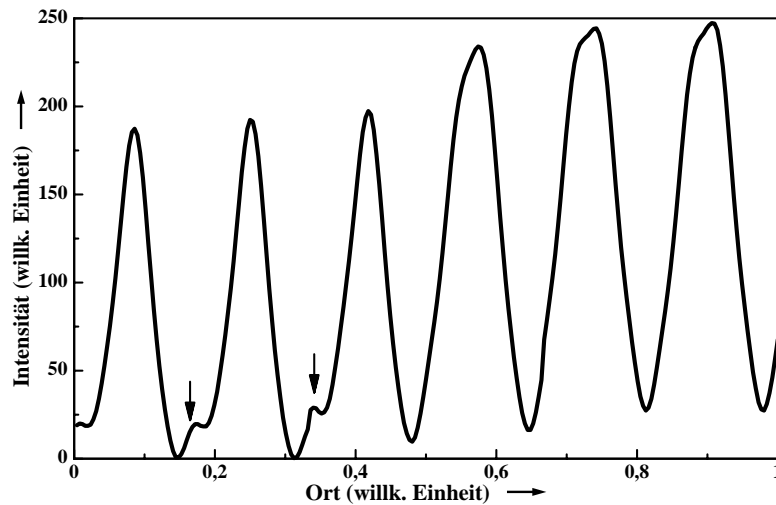


Abbildung 6.39: Intensitätslinescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung für das Modell 1 aus Abbildung 6.36.

rigen Intensitätsmaximum vertauscht haben. Der Vergleich der simulierten und der experimentellen Intensitätslinescans ergibt für die mit dem Modell 1 simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildung in Abbildung 6.39 eine besonders gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Im Speziellen stimmen für diese Intensitätslinescans auch die Positionen der mit Pfeilen markierten Bereiche, bezüglich der Position des dazugehörigen Intensitätsmaximum, gut überein. Werden unter diesem Gesichtspunkt noch einmal die für das Modell 1 simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung aus Abbildung 6.37.a mit der experimentellen aus Abbildung 6.35 verglichen, so fällt dabei ebenfalls die sehr gute Über-

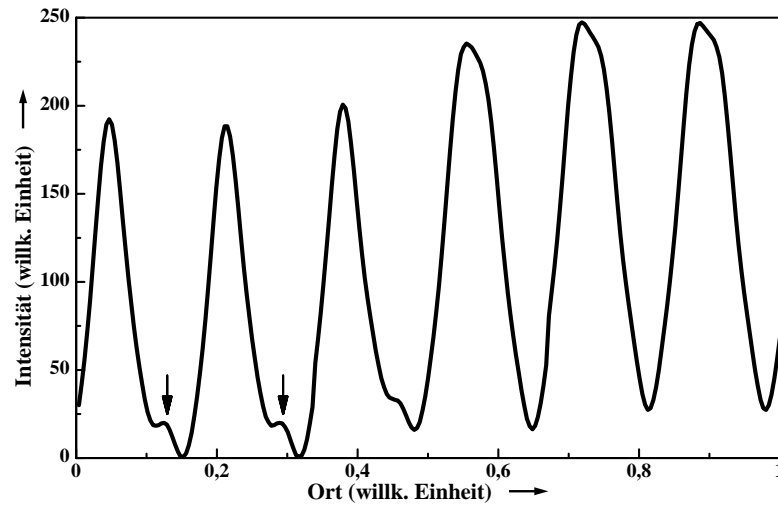


Abbildung 6.40: Intensitätslinescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung für das Modell 2 aus Abbildung 6.36.

einstimmung auf, was insbesondere auch für die Heteroübergänge gilt.

Die oben vorgestellten Untersuchungsergebnisse zeigen, daß durch den Vergleich von simulierten und experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, für Proben aus dem III-V-Halbleitersystem, sowohl die Kristallstruktur als auch die Struktur des Heteroübergangs bestimmt werden können.

6.4.2 Der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast von Heteroübergängen

In [102] wurde der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast anhand heteroübergangsfreier Proben untersucht. Aus dieser Untersuchung ergab sich ein maximal zu erwartender Intensitätsunterschied von nur ca. 10 %. Dadurch ist aber auch mittels elastischer, hochauflösender Ordnungszahl-Kontrastsimulationen ein guter Vergleich zwischen simulierten und experimentellen hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen möglich [58].

Es ist bis jetzt aber noch nicht geklärt, welchen Einfluß die thermisch diffuse Streuung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast von Proben mit Heteroübergängen hat und inwieweit die thermisch diffuse Streuung für die quantitative hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastsimulation von Heteroübergängen vernachlässigt werden kann. Im Folgenden wird daher untersucht, wie groß der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast von Heteroübergängen ist. Außerdem wird untersucht, ob auch für die quantitativ simulierten hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Heteroübergängen, wie bei den heteroübergangsfreien Proben, die thermisch diffuse Streuung ohne großen Fehler vernachlässigt werden kann.

Als Grundlage für die im Folgenden vorgestellten, und im Rahmen dieser Arbeit erzielten, Untersuchungsergebnisse dient die experimentelle Ordnungszahl-Kontrastabbildung für den $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergang aus Abbildung 6.35. Für die folgenden Ergebnisse der Ordnungszahl-Kontrastsimulationen ist jeweils eine Probendicke von 6 nm verwendet worden. Abbildung 6.41.a zeigt die elastisch simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung. Abbildung 6.41.b zeigt die unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung. Abbildung 6.41.c zeigt das Differenzbild der beiden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Der direkte Vergleich, der unter Vernachlässigung und unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für den $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergang in den Abbildungen 6.41.a und 6.41.b, zeigt Unterschiede in den Intensitätsverteilungen. Aber erst das Differenzbild dieser beiden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in der Abbildung 6.41.c zeigt deutlich deren Unterschiede. Am Differenzbild fällt auf, daß es in neun einzelne Segmente unterteilt ist, wobei sich jeweils die übereinander liegenden Segmente wiederholen. Der Grund ist, daß die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen 6.41.a und 6.41.b aus eben solchen Segmenten zusammengesetzt sind. Für die Ordnungszahl-Kontrastsimulationen sind nur drei verschiedene Segmente pro Ordnungszahl-Kontrastabbildung simuliert worden, eins für das $In_{0,5}Ga_{0,5}As$, eins für das InP und eins für den Heteroübergang. Diese Vorgehensweise resultiert aus der

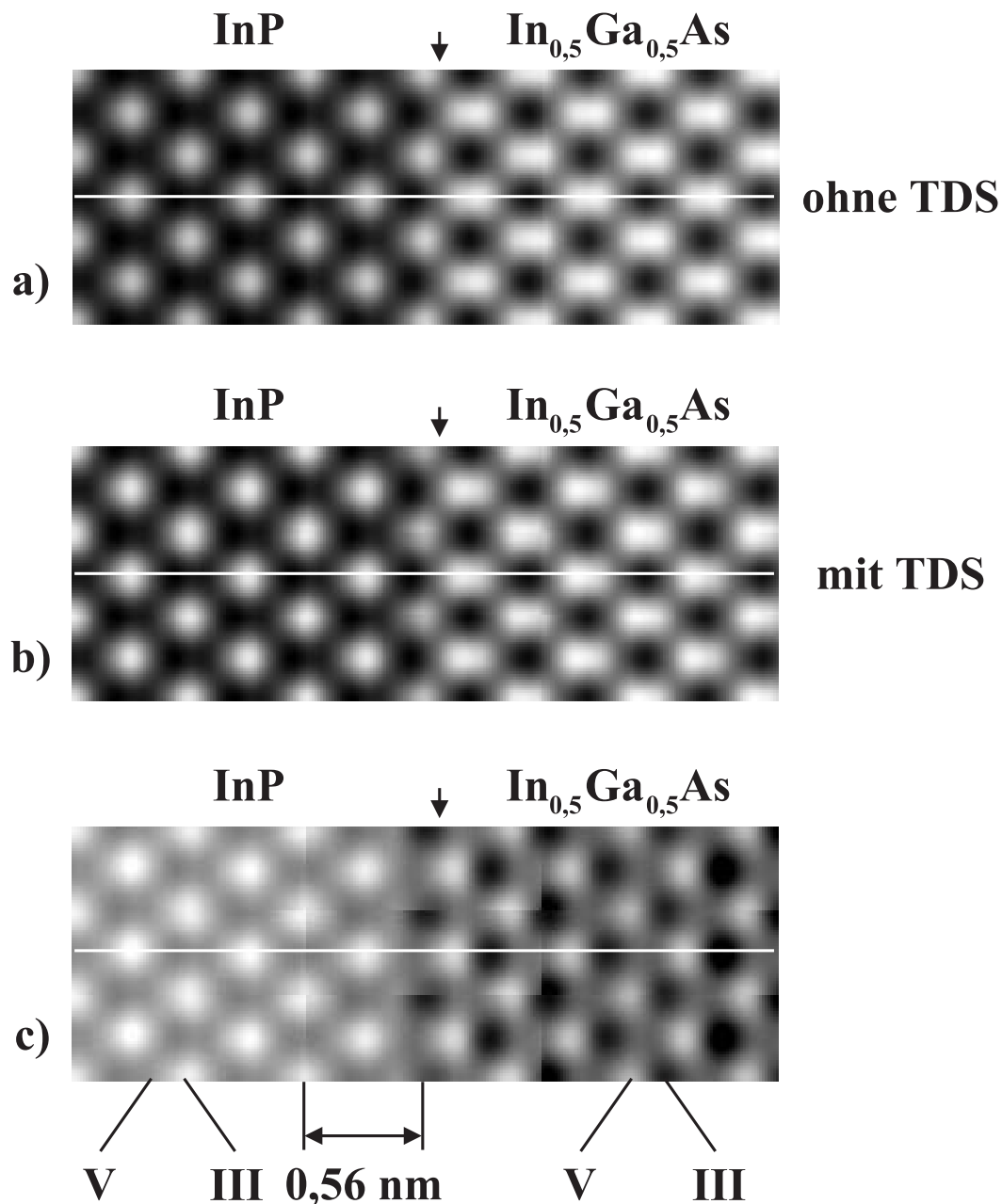


Abbildung 6.41: Unter Vernachlässigung (a) und unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung (b) simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für den $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergang in Abbildung 6.35 sowie deren Differenzbild (c).

sehr großen Simulationsdauer für Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Insbesondere gilt dies für die unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, da für deren Simulation ein Vielfaches der Simulationsdauer von rein elastisch simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen benötigt wird. Außerdem war die Größe der simulierbaren Scheiben für eine ausreichende Auflösung in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung und einer gleichzeitig noch sinnvollen Simulationsdauer begrenzt. Durch

die Aufteilung in drei Segmente konnten die Ordnungszahl-Kontrastsimulationen außerdem parallel durchgeführt werden. Das Differenzbild in der Abbildung 6.41.c weist in den Randbereichen der einzelnen Segmente eine Diskontinuität in der Intensitätsverteilung auf. Dies ist ein systematischer Fehler, der aus der Aufteilung der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in einzelne Segmente resultiert. Diese Segmente bestehen aufgrund der oben genannten Punkte für die zu untersuchende $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heterostruktur aus den Materialien InP und $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ sowie aus dem $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergang. Zusätzlich werden durch die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung die Atompositionen in einer Scheibe verändert. Würden die Atompotentialfunktionen dieser einzelnen Segmente zusammengesetzt, so ergäbe sich ein Sprung in der resultierenden Atompotentialfunktion beim Übergang von einem Segment auf das andere. Da die Atompotentialfunktion entscheidend für das Ordnungszahl-Kontrastsignal ist, weist auch das Differenzbild in den Randbereichen der einzelnen Segmente eine Diskontinuität auf. Diese Übergänge sind in dem Intensitätslinescan des Differenzbildes in Abbildung 6.41.c gut zu erkennen. Außer dieser systematisch bedingten Veränderung sind vor allem die Intensitätsveränderungen aufgrund der Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung erkennbar. Der Vergleich der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus den Abbildungen 6.41.a und 6.41.b ergibt, daß sich bedingt durch die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung die Intensitätsverteilungen deutlich verändern. Für den Bereich des InP ist die In -Atomsäule in Abbildung 6.41.b deutlich heller dargestellt als in Abbildung 6.41.a. Dies ist das Resultat einer relativen Intensitätszunahme im Bereich des InP , was auch aus dem Differenzbild in Abbildung 6.41.c deutlich hervorgeht. Für den Bereich des $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ sind sowohl helle als auch dunkle Punkte im Differenzbild erkennbar. Diese resultieren aus einer relativen Intensitätszunahme für die As -Atomsäule im Vergleich zur $In_{0,5}Ga_{0,5}$ -Atomsäule. Der dunkle Punkt befindet sich an der Position der $In_{0,5}Ga_{0,5}$ -Atomsäule und deutet auf eine relativ geringe Intensitätsveränderung hin.

Zur Klärung des genauen Intensitätsverlaufs, im Speziellen für den Heteroübergang, sind innerhalb der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen 6.41.a und 6.41.b sowie innerhalb des Differenzbildes, jeweils an den mit weißen Linien markierten Positionen, Intensitätslinescans aufgenommen worden. Diese Intensitätslinescans sind in den Abbildungen 6.42, 6.43 und 6.44 dargestellt. Anhand des Vergleichs der Intensitätslinescans zeigen sich mehrere Effekte. Im Fall der Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung entsprechen die Intensitätsverteilungen im InP sehr gut den zu erwartenden Intensitätsverhältnissen für dieses Material. Im Bereich des $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ führt die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung zu einer Verschiebung der Intensitätsmaxima in Richtung der Gruppe V-Atomsäulen. Diese resultiert aus den Größen der verwendeten Vibrationsamplituden aus [50, 64] und

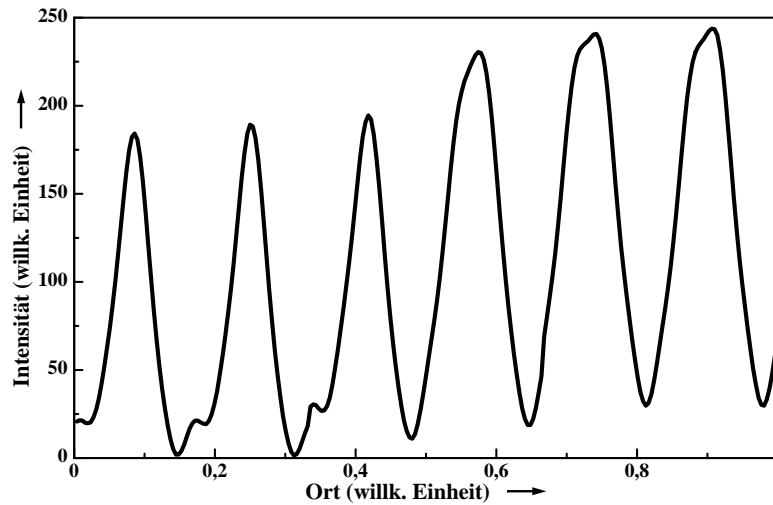


Abbildung 6.42: Intensitätslinescan für die elastisch simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung 6.41.a.

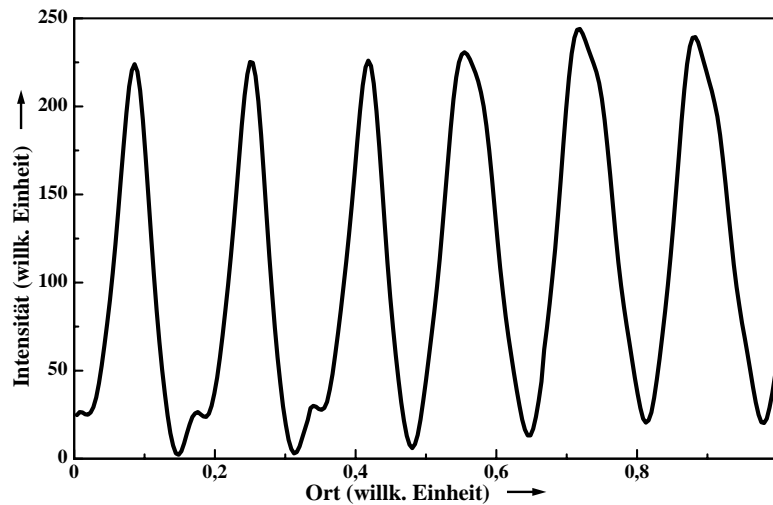


Abbildung 6.43: Intensitätslinescan für die unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung 6.41.b.

aus dem mit zunehmender Materialdicke stärker werdenden Einfluß der thermisch diffusen Streuung. Außerdem sind, durch die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, die Unterschiede zwischen den Beträgen der Intensitätsmaxima für den Bereich des InP im Vergleich zu denen des $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Bereichs deutlich verringert worden. Die Intensitätsverteilung für die unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung entspricht insgesamt, im Vergleich zu der rein elastisch simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildung, deutlich besser der Materialzusammensetzung in der untersuchten Heterostruktur. Der Intensitätslinescan des Differenzbildes in Abbildung

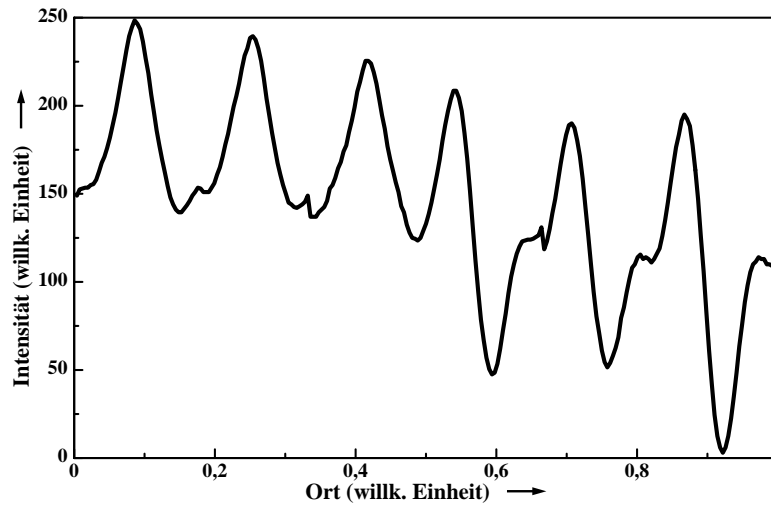


Abbildung 6.44: Intensitätslinescan für das Differenzbild 6.41.c.

6.44 zeigt deutlich den Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf die Intensitätsverhältnisse im Bereich des Heteroübergangs. Dieser weist für den Heteroübergang einen signifikanten Gradient in dem Intensitätsverlauf auf, der durch die thermisch diffuse Streuung hervorgerufen wird.

Aus den für diese Arbeit gemachten Untersuchungen über den Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast können zwei Erkenntnisse gewonnen werden.

- Es ist richtig, daß unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung nur ein geringer Informationsgewinn in der quantitativen Analyse von Proben ohne Heteroübergang zu erzielen ist. Damit ist für diesen Fall die deutliche Erhöhung der Simulationsdauer nicht unbedingt gerechtfertigt.
- Der Vergleich zwischen den unter Berücksichtigung und unter Vernachlässigung der thermisch diffusen Streuung simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Proben mit Heteroübergängen zeigt deutliche Veränderungen in den Intensitätsverhältnissen und Intensitätsverläufen. Damit ist die Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung für die quantitative Analyse von Proben mit Heteroübergängen unerlässlich. Dieses gilt insbesondere für die Fälle, in denen die einzelnen Atomsäulen, für die gewählte Orientierung, von dem RTEM nicht getrennt aufgelöst werden können. Denn dann können sich die von den einzelnen Atomsäulen gestreuten Elektronen überlagern.

6.4.3 Der Einfluß der elektronenmikroskopischen Parameter (Beschleunigungsspannung) auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast

Die Analyse von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen bietet unter anderem für die quantitative Charakterisierung von Halbleiterheterostrukturen einige Vorteile. Mit der normalen Ordnungszahl-Kontrastabbildung ist die globale Materialzusammensetzung der einzelnen Heteroschichten bestimmbar. Mittels der hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildung kann teilweise sogar für jede einzelne Atomsäule die Materialzusammensetzung bestimmt werden. Dieses bringt insbesondere für die Charakterisierung von Heteroübergängen große Vorteile, da sich mit diesem Verfahren sowohl die Struktur als auch die Materialzusammensetzung eines Heteroübergangs ermitteln läßt. Aufgrund der auf ca. $0,3\text{ nm}$ begrenzten Auflösung des verwendeten RTEM's sind einzelne Atomsäulen in Proben aus den für diese Arbeit relevanten Materialsystemen meistens nicht mehr getrennt auflösbar. Dieses resultiert aus der Überlagerung der Elektronen, die von den einzelnen Atomsäulen gestreut werden. Damit ist aber auch die Bestimmung der Materialzusammensetzung der einzelnen Atomsäulen anhand der Ordnungszahl-Kontrastintensitäten nicht mehr möglich. Um trotzdem noch Informationen aus den experimentellen hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen des verwendeten RTEM zu erzielen, werden diese mit simulierten hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen verglichen. Anhand dieses Vergleichs wurde in Kapitel 6.4.1 der *InP/InGaAs*-Heteroübergang in der $\{110\}$ -Orientierung aus Abbildung 6.35 charakterisiert. Für diese Orientierung beträgt der minimale Abstand zwischen den Atomsäulen ungefähr $0,14\text{ nm}$. Daher sind mit dem RTEM die einzelnen Atomsäulen dieser Heterostruktur nicht mehr getrennt auflösbar.

Der einfachste Weg zur Verbesserung der Auflösung ist prinzipiell die Vergrößerung der Beschleunigungsspannung. Hieraus resultiert eine Reduzierung der Wellenlänge der Elektronen des Primärelektronenstrahls. Die Wellenlänge kann nicht beliebig verkleinert werden, da sonst die Probe aufgrund der kinetischen Energie der Elektronen zerstört wird. Ein RTEM ist ein komplexes System, bei dem alle Komponenten aufeinander abgestimmt sein müssen. Daher sind bei einer Vergrößerung der Beschleunigungsspannung alle anderen Komponenten des RTEM zu optimieren. Dieses kann durch einen verbesserten Aufbau und/oder durch die Verwendung von optimaleren Elektronenlinsen und -quellen erfolgen. Welche Möglichkeiten sich durch die Vergrößerung der Beschleunigungsspannung bei gleichzeitiger Optimierung des RTEM ergeben, wurde für *GaAs* in der $\{110\}$ -Orientierung schon von anderen Gruppen gezeigt [30, 116].

Welche Vorteile sich aus der Optimierung eines RTEM für die Charakterisierung der Struk-

tur und der Materialzusammensetzung eines Heteroübergangs ergeben, ist aber bis jetzt noch unbekannt. Daher wird dieses im Folgenden genauer untersucht. Hierzu sind für drei existierende oder zukünftig mögliche RTEM's, anhand der vorgegebenen Leistungsdaten, die optimalen Betriebsparameter für die Erstellung von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen bestimmt worden. Diese sind in der Tabelle 6.1 dargestellt. Die optimalen Betriebsparameter für das 100 *keV*-RTEM stimmen mit den optimalen Betriebsparametern des VG HB501 RTEM's überein. Die optimalen Betriebsparameter für das 200 *keV*-RTEM stimmen annähernd mit den optimalen Betriebsparametern eines Philips CM200FEG/STEM überein. Das 300 *keV*-RTEM dient zur Abschätzung der Möglichkeiten von zukünftigen RTEM's. Für dieses wurde für den Defokuswert des 200 *keV*-RTEM für eine Beschleunigungsspannung von 300 *keV* der optimale sphärische Fehler und die optimale Objektivapertur bestimmt. Die optimalen Betriebsparameter wurden mittels der in Kapitel 2.2.3 beschriebenen Kontrasttransferfunktion bestimmt. Die Kontrasttransferfunktion (CTF) wird nicht nur zur Optimie-

Beschleunigungsspannung	100 <i>keV</i>	200 <i>keV</i>	300 <i>keV</i>
Mikroskoptyp (RTEM-Typ)	VG HB501	Philips CM200	zukünftiges RTEM
Defokussierung (Δf)	52,0 <i>nm</i>	26,0 <i>nm</i>	26,0 <i>nm</i>
Objektivapertur ($\Delta\alpha$)	10,3 <i>mrad</i>	11,8 <i>mrad</i>	10,75 <i>mrad</i>
Sphärischer Fehler (C_s)	1,3 <i>mm</i>	0,5 <i>mm</i>	0,6 <i>mm</i>

Tabelle 6.1: Optimale elektronenmikroskopische Parameter für drei verschiedene RTEM's.

rung einer Meßanordnung verwendet. Mit der Kontrasttransferfunktion läßt sich anhand der Beschleunigungsspannung und der Betriebsparameter eines RTEM's unter anderem auch die maximal erzielbare Ortsauflösung für eine Ordnungszahl-Kontrastabbildung abschätzen. Die Kontrasttransferfunktion gibt die relative Ordnungszahl-Kontrastintensität als Funktion der Raumfrequenz an, deren Kehrwert proportional zur erzielbaren Auflösung ist. Die Berechnung der Kontrasttransferfunktion setzt ideale Bedingungen voraus. In der Realität wird die maximal erzielbare Auflösung aber durch die Überlagerung von Rauschsignalen und anderen Effekten verschlechtert. Abbildung 6.45 zeigt die auf den RTEM-Daten aus der Tabelle 6.1 beruhenden Verläufe der Kontrasttransferfunktionen. Diese sind mit einem Programm von E.J. Kirkland berechnet worden. Abbildung 6.45 zeigt eine deutliche Zunahme der Raumfrequenz in Abhängigkeit von der Wahl der RTEM-Daten aus Tabelle 6.1. Mit zunehmender Beschleunigungsspannung nimmt die Raumfrequenz und somit die maximal erzielbare Auflösung zu. Im Idealfall ergibt sich eine Auflösung von ca. 0,18 *nm* für das 100 *keV*-RTEM, 0,11 *nm* für das 200 *keV*-RTEM und 0,09 *nm* für das 300 *keV*-RTEM. Diese Werte lassen schon die Möglichkeiten für die Material- und Heteroübergangscharakterisierung erahnen, wenn statt des 100 *keV*-RTEM das 200 *keV*- oder sogar das 300 *keV*-RTEM verwendet wird.

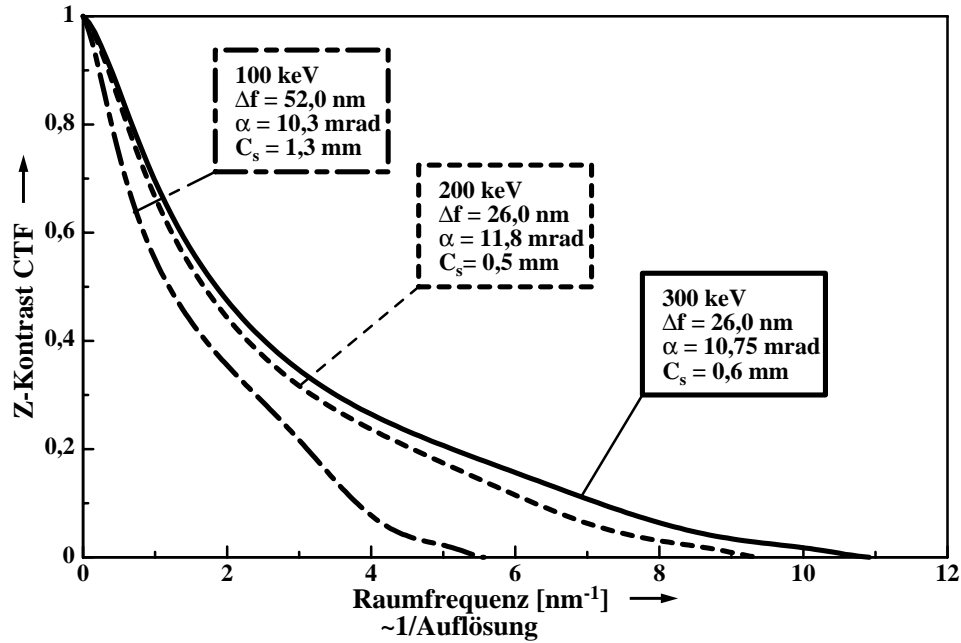


Abbildung 6.45: Kontrasttransferfunktionen für den Ordnungszahl-Kontrast basierend auf den RTEM-Daten aus der Tabelle 6.1.

Im Folgenden soll simulativ untersucht werden, ob und in welcher Form sich Verbesserungen in der Interpretation von hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Heteroübergängen durch die RTEM-Optimierung ergeben. Hierzu sind, basierend auf den RTEM-Daten aus der Tabelle 6.1, daher elastische Ordnungszahl-Kontrastsimulationen für den $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergang aus Abbildung 6.35 durchgeführt worden. Die Ergebnisse der Ordnungszahl-Kontrastsimulationen sind in Abbildung 6.46 dargestellt. Der Vergleich von den mit Ovalen markierten $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Doppelatomsäulen in Abbildung 6.46 zeigt, daß mit zunehmender Beschleunigungsspannung die Doppelatomsäulen immer besser aufgelöst werden. Hierdurch sind die Positionen der einzelnen Atomsäulen genauer bestimmbar. Für den Bereich des InP ergibt sich aus der Auflösungsverbesserung keine signifikante Verbesserung. Deswegen wird im Folgenden untersucht, inwieweit die Darstellung der InP -Doppelatomsäulen durch die Auflösungsverbesserung beeinflusst wird. Außerdem wird untersucht, wie sich die Intensitätsverteilung innerhalb der Ordnungszahl-Kontrastabbildung in Abhängigkeit von der Auflösungsverbesserung verändert. Hierzu sind an den mit weißen Linien gekennzeichneten Positionen in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Abbildung 6.46 jeweils Intensitätslinescans aufgenommen worden. Diese Intensitätslinescans sind in den Abbildungen 6.47, 6.48 und 6.49 dargestellt. Zusätzlich sind in den Intensitätslinescans jeweils die Positionen der Gruppe III- und V-Atomsäulen in einer InP - und einer $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Doppelatomsäule markiert. Der Intensitätslinescan für die mit dem 100 keV-RTEM simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung des $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergangs

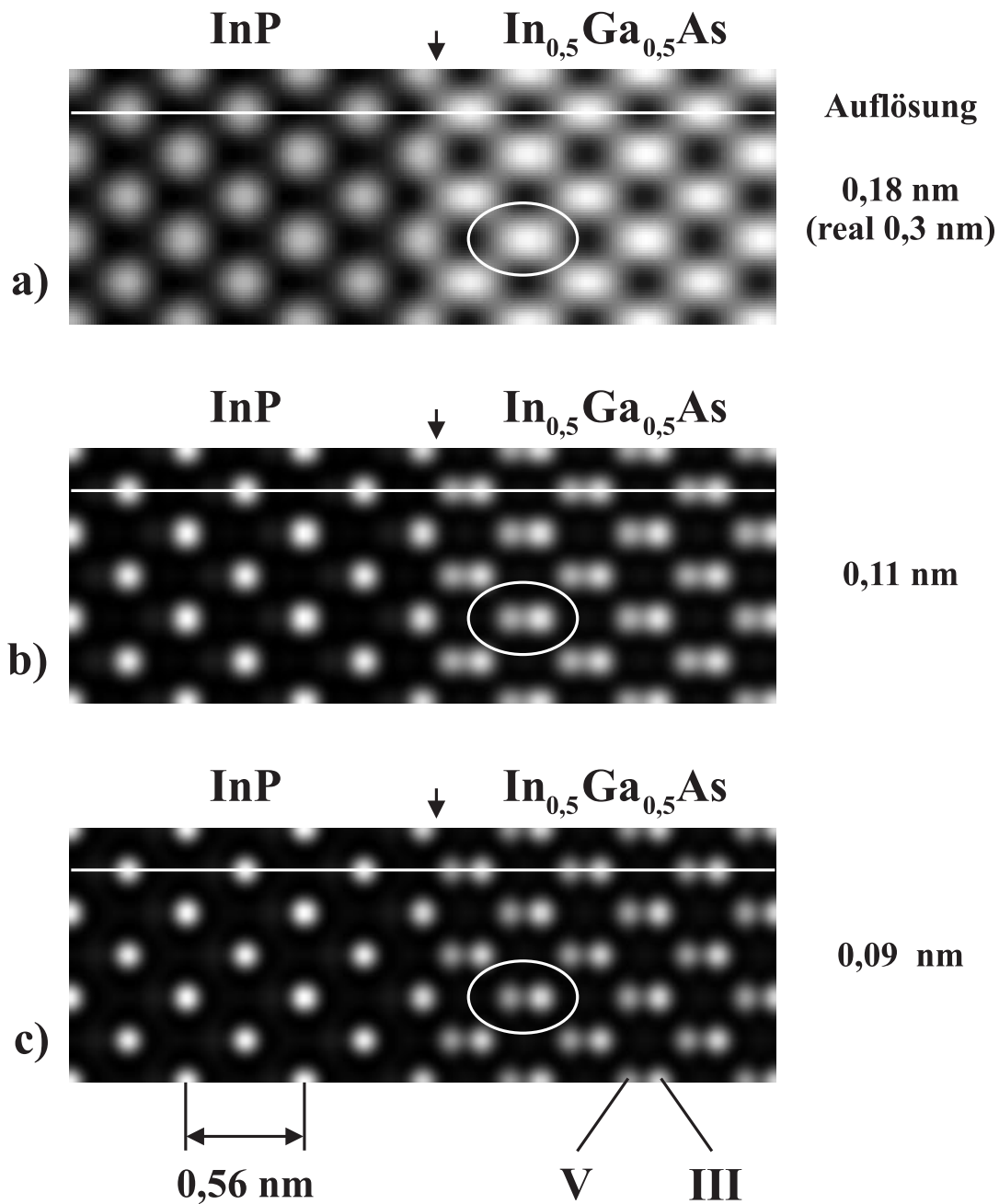


Abbildung 6.46: Mit den RTEM-Daten aus Tabelle 6.1 simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für ein a) 100 keV-, b) 200 keV- und c) 300 keV-RTEM. Das Oval markiert jeweils eine $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Doppelatomsäule. Jeweils rechts von den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen sind die mittels der Kontrasttransferfunktion bestimmten idealen Auflösungen der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen angegeben.

in Abbildung 6.47 und der Intensitätslinescan für die experimentelle Ordnungszahl-Kontrastabbildung des $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergangs in Abbildung 6.38 zeigen eine gute Übereinstimmung. Die in den Abbildungen 6.47, 6.48 und 6.49 markierten Positionen der

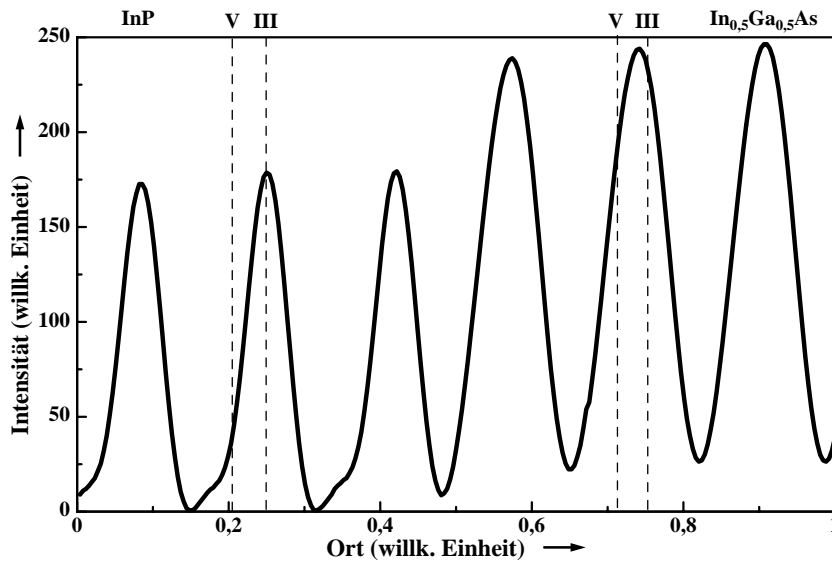


Abbildung 6.47: Linescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung 6.46.a für das 100 keV-RTEM aus Tabelle 6.1.

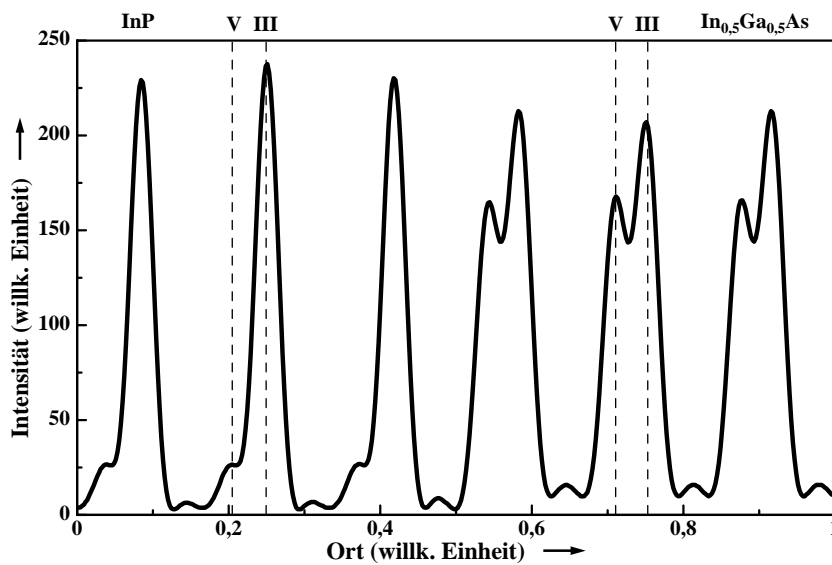


Abbildung 6.48: Linescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung 6.46.b für das 200 keV-RTEM aus Tabelle 6.1.

Gruppe III- und der Gruppe V-Atomsäulen zeigen, daß sich mit zunehmender Auflösung die Intensitäten der einzelnen Atomsäulen und somit die gestreuten Elektronen immer weniger überlagern. Anhand des Vergleichs der Intensitätslinescans fällt weiterhin auf, daß der Übergangsbereich in den Intensitätslinescans aus den Abbildungen 6.38, 6.39 und 6.40 für die *InP*-Doppelatomsäulen nicht nur von der *P*-Atomsäule verursacht wird. Im Gegensatz zu der obigen Vermutung wird dieser Übergangsbereich eher durch die Überlagerung

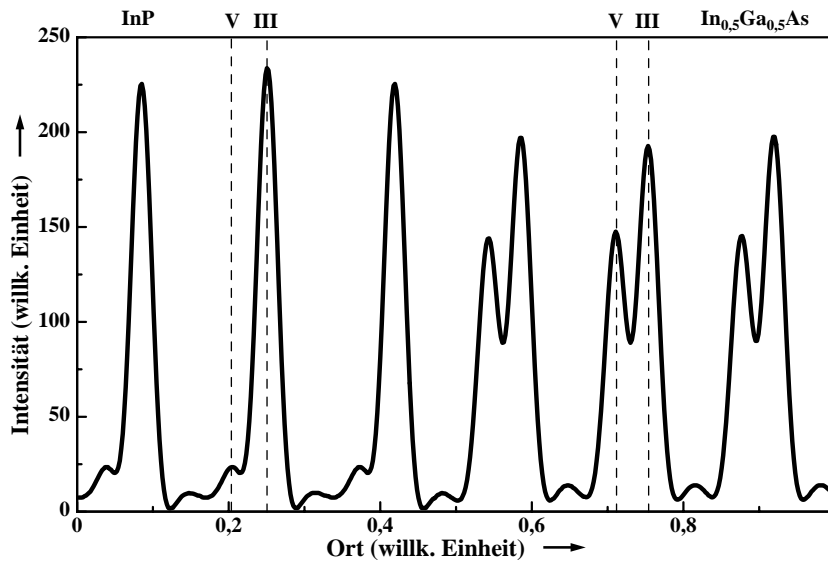


Abbildung 6.49: Linescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung 6.46.c für das 300 keV-RTEM aus Tabelle 6.1.

des Intensitätsuntergrundes in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung mit den Ordnungszahl-Kontrastintensitäten der *InP*-Doppelatomsäule verursacht. Diese Überlagerung resultiert aus der auf ca. 0,3 nm begrenzten Auflösung des 100 keV-RTEM's. Mit zunehmender Auflösung verschiebt sich in den Intensitätslinescans in den Abbildungen 6.47, 6.48 und 6.49 die Position des Intensitätsmaximums innerhalb der Doppelatomsäulen in Richtung der Gruppe III-Atomsäule. Gleichzeitig teilen sich die Intensitätsmaxima im *In_{0,5}Ga_{0,5}As* mit zunehmender Beschleunigungsspannung in zwei getrennte Intensitätsmaxima auf. Dieses sind die Intensitätsmaxima für die *In_{0,5}Ga_{0,5}*- und die *As*-Atomsäulen. Beim Vergleich der Beträge der Intensitätsmaxima fällt außerdem auf, daß sie für den *InP*-Bereich im Vergleich zu denen im Bereich des *In_{0,5}Ga_{0,5}As* mit zunehmender Beschleunigungsspannung immer größer werden. Der Grund für dieses Verhalten ist, daß mit zunehmender Auflösung die von den Doppelatomsäulen gestreuten Elektronen immer weniger interferieren. Die gemittelte Ordnungszahl der *InP*-Doppelatomsäule beträgt $Z_{InP} = 32$ und die der *In_{0,5}Ga_{0,5}As*-Doppelatomsäule beträgt $Z_{InGaAs} = 36,5$. Werden mit diesen Werten die zu erwartenden Intensitätswerte berechnet und mit den Beträgen der Intensitätsmaxima von den Doppelatomsäulen, für das 100 keV-RTEM, in Abbildung 6.47 verglichen, so ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Darüber hinaus stimmen die Beträge der Intensitätsmaxima mit zunehmender Beschleunigungsspannung immer besser mit der mittleren Ordnungszahl für die einzelnen Atomsäulen überein. Insbesondere das 300 keV-RTEM weist aufgrund der sehr guten Auflösung die beste Übereinstimmung zwischen den Intensitäten und der Materialzusammensetzung für jede einzelne Atomsäule auf.

Die hier vorgestellten Untersuchungsergebnisse zeigen, daß sich im Vergleich zum 100 *keV*-RTEM für das 200 *keV*- und 300 *keV*-RTEM deutliche Verbesserungen in der Bestimmung der Materialzusammensetzung und der Position der einzelnen Atomsäulen ergeben. Gerade diese Verbesserungen ermöglichen in Zukunft eine noch detailliertere und dabei einfachere Interpretation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für die Charakterisierung von Heteroübergängen. Die Vereinfachungen resultieren unter anderem aus der Tatsache, daß Informationen über den Kristallaufbau rein intuitiv, anhand der experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildung, ermittelt werden können. Dafür ist es dann nicht mehr unbedingt notwendig, wie in Kapitel 6.4.1 gezeigt wurde, den Kristallaufbau mittels des Vergleichs von experimentellen und für verschiedene Kristallmodelle simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zu bestimmen. Aufgrund dieser Tatsache sind zukünftig dann auch Verbesserungen in dem Herstellungsprozeß von Heteroübergängen mit speziellen Eigenschaften möglich.

6.4.4 Die Orientierungsabhängigkeit des Ordnungszahl-Kontrastes der Gruppe III-Nitride

Es existieren Untersuchungen von anderen Gruppen, die den Einfluß der Verkipfung des Primärelektronenstrahls auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast von *GaAs* demonstrieren [30]. Für die Gruppe III-Nitride existieren hierzu bisher, soweit bekannt ist, nur Untersuchungsergebnisse zu normal aufgelösten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen [41].

Anhand der Abbildung 6.50, soll für die Gruppe III-Nitride dieser Zusammenhang noch einmal kurz veranschaulicht werden. Für einen 17 nm breiten *InGaN/GaN*-Quantentopf, der auf einem Saphirsubstrat mit einer *AlN*-Bufferschicht epitaktisch aufgebracht wurde, zeigt Abbildung 6.50 die Hellfeld- (links) und die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen (rechts) für zwei unterschiedliche Strahlorientierungen. Die Elektronenbeugungsmuster in den Hellfeldabbildungen zeigen die Orientierung des Primärelektronenstrahls, mit dem die Hellfeld- und die dazugehörigen Ordnungszahl-Kontrastabbildung aufgenommen wurden. Zusätzlich ist in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen jeweils ein Intensitätslinescan für die jeweilige Ordnungszahl-Kontrastabbildung dargestellt. Sowohl die Hellfeld- als auch die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus Abbildung 6.50 zeigen eine starke Abhängigkeit von der Einstrahlrichtung des Primärelektronenstrahls. Dieses Ergebnis wird zusätzlich durch die Intensitätslinescans der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen untermauert.

Bis zum Beginn dieser Arbeit existierten keine genauen Erkenntnisse über den Einfluß von kleinen Verkipfungen des Primärelektronenstrahls auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride. Deshalb soll dieses nun anhand des Materials *GaN* in der $\{120\}$ -Orientierung genauer untersucht werden. Für diese Untersuchungen wird das für diese Arbeit entwickelte und in Kapitel 4.2.2 vorgestellte Multislice-Simulationsmodell für die Wurtzitstruktur eingesetzt. Da eine Vielzahl von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen simuliert werden müssen und die zu simulierenden Proben keine Heteroübergänge aufweisen, sind alle Ordnungszahl-Kontrastabbildungen rein elastisch simuliert worden.

Für die Untersuchungen ist anhand von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für *GaN* eine Simulationsreihe erstellt worden, in der der Primärelektronenstrahl aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{002\}$ - und des $\{\bar{2}10\}$ -Kikuchibandes verkippt wurde. Die hierfür verwendeten Verkipfungswinkel sind $0, 5^\circ, 0, 25^\circ, 0, 0^\circ, -0, 25^\circ$ und $-0, 5^\circ$. Die für die Ordnungszahl-Kontrastsimulationen verwendeten Probendicken sind $3\text{ nm}, 6\text{ nm}$ und 9 nm . Die Abbildungen 6.51 und 6.54 zeigen die Simulationsergebnisse dieser Untersuchungen. Aufgrund des geringen Abstandes der *Ga*- und *N*-Atomebenen in der Wurtzitstruktur, von ungefähr $0,065\text{ nm}$, sind diese nicht getrennt auflösbar. Deshalb erscheinen sie als helle waagerech-

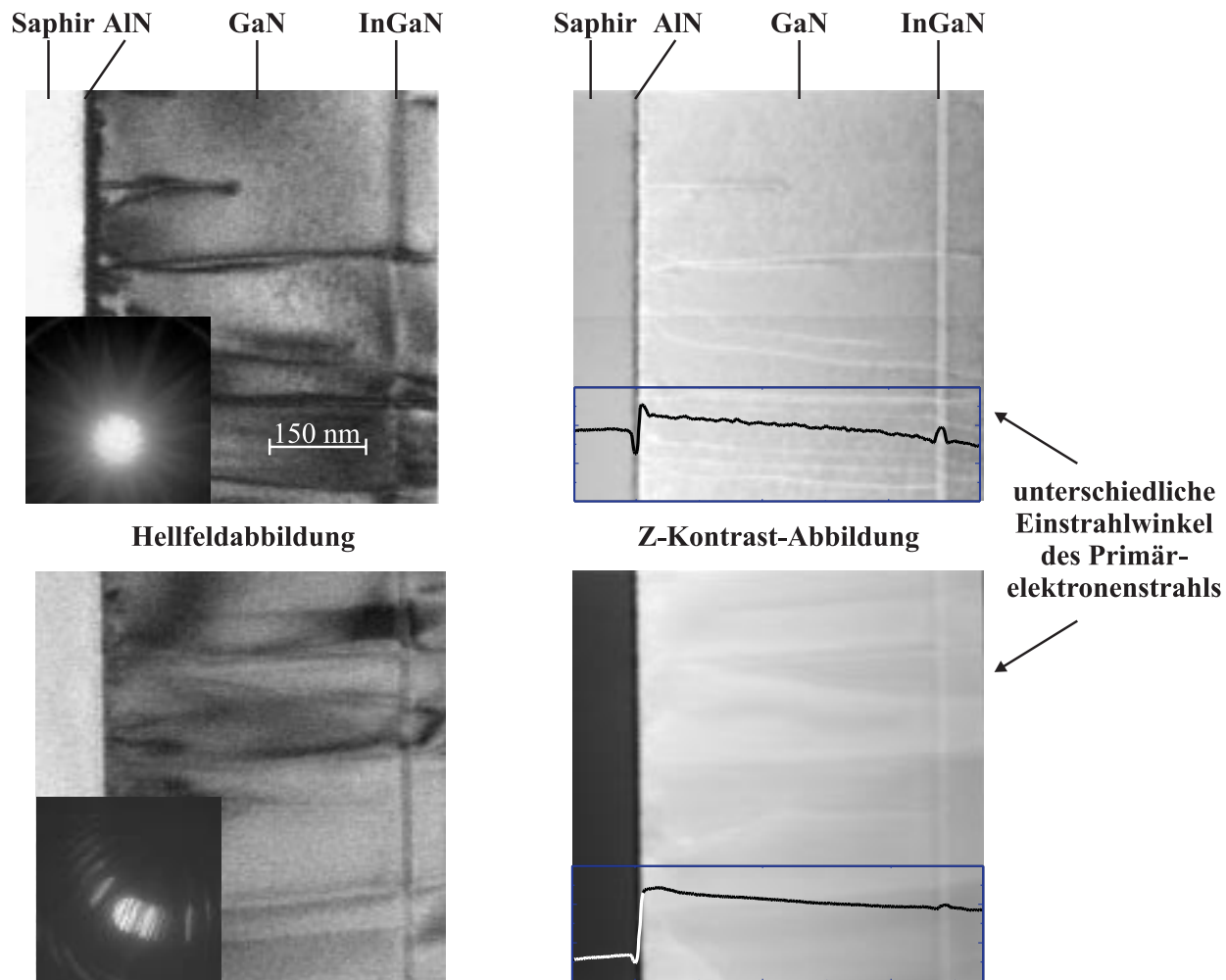


Abbildung 6.50: Hellfeld- (links) und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen (rechts) für einen 17 nm breiten *InGaN/GaN*-Quantentopf, der auf einem Saphirsubstrat mit einer *AlN*-Bufferschicht epitaktisch aufgebracht wurde, für zwei unterschiedliche Strahlorientierungen.

te Linie in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen und werden im Folgenden als *GaN*-Doppelschicht bezeichnet. Für die Darstellung einer Ordnungszahl-Kontrastabbildung werden die Graustufen normalerweise auf die minimale und die maximale Intensität in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung normiert. Zur besseren Vergleichbarkeit der simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in den Abbildungen 6.51 und 6.54 sind für die darin dargestellten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen jeweils die Intensitätsminima und Intensitätsmaxima bestimmt worden. Aus diesen Werten ist dann für die Abbildungen 6.51 und 6.54 jeweils das absolute Intensitätsminimum und das absolute Intensitätsmaximum ermittelt worden. Mit diesen absoluten Werten sind dann die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in den Abbildungen 6.51 und 6.54 normiert worden. Abbildung 6.51 zeigt deutlich, daß schon für einen relativ kleinen Verkipfungswinkel von $\pm 0,5^\circ$ und eine relativ kleinen Pro-

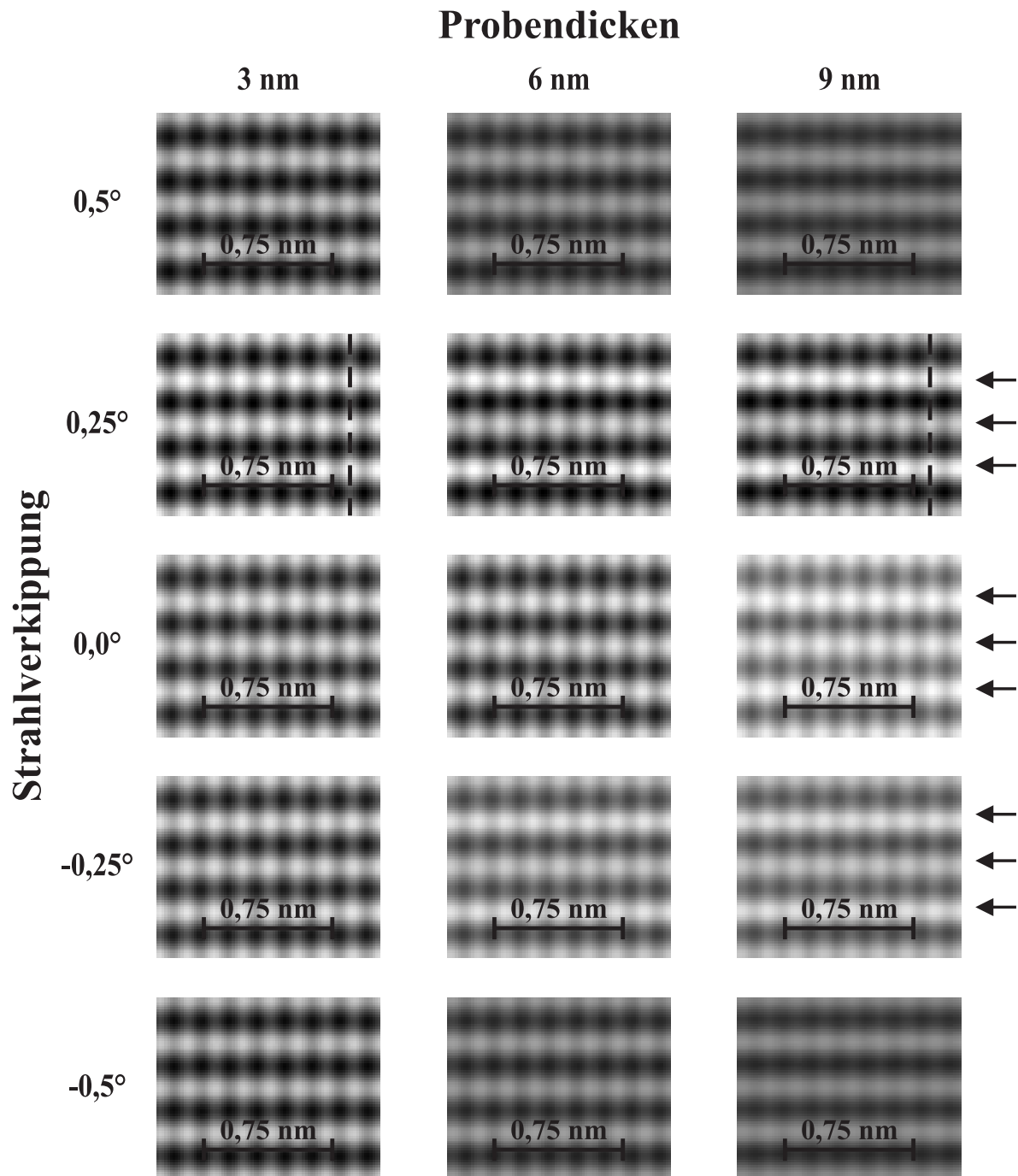


Abbildung 6.51: Simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für *GaN* mit der Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{\bar{2}10\}$ -Kikuchibandes. Die verwendeten Materialdicken und Verkipfungswinkel sind jeweils angegeben.

bendicke von 9 nm die Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen gegenüber den Intensitäten in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung für einen Verkipfungswinkel von $0,0^\circ$ und einer Probendicke von 9 nm deutlich abnehmen. Das bedeutet, daß sich bei der Verkipfung des Primärelektronenstrahls entlang des $\{\bar{2}10\}$ -Kikuchibandes für größere Ma-

terialdicken schon bei kleinen Verkippungswinkeln eine starke Intensitätsveränderung in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen einstellen wird. Für den Verkippungswinkel von $\pm 0,25^\circ$ existiert diese deutliche Intensitätsabnahme nicht. Es existieren aber Änderungen in den Intensitäten im Vergleich zur Ordnungszahl-Kontrastabbildung für den Verkippungswinkel von $0,0^\circ$. Die Intensitätsveränderungen sind aber nicht symmetrisch. Außerdem weisen die nicht auflösbaren *GaN*-Doppelschichten eine Modulation in den Intensitätswerten der Intensitätsmaxima auf. Diese sind in der Abbildung 6.51 mit Pfeilen markiert. Um diesen Effekt genauer zu untersuchen, sind an den mit gestrichelten Linien gekennzeichneten Positionen in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus Abbildung 6.51 Intensitätslinescans aufgenommen worden. Das Ergebnis dieser Intensitätslinescans ist in den Abbildungen 6.52 und 6.53 dargestellt. Der Vergleich der Abbildungen 6.52 und 6.53 zeigt, daß die Intensitätsmodulation in beiden Abbildungen existiert. Gleichzeitig nimmt die Stärke der Intensitätsmodulation mit zunehmender Materialdicke zu. Diese beiden Effekte existieren in allen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Abbildung 6.51. In Kapitel 6.4.6 wird genauer auf die Ursache der Modulation der maximalen Intensitäten eingegangen.

Abbildung 6.54 zeigt die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für den Fall, daß der Primärelektronenstrahl entlang des $\{002\}$ -Kikuchibandes aus der $\{120\}$ -Orientierung verkipppt wird. Auch hier weisen die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen schon für kleine Verkippungswinkel deutliche Veränderungen auf. Wie schon in Abbildung 6.51 ist eine Modulation der maximalen Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Abbildung 6.54 zu erkennen. Darüber hinaus sind zwei weitere Effekte beobachtbar. Als erstes fällt in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Abbildung 6.54 besonders deutlich die asymmetrische Veränderung der Intensitäten für den Fall der Strahlverkippung um $\pm 0,5^\circ$ auf. Dieses ähnelt sehr stark dem Verhalten, welches schon in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Abbildung 6.51 für den Verkippungswinkel von $\pm 0,25^\circ$ beobachtet wurde. Damit resultiert dieses Verhalten aus der nicht zentralsymmetrischen Wurtzitstruktur der Gruppe III-Nitride. Denn für diese existiert eine deutliche Veränderung in den Ordnungszahl-Kontrastintensitäten als Resultat der Umkehrung der Kristallpolarität in Inversionsdomänen [93, 117, 118]. Als zweites fällt in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen die Verschiebung der Intensitätsmaxima in Abhängigkeit vom Einstrahlwinkel auf. Beispielhaft sind hierzu in Abbildung 6.54 die verschobenen Intensitätsmaxima für den Verkippungswinkel von $\pm 0,25^\circ$ mit Pfeilen markiert worden. Deutlicher ist dieser Effekt anhand der Intensitätslinescans zu erkennen, die für die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in Abbildung 6.54 an den mit gestrichelten Linien markierten Positionen aufgenommen wurden. Die resultierenden Intensitätslinescans sind in den Abbildungen 6.55 und 6.56 dargestellt. Die Intensitätslinescans der Abbildungen 6.55 und 6.56 zeigen im direkten Vergleich eine besonders

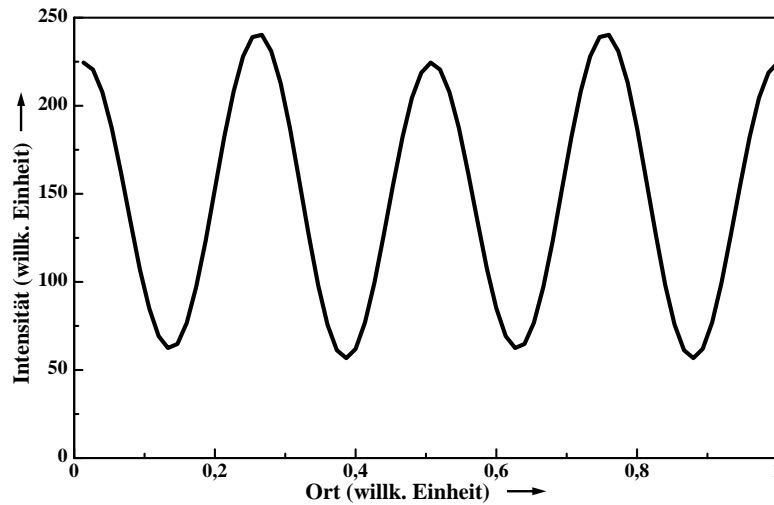


Abbildung 6.52: Linescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN aus Abbildung 6.51 mit einer Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{\bar{2}10\}$ -Kikuchibandes von $0,25^\circ$ und einer Probendicke von 3 nm .

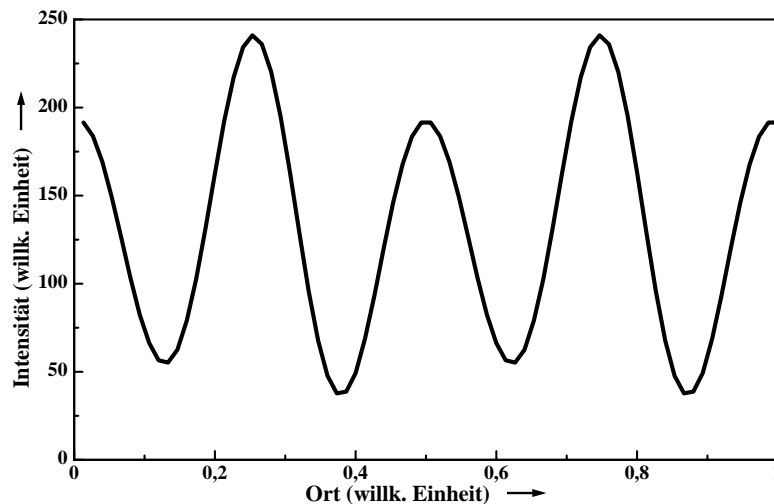


Abbildung 6.53: Linescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN aus Abbildung 6.51 mit einer Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{\bar{2}10\}$ -Kikuchibandes von $0,25^\circ$ und einer Probendicke von 9 nm .

deutliche Verschiebung der Position der Intensitätsmaxima als Funktion des Einstrahlwinkels auf. Diese Verschiebung der Position der Intensitätsmaxima ist für den Einstrahlwinkel von $\pm 0,5^\circ$ nicht zu beobachten. Grundsätzlich sollte für größere Verkipfungswinkel diese Verschiebung aber wieder auftreten, da sie direkt mit dem Kristallaufbau und der Einstrahlrichtung gekoppelt ist.

Im Folgenden werden die oben gewonnenen Untersuchungsergebnisse über den Einfluß der

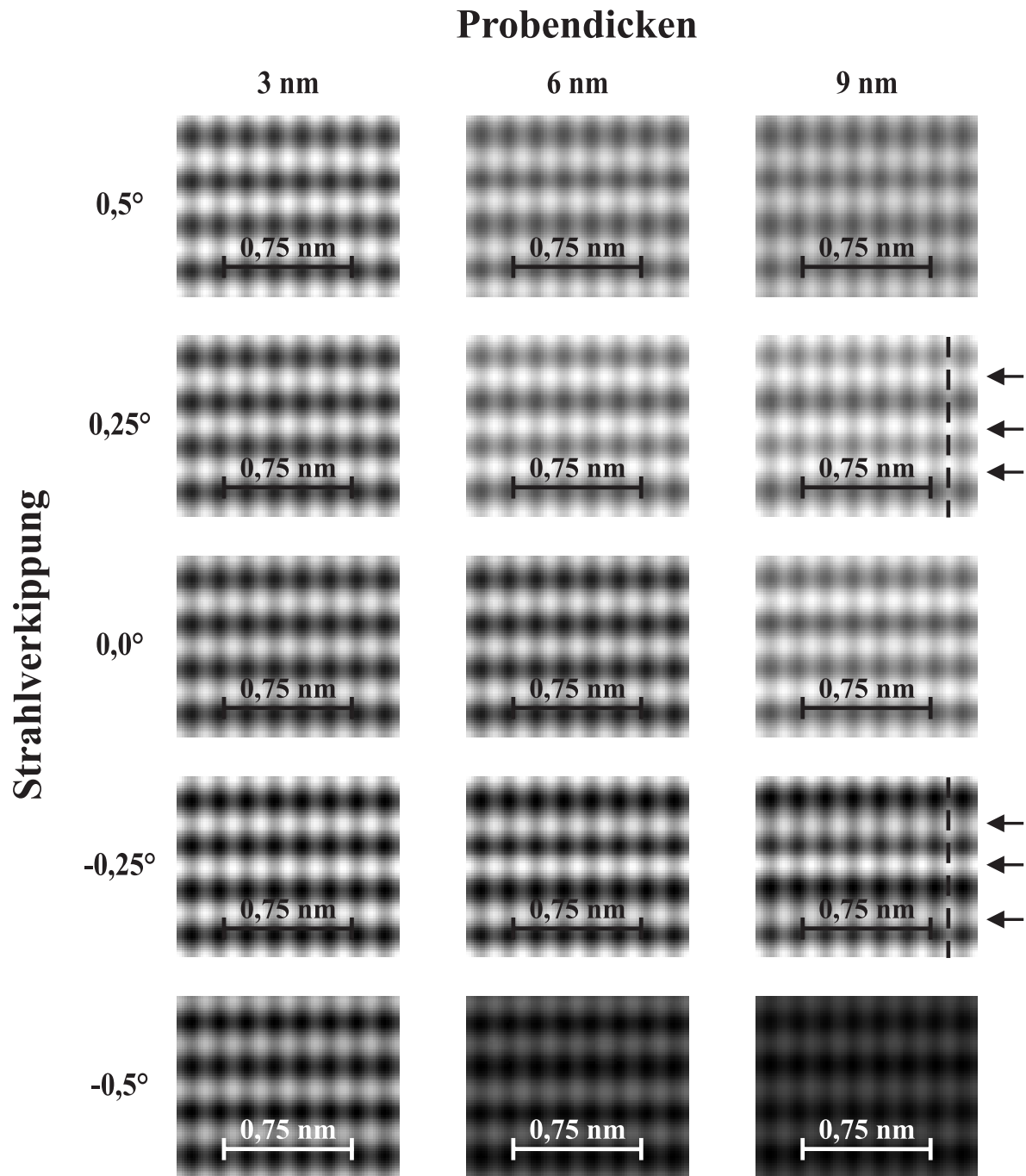


Abbildung 6.54: Simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für *GaN* mit einer Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{002\}$ -Kikuchibandes für die angegebenen Materialdicken und Verkipfungswinkel.

Strahlverkipfung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride kurz zusammengefaßt:

1. Für die Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{\bar{2}10\}$ -Kikuchibandes ist ab

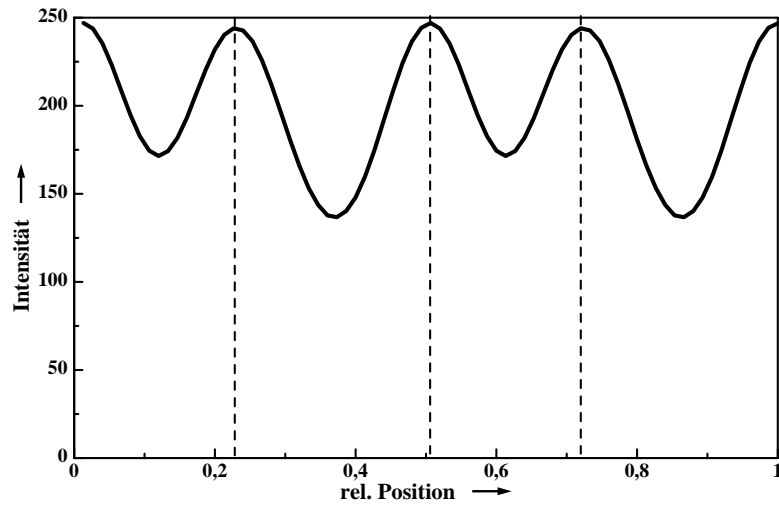


Abbildung 6.55: Intensitätslinescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung von GaN mit einer Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{002\}$ -Kikuchibandes von $0,25^\circ$ und einer Probendicke von ungefähr 9 nm .

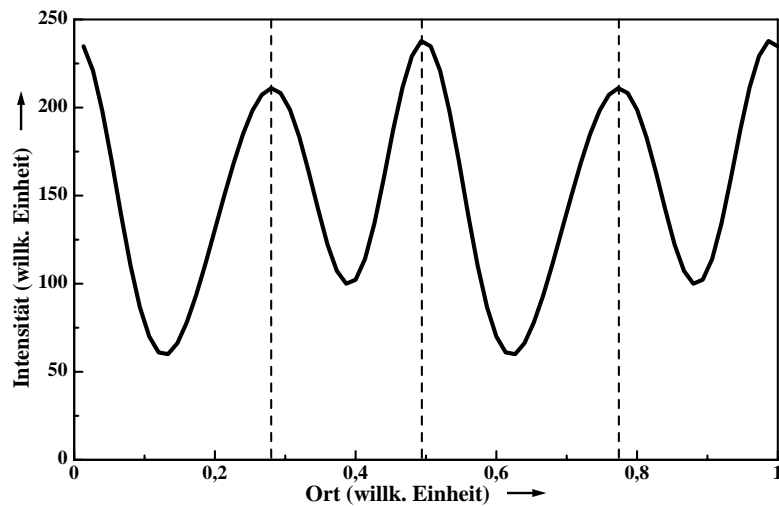


Abbildung 6.56: Intensitätslinescan über die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung von GaN mit einer Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{002\}$ -Kikuchibandes von $-0,25^\circ$ und einer Probendicke von ungefähr 9 nm .

dem Verkipfungswinkel von $\pm 0,5^\circ$ eine annähernd symmetrische Veränderung der Ordnungszahl-Kontrastintensitäten zu erwarten.

2. Für die Strahlverkipfung aus dem $\{120\}$ -Pol entlang des $\{002\}$ -Kikuchibandes ist eine asymmetrische Veränderung der Ordnungszahl-Kontrastintensitäten zu erwarten. Diese entspricht von der Art her der Veränderung der Ordnungszahl-Kontrastintensitäten in Inversionsdomänen. Gleichzeitig ist auch eine deutliche Veränderung der Position

der *GaN*-Doppelschicht zu beobachten.

3. Für einen vom Betrag her gleichen Einstrahlwinkel entstehen für unterschiedliche Vorzeichen zum Teil äußerst unterschiedliche Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Damit erfolgt die Änderung des Ordnungszahl-Kontrastes nicht vollkommen symmetrisch.
4. Es ist eine leichte Reduzierung der maximalen Ordnungszahl-Kontrastintensität für jede zweite *GaN*-Doppelschicht zu beobachten. Auf deren Ursache wird in Kapitel 6.4.6 eingegangen.

6.4.5 Der Einfluß der Materialvariation auf den Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride

Für Materialien mit der Zinkblendekristallstruktur existieren schon Untersuchungen über die Materialabhängigkeit des hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastes [58]. In dieser Arbeit sind II-VI-Halbleiter aus dem Materialsystem $ZnSSe$ untersucht worden. Bis jetzt ist aber noch relativ unklar, wie sich die Materialvariation auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride auswirken wird. Für dieses Materialsystem existieren noch fast keine hochaufgelösten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen.

Um die Interpretation von experimentellen hochaufgelösten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zu erleichtern, sind daher im Rahmen dieser Arbeit Untersuchungen über den Einfluß der Materialvariation auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride durchgeführt worden. Für diese Untersuchungen wird das für diese Arbeit entwickelte und in Kapitel 4.2.2 vorgestellte Multislice-Simulationsmodell für die Wurtzitstruktur eingesetzt. Da, wie schon in Kapitel 6.4.4, eine Vielzahl von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen simuliert werden müssen und die zu simulierenden Proben keine Heteroübergänge aufweisen, sind alle Ordnungszahl-Kontrastabbildungen rein elastisch simuliert worden. Für die folgenden Untersuchungsergebnisse sind für die Materialien $InGaN$ und $AlGaN$ Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für verschiedene Materialzusammensetzungen in der $\{100\}$ - und $\{120\}$ -Orientierung simuliert worden. Die benötigten Gitterkonstanten sind mittels des Vegardschen Gesetzes, basierend auf den Gitterkonstanten von GaN , AlN und InN aus [91], berechnet worden. Abbildung 6.57 und 6.59 zeigen das Ergebnis dieser Ordnungszahl-Kontrastsimulationen. Normalerweise werden die Graustufen in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen jeweils auf den minimalen und maximalen Intensitätswert der jeweiligen Ordnungszahl-Kontrastabbildung normiert. Wie auch schon in Kapitel 6.4.4 sind die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in der Abbildung 6.57 und 6.59 auf das jeweils absolute Intensitätsminimum und das absolute Intensitätsmaximum der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in diesen Abbildungen normiert worden. Hierdurch ist eine bessere Vergleichbarkeit der Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen möglich.

Abbildung 6.57 zeigt für die Materialsysteme $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ mit den Materialzusammensetzungen $x = 0,0$, $x = 0,1$, $x = 0,2$ und $x = 1,0$, das Ergebnis der Ordnungszahl-Kontrastsimulationen in der $\{100\}$ -Orientierung. Zur besseren Vergleichbarkeit der Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen ist zusätzlich neben jeder Ordnungszahl-Kontrastabbildung jeweils die Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN dargestellt. Der Vergleich der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus der Abbildung 6.57 ergibt nur für die Materialien AlN und InN signifikante Veränderungen in den Intensitäten.

Damit ist für Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, die gleichzeitig InN -, AlN -, $Al_xGa_{1-x}N$ - und $In_xGa_{1-x}N$ -Schichten darstellen, nur eine Materialvariation von $x \geq 0,2$ bestimmbar. Werden statt dem rein optischen Vergleich der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen die Intensitätswerte direkt miteinander verglichen, so zeigt sich ein etwas anderes Verhalten. Abbildung 6.58 zeigt die maximalen Intensitäten der Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus Abbildung 6.57 als Funktion der Materialzusammensetzung. Die Intensitätswerte wurden jeweils auf den maximalen Intensitätswert der Ordnungszahl-Kontrastabbildung von GaN normiert. Bei genauerer Betrachtung der Abbildung 6.58 zeigt sich, wie schon bei den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, ein relativ kleiner Unterschied in den Intensitäten für Materialzusammensetzungen mit einem Wert von $x \leq 0,2$. Der Funktionsverlauf aus Abbildung 6.58 zeigt, daß in der $\{100\}$ -Orientierung für die Materialsysteme $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ mit dem gleichen Wert x prinzipiell eine Unterscheidung in der Materialzusammensetzungen möglich ist. Darüber hinaus ist mittels des Funktionsverlaufs aus Abbildung 6.58 aber keine eindeutige Unterscheidung der Materialien möglich. Dieses gilt insbesondere für Materialzusammensetzungen mit einem Wert von $x \leq 0,2$.

Abbildung 6.59 zeigt für die Materialzusammensetzungen $x = 0,0$, $x = 0,1$, $x = 0,2$ und $x = 1,0$ das Ergebnis der Ordnungszahl-Kontrastsimulationen für die Materialsysteme $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ in der $\{120\}$ -Orientierung. Zur besseren Vergleichbarkeit der Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen ist wiederum neben jeder Ordnungszahl-Kontrastabbildung jeweils die Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN dargestellt. Die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus Abbildung 6.59 zeigen schon für Materialzusammensetzungen mit $x \leq 0,2$ deutliche Unterschiede in den Intensitäten. Somit sind selbst kleinere Veränderungen in der Materialzusammensetzung besser identifizierbar. Wie auch schon für die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in Abbildung 6.57 sind für die der Abbildung 6.59 die maximalen Intensitäten bestimmt worden. Diese sind auf die maximale Intensität der GaN -Ordnungszahl-Kontrastabbildung normiert und in Abbildung 6.60 als Funktion der Materialzusammensetzung dargestellt worden. Abbildung 6.60 zeigt, daß sich der Trend in der besseren Unterscheidbarkeit der Materialzusammensetzung für die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen aus Abbildung 6.59 auch in dem Verlauf der maximalen Intensitäten fortsetzt. Zusätzlich ist in dem Funktionsverlauf für das Materialsystem $In_xGa_{1-x}N$ in Abbildung 6.60 noch eine Art Sättigungsverhalten zu erkennen. Aufgrund dieses Verhaltens sind nochmals die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für das Materialsystem $In_xGa_{1-x}N$ in Abbildung 6.59 genauer untersucht worden. An diesen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen fällt auf, daß bei Vergrößerung der Materialzusammensetzung x zuerst die maximalen Intensitäten in jeder zweiten, nicht auflösbaren, $InGaN$ -Doppelschicht zunehmen. In der Ordnungszahl-Kontrastabbildung des Materials InN erscheinen alle, nicht

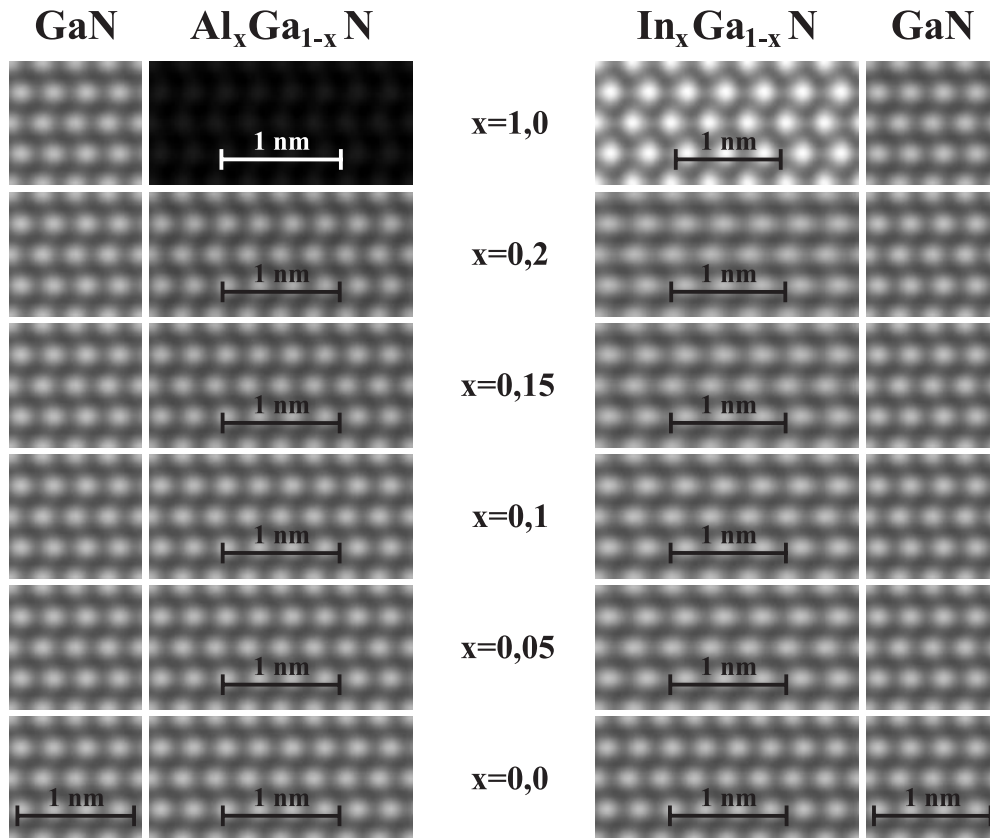


Abbildung 6.57: Simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für die Materialien $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ in der $\{100\}$ -Orientierung.

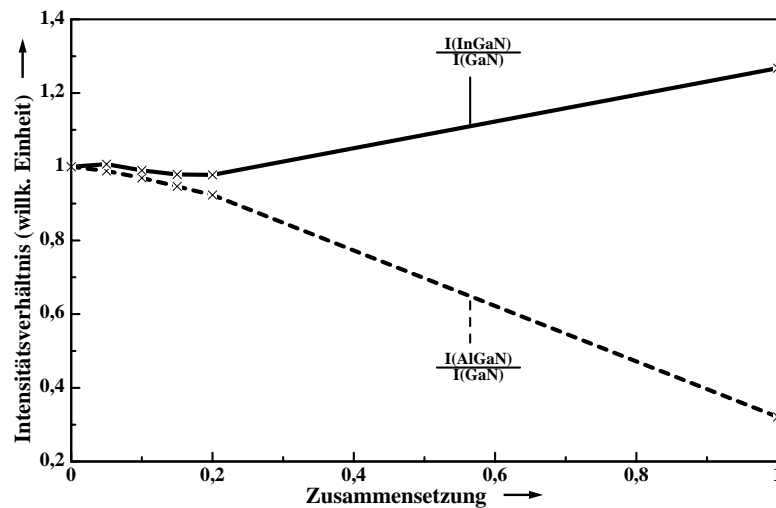


Abbildung 6.58: Verlauf der maximalen Intensitäten der simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in Abbildung 6.57 für die Materialien $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ in der $\{100\}$ -Orientierung, normiert auf die maximale Intensität von GaN .

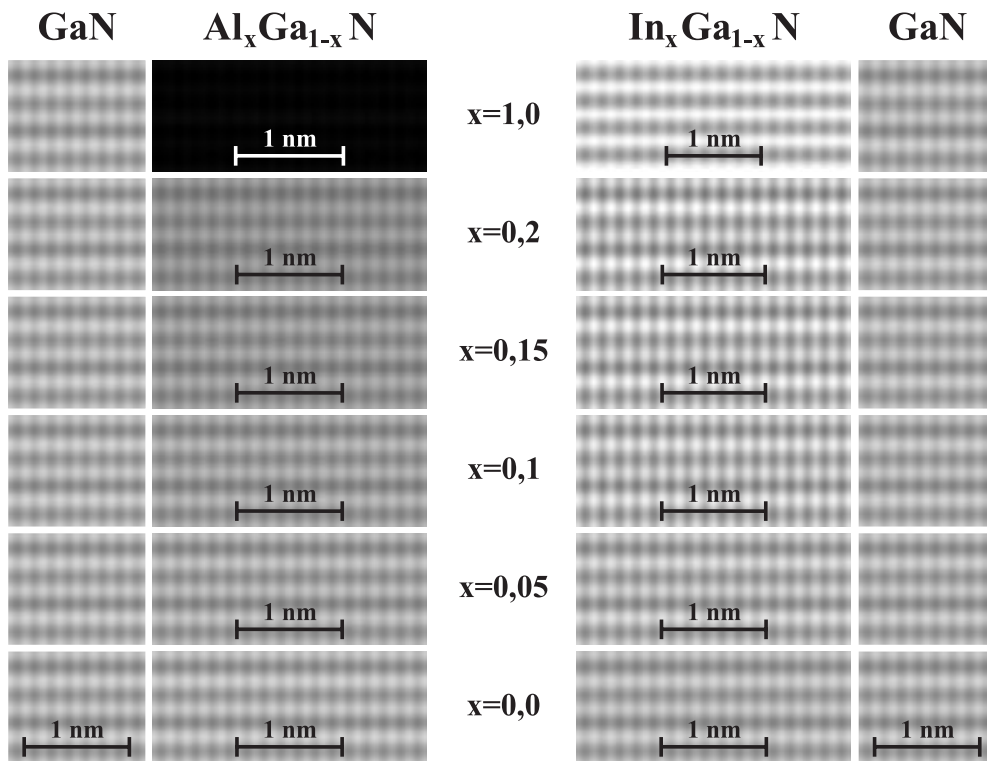


Abbildung 6.59: Simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für die Materialien $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ in der $\{120\}$ -Orientierung.

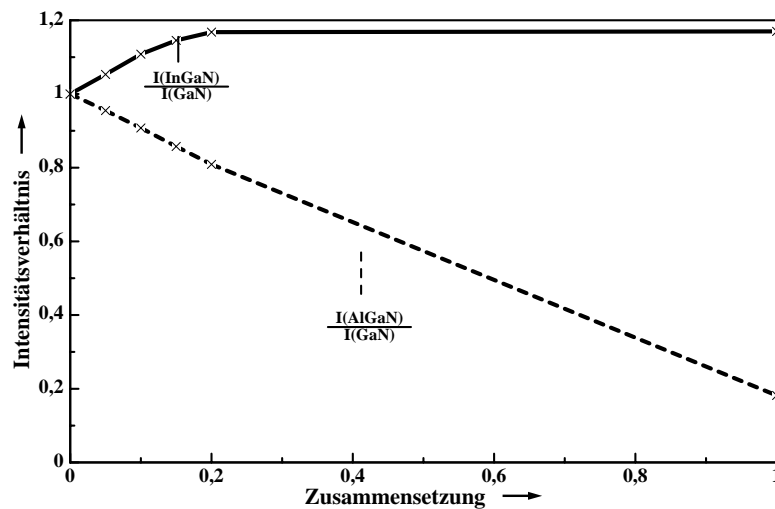


Abbildung 6.60: Maximale Intensitäten der simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für die Materialien $Al_xGa_{1-x}N$ und $In_xGa_{1-x}N$ in der $\{120\}$ -Orientierung aus Abbildung 6.59, normiert auf die maximale Intensität von GaN .

auflösbaren, InN -Doppelschichten gleich hell. Dieses Verhalten zeigt eindeutig, daß auch die reine Betrachtung der maximalen Intensitäten einer Ordnungszahl-Kontrastabbildung

nicht zu einer eindeutigen Identifizierung der Materialzusammensetzung führen wird.

Aus den hier erzielten Untersuchungsergebnissen lassen sich mehrere Aussagen über die Materialabhängigkeit des hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastes für die Gruppe III-Nitride in der $\{100\}$ -Orientierung und $\{120\}$ -Orientierung ableiten:

1. Die $\{120\}$ -Orientierung zeigt gegenüber der $\{100\}$ -Orientierung eine stärkere Abhängigkeit des hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastes von der Materialzusammensetzung.
2. Der Vergleich der maximalen Intensitäten einer hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildung bringt zwar zusätzliche Informationen, aber er kann nur im Zusammenhang mit der dazugehörigen Ordnungszahl-Kontrastabbildung zur Bestimmung der Materialzusammensetzung dienen.
3. Alle hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in der $\{120\}$ -Orientierung weisen eine Modulation der maximalen Intensitäten auf, die für die hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in der $\{100\}$ -Orientierung nicht zu erkennen sind. Auf dieses Problem wird in Kapitel 6.4.6 aber noch eingegangen.

6.4.6 Der Einfluß der Auflösungsverbesserung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride

In den Kapiteln 6.4.4 und 6.4.5 wurden in hochaufgelösten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitride für die $\{120\}$ -Orientierung Modulationen in den maximalen Intensitäten beobachtet, deren Ursache bis jetzt nicht bekannt ist. Außerdem weisen die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für die $\{120\}$ -Orientierung im Vergleich zu denen der $\{100\}$ -Orientierung einen deutlich stärker ausgeprägten Intensitätsuntergrund auf. Gleichzeitig sind die minimalen Abstände zwischen den einzelnen Atomsäulen in der $\{120\}$ -Orientierung im Vergleich zu denen der $\{100\}$ -Orientierung deutlich geringer. Im Kapitel 6.4.3 wurde gezeigt, daß durch die Verbesserung der Auflösung die einzelnen Atomsäulen einer Doppelatomsäule eines $InP/In_{0,5}Ga_{0,5}As$ -Heteroübergangs in der $\{110\}$ -Orientierung getrennt dargestellt werden können. Diese Auflösungsverbesserung führte gleichzeitig zu einer verbesserten Bestimmbarkeit der Materialzusammensetzung und zu einer deutlichen Reduzierung des Intensitätsuntergrundes. Daher werden im Folgenden mit den optimalen RTE-Parametern aus der Tabelle 6.1 in Kapitel 6.4.3 die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für GaN in der $\{120\}$ -Orientierung simuliert, anhand derer die folgenden Punkte untersucht werden:

- Ursache der Modulation der maximalen Intensitäten in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitride in der $\{120\}$ -Orientierung.
- Einfluß der Auflösungsverbesserung auf den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride.

Auch für diese Untersuchungen wird wieder das für diese Arbeit entwickelte und in Kapitel 4.2.2 vorgestellte Multislice-Simulationsmodell für die Wurtzitstruktur eingesetzt. Da die hier zu simulierenden Proben keine Heteroübergänge aufweisen, sind alle Ordnungszahl-Kontrastabbildungen rein elastisch simuliert worden.

Die in den Kapiteln 6.4.4 und 6.4.5 gezeigten Untersuchungsergebnisse weisen für die hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Gruppe III-Nitride in der $\{120\}$ -Orientierung Modulationen in den maximalen Intensitäten auf, die in den hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in der $\{100\}$ -Orientierung nicht zu beobachten sind. Daher wird im ersten Schritt dieser Untersuchung überprüft, ob diese Intensitätsmodulationen auch in der $\{100\}$ -Orientierung existieren. Abbildung 6.61 zeigt hierzu die simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN in der $\{100\}$ -Orientierung. Die Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN in der $\{100\}$ -Orientierung in Abbildung 6.61 zeigt keine Modulation in den maximalen Intensitäten. Da die rein optische Betrachtung nicht vollkommen

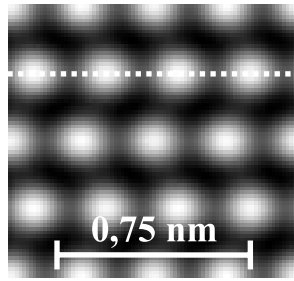


Abbildung 6.61: Simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN in der $\{100\}$ -Orientierung. Die gestrichelte Linie kennzeichnet die Position, an der ein Intensitätslinescan aufgenommen wurde.

objektiv ist, wurde an der mit einer gestrichelten Linie gekennzeichneten Position in der Ordnungszahl-Kontrastabbildung in Abbildung 6.61 ein Intensitätslinescan aufgenommen. Das Ergebnis dieses Intensitätslinescans ist in Abbildung 6.62 dargestellt. Der Intensitäts-

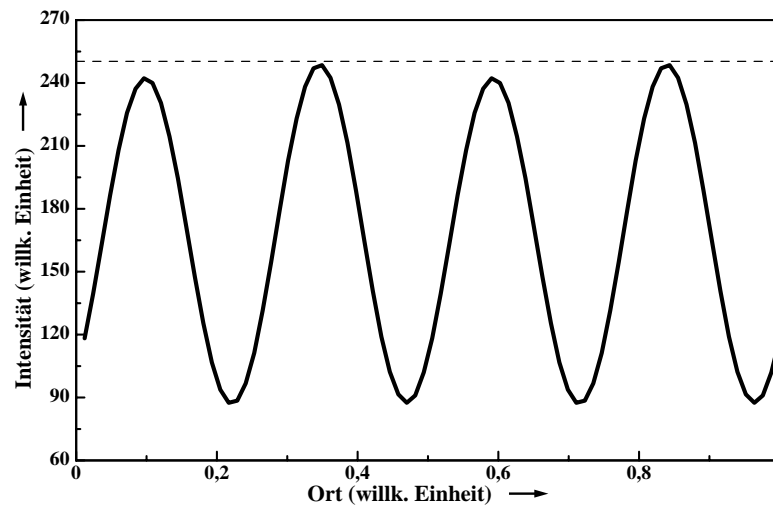


Abbildung 6.62: Intensitätslinescan über die mit einer gestrichelten Linie gekennzeichnete Position in Abbildung 6.61.

linescan in Abbildung 6.62 zeigt, daß auch die Ordnungszahl-Kontrastabbildung für GaN in der $\{100\}$ -Orientierung eine Modulation der maximalen Intensitäten aufweist. Diese ist im Vergleich zur $\{120\}$ -Orientierung aber deutlich schwächer ausgeprägt. Da die Abstände der Atomsäulen in der $\{100\}$ -Orientierung größer sind als in der $\{120\}$ -Orientierung, deutet dieses Ergebnis darauf hin, daß es sich bei den Intensitätsmodulationen um ein Resultat der auf $0,3\text{ nm}$ begrenzten Auflösung des verwendeten RTEEM handelt, für daß die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in den Kapiteln 6.4.4 und 6.4.5 simuliert wurden. In Kapitel 6.4.3 konnte schon gezeigt werden, daß die begrenzte Auflösung des verwendeten

RTEM zu einer Überlagerung der Intensitäten von Doppelatomsäulen führt, die mit steigender Auflösung verringert wird. Da die Abstände der einzelnen Atomsäulen für die Gruppe III-Nitride in der $\{120\}$ -Orientierung gegenüber der $\{100\}$ -Orientierung deutlich geringer sind, soll im Folgenden untersucht werden, ob die beobachteten Intensitätsmodulationen aus der Überlagerung der Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen resultieren. Sollte dieses der Fall sein, so werden die Intensitätsmodulationen mit zunehmender Auflösung reduziert. Die hierzu notwendigen Ordnungszahl-Kontrastsimulationen wurden für *GaN* in der $\{120\}$ -Orientierung mit den verbesserten RTEM-Daten aus der Tabelle 6.1 in Kapitel 6.4.3 durchgeführt. Das Ergebnis der Ordnungszahl-Kontrastsimulationen ist in der Abbildung 6.63 dargestellt. Die simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen in Ab-

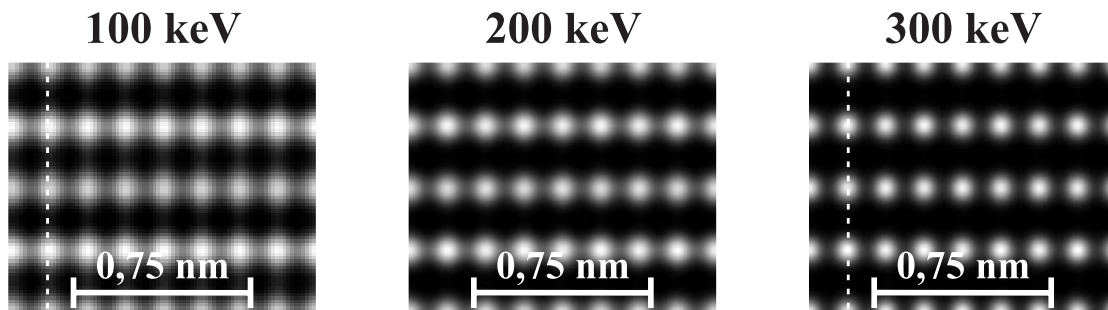


Abbildung 6.63: Mit den RTEM-Daten aus der Tabelle 6.1 in Kapitel 6.4.3 simulierte Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für *GaN* in der $\{120\}$ -Orientierung. Die gestrichelten Linien in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen markieren die Positionen, für die ein Intensitätslinescan aufgenommen wurden.

Abbildung 6.63 zeigen, daß mit zunehmender Beschleunigungsspannung und somit mit zunehmender Auflösung schon rein optisch die Stärke der Modulation der maximalen Intensitäten abnimmt. Um ein noch objektiveres Ergebnis zu erhalten, sind an den mit gestrichelten Linien gekennzeichneten Positionen in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen der Abbildung 6.63 für das 100 *keV*- und das 300 *keV*-RTEM Intensitätslinescans aufgenommen worden. Das Ergebnis dieser Intensitätslinescans ist in der Abbildung 6.64 dargestellt. Die Intensitätslinescans in Abbildung 6.64 zeigen eine deutliche Abnahme der Intensitätsmodulationen der maximalen Intensitäten und eine deutliche Reduzierung des Intensitätsuntergrundes mit zunehmender Auflösung. Dieses Ergebnis bestätigt die obige Vermutung, daß die starke Modulation der maximalen Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für die Gruppe III-Nitride auf den geringen Abstand der einzelnen Atomsäulen in der $\{120\}$ -Orientierung zurückzuführen ist.

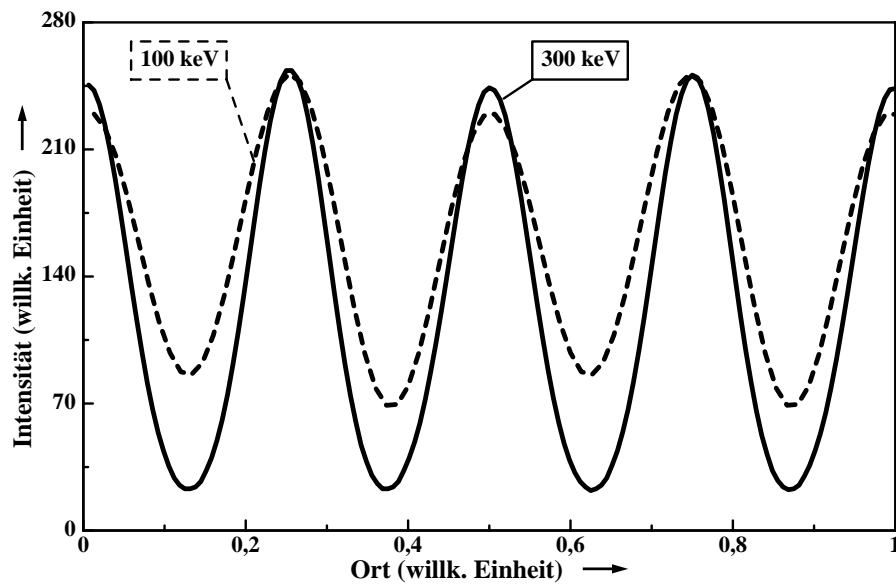


Abbildung 6.64: Intensitätscans für die Ordnungszahl-Kontrastabbildung des 100 *keV*- und des 300 *keV*-RTEM aus Abbildung 6.63. Diese sind in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen an den mit gestrichelten Linien markierten Positionen aufgenommen worden.

7. Ausblick

Die in dieser Arbeit gemachten Neuerungen, Neu- und Weiterentwicklungen sowie die damit erzielten Ergebnisse demonstrieren die vielseitige Einsetzbarkeit des Multislice-Ansatzes zur Analyse von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen. Dabei ist es völlig unerheblich, aus welchen Materialsystemen die zu untersuchenden Proben bestehen und welche Kristallstruktur sie haben.

Wie schon in dieser Arbeit gezeigt wurde, werden die in dieser Arbeit gemachten Neuerungen, Neu- und Weiterentwicklungen zukünftig auch zur quantitativen Analyse von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen, mittels des Vergleichs von simulierten und experimentellen, energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, eingesetzt werden können. Damit sind dann vielfältige, quantitative Informationen über die zu untersuchenden Proben erzielbar. Unter anderem sind dies:

- Der Aufbau von inneren Materialgrenzflächen,
- die Materialverspannung
- und der Grad der Entmischung von quaternären Materialschichten.

Anhand dieser Informationen kann in Zukunft auch der Herstellungsprozeß für Halbleiterheterostrukturen weiter optimiert werden. Dieses führt zu einer Verbesserung in der Herstellungsqualität, so daß z. B. die Lebensdauer von Halbleiterlasern vergrößert werden kann.

Anhand des quantitativen Vergleichs von mit dem Multislice-Ansatz simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern und Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, können zukünftig auch Fragestellungen genauer untersucht werden, die sich mit der Meßtechnik, der Physik der Elektronenbeugung und mit anderen, globaleren Effekten auseinandersetzen. Als Beispiel sei hier nur der in dieser Arbeit erstmalig nachgewiesene Reflexionseffekt für Elektronen an Heteroübergängen genannt. Andererseits können aber auch neue Erkenntnisse über schon bekannte Effekte gewonnen werden.

Das Ziel von elektronenmikroskopischen Untersuchungen an Halbleiterheterostrukturen ist, deren atomare Struktur quantitativ zu bestimmen, um sie anhand der so gewonnenen Informationen noch weiter optimieren zu können. Die Identifizierung der genauen atomaren Struktur ist aber nur mittels eines iterativen Prozesses möglich, bei dem die Simulationsergebnisse immer mehr an die experimentellen Elektronenbeugungsergebnisse angepaßt wer-

den [119]. Das Hauptproblem dieses iterativen Prozesses ist die sehr große Simulationsdauer, insbesondere im Fall des Multislice-Ansatzes. Diese führt zur Zeit zu einer zeitlich nicht mehr vertretbaren Gesamtsimulationsdauer, wenn die iterative Annäherung des Simulationsergebnisses an das experimentelle Ergebnis nur mittels des Multislice-Ansatzes erfolgt. Zukünftig wird dieses Problem durch die größere Leistungsfähigkeit der verwendeten Rechner relativiert werden. Dann steht mit dem Multislice-Ansatz eine universell einsetzbare Simulationstechnik zur Verfügung, mit der sowohl materialspezifische als auch meßtechnische Problemstellungen gelöst werden können.

8. Zusammenfassung

Ein Ziel dieser Arbeit war es, den im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik verwendeten Multislice-Ansatz dahingehend zu erweitern, daß auch inelastische Effekte mit diesem simuliert werden können. Erst die Berücksichtigung dieser Effekte ermöglicht eine vollständig quantitative Interpretation von RTEM-Meßergebnissen. Basierend auf dem so erweiterten Multislice-Ansatz, sollten dann spezielle Fragestellungen im Bezug auf die Charakterisierung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen geklärt werden. Die hierzu erforderlichen Simulationen sollten gleichzeitig das breite Einsatzspektrum und die Leistungsfähigkeit des Multislice-Ansatzes demonstrieren.

Für die geschilderten Ziele in dieser Arbeit war es unerlässlich, die verschiedensten Grundlagen aufzuarbeiten. Dieses betraf

- die physikalischen Grundlagen der Elektronenbeugung,
- die meßtechnischen Grundlagen,
- die materialspezifischen Grundlagen der III-V- und II-VI-Halbleiter sowie der Gruppe III-Nitride
- und die Grundlagen der relevanten Elektronenbeugungssimulationsansätze.

Es ist insbesondere der Multislice-Ansatz, aber auch der Blochwellen- und der kinematische Elektronenbeugungssimulationsansatz erklärt worden. Zusätzlich wurde der für diese Arbeit wichtige Ansatz zur Simulation der thermisch diffusen Streuung vorgestellt. Für die zu untersuchenden Materialsysteme sind die für diese Arbeit relevanten Effekte, wie die Entmischung von quaternären Halbleitern, genauer erläutert worden.

Basierend auf diesen Angaben sind der Leistungsstand und die Defizite in der Charakterisierung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen ausgearbeitet worden. Anhand der Defizite sind die notwendigen Neuerungen, Neu- und Weiterentwicklungen identifiziert worden. Dieses sind:

- Parallelisierung des Multislice-Ansatzes und Vergrößerung des Simulationsbereichs.
- Entwicklung eines Ansatzes, mit dem auch die thermisch diffuse Streuung für Materialgrenzflächen schnell, mit dem Multislice-Ansatz, simuliert werden kann.

- Entwicklung eines Multislice-Simulationsmodells für die Wurtzitstruktur.
- Entwicklung eines Multislice-Simulationsmodells für den Effekt des Static Atomic Displacements.
- Entwicklung eines Multislice-Simulationsmodells für den Effekt der Oberflächenrelaxation.
- Entwicklung eines Grenzflächenmodells für die Multislice-Simulation von nicht abrupten Materialgrenzflächen, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung.
- Entwicklung von weiteren Analyseprogrammen zur Interpretation von Elektronenbeugungsmustern.

Für die beschriebenen Neuerungen, Neu- und Weiterentwicklungen ist dann zum Teil die Leistungsfähigkeit genauer untersucht worden. Die Vergrößerung des Simulationsbereichs führte zu einer verbesserten Auflösung, aber auch zu einem signifikanten Anstieg in der Gesamtsimulationsdauer. Die quantitative Elektronenbeugungssimulation mit einer höheren Auflösung ist daher nur mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Ansatz zur Simulationsoptimierung möglich. Die anschließenden Untersuchungsergebnisse wiesen den starken Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf die Elektronenbeugung nach. Der Vergleich zwischen, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmustern, zeigte für Materialien mit der Zinkblende-Kristallstruktur eine gute Übereinstimmung. Auch für das in dieser Arbeit entwickelte Simulationsmodell für die Wurtzitstruktur sind, unter Berücksichtigung der thermisch diffusen Streuung, erste Elektronenbeugungssimulationen durchgeführt worden. Auch hier zeigte sich der starke Einfluß der thermisch diffusen Streuung und die gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Es sind auch mit dem in dieser Arbeit entwickelten Ansatz zur Simulation des Static Atomic Displacements erste Elektronenbeugungsmuster simuliert worden. Diese wurden mit zunehmender Displacementamplitude immer diffuser. Abschließend ist die Leistungsfähigkeit, von den im Rahmen dieser Arbeit implementierten Analysemethoden, untersucht worden. Es zeigte sich, daß sie sehr gut zur Interpretation von Elektronenbeugungsmustern geeignet sind.

Die Neuerungen, Neu- und Weiterentwicklungen sind dann zur Charakterisierung von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen eingesetzt worden.

Im ersten Schritt sind die Intensitätsasymmetrien, die in Elektronenbeugungsmustern von Materialgrenzflächen in Halbleiterheterostrukturen beobachtet wurden, genauer untersucht worden. Bis zu Beginn dieser Arbeit war deren Ursache vollkommen unklar. Es konnte simulativ und meßtechnisch belegt werden, daß die Intensitätsasymmetrien weder von einem

Meßfehler, einem Simulationsfehler, einem Artefakt aufgrund der Meßanordnung noch von der Brechung der Elektronen an den Materialübergängen verursacht werden. Anhand von Elektronenbeugungssimulationen für *InGaAs/GaAs*- und *AlGaAs/GaAs*-Heteroübergänge ist bewiesen worden, daß die Intensitätsasymmetrien aus der Reflexion von Elektronen an den Materialübergängen resultieren. Damit ist in dieser Arbeit weltweit erstmalig die Existenz des Reflexionseffektes für Elektronen an Materialübergängen nachgewiesen worden. Mit dieser Erkenntnis ist dann untersucht worden, inwieweit sich dieser Effekt zur Charakterisierung von Materialübergängen in Halbleiterheterostrukturen eignet. Es zeigte sich, daß hiermit sowohl die Form, als auch die Position des Materialübergangs nachweisbar ist. Darüber hinaus war damit auch der Durchmesser des Primärelektronenstrahls bestimmbar.

Vielfach wird zur Verspannungsbestimmung der kinematische Simulationsansatz eingesetzt. Anhand des Blochwellenansatzes und dem neuartigen Materialsystem der Gruppe III-Nitride wurde untersucht, wie sich die Verspannung auf dynamische Elektronenbeugungssimulationen auswirkt. Diese Untersuchung zeigte, daß sich in Abhängigkeit von der Verspannung, die HOLZ-Linien verschieben und sich die Intensitätsverteilung in den Elektronenbeugungsmustern ändert. Für Materialübergänge sind mittels des Blochwellenansatzes nur, wenn überhaupt, Elektronenbeugungssimulationen unter großem Aufwand möglich. Deshalb ist für einen Materialübergang der Gruppe III-Nitride untersucht worden, inwieweit sich der Multislice-Ansatz zur Verspannungsbestimmung einsetzen läßt. Die Simulationsergebnisse zeigten einen deutlichen Einfluß der Materialverspannung. Es existierte auch eine gute Übereinstimmung zwischen den HOLZ-Linien der simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmuster. Aufgrund der fehlenden Übereinstimmung der Materialdicken zwischen Simulation und Experiment stimmten die Intensitätsverteilungen in den Elektronenbeugungsmustern nicht überein. Dieses ist auch der Hauptnachteil des Multislice-Ansatzes, da für die Bestimmung der Materialdicke mittels dieses Ansatzes ein hoher Rechenaufwand notwendig ist. Deshalb ist für die jeweilige Problemstellung abzuwägen, inwieweit dieser erhöhte Rechenaufwand sinnvoll ist. Abschließend wurde die Einsetzbarkeit des Multislice-Ansatzes zur Verspannungsbestimmung in quaternären Halbleitermaterialien untersucht. Auch dafür existierte eine gute Übereinstimmung zwischen den HOLZ-Linienmustern der simulierten und experimentellen Elektronenbeugungsmuster. Da die simulierten Elektronenbeugungsmuster energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern entsprachen, und die experimentellen nicht, war ein direkter Intensitätsvergleich für die Elektronenbeugungsmuster nicht möglich.

Vielfach entmischen ternäre und quaternäre Halbleitermaterialien, was einen nachteiligen Einfluß auf die Qualität von damit realisierten Bauelementen hat. Ein Effekt, der durch die Entmischung gefördert wird, ist der Effekt des Static Atomic Displacements. Um diesen Effekt mit dem Multislice-Ansatz genauer zu untersuchen und um auch quantitative Aussagen

machen zu können, ist in dieser Arbeit ein Simulationsmodell für diesen Effekt entwickelt worden. Die damit erzielten Simulationsergebnisse wiesen nach, daß die Displacementamplitude im Rahmen von den in der Literatur veröffentlichten Werten liegt. Eine genauere Bestimmung der Displacementamplitude war aber nicht möglich, da die Simulationsergebnisse energiegefilterten Elektronenbeugungsmustern entsprechen und die Meßergebnisse nicht. Außerdem ist für entmischte Proben die Ursache für die Aufspaltung der HOLZ-Linien in deren Elektronenbeugungsmustern und die Ursache für die Kontrastmodulation in deren Ordnungszahl-Kontrastabbildungen, die als Materialvariation interpretiert werden könnte, genauer untersucht worden. Dafür ist das in dieser Arbeit entwickelte Oberflächenrelaxationsmodell für die Multislice-Simulationen eingesetzt worden. Die Untersuchungsergebnisse zeigten:

- Die Aufspaltung der HOLZ-Linien wird mit zunehmender Oberflächenrelaxation immer ausgeprägter.
- Mit zunehmender Oberflächenrelaxation ändert sich die Stärke des Ordnungszahl-Kontrastsignals. Sie nimmt zuerst zu und sinkt bei weiterer Zunahme wieder ab.
- Das Ordnungszahl-Kontrastsignal der Probe mit den Oberflächenrelaxationen war generell größer als das der Probe ohne Oberflächenrelaxationen.
- Die Variation des Ordnungszahl-Kontrastsignals, in Abhängigkeit von der Oberflächenrelaxation, kann als Materialvariation fehlinterpretiert werden.

Damit ist erstmalig gezeigt worden, daß sowohl die Aufspaltung der HOLZ-Linien in Elektronenbeugungsmustern als auch die Kontrastmodulation in Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von entmischten Proben, von dem Oberflächenrelaxationseffekt verursacht werden.

Die obigen Untersuchungsergebnisse behandelten die Untersuchung von Materialien und Grenzflächen von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen mittels der Interpretation von Elektronenbeugungsmustern. Im Folgenden werden die in dieser Arbeit anhand der Interpretation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen erzielten Untersuchungsergebnisse für mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen zusammengefaßt.

Als erstes wurde hierzu ein Materialübergang mit Hilfe des Vergleichs von simulierten und experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen charakterisiert. Die experimentelle Ordnungszahl-Kontrastabbildung stammt von einem *InGaAs/InP*-Heteroübergang, für den die genaue Struktur der Grenzfläche und des Kristallgitters nicht bekannt war. Diese wurde mit zwei simulierten Ordnungszahl-Kontrastabbildungen verglichen, deren Kristallgitteraufbau sich nur durch die vertauschten Positionen der Gruppe III- und Gruppe V-Atome

unterschied. Mittels dieses Vergleichs konnte der genaue Aufbau des Materialübergangs und des Kristallgitters ermittelt werden.

Anhand des obigen *InGaAs/InP*-Heteroübergangs wurde auch der Einfluß der thermisch diffusen Streuung auf Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Materialübergängen genauer untersucht. Das Ergebnis dieser Untersuchungen war, daß im Gegensatz zu asymmetriefreien Proben, für quantitative Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Materialübergängen, die thermisch diffuse Streuung nicht vernachlässigt werden darf.

Weiterhin ist anhand des *InGaAs/InP*-Heteroübergangs untersucht worden, inwieweit sich die Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter auf Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Materialübergängen auswirkt. Die Untersuchungsergebnisse zeigten, daß sich durch deren Optimierung die erzielbare Ortsauflösung stark verbessert. Hierdurch wurden einzelne Atomsäulen deutlich besser aufgelöst. Damit ermöglicht die Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter eine viel intuitivere Interpretation von experimentellen Ordnungszahl-Kontrastabbildungen. Hierdurch kann die Simulation von Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zu deren Interpretation zum Teil entfallen.

Die Gruppe III-Nitride sind ein neuartiges Materialsystem, für das bis zu Beginn dieser Arbeit, wenn überhaupt, nur wenige hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen existierten. Um zukünftig deren Interpretation zu vereinfachen, ist es sinnvoll, schon im Vorfeld viele Fragestellungen mittels der Simulation von hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zu klären.

Einige experimentelle, nicht hochaufgelöste, Ordnungszahl-Kontrastabbildungen zeigen für die Gruppe III-Nitride eine starke Abhängigkeit des Ordnungszahl-Kontrastes von dem Verkipfungswinkel des Primärelektronenstrahls. Daher wurde untersucht, inwieweit dieses auch für deren hochauflösenden Ordnungszahl-Kontrast zutrifft. Hierzu wurden hochauflösende Ordnungszahl-Kontrastabbildungen für einen Primärelektronenstrahl mit unterschiedlichen Verkipfungswinkeln und -richtungen simuliert. Die Untersuchungsergebnisse zeigten, daß sich die Intensitäten sowohl symmetrisch als auch asymmetrisch verändern können. Darüber hinaus wiesen die Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen eine leichte Modulation der Intensitätsmaxima auf, bei der jede zweite Gruppe III-Nitrid-Doppelschicht etwas heller dargestellt war.

Als nächstes wurde untersucht, inwieweit der Ordnungszahl-Kontrast der Gruppe III-Nitride von der Materialzusammensetzung und der Probenorientierung beeinflusst wird. Hierzu ist für zwei unterschiedliche Orientierungen jeweils die Materialzusammensetzung variiert worden. Die eine Orientierung wies eine deutlich stärkere Abhängigkeit des Ordnungszahl-Kontrastes von der Materialzusammensetzung auf, als die andere. Außerdem zeigten die-

se Untersuchungen, daß zwar ein Zusammenhang zwischen der Materialzusammensetzung und dem Ordnungszahl-Kontrast besteht, dieser aber nicht unbedingt eindeutig sein muß. Darüber hinaus wies die Orientierung mit der stärkeren Abhängigkeit vom Ordnungszahl-Kontrast eine Modulation in den maximalen Intensitäten, für jede zweite Gruppe III-Nitrid-Doppelschicht, auf.

Abschließend ist untersucht worden, wie sich die Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter auf die Ordnungszahl-Kontrastabbildungen von Gruppe III-Nitrid Materialien auswirkt. Die hierzu gemachten Untersuchungen zeigten, daß die Modulation in den maximalen Intensitäten für jede zweite Gruppe III-Nitrid-Doppelsicht für jede Orientierung existiert, aber unterschiedlich stark ausgeprägt war. Insbesondere wiesen die Orientierungen mit den kleinsten Abständen zwischen den Atomsäulen die stärkste Modulation in den maximalen Intensitäten auf. Deshalb wurde als nächstes untersucht, wie sich die Optimierung der elektronenmikroskopischen Parameter auf die Auflösung der Atomsäulen und die Modulation der maximalen Intensitäten auswirkt. Das Ergebnis dieser Untersuchungen war, daß mit zunehmender Auflösung die Atomsäulen immer besser dargestellt wurden. Gleichzeitig nahm die Modulation der maximalen Intensitäten in den Ordnungszahl-Kontrastabbildungen immer mehr ab. Damit ist sie nur das Resultat, der zu kleinen Abstände zwischen den Atomsäulen für die verwendete Auflösung.

Der Multislice-Ansatz hat sich in dieser Arbeit als universell einsetzbares Simulationswerkzeug für die Analyse von mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen erwiesen. Mit diesem wurden die vielfältigsten Fragestellungen für unterschiedlichste Materialsysteme und Kristallstrukturen aufgeklärt. Es war mit diesem Ansatz nicht nur möglich, für gegebene Fragestellungen anhand von vorliegenden, experimentellen Daten die Lösung abzuleiten, sondern es war mit diesem Ansatz auch möglich, im Vorfeld von Untersuchungen schon Aussagen über die zu erzielenden Meßergebnisse zu machen. In beiden Fällen machte es dabei keinen Unterschied, ob nun Elektronenbeugungsmuster oder Ordnungszahl-Kontrastabbildungen mit diesem Ansatz simuliert werden sollten.

Literaturverzeichnis

- [1] S. Namba, C. Hamaguchi und T. Ando (Herausgeber): *Science and Technology of Mesoscopic Structures*. Springer Verlag, 1992.
- [2] G. Bauer and F. Kuchar und H. Heinrich (Herausgeber): *Two-Dimensional Systems: Physics and New Devices*, Band 67 der Reihe *Solid-State Sciences*. Springer-Verlag, 1986.
- [3] Mark A. Reed und Wiley P. Kirk (Herausgeber): *Nanostructure physics and fabrication*. Academic Press Inc., 1990.
- [4] J.H. Edgar: *Prospects for device implementation of wide band gap semiconductors*. J. Mater. Res., 7(1):235–253, 1992.
- [5] Akihiko Ishibashi, Hidemi Takeishi, Nobuyuki Uemura, Masahiro Kume, Yasufumi Yabuuchi und Yuzaburoh Ban: *Metalorganic Vapor Phase Epitaxy Growth of a High-Quality GaN/InGaN Single Quantum Well Structure Using a Misoriented SiC Substrate*. Jpn. J. Appl. Phys., 36:1961–1965, 1997.
- [6] Takashi Matsuoka: *InGaAlN and II-VI Systems for Blue-Green Light-Emitting Devices*. Adv. Mater., 8(6):469–479, 1996.
- [7] Robert L. Gunshor und Arto V. Nurmikko: *Wide bandgap semiconductors and their application to light emitting devices*. Current Opinion in Solid State & Materials Science, 1:4–10, 1996.
- [8] Shuji Nakamura: *Present and future Aspects of blue light emitting devices*. Applied Surface Science, 113/114:689–697, 1997.
- [9] Shuji Nakamura: *First III-V-nitride-based violet laser diodes*. Journal of Crystal Growth, 170:11–15, 1997.
- [10] G.B. Stringfellow: *Miscibility Gaps in Quaternary III/V Alloys*. J. Crystal Growth, 58:194–202, 1982.
- [11] C. Mendorf, G. Brockt, Q. Liu, A. Behres, K. Heime, E. Kubalek, M. Heuken und H. Lakner: *Decomposition analysis of $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ heterostructures by STEM*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 251–256, 1997.

- [12] F. Glas, M.M.J. Treacy, M. Quillec und H. Launois: *Interface Spinodal Decomposition in LPE $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$ Matched to InP*. Journal de Physique, C5(12):11–16, 1982.
- [13] A.J. Bons, Y.S. Oei und F.W. Schapnik: *Periodic TEM contrast modulations in LPE-grown $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ matched to InP*. Band 100 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 161–166, 1989.
- [14] M.M.J. Treacy, J.M. Gibson und A. Howie: *On elastic relaxation and long wavelength microstructures in spinodally decomposed $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$ epitaxial layers*. Philosophical Magazine A, 51(3):389–417, 1985.
- [15] A.J. Bons, H. Gong und F.W. Schapink: *The interpretation of the FOLZ reflection fine structure in CBED patterns of GaInAsP*. Philosophical Magazine B, 63(3):1395–1408, 1991.
- [16] F. Glas: *The origin of the diffuse streaks in the diffraction pattern of ternary and quaternary III-V alloys*. Band 100 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 167–172, 1989.
- [17] U. Bangert, A.J. Harvey, V.A. Wilkinson, C. Dieker, J.M. Jowett, A.D. Smith, D. Perrin und C.J. Gibbins: *Evidence for Strain Relaxation Via Composition Fluctuations in Strained Quaternary/Quaternary and Quaternary/Ternary Multiple Quantum Wells*. J. Crystal Growth, 132:231, 1993.
- [18] S. Mahajan, B.V. Dutt, H. Temkin, R.J. Cavan und W.A. Bonner: *Spinodal decomposition in InGaAsP epitaxial Layers*. Journal of Crystal Growth, 68:589–595, 1984.
- [19] P. Henoc, A. Izrael, M. Quillec und H. Launois: *Composition Modulation in Liquid Phase Epitaxial InGaAsP Layers Lattice Matched to InP*. Appl. Phys. Lett., 40:963, 1982.
- [20] L.H. Kuo, L. Salamanca-Riba, B.J. Wu, M. DePuydt, G.M. Haugen, H. Cheng, S. Ghua und M.A. Haase: *Composition modulation in lattice matched $Zn_xMg_{1-x}S_ySe_{1-y}/ZnSe$ buffer layer/GaAs heterostructures*. Appl. Phys. Letter., 65(10):1230–1232, 1994.
- [21] H. Lakner, B. Bollig, P. Volmilch, Q. Liu, F. Scheffer, A. Lindner und W. Prost: *High Resolution STEM Z-contrast imaging and XRD: two new approaches for the characterization of GaInP/GaAs heterostructures*. Band 134 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 497–502, 1993.

- [22] H. Lakner, J. Helmrich und E. Kubalek: *Analysis of Ordering in GaInP by CBED*. Electron Microscopy, 1:884, 1994.
- [23] A. Dunbar, S. Hall, M. Halsall und U. Bangert: *Investigations of ordering in AlGaInP*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 257–260, 1997.
- [24] J.C. Jiang, A.K. Schaper, Z. Spika, W. Stolz, P. Werner und L. T oth: *Structural characteristics of highly ordered (GaIn)P*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 261–264, 1997.
- [25] T. Walther und D. Gerthsen: *Quantitative Characterization of AlAs/GaAs Interfaces by High-Resolution Transmission Electron Microscopy along the $\langle 100 \rangle$ and the $\langle 110 \rangle$ Projection*. Appl. Phys. A, A57:393–400, 1993.
- [26] D. Stenkamp und W. Jäger: *Compositional and structural characterization of Si_xGe_{1-x} alloys and heterostructures by high-resolution transmission electron microscopy*. Ultramicroscopy, 50:321–354, 1993.
- [27] Nigel D. Browning, Matthew F. Chisholm und Stephen J. Pennycook: *Atomic Resolution Chemical Analysis*. Adv. Mater., 6(4):328–331, 1994.
- [28] N.D. Browning und S.J. Pennycook: *Direct experimental determination of the atomic structure at internal interfaces*. J. Phys. D: Appl. Phys., 29:1779–1798, 1996.
- [29] Hubert Lakner, Bernd Bollig, Stefan Ungerechts und Erich Kubalek: *Characterization of III-V semiconductor interfaces by Z-contrast imaging, EELS and CBED*. J. Phys. D: Appl. Phys., 29:1767–1778, 1996.
- [30] S.J. Pennycook, M.F. Chisholm und P.D. Nellist: *Towards sub-Åresolution through incoherent imaging*. Band 3 der Reihe *Proceedings of Microscopy and Microanalysis '97*, Seiten 1167–1168. Microscopy Society of America, Microbeam Analysis Society, Histochemical Society, Springer, 1997.
- [31] Hubert Lakner, Stefan Ungerechts und Erich Kubalek: *CBED from Semiconductor heterostructures using (coherent) subnanometer electron probes*. Beitr. Elektronenmikroskop. Direktabb. Oberfl., 28:85–90, 1995.
- [32] J.C.H. Spence und J.M. Zuo: *ELECTRON MICRDIFFRACTION*. 1992.
- [33] P. Vermaut, P. Ruterana, G. Nouet, A. Salvador und H. Morkoç: *Polarity study by CBED of GaN-films grown on $(0001)_{Si}$ 6H – SiC*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 183–186, 1997.

- [34] W. Mader und A. Recnik: *A Simple Method for the Determination of Crystal Polarity*. ICEM 13-Paris, Seiten 933–934, 1994.
- [35] S. Ungerechts und H. Lakner: *Characterisation of C-doped GaAs by quantitative Convergent Beam Electron Diffraction (CBED)*. Proc. of XI European Congress on Microscopy (EUREM '96), Dublin, Irland (1996) (CD-ROM, Vol. 1, published by: ucd belfield, dublin 4, IRELAND), 1996.
- [36] S.J. Pennycook: *Z-CONTRAST STEM FOR MATERIALS SCIENCE*. Ultra-microscopy, 30:58–69, 1989.
- [37] S.J. Pennycook und L.A. Boatner: *Chemically sensitive structure-imaging with a scanning transmission electron microscope*. Nature, (336):565–576, 1988.
- [38] Hubert Lakner: *Ortsaufgelöste Charakterisierung von AlGaAs/InGaAs-Heteroschichten im Raster-Transmissionselektronenmikroskop (RTEM)*. Doktorarbeit, Universität Gesamthochschule Duisburg, 1993.
- [39] C. Mendorf, G. Brockt, A. Behres, C. von Eichel-Steiber, M. Heuken, K. Heime und H. Lakner: *Characterisation of InPSb layers on different substrates (InAs or GaSb)*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 299–302, 1997.
- [40] D.E. Jesson und S.J. Pennycook: *High Resolution Z-Contrast Imaging of Semiconductor Interfaces*. MRS Bulletin/March, 1991.
- [41] G. Brockt, C. Mendorf, A. Radefeld und H. Lakner: *STEM Characterisation of MOVPE-grown (In, Ga)_N quantum wells*. Band 157 der Reihe *Inst. Conf. Ser.*, Seiten 221–226, 1997.
- [42] H. Bethe: *Theorie der Beugung von Elektronen an Kristallen*. Annalen der Physik, Series 4, 1928(87):55–129, 1928.
- [43] J.M. Cowley und A. F. Moodie: *The Scattering of Electrons by Atoms and Crystals. I A New Theoretical Approach*. Acta. Cryst., A 24:390–397, 1957.
- [44] G. Radi: *Complex Lattice Potentials in Electron Diffraction Calculated for a Number of Crystals*. Acta Cryst., A26:41–56, 1970.
- [45] D.M. Bird: *Absorption in High-Energy Electron Diffraction from Non-Centrosymmetric Crystals*. Acta Cryst., A46:208–214, 1990.
- [46] D.M. Bird und Q.A. King: *Absorptive Form Factors for High-Energy Electron Diffraction*. Acta Cryst., A46:202–208, 1990.

- [47] A. Weikenmeier und H. Kohl: *Computation of Absorptive Form Factors for High-Energy Electron Diffraction*. Acta Cryst., A47:590–597, 1991.
- [48] Zhong Lin Wang: *Elastic and Inelastic Scattering in Electron Diffraction and Imaging*. Plenum Press, New York, 1995.
- [49] C. Dinges, A. Berger und H. Rose: *Simulation of TEM images considering phonon and electronic excitations*. Ultramicroscopy, 60:49–70, 1995.
- [50] Russel F. Loane, Peirong Xu und John Silcox: *Thermal Vibrations in Convergent-Beam Electron Diffraction*. Acta Cryst., A47:267–278, 1991.
- [51] Earl J. Kirkland: *A Set of Programs to Simulate Electron Images and Diffraction (CTEM, STEM, CBED) Using the Multislice Method*. School of Applied and Engineering Physics, Cornell University, 1995.
- [52] Peirong Xu, Russel F. Loane und John Silcox: *Energy-filtered convergent-beam electron diffraction in STEM*. Ultramicroscopy, 38:127–133, 1991.
- [53] Russel F. Loane: *Annular Dark Field Scanning Transmission Electron Microscopy of Crystals*. Dissertation, Cornell University, Ithaca, New York, USA, 1991.
- [54] Russel F. Loane, Peirong Xu und John Silcox: *Incoherent imaging of zone axis crystals with ADF STEM*. Ultramicroscopy, 40:121–138, 1992.
- [55] Sean Hillyard, Russel F. Loane und John Silcox: *Annular dark-field imaging: resolution and thickness effects*. Ultramicroscopy, 49:14–25, 1993.
- [56] B. Bollig, H.-G. Fischer und E. Kubalek: *Multislice Simulation of High-Resolution Scanning Transmission Electron Microscopy Z-Contrast Images of Semiconductor Heterointerfaces*. Scanning, 18:291–300, 1996.
- [57] S. Ungerechts: *Charakterisierung innerer Grenzflächen von Halbleiter-Heteroschichten mittels CBED (Convergent Beam Electron Diffraction)*. Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität Gesamthochschule Duisburg, 1995.
- [58] Bernhard Bollig: *Raster-Transmissionselektronenmikroskopie an $ZnS(x)Se(1-x)/ZnSe$ -Heteroschichten*. Doktorarbeit, Gerhard-Mercator-Universität - Gesamthochschule Duisburg, 1995.
- [59] S. Ungerechts und H. Lakner: *Experimental and simulated CBED patterns from semiconductor heterointerfaces*. Proc. of XI European Congress on Microscopy (EUREM

- '96), Dublin, Irland (1996) (CD-ROM, Vol. 1, published by: ucd belfield, dublin 4, IRELAND), 1996.
- [60] P. A. Doyle und P. S. Turner: *Relativistic Hartree-Fock X-Ray and Electron Scattering Factors*. Acta Cryst., 1968(A 24):390–397.
- [61] R.F. Egerton: *Electron Energy Loss Spectroscopy in the Electron Microscope*. Plenum Press, New York, 1986.
- [62] A. G. Fox, M. A. O'Keefe und M. A. Tabbernor: *Relativistic Hartree-Fock X-ray and Electron Atomic Scattering Factors at High Angles*. Acta Cryst., A45:786–793, 1989.
- [63] L.-M. Peng und J. M. Cowley: *Errors Arising from Numerical Use of the Mott Formula in Electron Image Simulation*. Acta Cryst., A44:1–5, 1988.
- [64] International Union of Crystallography (Herausgeber): *International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. IV, Revised and Supplemetary Tables*. The Kynoch Press, 1976.
- [65] G. Möbius, T. Gemming, W. Nüchter, M. Exner, P. Gumbsch, A. Weickenmeier, M. Wilson und M. Rühle: *ARE COMMON ATOM FORM FACTORS IN HREM-SIMULATIONS ACCURATE ENOUGH FOR QUANTITATIVE IMAGE MATCHING?* Band 3 der Reihe *Proceedings of Microscopy and Microanalysis '97*, Seiten 1159–1160. Microscopy Society of America, Microbeam Analysis Society, Histochemical Society, Springer, 1997.
- [66] Ekbert Hering, Rolf Martin und Martin Stoher: *Physik für Ingenieure*. VDI-Verlag, 1988.
- [67] C.R. Hall und P.B. Hirsch: *Effect of thermal diffuse scattering on propagation of high energy electrons through crystals*. Band A286 der Reihe *Proc. R. Soc. London*, Seiten 158–177, 1965.
- [68] S.J. Pennycook und D.E. Jesson: *High resolution Z-contrast imaging of crystals*. Ultramicroscopy, 37:14–38, 1991.
- [69] S.J. Pennycook und D.E. Jesson: *High resolution Z-contrast imaging of crystals*. Ultramicroscopy, 37:14–38, 1991.
- [70] P. Hirsch, A. Howie, R. Nicholson, D. W. Pashley und M. J. Whelan: *Electron microscopy of thin crystals*. R. E. Krieger Publishing Co. Inc., 1977.
- [71] L. Reimer: *Transmission Electron Microscopy*. Springer Verlag, 1984.

- [72] L. Reimer: *Scanning Electron Microscopy*. Springer Verlag, 1985.
- [73] C. J. Humphreys: *The scattering of fast electrons by crystals*. Rep. Prog. Phys., 42:1825–1887, 1979.
- [74] S. Teukolsky W.H. Press, B. Flannery und W. Vetterling: *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, New York, 1986.
- [75] A. Delong: *Electron Sources for Electron Microscopes*. European Microsc. Analysis, 26:9–11, 1993.
- [76] M.M.J. Treacy, A. Howie und C.J. Wilson: *Z-contrast of platinum and palladium catalysts*. Phil. Mag., 38:569–585, 1978.
- [77] A.M. Donald und C.J. Craven: *A study of grain boundary segregation in Cu-Bi alloys using STEM*. Phil Mag., A39:1–11, 1979.
- [78] J.C.H. Spence und J.M. Cowley: *Lattice imaging in STEM*. Optik, 50(2):129–142, 1978.
- [79] Z.L. Wang und J.M. Cowley: *Dynamic Theory of High-Angle Annular-Dark-Field STEM Lattice Images for a Ge/Si Interface*. Ultramicroscopy, 32:275–289, 1990.
- [80] J.H.C. Spence und J.M. Zuo: *Quantitative Strain and Structure Factor Phase Measurement by CBED*. Ultramicroscopy, 41:211, 1992.
- [81] John. M. Cowley: *Diffraction Physics*. North Holland, 1990.
- [82] P.A. Stadelmann: *EMS - A Software Package for Electron Diffraction Analysis and HREM Image Simulation in Materials Science*. Ultramicroscopy, 21:131–146, 1987.
- [83] Earl J. Kirkland, Russell F. Loane und John Silcox: *Simulation of Annular Dark Field STEM Images Using a Modified Multislice Method*. Ultramicroscopy, 23:77–96, 1987.
- [84] Z.L. Wang: *Dynamical Simulations of Energy-Filtered Inelastic Electron Diffraction Patterns*. Acta. Cryts., A48:674–688, 1992.
- [85] T. S. Moss und Sympor P. Keller: *Handbook on Semiconductors*. 1980.
- [86] Bernhard Opitz: *Wannier-Stark-Effekt in verspannten GaInAs(P)-Übergittern für optoelektronische Modulatoren*. Doktorarbeit, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1996.

- [87] S. Mahajan, M.A. Shahid und D.E. Laughlin: *Current status of atomic ordering and phase separation in quaternary III-V compound semiconductors*. Band 100 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 143–153, 1989.
- [88] F. Glas: *Effect on Static Atomic Displacement on the HREM Images of Disordered III-V Alloys*. *Electron Microscopy*, 1:363, 1994.
- [89] Chimin Hu, N.T. Nuhfer, S. Mahjan, J.W. Yang, C.J. Sun, M. Asif Khan und H. Temkin: *Growth of GaN Layers on nitrated GaAs/Si and GaAs/SIMOX composite Substrates by OMVPE*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 195–198, 1997.
- [90] A. Tampert, O. Brandt, H. Yang, B. Yang und K.H. Ploog: *Heteroepitaxy of Cubic GaN: influence of interface structure*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 205–208, 1997.
- [91] S. Strite und H. Morkoç: *GaN, AlN and InN: A review*. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 10(4):1237–1266, 1992.
- [92] E.V. Kalshinkov und V.I. Nikolaev: *Temperature-Composition Dependence of the Bandgap and Possible Non-complanar Structures in GaN – AlN, GaN – InN and InN – AlN Mixed Crystals*. *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research*, 2(3), 1997.
- [93] Y. Xin, P.D. Brown, T.S. Cheng, C.T. Foxon und C.J. Humphreys: *Domain Boundaries in epitaxial GaN grown on $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ B GaAs and GaP molecular beam epitaxy*. Band 157 der Reihe *Inst. Conf. Ser.*, Seiten 95–98, 1997.
- [94] D. Cherns, W.T. Young, M.A. Saunders, F.A. Ponce und S. Nakamura: *The analysis of nanopipes and inversion domains in GaN thin films*. Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 187–190, 1997.
- [95] F. Scholz, V. Härle, F. Steuber, H. Bolay, A. Dörnen, V. Syganow und A. Hangleiter: *Low pressure MOVPE of GaN and GaInN/GaN heterostructures*. *Journal of Crystal Growth*, 170:321–324, 1997.
- [96] J. L. Rouviere, M. Arley, R. Niebuhr, K. H. Bachem und Oliver Briot: *Correlation between surface morphologies and crystallographic structures of GaN layers grown by MOCVD on sapphire*. *Internet Journal of Nitride Semiconductor Research*, 1(33), 1996.

- [97] D.F. Lynch und M. O'Keefe: *n-Beam Lattice Images. II.* Acta Cryst., A28:536–548, 1972.
- [98] O'Keefe: *n-Beam Lattice Images. IV. Computed Two-Dimensional Images.* Acta Cryst., A29:389–401, 1973.
- [99] D.M. Bird und M. Saunders: *Sensitivity and accuracy of CBED pattern Matching.* Ultramicroscopy, 45:241–251, 1992.
- [100] J.M. Zuo: *Automated Lattice Parameter Measurements from HOLZ Lines and their Use for the Measurement of Oxygen Content in $YBa_2Cu_3O_7$ from Nanometer-Sized Region.* Ultramicroscopy, 41:211–223, 1992.
- [101] C. Deinninger, G. Necker und J. Mayer: *Determination of structure factors, lattice strains and accelerating voltage by energy-filtered convergent beam electron diffraction.* Ultramicroscopy, 54:15–30, 1994.
- [102] Sean Hillyard und John Silcox: *Detector geometry, thermal diffuse scattering and strain effects in ADF STEM imaging.* Ultramicroscopy, 58:6–17, 1995.
- [103] Ian Foster: *Designing and Building Parallel Programs.* 1995.
- [104] *Int. Tables for X-Ray Cryst.*, Band III. 1968.
- [105] V.F. Sears und S.A. Shelly: *Debye Waller Factor for Elemental Crystals.* Acta Cryst., A47:441–446, 1991.
- [106] Frank Glas: *Correlated static atomic displacements and transmission-electron-microscopy contrast in compositionally homogenous disordered alloys.* Physical Review B, 51(2):825–839, 1995.
- [107] F. Glas: *Transmission electron microscopy contrast from static atomic displacements in homogeneous random alloys.* Philosophical Magazine Letters, 69(5):269–277, 1994.
- [108] A. Radefeld und H. Lakner: *Electron diffraction from cross-sectional semiconductor heterointerfaces using subnanometer electron probes.* Band 157 der Reihe *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Seiten 71–74, 1997.
- [109] D.M. Bird und A.G. Wright: *Phase Dependence of Kikuchi Patterns. I. Theory.* Acta Cryst., A45:104–109, 1989.
- [110] J. Taftø und J. Gjønnnes: *Reflection and Refraction of Fast Electrons at Solid/Solid Interfaces.* Acta Cryst., A44:833–837, 1988.

- [111] M. Gajdardziska-Josifovska und J.M. Cowley: *A Novel Technique for Studying Interface Abruptness in a STEM*. Proceedings of the 47th Annual Meeting of the Electron Microscopy Society of America, 1989.
- [112] M. Gajdardziska-Josifovska, J.K. Weiss und J.M. Cowley: *Studies of Mo/Si multilayers with coherent electron beams*. Ultramicroscopy, 58:65–78, 1995.
- [113] Marija Gajdardziska-Josifovska: *Electron microscopy studies of solid surfaces and interfaces*. Doktorarbeit, Arizona State University, 1991.
- [114] F. Glas, C. Gors und P. Henoc: *Diffuse scattering, size effect and alloy disorder in ternary and quaternary III-V compounds*. Philosophical Magazine B, 62(4):373–394, 1990.
- [115] International Union of Crystallography (Herausgeber): *International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. III*. The Kynoch Press, 1969.
- [116] P.D. Nellist und S.J. Pennycook: *Quantitative information from image processing in ADF STEM*. Band 3 der Reihe *Proceedings of Microscopy and Microanalysis '97*, Seiten 1149–1150. Microscopy Society of America, Microbeam Analysis Society, Histochemical Society, Springer, 1997.
- [117] J.-L. Rouviere, M. Arlery und A. Bourret: *Structural characterisation of GaN layers: influence of polarity and strain release*. Band 157 der Reihe *Inst. Conf. Ser.*, Seiten 173–182, 1997.
- [118] V. Potin, P. Ruterana, G. Nouet, A. Salvador und H. Morkoç: *HREM study of the $\{10\bar{1}0\}$ inversion domains in GaN grown on (0001) sapphire substrates*. Band 157 der Reihe *Inst. Conf. Ser.*, Seiten 191–194, 1997.
- [119] D. van Dyck: *What is the future for image simulations?* Band 3 der Reihe *Proceedings of Microscopy and Microanalysis '97*, Seiten 1153–1154. Microscopy Society of America, Microbeam Analysis Society, Histochemical Society, Springer, 1997.

Danksagung

Herrn Prof. Dr.-Ing. E. Kubalek möchte ich für die Möglichkeit danken, in seinem Fachgebiet diese Arbeit anfertigen zu können. Zusätzlich möchte ich mich für sein Interesse an dem Vorankommen dieser Arbeit und für seine Bemühungen bei der Erstellung dieser Arbeit bedanken.

Herrn Prof. Dr. rer. nat. K. Heime möchte ich herzlich für die Übernahme des Korreferats danken.

Insbesondere möchte ich Herrn Dr.-Ing. H. Lakner für seine Anregungen, die zahlreichen Diskussionen und die kollegiale Zusammenarbeit bei der Entstehung dieser Arbeit danken.

Frau Dr.-Ing. Q. Liu, Frau Dipl.-Ing. C. Mendorf, Herrn Dipl.-Phys. G. Brockt, Herrn Dipl.-Phys. F. Schulze-Kraasch und Herrn Dipl.-Ing. V. Wittpahl möchte ich für die kollegiale Zusammenarbeit und die stetige Diskussionsbereitschaft danken.

Insgesamt möchte ich mich bei allen Mitarbeitern des Fachgebietes "Werkstoffe der Elektrotechnik" bedanken, da jeder auf seine Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. In diesem Zusammenhang bedanke ich mich auch für die zur Verfügung gestellten Meßergebnisse.

Herrn Prof. Dr. J. Silcox und Herrn Dr. E. Kirkland von der Cornell University in Ithaca, New York, möchte ich für die Bereitstellung der Simulationsprogramme danken.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft möchte ich für die finanzielle Unterstützung danken.

Vor allem möchte ich mich auch bei meiner Frau Dana bedanken, die mit ihrer großen Geduld und Rücksichtnahme sowie durch ihre Unterstützung zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat.

Abschließend möchte ich mich auch bei meinen Eltern und Schwiegereltern bedanken, die mich während dieser Zeit soweit als möglich unterstützt haben.

Lebenslauf

Geburtstag	13. 03. 1966
Geburtsort	Rhede
Familienstand	verheiratet
Schule	1972-1976 Grundschulbesuch 1976-1982 Realschulbesuch Abschluß: Fachoberschulreife
Facharbeiterausbildung	1982-1986 Abschluß: Informationselektroniker
Schule	1986-1987 Fachoberschule für Technik Abschluß: Fachhochschulreife
Wehrdienst	1987-1988 Dienstgrad Obergefreiter
Studium	1988-1994 Gerhard-Mercator-Universität - GH Duisburg Studienrichtung: Elektrotechnik/Informationstechnik Vertiefungsrichtung: Mikroelektronik Abschluß: Dipl.-Ing. (DII)
Studienarbeit	1992-1993 Thema: Analyse von Koplanarleitungen auf anisotropen Substraten unter Verwendung eines zu modifizierenden Programmes
Diplomarbeit	1994 Thema: Simulation von <i>InAlAs/InGaAs</i> -Heterostrukturfeld-effekttransistoren unter Berücksichtigung des Stoßionisations-effektes
Beruflicher Werdegang	1996-1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fachgebiet Werkstoffe der Elektrotechnik an der Gerhard-Mercator-Universität – Gesamthochschule Duisburg seit 1998 Systemanalytiker bei der ALLDATA Service GmbH Düsseldorf