4 Verbesserung der Hochauflösungs-Ordnungszahl-kontrastabbildung durch Anwendung des Maximum-Entropie-Verfahrens (MEV)

In diesem Kapitel wird zunächst kurz auf die angewandte Software eingegangen. Im Anschluss erfolgt die systematische Untersuchung des Einflusses der Eingabeparameter auf die Berechnungsergebnisse, um das Potential des MEV auszuloten. Abschließend wird die Leistungsfähigkeit des MEV anhand ausgewählter Beispiele demonstriert.
Die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildungen des II-VI-Halbleitermaterialsystems wurden von Herrn Dr.-Ing. Bernhard Bollig, einem früheren Mitarbeiter des Fachgebiets, aufgenommen.

4.1 Kritische Prüfung des MEV

Im Rahmen der Arbeit wurde zur Auswertung von Hochauflösungs-Ordnungszahl-kontrastabbildungen die kommerziell erhältliche Software ”MAXENT” von der Firma VG Scientific genutzt.
Das MEV rekonstruiert ein optimales Bild aus einem mit Fehlern (z.B. Abbildungsfehler, Bildrauschen) behafteten Datensatz. Das Programm benötigt dazu den experimentell aufgenommenen, originalen Bilddatensatz und eine Beschreibung der Störung des Bildes. Diese Störungen sind in der Elektronenmikroskopie auf instrumentelles Rauschen und auf die exakte Form der Elektronensonde zurückzuführen. Das Intensitätsprofil der Elektronensonde (PSF) lässt sich im Programm durch eine Gaußfunktion, eine Lorentzfunktion oder eine komplexe mathematische Funktion darstellen. Bei der Gauß- und bei der Lorentzfunktion wird das Intensitätsprofil allein durch die Eingabe der Halbwertsbreite (engl.: Full Width at Half Maximum, FWHM) definiert. Die Bestimmung einer theoretischen Elektronensonde erfolgt nach einem mathematischen Ausdruck, der z.B. in [69] zu finden ist. Als Eingabeparameter sind hierbei die Wellenlänge, der Öffnungswinkel, der Defokus der Elektronensonde und die sphärische Aberrationskonstante erforderlich. Außerdem werden zur Skalierung des Sondenprofils sein maximaler Radius sowie die entsprechende Angabe der Bildpunkte pro Nanometer benötigt.
Die Software berechnet aus den Eingabedaten, d.h. den Hochauflösungs-Ordnungszahl-kontrastabbildungen, die größte Wahrscheinlichkeit der tatsächlichen Atompositionen und

ihre Streuintensität. Beim rekonstruierten Datensatz sind die Sondeneigenschaften und das Rauschen weitgehend entfernt. Die Berechnung dauert je nach Größe des zu bearbeitenden Bildes und der Anzahl der benötigten Iterationsschritte mit heutiger Rechenleistung handelsüblicher Computer mehrere Stunden. Optional kann ein Bild erzeugt werden, welches nur vom Rauschen befreit ist (die sogenannte Mockdatei). Dazu wird das rekonstruierte Bild mit der verwendeten PSF gefaltet [70], [71].

Zur systematischen Ermittlung der optimalen Eingabeparameter bezogen auf die Betriebsparameter des genutzten RTEM wurde zunächst ein experimentelles Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastbild als Testbild ausgewählt, welches folgende Eigenschaften besitzt:

- sehr gute Bildqualität
- ein Materialsystem (keine Grenzfläche)
- perfekte kristalline Struktur

Durch diese Auswahl soll sichergestellt werden, dass möglichst alle zusätzlichen Störeinflüsse außer dem experimentellen Rauschen bei der Bestimmung der optimalen PSF eliminiert sind. Bild 4.1 zeigt das ausgewählte Testbild, eine Hochauflösungs-Ordnungszahl-kontrastabbildung einer $ZnS_{0,4}Se_{0,6}$-Schicht.

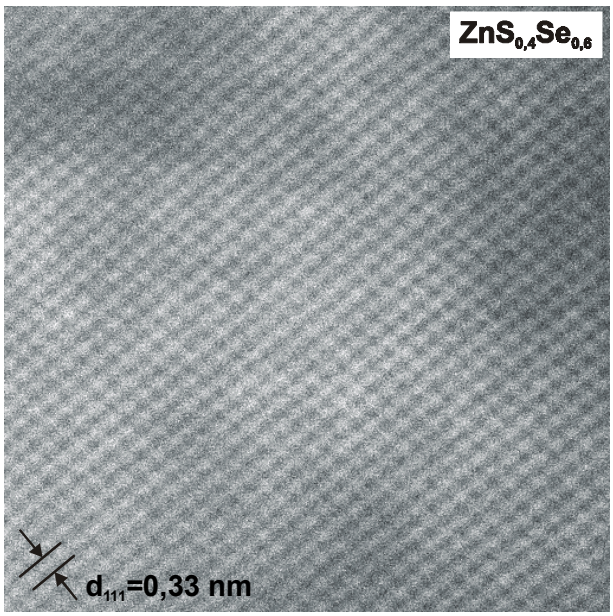
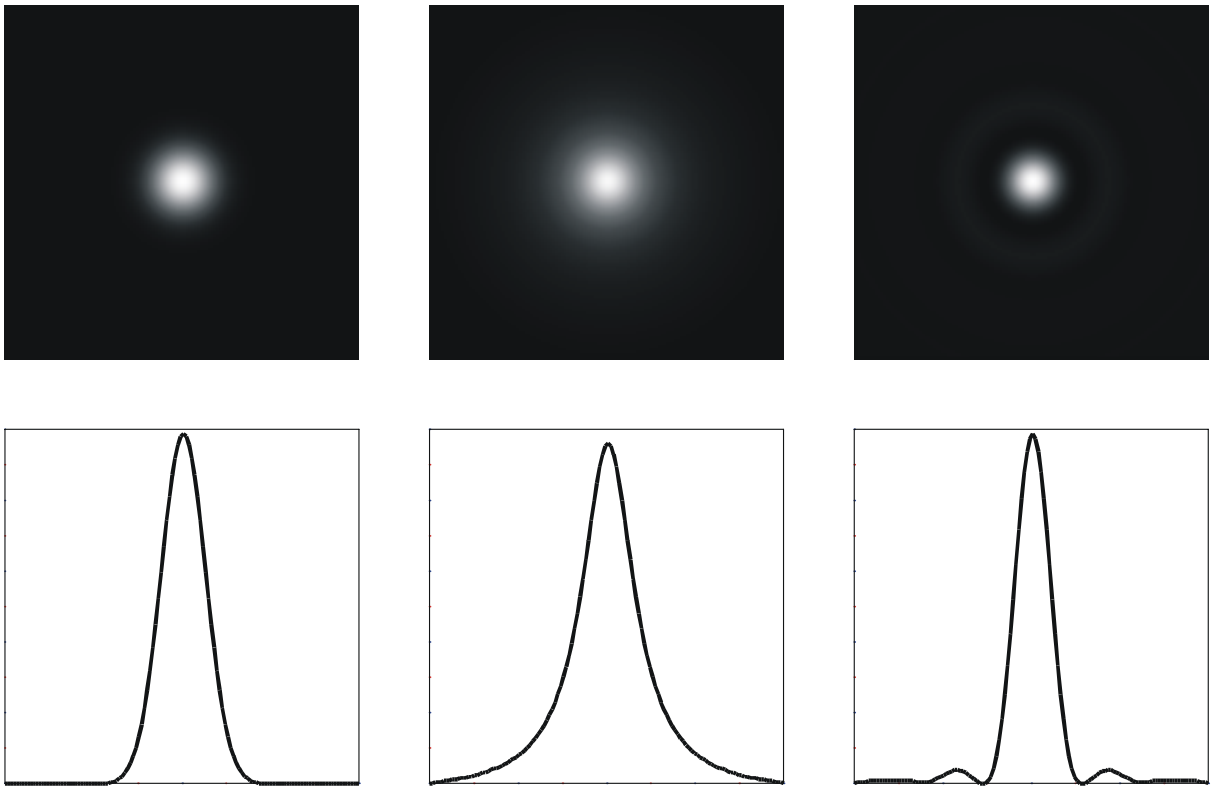


Bild 4.1 : Testbild zur Bestimmung der optimalen PSF

Es ist gut zu erkennen, dass das ausgewählte Bild ausgezeichnet den oben aufgestellten Forderungen entspricht. Die {111}-Gitterebenen sind aufgelöst und sehr gut zu erkennen, das Bild zeigt nahezu über den kompletten Bereich keine nennenswerten Kontraständerungen und weist eine perfekte Kristallstruktur auf.

Beispiele für die drei zur Auswahl stehenden Intensitätsprofile sind in Bild 4.2 abgebildet. Bei der theoretisch bestimmten PSF ist hier eine Sonde mit dem für das genutzte RTEM optimalen Defocus von 70 nm abgebildet [28]. Für die Gauß- und die Lorentzfunktion wurde eine Halbwertsbreite von 8 Bildpunkten gewählt.



Gaußfunktion | Lorentzfunktion | theoretisch bestimmte Funktion

Bild 4.2 : Mögliche Intensitätsprofile der Elektronensonde im Programm MAXENT

Sowohl bei der Benutzung einer Gauß- als auch bei einer Lorentzfunktion als PSF ist nur die Angabe der Halbwertsbreite erforderlich. Zur Ermittlung des optimalen Sondenprofils ist es daher lediglich notwendig, die Halbwertsbreite der PSF über ein sinnvolles Intervall zu variieren. Um einen vernünftigen Startwert abzuschätzen, wird daher aus dem experimentellen Testbild ein Linescan über einige Atomsäulen extrahiert und aus diesem

Intensitätsprofil die Halbwertsbreite abgeleitet (siehe Bild 4.3). Entsprechend diesen Wertes wurde die Halbwertsbreite in beide Richtungen jeweils in- bzw. dekrementiert.

Zur Ermittlung der optimalen theoretisch bestimmten Sondenform spielt neben der Halbwertsbreite die Auswahl des Defokuswertes eine entscheidende Rolle. Die Skalierung des Intensitätsprofils ergibt sich wiederum aus den Daten des Testbildes. In der vorgegebenen Abbildung (Bild 4.1) entspricht eine Bildbreite von 12 nm 512 Bildpunkten. Bei der Verwendung der theoretischen Funktion ist es daher wesentlich aufwendiger, das optimale Sondenprofil zu ermitteln.

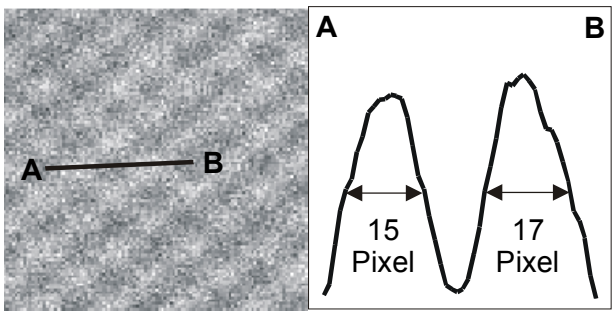


Bild 4.3 : Linescan aus Bild 4.1 zur Bestimmung der Halbwertsbreite der PSF

In Bild 4.4 sind die bestmöglichen Ergebnisse für die unterschiedlichen Sondenformen dargestellt. Die Maximum-Entropie-Rekonstruktionen sind dabei ohne jegliche Bildnachbearbeitungen abgebildet.

Die Maximum-Entropie-Rekonstruktionen, die mittels einer Gauß- und einer Lorentzfunktion berechnet wurden, zeigen so gut wie keine wahrnehmbaren Unterschiede. Die Intensitäten der Doppelatomsäulen sind scharf voneinander getrennt. Lediglich am Bildrand werden die Intensitätspeaks schwächer und weiten sich auf. Im Gegensatz dazu weist die Maximum-Entropie-Rekonstruktion, die mit einer theoretisch bestimmten Funktion berechnet wurde, leichte Unterschiede auf. Die Intensitätspeaks sind teilweise nicht ganz so scharf, die Peaks sind entlang der {111}-Ebenen elongiert und an einigen Stellen nicht mehr voneinander getrennt. Der Defokus der theoretisch ermittelten Sonde besitzt hier einen Wert von 60 nm.

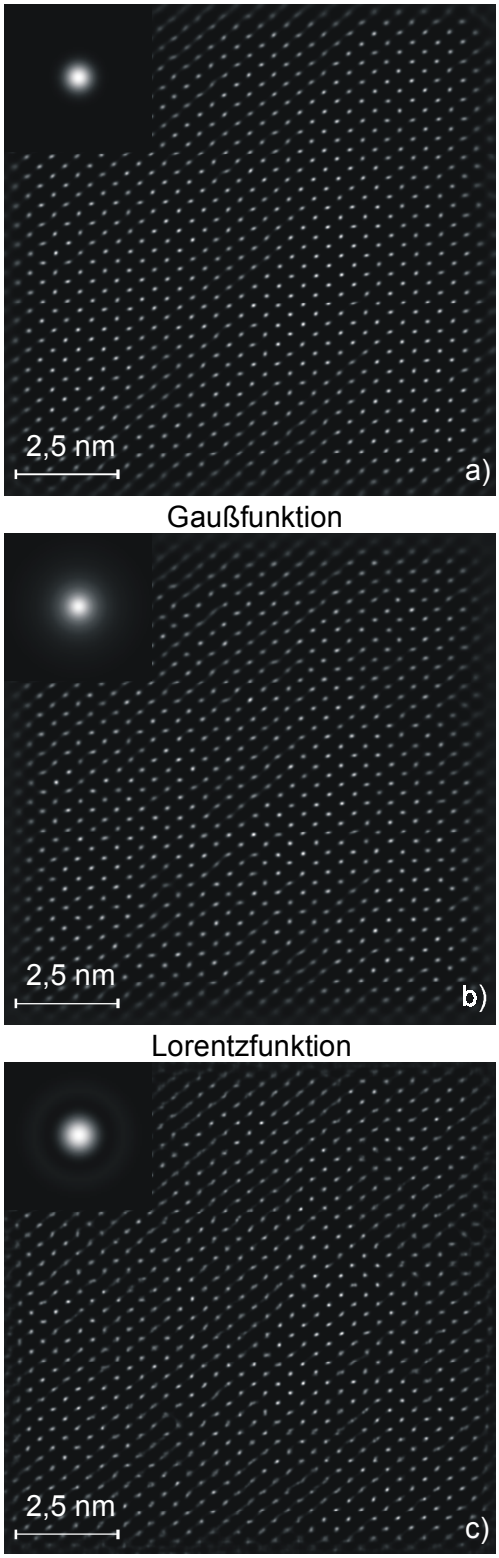


Bild 4.4 : Einfluss der gewählten Sondenform auf die rekonstruierte Objektfunktion

a) Maximum-Entropie-Rekonstruktion von Bild 4.1 mittels einer Gaußfunktion

b) Maximum-Entropie-Rekonstruktion von Bild 4.1 mittels einer Lorentzfunktion

c) Maximum-Entropie-Rekonstruktion von Bild 4.1 mittels einer theoretisch bestimmten Funktion mit 60 nm Defokus

Welchen Einfluss die Wahl des Defokus auf die Maximum-Entropie-Rekonstruktionen hat, ist in Bild 4.5 dargestellt. Der Defokus wurde von 30 nm bis 110 nm variiert. Bei Defokuswerten von 30 nm und 50 nm ist die Qualität der Maximum-Entropie-Rekonstruktionen sehr schlecht. Die Intensitätspeaks der Atomsäulen ist nicht auf einen Ort konzentriert und voneinander getrennt, sondern sie weisen ein gesprenkeltes Muster auf, das fließende Übergänge zeigt. Die Maximum-Entropie-Rekonstruktion mit einem Defokus von 50 nm ist dabei von schlechterer Qualität als die Maximum-Entropie-Rekonstruktion mit einem Defokus von 30 nm. Das qualitativ beste Ergebnis liefert die Maximum-Entropie-Rekonstruktion mit einem Defokus von 60 nm.

Bei einem Defokus von 70 nm und 90 nm wird die Qualität wieder schlechter. Die Intensitätsverteilung der Atomsäulen ist zwar verwaschener als bei einem Defokus von 60 nm, jedoch sind sie noch voneinander zu unterscheiden. Erst ein Defokus von 110 nm liefert in der Maximum-Entropie-Rekonstruktion wieder ein ähnlich gesprenkeltes Muster wie bei den Defoki von 30 nm und 50 nm.

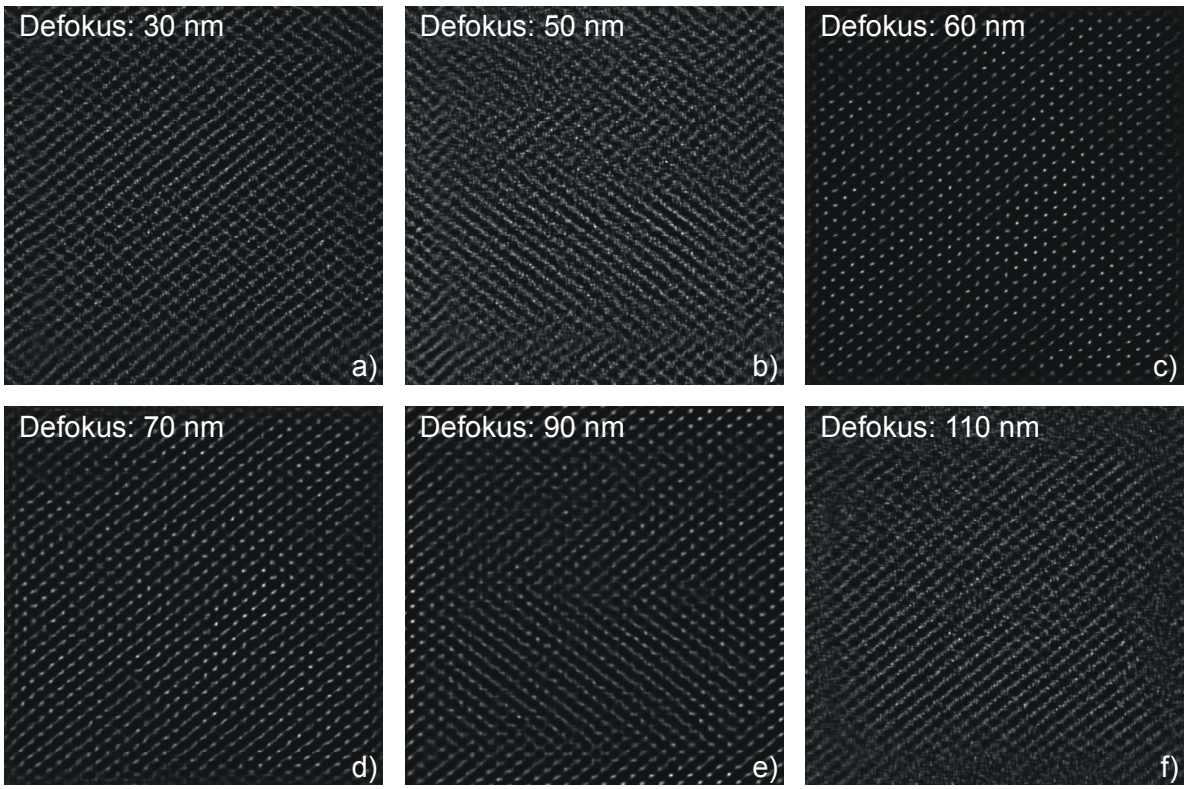


Bild 4.5 : Einfluss des Defokus auf die rekonstruierte Objektfunktion

Diese Ergebnisse zeigen deutlich, dass es bei der Verwendung einer theoretisch bestimmten PSF sehr aufwendig ist, die bestmögliche Maximum-Entropie-Rekonstruktion zu erzielen. Es erweist sich als außerordentlich kritisch, ein sinnvolles Intervall zu definieren, in dem man sich an die optimale Rekonstruktion annähert. Man benötigt dementsprechend eine Vielzahl von Berechnungen mit entsprechenden Defokus-Variationen. Berücksichtigt man nun die benötigte Rechenzeit für eine einzige Rekonstruktion, zeigt sich, dass bei der Verwendung einer Gauß- oder einer Lorentzfunktion ein vergleichbares Ergebnis mit wesentlich weniger Berechnungen zu erzielen ist. Daher wurde darauf verzichtet, bei den sich anschließenden Untersuchungen Berechnungen mit einer theoretisch bestimmter PSF durchzuführen.

Da die Maximum-Entropie-Rekonstruktionen, die mit Hilfe einer Gauß- bzw. einer Lorentzfunktion berechnet wurden, kaum wahrnehmbare Unterschiede aufwiesen, ergab sich die Frage, ob eine der beiden Funktionen entscheidende Vorteile bietet, so dass sie den Vorzug vor der anderen Funktion erhalten könnte. Dazu wurde ermittelt, in welchem Intervallbereich, ausgehend von der optimal rekonstruierten Objektfunktion, keine signifikanten Änderungen der Intensitäten der Atomsäulen auftreten. In Bild 4.6 wird dieses Intervall bei der Verwendung einer gaußförmigen PSF gezeigt. In der Mitte (Bild 4.6b) ist die optimale Maximum-Entropie-Rekonstruktion abgebildet. Bis zu einem Sondenprofil, deren Halbwertsbreite 8,5 % kleiner als die der bestmöglichen PSF ist, sind keine extremen Änderungen zu erkennen (Bild 4.6a). Dies gilt ebenso für Sondenprofile, die eine bis zu 6,3 % größere Halbwertsbreite aufweisen (Bild 4.6c).

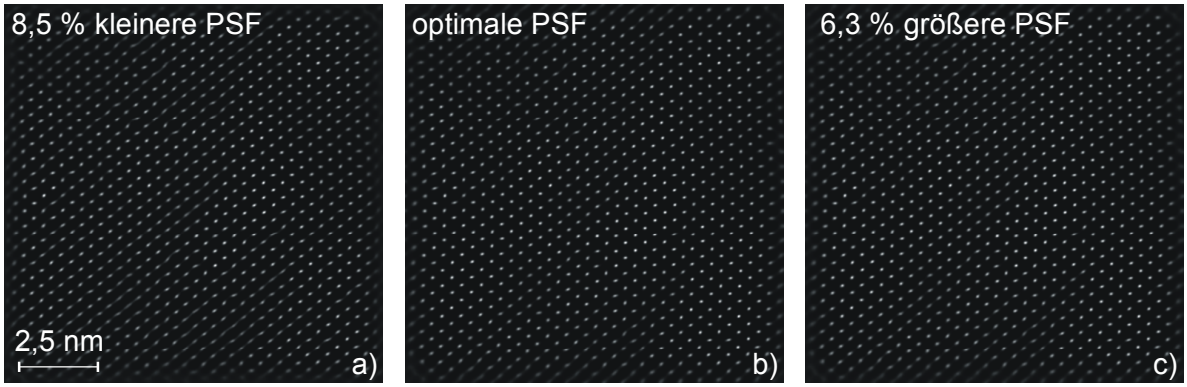


Bild 4.6 : Einfluss der Sondengröße auf die rekonstruierte Objektfunktion bei der Verwendung einer gaußförmigen PSF

Bei der Nutzung einer lorentzförmigen PSF zeigt sich, dass dieses Intervall im Vergleich zur Gaußfunktion ein wenig größer ist (siehe Bild 4.7). In der Mitte von Bild 4.7 ist wieder die optimale Maximum-Entropie-Rekonstruktion abgebildet (Bild 4.7b). Bis zu einem Sondenprofil, deren Halbwertsbreite 12,5 % kleiner als die der bestmöglichen PSF ist, sind keine extremen Änderungen zu erkennen (Bild 4.7a). Dies gilt ebenso für Sondenprofile, die eine bis zu 8,5 % größere Halbwertsbreite aufweisen (Bild 4.7c).

Beide Ergebnisse machen deutlich, dass ein ausreichend großer Spielraum für die Größe der Halbwertsbreite der PSF zur Verfügung steht, ohne dass eine signifikante Verschlechterung der Qualität der rekonstruierten Objektfunktion auftritt.

Das etwas größere Intervall bei der Verwendung einer Lorentzfunktion ist allerdings kein ausreichender Faktor, um sich bei den fortführenden Berechnungen allein auf eine Lorentzfunktion als PSF zu stützen. Außerdem ist nicht geklärt, wie sich die Verwendung von einer Gauß- bzw. einer Lorentzfunktion auf Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrast-abbildungen auswirkt, die nicht von optimaler Qualität sind. Daher erschien es für die weiteren Berechnungen an anderen Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildungen sinnvoll, zunächst die Halbwertsbreite der PSF mittels der Lorentzfunktion zu ermitteln und dann eine Kontrollberechnung mittels der gaußförmigen PSF durchzuführen. Dadurch sollte ausgeschlossen werden, dass mögliche Artefakte aufgrund der gewählten Sondenform das Ergebnis der Maximum-Entropie-Rekonstruktion verfälschen. Dementsprechend wurde von Fall zu Fall entschieden, welche Sondenform das bestmögliche Ergebnis liefert.

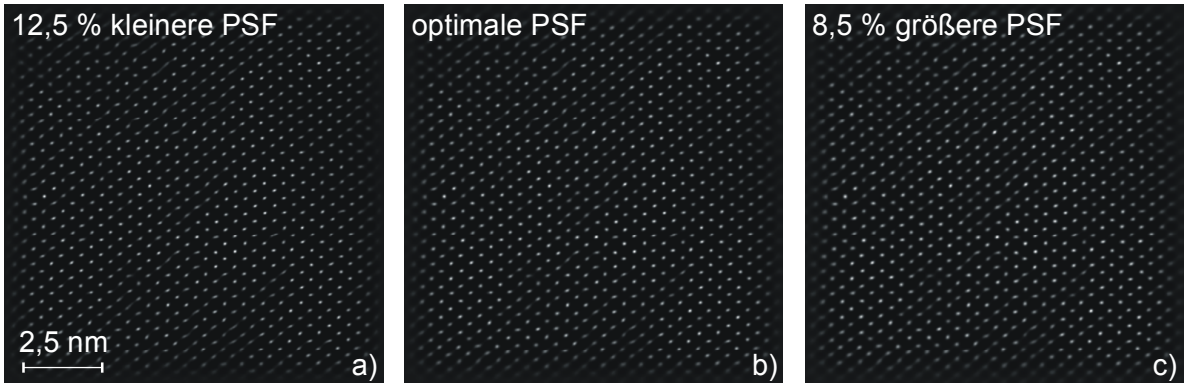


Bild 4.7 : Einfluss der Sondengröße auf die rekonstruierte Objektfunktion bei der Verwendung einer lorentzförmigen PSF

4.2 Leistungsfähigkeit des MEV

Im folgenden Kapitel soll anhand einiger ausgewählter Beispiele die Leistungsfähigkeit des Maximum-Entropie-Verfahrens unter Beweis gestellt werden. Dabei wird auf den Einsatz des MEV in der Grenzflächencharakterisierung sowie im Bereich der Defektlokalisierung eingegangen. Außerdem wird gezeigt, dass durch die Auswertung von Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildungen mit dem Maximum-Entropie-Verfahren im rekonstruierten Bild eine Verbesserung der Ortsauflösung erzielt werden kann.

4.2.1 Qualitativer Nachweis chemischer Zusammensetzungen

Die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung stellt ein leistungsfähiges Werkzeug zur qualitativen Bestimmung der chemischen Zusammensetzungen bis in den Subnanometerbereich dar. Es liegt daher nahe, bei der Auswertung von Grenzflächen-charakterisierungen das MEV als zusätzliches Auswerteverfahren einzusetzen. Anhand von InGaAs/InP-Grenzflächen innerhalb von Heterostruktur-Bipolar-Transistoren (HBT) wird der erfolgreiche Einsatz des MEV zur chemischen Analyse gezeigt. Im vorliegenden Fall wurde die bestmögliche Rekonstruktion jeweils mit einer gaußförmigen PSF mit einer Halbwertsbreite von 14,5 Bildpunkten erzielt.

Bild 4.8 zeigt neben der experimentellen Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung (Bild 4.8a) die Maximum-Entropie-Rekonstruktion (Bild 4.8b) einer abrupten InGaAs/InP-Grenzfläche. Die Atomsäulen mit hoher Streuintensität (InGaAs : hohe mittlere Ordnungszahl) erscheinen heller als die Atomsäulen der InP-Schicht. Bild 4.8c zeigt ein über die Grenzfläche verlaufendes Intensitätsprofil, dessen Verlauf in Bild 4.8b eingezeichnet ist.

Der Verlauf des Linescans parallel zu den {111}-Gitterebenen erlaubt die Beurteilung einzelner, benachbarter Atomlagen. In Bild 4.8c ist deutlich der abrupte Abfall der Intensität von einer Atomlage zur nächsten beim Übergang von InGaAs nach InP zu erkennen.

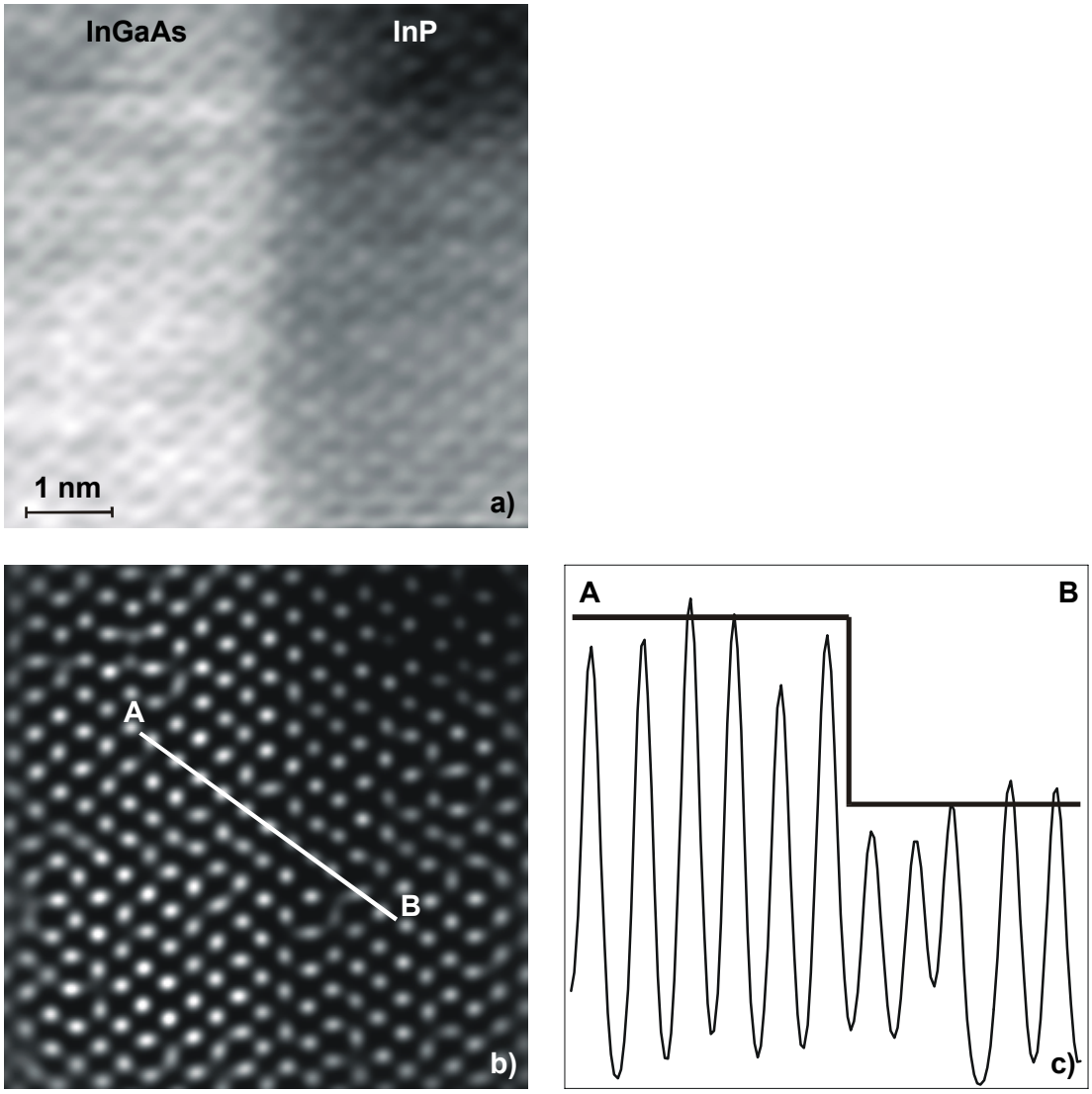


Bild 4.8 : Abrupte InGaAs/InP-Grenzfläche : a) im experimentellen Bild, b) nach der Maximum-Entropie-Rekonstruktion, c) als Linescan über das rekonstruierte Bild

Im Gegensatz dazu ist in Bild 4.9 die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung und die Maximum-Entropie-Rekonstruktion einer nicht abrupten InGaAs/InP-Grenzfläche abgebildet. Wie bei dem vorherigen Bild zeigt das durch das Maximum-Entropie-Verfahren rekonstruierte Bild helle Atomsäulen in der InGaAs-Schicht und dunklere Säulen im InP (Bild 4.9b). Der in Bild 4.9c dargestellte Linescan zeigt jedoch deutlich den „verschmierten“ Übergang. Der Wechsel von InGaAs auf InP dehnt sich über etwa 5 Atomlagen aus.

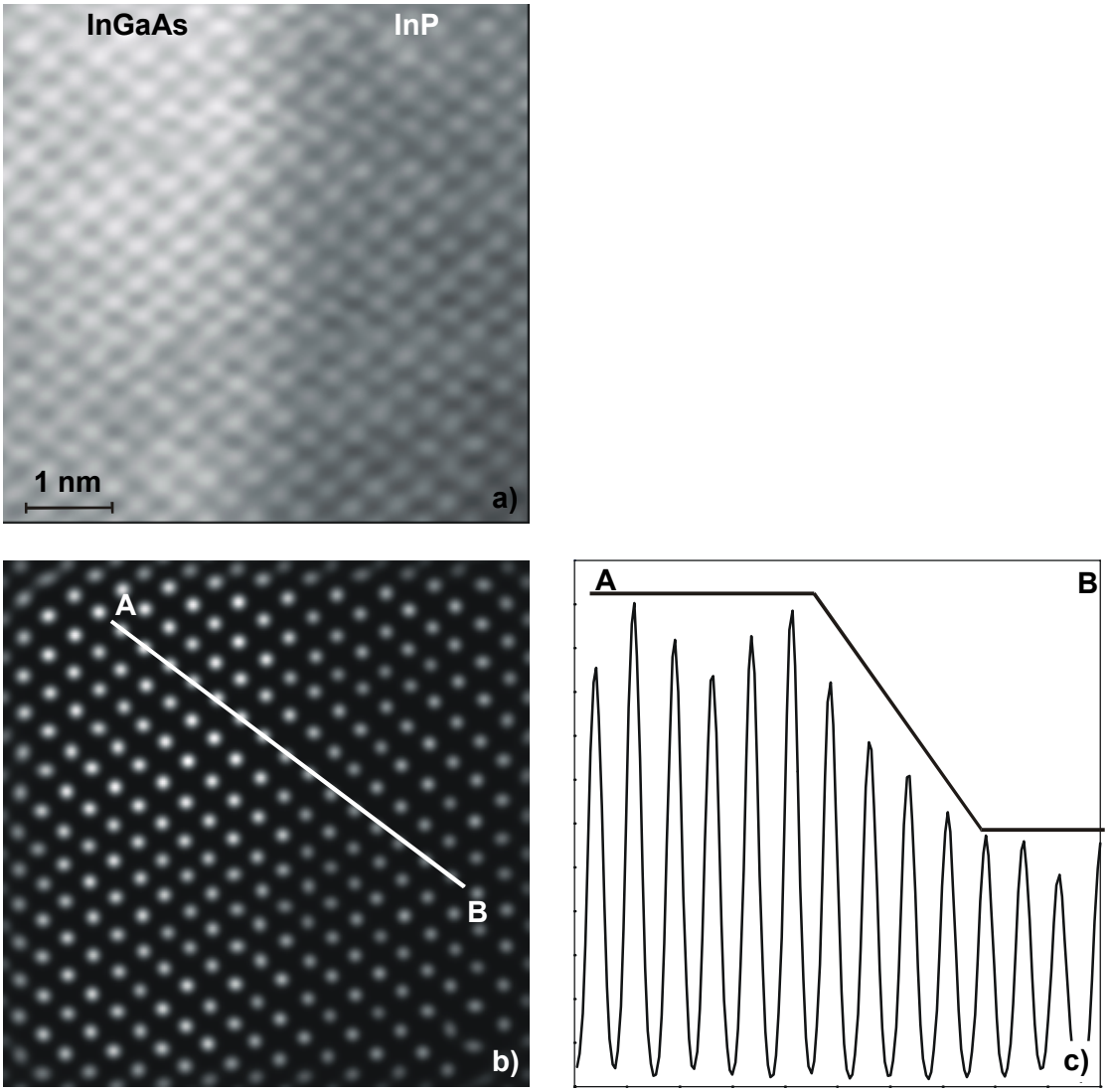
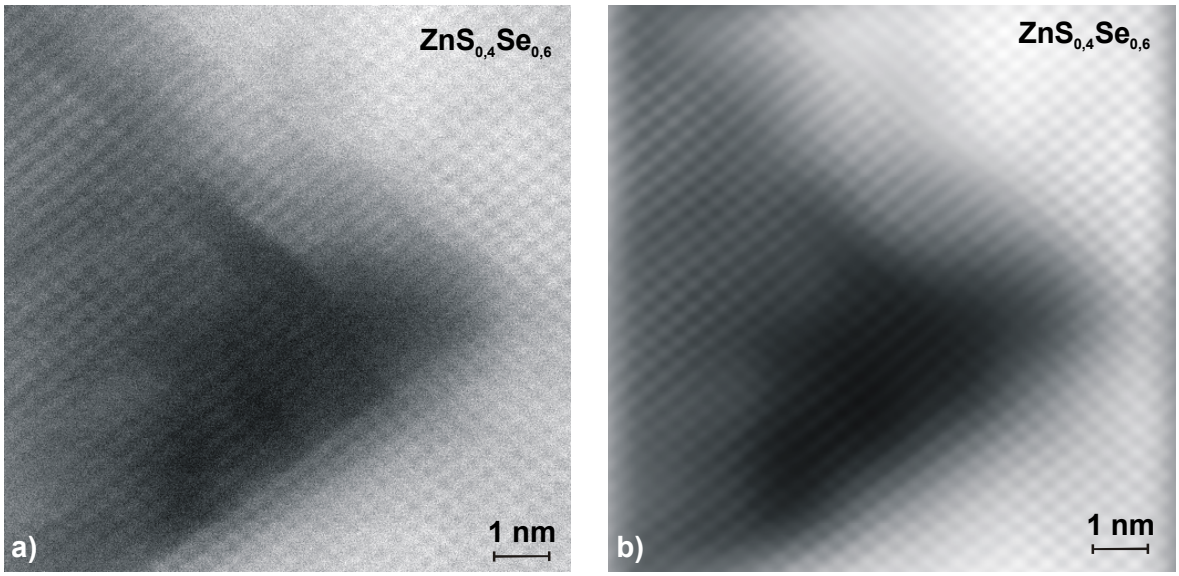


Bild 4.9 : Nicht abrupte InP-InGaAs-Grenzfläche : a) im experimentellen Bild, b) nach der Maximum-Entropie-Rekonstruktion, c) als Linescan über das rekonstruierte Bild

4.2.2 Nachweis struktureller Defekte

Neben Informationen über die chemische Zusammensetzung gibt die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung die Projektion der Gitterstruktur einer Probe wieder. In Kombination mit dem Maximum-Entropie-Verfahren ist es somit möglich, wichtige Informationen über die atomare Struktur zu erlangen. Dies wird durch die folgenden Abbildungen verdeutlicht.

Bild 4.10a zeigt die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung einer $ZnS_{0,4}Se_{0,6}$-Schicht in <110>-Projektion mit strukturellen Defekten. Die {111}-Gitterebenen sind erkennbar, jedoch ist die Qualität des Mikrobildes durch Bildrauschen und Dickenschwankungen der Probe beeinträchtigt. Dadurch ist es schwierig, die Versetzungen zu lokalisieren. Zur Verbesserung der Bildqualität wurde das Mikrobild fouriergefiltert (Bild 4.10b). Dadurch wird das hochfrequente Bildrauschen, das unter anderem durch Schwankungen des Strahlstromes und das Detektorrauschen verursacht wird, unterdrückt [28].



ungefiltert fouriergefiltert

Bild 4.10 : a) Ungefilterte Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung einer $ZnS_{0,4}Se_{0,6}$-Schicht in <110>-Projektion mit strukturellen Defekten
b) Fouriergefiltertes Mikrobild zu a)

Um den Nachweis zu erbringen, dass im abgebildeten Probenbereich aus Bild 4.10 Defekte vorhanden sind, wird zunächst eine Bildverarbeitungsroutine nach Bauer [72] angewendet.

Dabei wird die zweidimensionale Fouriertransformierte der Hochauflösungsabbildung mit geeignet gewählten Filtermasken multipliziert und anschließend rücktransformiert. Durch dieses Verfahren lassen sich Abbildungen erzeugen, die fast ausschließlich Informationen über eine Gitterebenenschar besitzen. Bild 4.11a zeigt die zweidimensionale Fouriertransformierte von Bild 4.10a. Die symmetrisch um die Bildmitte angeordneten Intensitätsmaxima resultieren aus den {111}-Gitterebenen. Durch die Multiplikation der Fouriertransformierten mit den Filtermasken aus Bild 4.11b bzw. Bild 4.11c wird jeweils eine der beiden {111}-Ebenenscharen entfernt und die Rücktransformation liefert die in Bild 4.12 dargestellten Mikrobilder.

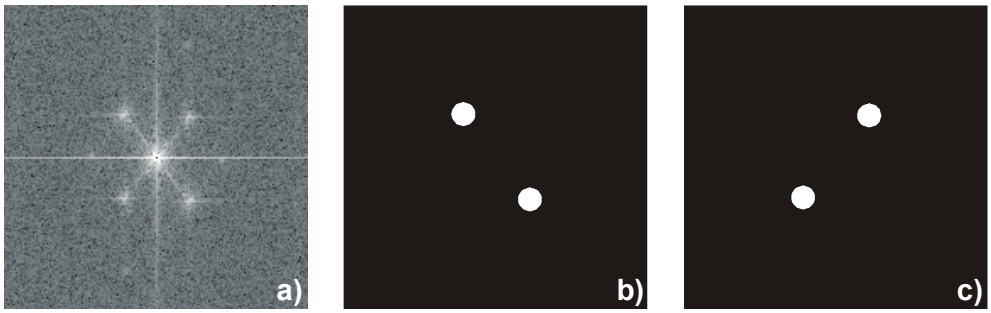


Bild 4.11 : a) Zweidimensionale Fouriertransformierte von Bild 4.10a
b) Filtermaske zur Berechnung von Bild 4.12a
c) Filtermaske zur Berechnung von Bild 4.12b

Die fouriergefilterten Mikrobilder in Bild 4.12a und Bild 4.12b zeigen jeweils eine {111}-Ebenenschar. Im versetzungsfreien Fall sind die Gitterebenen ununterbrochene Linien. Bei Versetzungen ist in das reguläre Gitter eine unvollständige Gitterebene eingeschoben, die in einer Versetzungslinie endet [73]. Beispielhaft ist in beiden Abbildungen jeweils ein Bereich markiert, in dem eine solche Versetzung vorhanden ist.
Der Vergleich mit dem experimentellen Bild beweist die Leistungsfähigkeit dieser speziellen Fourierfilterung. Sie liefert den Nachweis für vorhandene Versetzungslinien, die in der ungefilterten experimentellen Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung (Bild 4.10a) nur sehr schwer bzw. gar nicht auszumachen sind. Auch im fouriergefilterten Mikrobild (Bild 4.10b) sind die Versetzungslinien nur schwer wiederzufinden.

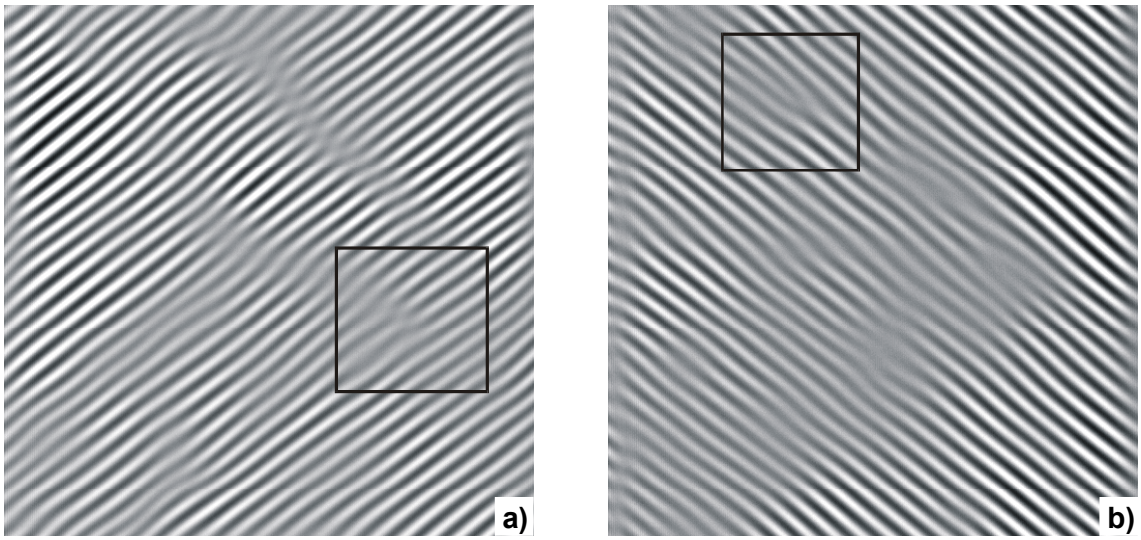


Bild 4.12 : Fouriergefilterte Mikrobilder der Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrast-abbildung aus Bild 4.10 mit den Filtermasken aus Bild 4.11b und Bild 4.11c. In den markierten Bereichen befindet sich eine Versetzung

Bild 4.13 zeigt das Ergebnis der Maximum-Entropie-Rekonstruktion, angewendet auf die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung aus Bild 4.10a. Für das Sondenprofil wurde eine gaußförmige Funktion mit einer Halbwertsbreite von 17 Bildpunkten gewählt. Trotz der relativ schlechten Qualität der Eingabedatei gibt das rekonstruierte Bild meistenteils die genaue Position der Atomsäulen wieder. Selbst in den Bildbereichen, bei denen im Originalbild keine Strukturen mehr zu erkennen sind, sind die Atompositionen größtenteils zuzuordnen. Teilweise ist eine komplette Trennung benachbarter Atomsäulen allerdings nicht erfolgt, sondern es existieren fließende Übergänge. In diesen Linien existieren jedoch lokale Intensitätsmaxima, die darauf hindeuten, dass dort die wahrscheinlichste Atomposition anzunehmen ist. Die Versetzungen, deren Existenz schon durch die Spezialfilterung nachgewiesen wurde, sind in der Maximum-Entropie-Rekonstruktion eindeutig wiederzufinden (siehe markierte Bereiche).

Das gezeigte Beispiel beweist eindrucksvoll die Leistungsfähigkeit des Maximum-Entropie-Verfahrens. Es erweist sich als ein ausgesprochen robustes Verfahren, welches auch die Rekonstruktion von qualitativ minderwertigen Bildern ermöglicht. Des Weiteren ist durch ihre Anwendung auf die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung eine weitergehende Auswertung in Hinblick auf Defektstrukturen zugänglich geworden.

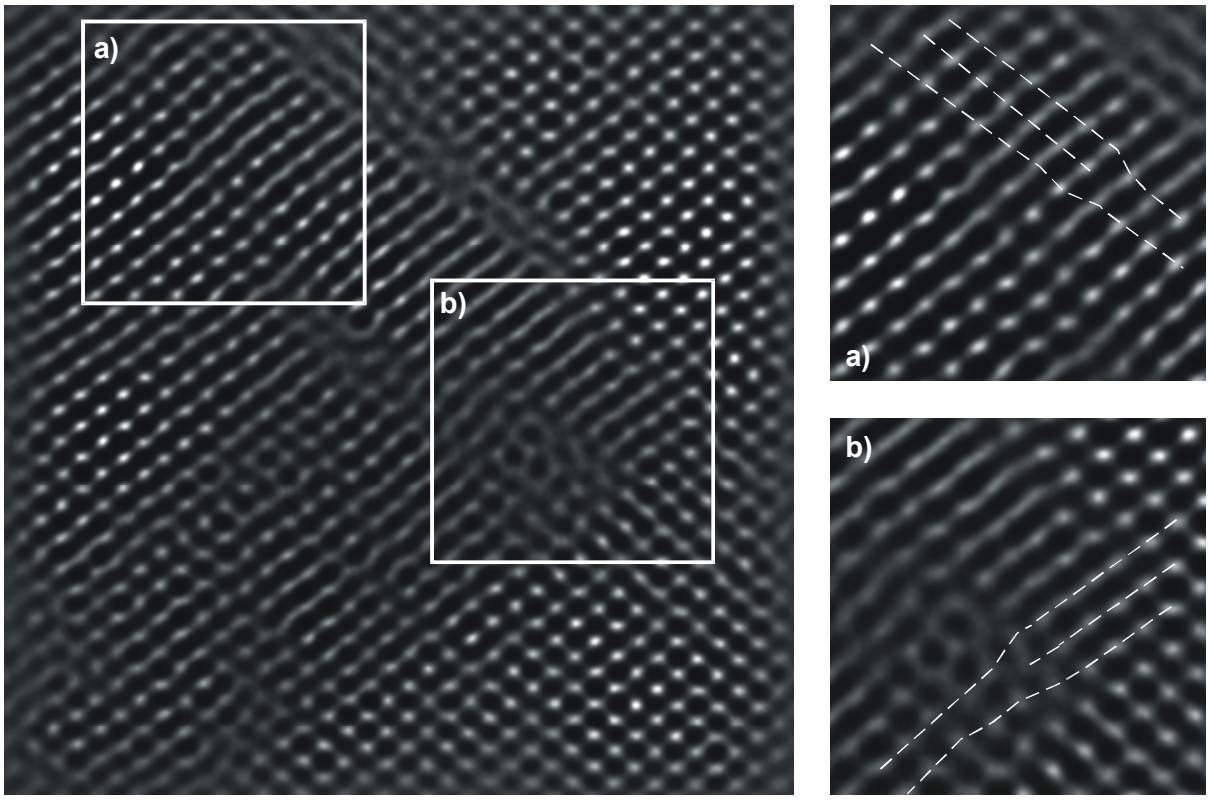


Bild 4.13 : Maximum-Entropie-Rekonstruktion aus Bild 4.10a. Die Versetzungen sind deutlich zu erkennen

4.2.3 Verbesserung der Ortsauflösung

Nachdem der erfolgreiche Einsatz des Maximum-Entropie-Verfahrens im Bereich der Grenzflächencharakterisierung und der Defektlokalisierung präsentiert wurde, wird im Folgenden der Nachweis erbracht, dass in der Maximum-Entropie-Rekonstruktion die Ortsauflösung entscheidend verbessert werden kann.

Bild 4.14 zeigt die Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung einer GaSb-Schicht in <110>-Projektion. Die Gitterkonstante von GaSb beträgt 0,609 nm und der Abstand der {111}-Gitterebenen 0,35 nm. Der Abstand der Doppelatomsäulen (engl. dumbbells) beträgt 0,153 nm. Im experimentellen Mikrobild sind die Doppelatomsäulen eindeutig auszumachen. Sie erscheinen heller als der Zwischenraum und weisen eine deutlich elongierte Form auf. Im Gegensatz dazu waren z.B. die Atomsäulen aus InP (vgl. Bild 4.9) eher kreisförmig. Zusätzlich wurde in das experimentelle Bild eine Multislice-Simulation (obere linke Ecke) der Schicht eingebettet.

Der Vergleich zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation.

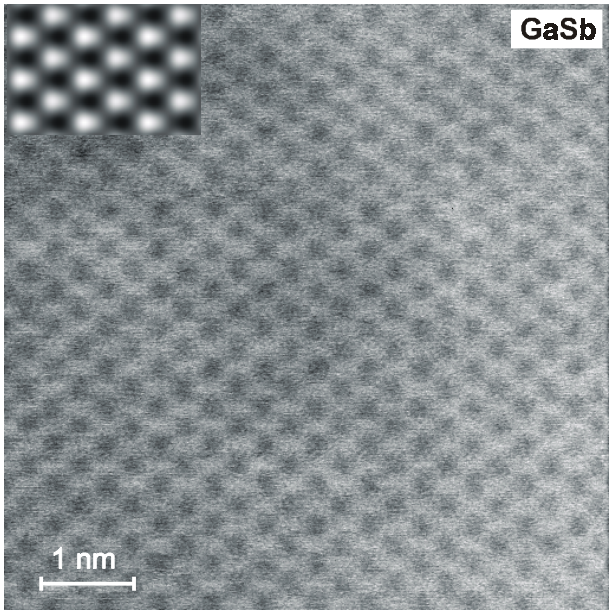


Bild 4.14 : Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung einer GaSb-Schicht in <110>-Projektion mit eingebetteter Simulation

Durch die Berechnung der Fouriertransformierten von Bild 4.14 können zusätzliche Informationen aus der Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung gewonnen werden, die mit dem Auge nicht mehr wahrgenommen werden (siehe Bild 4.15a). Die Intensitätsmaxima, die eindeutig zu erkennen sind, entsprechen den {1,1,1}-, {0,0,2}- und {2,2,0}-Ebenenscharen (vgl. Bild 4.15b).

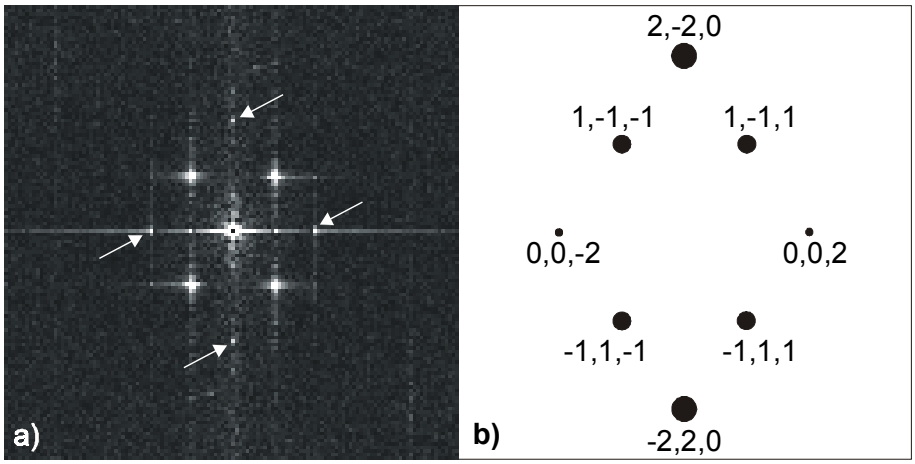


Bild 4.15 : a) Zweidimensionale Fouriertransformierte von Bild 4.14 b) schematische Darstellung von a)

Den Ebenenscharen des Materials GaSb entsprechen dabei Abstände von $d_{111} = 0{,}35\,\text{nm}$, $d_{002} = 0{,}3\,\text{nm}$ und $d_{220} = 0{,}215\,\text{nm}$. Das bedeutet, dass das Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastbild mindestens eine Ortsauflösung von 0,215 nm besitzt, was sogar minimal besser als die theoretische Auflösungsgrenze ist (vgl. Kapitel 2.1.3.2).

Bild 4.16 zeigt die Maximum-Entropie-Rekonstruktion der Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung aus Bild 4.14. Die Rekonstruktion wurde mit einer gaußförmigen PSF mit einer Halbwertsbreite von 18,2 Bildpunkten berechnet. In der Abbildung sind die Doppelatomsäulen aufgelöst. Das heißt, in der Rekonstruktion ist eine Ortsauflösung von 0,15 nm erreicht worden. Bei dem Materialsystem GaSb ist dies bei einer Beschleunigungsspannung von 100 kV bisher noch nicht erreicht worden. Es existiert weltweit überhaupt nur eine Veröffentlichung, in der ebenfalls bei 100 kV Beschleunigungsspannung mit der Maximum-Entropie-Rekonstruktion an Silizium in <110>-Projektion die Doppelatomsäulen aufgelöst wurden [74].

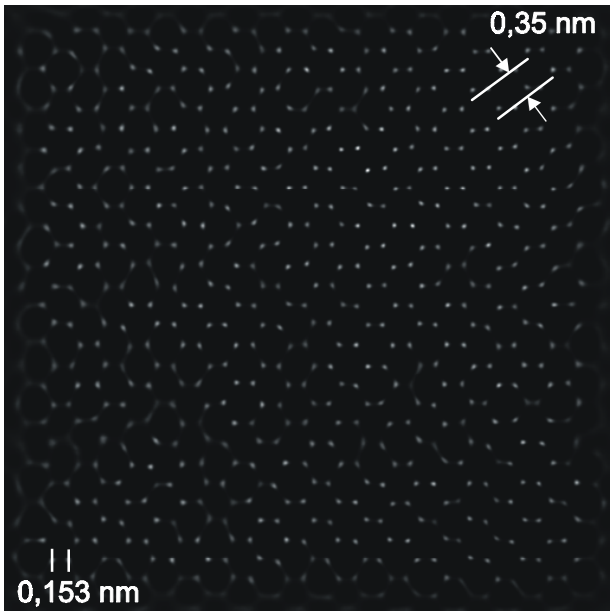


Bild 4.16 : Maximum-Entropie-Rekonstruktion aus Bild 4.14

Um zu verdeutlichen, wie gut die Rekonstruktion, das heißt die Lage der Atomsäulen zur experimentellen Abbildung passt, wurde in Bild 4.17 der Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung die Maximum-Entropie-Rekonstruktion überlagert. Zur besseren Darstellung wurde dafür die Rekonstruktion invertiert. Man erkennt sofort die exzellente Übereinstimmung zwischen Experiment und Rekonstruktion.

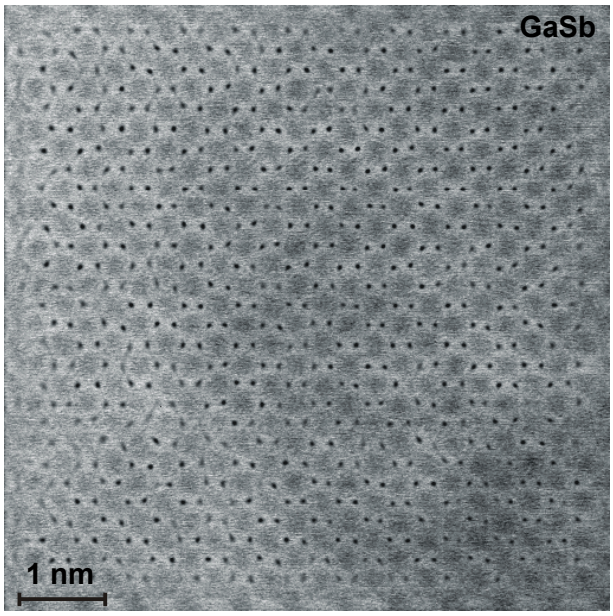


Bild 4.17 : Superposition von Hochauflösungs-Ordnungszahlkontrastabbildung und Maximum-Entropie-Rekonstruktion