

Untersuchung von oberflächennahen
Nanostrukturen in Silizium-Systemen nach
Ionenimplantation und bei epitaktischem
Wachstum mit Methoden der
Röntgenstreuung

Dissertation der Fakultät für Physik
der
Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von Udo W. L. Beck
aus Kulmbach

München, 25. Mai 1999

1. Gutachter : Prof. Dr. Johann S. Peisl, Universität München
2. Gutachter : Prof. Dr. Jörg P. Kotthaus, Universität München

Tag der mündlichen Prüfung: 21. Juli 1999

Dem Andenken meines Vaters Arno Georg Beck gewidmet

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Probensysteme auf Silizium-Basis, deren dotierte Bereiche durch Ionenimplantation bzw. durch epitaktisches Lagen-Wachstum hergestellt sind, mit Hilfe oberflächensensitiver Röntgenstreuung untersucht. Im Vordergrund steht dabei die Identifizierung und Charakterisierung von Defekten und Realstrukturen, die die elektronischen Eigenschaften beeinflussen.

Die ionenimplantierten Proben bestehen aus nach dem Zonenschmelzverfahren hergestellten Silizium(001)-Substraten, die mit unterschiedlichen Konzentrationen - $6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ und $6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ - an Bor und Arsen bei einer Energie von 32 keV implantiert wurden. Die anschließende Ausheilbehandlung wurde bei zwei verschiedenen Temperaturen - 750° C und 1070° C - durchgeführt. Teilweise ist in einem zweiten Implantationsschritt Silizium bei 80 keV implantiert, um die Auswirkung mehrstufiger Implantationsprozesse zu untersuchen. Außerdem wurden epitaktisch Bor-dotierte Proben, die anschließend mit Silizium implantiert wurden, betrachtet.

Zur Charakterisierung der nach dem Ausheilen zurückbleibenden Defekte wurde eine neue Meßgeometrie unter Verwendung eines eindimensionalen positionsempfindlichen Detektors angewandt, die für die Registrierung der diffusen Streuung in der Umgebung von Oberflächenreflexen eine hochauflösende Anordnung mit einer effektiven Datensammlung kombiniert.

Die gemessenen diffusen Intensitätsverteilungen zeigen, daß die Defekte bei Bor-implantiertem Silizium sehr stark von der Ausheiltemperatur abhängen. Bleibt diese bei 750° C , dann bilden sich ausschließlich interstitielle Defekt-Cluster mit einem mittleren Radius von 20 \AA , die auch bei langanhaltender Temperaturbehandlung stabil bleiben. Erreicht die Ausheiltemperatur dagegen 1070° C , so bilden sich zusätzlich extrinsische Stapelfehler auf (111)-Ebenen, die aus überschüssigen Silizium-Zwischengitteratomen bestehen. Ihre Dicke beträgt etwa eine atomare Monolage und ihr mittlerer, nach einer Temperaturbehandlung von 10 Sekunden erreichter Radius 350 \AA . Die Zahl der interstitiellen Defekt-Cluster dagegen geht in der gleichen Zeit auf ein Viertel zurück. Mit tiefenaufgelöster diffuser Streuung und mit Hilfe der Röntgenreflektivität läßt sich zeigen, daß sich diese Stapelfehler in unmittelbarer Oberflächennähe befinden. Sie bilden aber keine stabile Defektkonfiguration, sondern heilen bei längerer Temperaturbehandlung durch Ablagerung des Silizium-Überschusses an der Oberfläche aus. Daraus kann gefolgert werden, daß die bei 750° C ausschließlich beobachteten interstitiellen Cluster aus zwei Arten bestehen. Eine Bor-haltige Komponente bleibt auch bei sehr hohen Ausheiltemperaturen stabil, während sich die nur aus Silizium bestehenden Cluster zugunsten der extrinsischen Stapelfehler auflösen. Die Untersuchungen zeigen, daß sich die Defekte, die nur auf die Silizium-Zwischengitteratome zurückzuführen sind, vollständig ausheilen lassen wenn die Temperatur hinreichend groß gewählt wird. Diese Art der Defektbildung ist elementspezi-

fisch und gleichzeitig durch die Implantation bedingt, da sowohl die analog präparierten Arsen-implantierten Proben als auch epitaktisch Bor-dotierte Systeme nur kleine Punktdefekte aufweisen. Die epitaktische Bor-Dotierung stellt daher eine Alternative zur Implantation dar, die die dort auftretenden komplexen Defekte vermeidet.

Bei den ausschließlich durch epitaktisches Lagenwachstum hergestellten Proben-systemen wurde Germanium auf Silizium(001) aufgewachsen und mit einer Silizium-Schicht bedeckt. Dadurch entstehen hochdotierte, vergrabene Germanium- δ -Schichten. Das Wachstum wurde bei verschiedenen Temperaturen durchgeführt. Teilweise wurde eine geringe Menge an Bor zusätzlich gewachsen, um den Einfluß dieses Surfactant-Materials auf die Schichtqualität zu ermitteln.

Zur Charakterisierung dieser Schichtsysteme wurde eine neue Meßanordnung für die Bestimmung der spekulären Röntgenreflektivität verwendet. Dabei wird die spekuläre zusammen mit der diffusen Intensität in der Einfallsebene mit einem eindimensionalen positionsempfindlichen Detektor registriert, so daß eine exakte Trennung zwischen spekulären und diffusen Anteilen möglich ist.

Die Meßergebnisse zeigen, daß nur die Grenzfläche zwischen Substrat und dünner Schicht sehr gut definiert ist. Die Grenzfläche zur Deckschicht ist dagegen immer ausgeschmiert, so daß sich die δ -Schicht nie auf wenige Monolagen beschränken läßt. Im Bereich der δ -Schicht selbst weist das Germanium ein oszillatorisches Dichteprofil auf, das sich durch die abwechselnde Besetzung der einzelnen Lagen mit Germanium und Silizium erklären läßt. Das zusätzlich gewachsene Bor verstärkt diesen Effekt, so daß ausgeprägtere Dichteoszillationen entstehen.

Die nichtspekuläre Röntgenreflektivität ermöglicht darüber hinaus die Beobachtung der lateralen Terrassenstufen, die als Folge der unvermeidlichen Fehlorientierung zwischen Netzebenen und mittlerer Oberfläche entstehen. Es zeigt sich, daß die gestufte Oberfläche beim Wachstum der δ -Schicht eingefroren wird und sich ihre laterale Struktur an der Oberfläche der Deckschicht repliziert. Neben der Bestimmung der Terrassenbreiten und Stufenhöhen lassen sich auch Aussagen über die Ordnung und Wechselwirkung der Stufenkanten treffen. Eine rein statistische, nur im Mittel mit dem Fehlorientierungswinkel kompatible Verteilung dieser Kanten steht nicht mit den gemessenen Beugungsprofilen in Einklang. Vielmehr bilden die Kanten eine quasi-langreichweitige Ordnung aus, die durch eine - vermutlich durch sterische Wechselwirkung erzeugte - Abstoßung vermittelt wird. Dabei spielt die Bedingung, daß sich die einzelnen Stufenkanten nicht kreuzen können eine zentrale Rolle. Damit war es möglich, derartige grundlegende Fragen zur statistischen Physik des Kristallwachstums mit einer einfachen und vielseitig einsetzbaren experimentellen Anordnung zu untersuchen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	6
2	Probensysteme	10
2.1	Epitaktisch gewachsene kristalline δ -Schichten	10
2.1.1	Wachstumsmoden	11
2.1.2	Pseudomorphes Wachstum von δ -Schichten	13
2.1.3	Die epitaktischen Proben	14
2.1.4	Charakterisierung durch Transmissionselektronenmikroskopie .	16
2.2	Bor- und Arsen-implantiertes Silizium(001)	17
2.2.1	Das System Bor in Silizium	18
2.2.2	Arsen in Silizium	19
2.2.3	Die untersuchten Proben	20
3	Methoden der Röntgenstreuung	22
3.1	Die spekuläre Reflektivität	23
3.1.1	Brechungsindex und Totalreflexion	23
3.1.2	Die Reflektivität von Schichtsystemen	24
3.1.3	Der Einfluß der Rauigkeit	26
3.2	Nichtspekuläre oder diffuse Reflektivität	28
3.2.1	Die Born Approximation (BA)	28
3.2.2	Die Distorted-Wave Born Approximation (DWBA)	31
3.3	Beugung unter streifendem Einfall	34
3.3.1	Grundlagen	34
3.3.2	Ableitung der gebeugten Intensität	36
3.3.3	Röntgenstreuung unter streifendem Einfall an Kristallen mit Defekten	40
3.4	Positionsbestimmung von Fremdatomen mit stehenden Röntgenwellen	51
3.4.1	Totalreflexionsbereich und stehendes Wellenfeld	51
3.4.2	Röntgenfluoreszenz und Positionsbestimmung	52
4	Experimentelle Aspekte	54
4.1	Trennung zwischen spekulärer und diffuser Reflektivität	54
4.2	Meßmethoden für die diffuse Streuung	58

4.2.1	Der "parallele" Modus	58
4.2.2	Der "senkrechte" Modus	61
5	Oberflächennahe Nanostrukturen in ionenimplantiertem Silizium	63
5.1	Charakterisierung der Bor-implantierten Systeme mit Hilfe der Intensitätsverteilung in der Umgebung der Oberflächenreflexe	63
5.1.1	Meßergebnisse	63
5.1.2	Analyse der diffusen Streuung	72
5.1.3	Untersuchung der Satellitenreflexe	76
5.2	Referenz 1: Epitaktisch Bor-dotiertes Silizium	85
5.3	Referenz 2: Arsen-implantiertes Silizium	88
5.4	Modell für die Defektbildung in Bor-implantiertem Silizium	91
5.4.1	Clusterbildung	91
5.4.2	Wachstum von Stapelfehlern durch Hochtemperatur-Ausheilen	92
5.5	Simulation der durch die Stapelfehler induzierten Intensität	95
5.5.1	Klassische Modellrechnungen	95
5.5.2	Atomistische Modellrechnungen	99
5.6	Tiefenverteilung der Stapelfehler	104
6	Charakterisierung von vergrabenen Germanium-δ-Schichten	108
6.1	Bragg-Messungen am System <i>Delta 1</i>	109
6.1.1	Anwendung der Methode der stehenden Röntgenwellen	109
6.1.2	Bragg-Beugung unter streifendem Einfall	111
6.2	Spekuläre Reflektivitätsmessungen	113
6.2.1	Meßergebnisse	113
6.2.2	Modellbildung und Simulation	116
6.3	Nachweis vergrabener Terrassen	118
6.4	Ordnungszustand einer wachsenden terrassierten Oberfläche	126
6.4.1	Der statistische Ansatz nach Holý	126
6.4.2	Neues Modell: Sterische Wechselwirkung von Domänengrenzen	132
6.5	Aussagen über die Form der Terrassen	142
7	Schlußfolgerungen und Ausblick	146
7.1	Weitere Untersuchungen an Bor-implantiertem Silizium	146
7.2	Kristalline Terrassen an Oberflächen	148
A	Die Reflektivität eines Terrassen-Schichtsystems nach V. Holý	149
A.1	Die dreidimensionale Korrelationsfunktion einer gestuften Oberfläche	149
A.2	Die nichtspekuläre Streuintensität	151

B	Der Strukturfaktor einer gestuften Oberfläche nach Noh et al.	154
B.1	Strukturfaktor nach Noh et al.	154
B.2	Beugungsprofil der gestuften Oberfläche	156

Kapitel 1

Einleitung

Für die Untersuchung von oberflächennahen Nanostrukturen in Silizium-Systemen gibt es eine zweifache Motivation. Auf der einen Seite bilden die mit hoher Perfektion hergestellten Silizium-Kristalle die Basis für die industrielle Produktion von integrierten Schaltkreisen in der Halbleitertechnologie. Der allgemeine Trend hin zu kleineren räumlichen Dimensionen und größeren Schaltgeschwindigkeiten stellt dabei hohe physikalische und technologische Herausforderungen v. a. an die Verfahren zur Erzeugung dotierter Strukturen und es ist ein grundlegendes Verständnis der dabei erzeugten Defekte erforderlich [30]. Zum anderen eignet sich das mit Fremdatomen dotierte Silizium sehr gut als Modellsystem, an dem grundlegende physikalische Fragen zur Wechselwirkung zwischen Dotieratomen und Silizium-Matrix studiert werden können.

Bei den Verfahren zur Dotierung räumlich begrenzter Bereiche des Silizium-Kristalls ist die Ionenimplantation derzeit das bedeutendste Werkzeug. Sie wurde 1952 von Ohl in den Bell Laboratories entdeckt [114] und hat sich seitdem in Industrie und Forschung zu einem unverzichtbaren Verfahren entwickelt. Die Dotierstoffe werden ionisiert und je nach Material und erforderlicher Implantationstiefe mit Energien zwischen 1 keV und 500 keV in das Silizium eingeschossen. Das durch diesen Prozeß weitgehend zerstörte Silizium-Gitter muß anschließend durch thermisches Ausheilen rekristallisiert werden.

Die Wechselwirkungen der eingeschossenen Ionen mit dem Festkörper sind in den letzten Jahrzehnten umfassend erforscht worden und gelten heute im allgemeinen als gut verstanden [30]. Das Tiefenprofil der eingeschossenen Atome läßt sich daher inzwischen mit großer Genauigkeit berechnen [30]. Auch sind in jüngster Zeit umfangreiche Computersimulationen durchgeführt worden, die die Bildung und das Ausheilen von Punktdefekten in der Kollisionskaskade [110] sowie die kollektive Bewegung vieler Atome als Folge der Implantation [112] nachvollziehen.

Das nach der Implantation erfolgende Ausheilen zielt nicht nur darauf ab das Kristallgitter wiederherzustellen. Es sollen auch die implantierten Fremdatome auf Gitterplätzen eingebaut und dadurch elektrisch aktiviert werden. Dabei kann es zur Bil-

derung von kleineren und größeren Defekten kommen, die die elektrischen Eigenschaften und damit die Qualität der hergestellten Bauelemente beeinträchtigen. Diese Prozesse sind bis heute nur ungenügend verstanden [30]. Gleichzeitig hat die Halbleiterindustrie sehr große Fortschritte gemacht, wobei die Informationsmenge, die auf einem Silizium-Chip gespeichert werden kann, seit 1980 exponentiell als Funktion der Zeit gewachsen ist. Diese enorme Entwicklung wurde durch eine stetige Reduzierung der Ausdehnung der elektronischen Schaltelemente erreicht. Bei Transistoren wird derzeit daran gearbeitet den Bereich unterhalb von $0,1 \mu\text{m}$ zu erschließen [30]. Die Auswirkungen selbst von Punktdefekten werden dadurch immer größer und um so mehr gilt dies für ausgedehntere Defektagglomerate [155]. Daher ist es heute erforderlich die Defektbildung während des Ausheilens besser zu verstehen um insbesondere den Einfluß der wichtigen Parameter wie Temperatur und Ausheildauer auf diesen Prozeß zu ermitteln. Das gilt im Prinzip für alle Elemente, die zur Silizium-Dotierung herangezogen werden, insbesondere weil die zur Herstellung einzelner Schaltelemente eingesetzte Anzahl der Implantationsschritte und damit auch die Anzahl der Ausheilsschritte immer weiter ansteigt [30] und auch der Bereich der eingesetzten Implantationsenergien immer größer wird [30].

Bei dem häufig zur positiven Dotierung eingesetzten Material Bor kommt eine weitere Herausforderung hinzu. Diese besteht in dem Phänomen einer vorübergehend erhöhten Diffusion der Bor-Atome (*"Transient Enhanced Diffusion"*) [100]. Man versteht darunter die Tatsache, daß die Diffusionskonstante der implantierten Fremdatome im Frühstadium des Ausheilens um mehrere Größenordnungen über dem Gleichgewichtswert liegen kann, wobei sie aber im Verlauf der Temperaturbehandlung wieder auf diesen Normalwert absinkt. Die Dotierprofile können sich dadurch sehr stark verbreitern so daß eine weitere Miniaturisierung der Bauelemente verhindert wird [100]. Bei diesem Effekt spielen Defekte des Silizium-Gitters eine zentrale Rolle [159], wobei ein grundlegendes Verständnis auf atomarer Ebene ebenfalls noch nicht erreicht ist. Auch unter diesem Gesichtspunkt sind weitere Untersuchungen zur Defektbildung während des Ausheilens dringend erforderlich.

Ionenimplantierte Probensysteme auf Silizium-Basis wurden bisher hauptsächlich mit Sekundärionenmassenspektroskopie (*"Secondary Ion Mass Spectroscopy"* - SIMS) und mit Transmissionselektronenmikroskopie (*"Transmission Electron Microscopy"* - TEM) untersucht. Diese Verfahren unterliegen jedoch sehr starken Beschränkungen. Zwar lassen sich mit SIMS zuverlässig Dotierprofile messen [57]. Die Auflösung liegt aber nur im zweistelligen Nanometerbereich, so daß man von der atomaren Größenordnung noch weit entfernt ist. Beim TEM erhält man zwar direkte und in der Regel aufschlußreiche Abbildungen der Kristallstruktur [182]. Allerdings lassen sich diese nur weitgehend qualitativ interpretieren. Zudem hängt das Ergebnis stark von dem gewählten Schnitt durch die Probe ab und es lassen sich nur diejenigen Realstrukturphänomene bestimmen, die gegenüber der Silizium-Matrix einen genügend hohen Kontrast erzeugen um in der Abbildung sichtbar zu sein. Außerdem sind beide Verfahren mit der Zerstörung des untersuchten Systems verbunden.

Die Röntgenstreuung unter streifendem Einfall dagegen ist für die Untersuchung der oberflächennahen Defektstruktur, die als Folge von Implantation und Ausheilen entsteht, besonders gut geeignet. Sie liefert eine tiefenaufgelöste Information, so daß im Prinzip verschiedene Probenbereiche entsprechend ihrem Abstand von der Oberfläche voneinander separiert werden können. Außerhalb der Bragg-Reflexe sind die Streubeiträge zudem allein durch die Defekte und die von ihnen ausgelöste Störung des Kristallgitters bestimmt, so daß diese v.a. angesichts der heute zur Verfügung stehenden Synchrotronstrahlungsquellen hoher Intensität genau untersucht werden können. Weiterhin sind die Röntgenmethoden zerstörungsfrei und ohne spezielle Probenpräparation durchführbar, so daß ihre Ergebnisse durch eine derartige Behandlung nicht verfälscht werden können.

Für die Herstellung von dotierten, oberflächennahen Bereichen in Silizium-Kristallen werden neben der Implantation zunehmend epitaktische Verfahren diskutiert. Dabei werden atomare Lagen schichtweise auf einem Substrat abgeschieden, so daß sich die Methode v.a. zur Herstellung von oberflächennahen Schichten und Schichtsystemen eignet. Durch Wachstum von Silizium auf ein Silizium-Substrat und die kontrollierte Beimischung von Fremdatomen zu dem aufwachsenden Material kann dieses Verfahren auch zur Dotierung von oberflächennahen Schichten herangezogen werden [19].

Inzwischen ist eine Vielzahl verschiedenster Verfahren zur Durchführung des Wachstumsprozesses entwickelt worden. Diese beinhalten die direkte Ablagerung des Materials aus der Gasphase (*"Vapour Phase Epitaxy"* - VPE), wobei die häufig eingesetzte Molekularstrahlepitaxie (*"Molecular Beam Epitaxy"* - MBE) einen Spezialfall dieser Methode darstellt. Die Ablagerung kann aber auch aus der flüssigen Phase (*"Liquid Phase Epitaxy"* - LPE) erfolgen oder es kann eine chemische Verbindung abgeschieden werden, die die Atome für den Wachstumsprozeß durch Zersetzung freisetzt (*"Chemical Vapour Deposition"* - CVD) [180]. Auch das Wachstum von zunächst amorphen Schichten, die anschließend durch Temperaturbehandlung kristallisiert werden (*"Solid Phase Epitaxy"* - SPE), wird heute in der Praxis angewandt [19].

Von besonderem Interesse ist das epitaktische Wachstum, weil sich damit auch die Herstellung von sehr dünnen, hochdotierten, kristallinen Schichten (sog. δ -Schichten) realisieren läßt [19]. In diesen Schichten überlagern sich die elektronischen Niveaus der Fremdatome zu einem zusätzlichen Leitungsband, das sich zwischen Valenz- und Leitungsband des dotierten Materials befindet [19]. Damit lassen sich eine größere Beweglichkeit der Ladungsträger und neuartige elektronische Eigenschaften realisieren. Dabei sind die Fremdatome in Konzentrationen vorhanden, die weit größer sind als die Festkörperlöslichkeit des entsprechenden Materials in Silizium, so daß sich derartige Strukturen auch nicht durch Implantation und anschließendes Ausheilen herstellen lassen. Epitaktische Verfahren stellen daher eine echte Ergänzung zur Implantation dar, die die Erzeugung von neuartigen Materialien erlaubt. Von besonderem praktischen Interesse ist das System Germanium in Silizium (vgl. [53], [54], [143]), das

durch eine starke Erhöhung der Ladungsträgermobilitäten deutliche Fortschritte für die Halbleitertechnologie verspricht [104].

Außerdem bieten diese dünnen epitaktischen Schichten die Perspektive von den heute ausschließlich verwendeten zweidimensional integrierten Bauelementen und Schaltungen, die sich an der Oberfläche von einkristallinen Silizium-Scheiben befinden, zu einer dreidimensionalen Integration überzugehen. Dadurch ließe sich nicht nur eine noch dichtere Packung von Bauelementen sondern gleichzeitig eine viel höhere Zahl an Verbindungen bei deutlich kleinerer Verbindungslänge realisieren [19], so daß wesentlich schnellere und leistungsfähigere Schaltkreise möglich erscheinen.

In jedem Fall ist die Voraussetzung für den erfolgreichen Einsatz von δ -Schichten aber eine geringe räumliche Ausdehnung und eine gute Grenzflächenqualität. SIMS und TEM sind zur Überprüfung dieser Eigenschaften gar nicht bzw. nur sehr bedingt geeignet und alle mikroskopischen Verfahren, die im wesentlichen die Oberfläche des Materials untersuchen sind bei diesen in der Regel vergrabenen Schichten nicht anwendbar. Nur während des Wachstums steht in Form der Reflektivität hochenergetischer Elektronen ("*Reflection High Energy Electron Diffraction*" - RHEED) eine Methode zur Verfügung mit der eine sehr gute in situ Überwachung der wachsenden Oberfläche gelingt [31]. Über den Endzustand läßt sich aber auch damit nichts aussagen.

Die Röntgenstremethoden unter streifendem Einfall dagegen bieten auch hier die ideale Voraussetzung, um eine detaillierte strukturelle Charakterisierung der Systeme vorzunehmen und damit einen entscheidenden Beitrag zur weiteren Optimierung der Herstellungsverfahren zu leisten.

In der vorliegenden Arbeit werden ausgehend von den eben diskutierten Problemen Modellsysteme aus Bor-implantiertem Silizium und aus vergrabenen Germanium- δ -Schichten in Silizium mit Hilfe der heute zur Verfügung stehenden oberflächensensitiven Röntgenmethoden charakterisiert, wobei sich zeigt, daß in beiden Fällen bisher unbekannt bzw. unverständene Realstruktureffekte aufgeklärt werden können. Zum Aufbau: in Kapitel 2 werden zunächst die Herstellungsverfahren und die Probenysteme vorgestellt. Danach folgt in Kapitel 3 ein Überblick über die Grundzüge der eingesetzten Röntgenstremethoden. Kapitel 4 stellt die Weiterentwicklungen der Meßverfahren dar, die im Rahmen der Arbeit durchgeführt wurden. Schließlich werden in Kapitel 5 die Ergebnisse dargestellt, die für die ionenimplantierten Systeme erzielt wurden, während Kapitel 6 in gleicher Weise die bei den epitaktischen Systemen gewonnenen Erkenntnisse enthält. In Kapitel 7 sind einige Schlußfolgerungen sowie Anregungen für weitere Untersuchungen enthalten.

Kapitel 2

Probensysteme

Im ersten Teil dieses Abschnitts soll die Herstellung epitaktisch gewachsener Schichtsysteme zusammen mit den wichtigsten dabei gültigen Gesetzmäßigkeiten diskutiert werden. Wegen der inzwischen nahezu unüberschaubar großen Anzahl verschiedener Herstellungsmethoden mit zum Teil recht spezifischen Anwendungen (vgl. [180], [31]) soll hier nur die bei der Herstellung der untersuchten Schichtsysteme eingesetzte Molekularstrahlepitaxie (MBE) näher betrachtet werden. Gleichzeitig werden transmissionselektronenmikroskopische Aufnahmen vorgestellt, die die Realraumstruktur der gewachsenen Schichtsysteme abbilden. Dadurch konnte bereits unmittelbar im Anschluß an den Herstellungsprozeß die erfolgreiche Realisierung qualitativ hochwertiger δ -Schichtsysteme verifiziert werden.

Der zweite Teil befaßt sich mit den durch Implantation von Bor und Arsen in Silizium hergestellten Proben. Hier wird auf das Standardverfahren der Ionenimplantation nur kurz eingegangen. Im Mittelpunkt stehen vielmehr die Eigenschaften der einzelnen Materialsysteme: Bor in Silizium, bzw. Arsen in Silizium. Sie waren in jüngster Zeit Gegenstand umfangreicher Untersuchungen, die den Ausgangspunkt für die im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Messungen bilden.

2.1 Epitaktisch gewachsene kristalline δ -Schichten

Die epitaktischen Verfahren werden inzwischen in großem Maßstab für die Herstellung von Schichten und Schichtsystemen eingesetzt. Unter *Epitaxie* versteht man dabei das schichtweise Wachstum kristalliner Atomlagen auf einem Substrat bei einer Temperatur unterhalb der Schmelztemperatur des jeweiligen Materials. Dabei ergeben sich grundsätzlich zwei Möglichkeiten. Entweder das aufzuwachsende Element ist in einer Verbindung enthalten, die auf das Substrat aufgebracht wird, sich dort zersetzt und dadurch das Schichtwachstum ermöglicht. Dann spricht man von "*Chemical Vapour Deposition (CVD)*". Oder aber das Element kann direkt abgelagert und eingebaut werden. Dann handelt es sich um "*Physical Vapour Deposition (PVD)*" [19].

Das wichtigste aus dieser zweiten Klasse von Verfahren ist die Molekularstrahl-

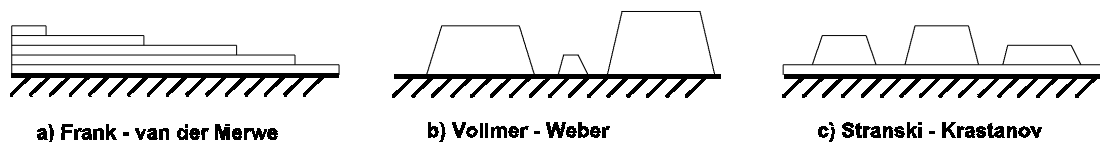


Abbildung 2.1: Die grundsätzlichen Wachstumsmoden, die beim epitaktischen Kristallwachstum je nach Wechselwirkungsstärke der Schichtatome mit dem Substrat realisiert werden.

epitaxie (*"Molecular Beam Epitaxy (MBE)"*). Dabei wird unter Ultrahochvakuumbedingungen ein einkristallines Schichtwachstum realisiert. Das aufzuwachsene Element wird aus einer Effusionszelle entweder durch Heizen oder mit Hilfe eines Elektronenstrahls verdampft, so daß ein Atom- oder Molekularstrahl entsteht, der auf das Substrat trifft. Durch die Wahl einer mittleren Substrattemperatur (bei Silizium typischerweise im Bereich zwischen 500 und 700° C) wird eine ausreichende Haftung der aufgedampften Atome sicher gestellt. Gleichzeitig ist ihre Diffusion an der Oberfläche aber noch groß genug, um die Einnahme der Gitterplätze zu ermöglichen. Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c , die vom Material und von der Orientierung der wachsenden Oberfläche abhängt, bildet sich keine kristalline Struktur sondern nur noch amorphes Material. Für einen ungestörten Einbau in das Gitter und damit für ein perfekt kristallines Wachstum muß außerdem der Fluß der auftreffenden Atome beschränkt sein, so daß sich typischerweise nur Wachstumsraten von einigen Å pro Sekunde realisieren lassen. Dieses Wachstumsregime ist aber gerade für die Herstellung atomar dünner Schichten und Schichtsysteme mit klar definierten Grenzflächen gut geeignet.

Unter δ -Schichtsystemen versteht man dünne, mit Fremdatomen hochdotierte, vergrabene, einkristalline Schichten in Halbleitermaterialien. Da das System Germanium in Silizium von besonderem praktischen Interesse ist ([54], [143]), wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit epitaktisch gewachsene Germanium- δ -Schichten in Silizium untersucht.

2.1.1 Wachstumsmoden

Grundsätzlich lassen sich je nach Wechselwirkung zwischen Substrat- und Schichtatomen drei verschiedene Wachstumsmoden unterscheiden, die in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt sind [184].

- Wenn die Wechselwirkung zwischen Substrat- und Schichtatomen viel größer ist als die Wechselwirkung der Schichtatome untereinander, kommt es zum Lagen-

wachstum, d.h. erst wenn eine monoatomare Schicht abgeschlossen ist beginnt die nächste zu wachsen. Dieser Modus wird auch als *Frank-van-der-Merwe-Wachstum* bezeichnet. Die Anlagerung der Atome findet dabei vorzugsweise an Terrassenstufen bzw. an sog. "Kinks", den Unregelmäßigkeiten entlang der Stufenkante statt, weil dort die Substrat-Schicht-Wechselwirkung besonders groß ist [132]. Da sich eine leichte Fehlorientierung zwischen der realen Substratoberfläche und der entsprechenden Netzebene des Kristallgitters in der Praxis nie ganz vermeiden läßt, ist diese Möglichkeit immer gegeben, weil sich immer Terrassenstufen bilden. Dieser "Terrace-Step-Kink-Mechanismus" führt dazu, daß sich das Schichtwachstum in Form einer Vorwärtsbewegung der einzelnen Stufen realisiert ("Step Flow Mode") [25].

- Wenn im umgekehrten Fall die Wechselwirkung der Schichtatome untereinander viel größer ist als die mit dem Substrat, dann kann sich kein Schichtwachstum einstellen. Die abgeschiedenen Atome lagern sich an bestimmten Nukleationspunkten an und von dort setzt sich das Wachstum in Form von Inseln fort, weil die auftreffenden Atome von den schon vorhandenen Schichtatomen wesentlich stärker gebunden werden als vom Substrat. Eine bestimmte monoatomare Schicht ist erst dann komplett, wenn alle Gräben zwischen den Inseln im Verlauf des Wachstums aufgefüllt worden sind. Man spricht vom sog. *Vollmer-Weber-Wachstum*, wobei das periodische Entstehen und Auffüllen von Gräben zu einer periodischen Änderung der Oberflächenrauigkeit im Verlauf des Wachstums führt.
- Zwischen diesen beiden Extremfällen gibt es noch einen dritten Wachstumsmodus, das sog. *Stranski-Krastanov-Wachstum*. Hierbei bilden sich zunächst eine oder mehrere geschlossene Monoschichten aus. Danach wächst die Schicht in Form von dreidimensionalen, kohärenten Inseln weiter.

Bei dieser Klassifizierung handelt es sich natürlich um vereinfachte Szenarien. Das reine Lagenwachstum beispielsweise kann beim Wachstum dicker Schichten nur realisiert werden, wenn die Gitterkonstanten von Schicht und Substrat miteinander übereinstimmen.

Bei der Heteroepitaxie von Halbleiterschichten ist dies aber praktisch nie der Fall. Im Anfangsstadium des Wachstums nimmt die Schicht trotzdem die Gitterkonstante des Substrats an. Ab einer bestimmten kritischen Schichtdicke d_c allerdings kommt es entweder zur Relaxation durch Bildung eines Versetzungsnetzwerks [22] - also zur Abweichung von der perfekt kristallinen Struktur - oder es erfolgt ein Übergang zum Inselwachstum [162], d.h. zu einer Form des Wachstums, die es dem wachsenden Material erlaubt ohne Defektbildung zu relaxieren. Der Stranski-Krastanov-Modus besitzt daher für die Halbleiterepitaxie die größte Bedeutung. Auf ihm basiert auch die Herstellung von selbstorganisierten Quanten-Dot-Schichtsystemen [35].

2.1.2 Pseudomorphes Wachstum von δ -Schichten

Für die Herstellung derartiger Strukturen kommen nur die epitaktischen Verfahren in Frage. Die Molekularstrahlepitaxie ist in diesem Zusammenhang besonders geeignet, weil diese Art des Wachstums so weit entfernt vom thermodynamischen Gleichgewicht abläuft, daß sich Fremdatome mit Konzentrationen weit oberhalb der normalen Festkörperlöslichkeit in die Kristallmatrix einbauen lassen [19]. Dies ist die Voraussetzung um überhaupt Schichten mit hoher Germanium-Konzentration und nur wenigen Atomlagen Dicke in Silizium herstellen zu können.

Die δ -Schicht wird dabei durch die *relaxierte Gitterfehlpassung*

$$\frac{\Delta a}{a} := \frac{a_L - a_S}{a_S} \quad (2.1)$$

charakterisiert, wobei a_S die Gitterkonstante des Substrats und a_L die Gitterkonstante der Schicht bezeichnet. Wenn dieser Parameter nicht allzu groß ist, nimmt die wachsende Schicht lateral zunächst die Gitterkonstante des Substrats an. In Wachstumsrichtung wird dies durch eine entsprechende elastische Verzerrung der Einheitszelle kompensiert, d.h. wenn das Schichtmaterial in lateraler Richtung komprimiert ist, wird es sich in Wachstumsrichtung ausdehnen und umgekehrt. In diesem Fall spricht man von *pseudomorphem Wachstum*. Die Verzerrung in Wachstumsrichtung hängt dabei mit der relaxierten Gitterfehlpassung über die elastischen Konstanten der Schicht zusammen. Es gilt [83]:

$$\left(\frac{\Delta d}{d}\right)^\perp = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} \left(\frac{\Delta a}{a}\right). \quad (2.2)$$

Dieser Mechanismus funktioniert nur bis zu einer von der Größe der Gitterfehlpassung abhängigen kritischen Schichtdicke. Bei reinem Germanium auf Silizium ist $\Delta a/a = 4,17\%$. Bei dieser Größenordnung ist die kritische Schichtdicke schon nach etwa 3 Monolagen erreicht [115].

Im allgemeinen läßt sich aber auch bei optimaler Einstellung der Wachstumsbedingungen keine reine Germanium-Schicht auf Silizium abscheiden. Bei den Temperaturen, die für das kristalline Wachstum notwendig sind, ergibt sich immer eine gewisse Interdiffusion über die Grenzfläche hinweg. Die Germanium- δ -Schicht besitzt dadurch einen bestimmten Silizium-Anteil, so daß sie als Legierung Si_xGe_{1-x} beschrieben werden muß. Für diesen Fall ergibt sich die Gitterkonstante der Schicht nach dem Vegard'schen Gesetz [175] durch lineare Interpolation:

$$a_L = x a_{Si} + (1 - x) a_{Ge}. \quad (2.3)$$

Daraus folgt sofort, daß die Gitterfehlpassung der Schicht mit wachsendem Silizium-Anteil abnimmt und entsprechend auch die elastische Verzerrung in Wachstumsrichtung. Die kritische Schichtdicke für das perfekt kristalline Lagenwachstum steigt dagegen entsprechend an. Sie bleibt aber für die kleinen x -Werte, die bei der Herstellung

von δ -Schichten angestrebt werden, weiterhin im Monolagenbereich.

Trotzdem wurde kürzlich eine Methode entwickelt mit der sich die kritische Schichtdicke für das Lagenwachstum drastisch erhöhen läßt, ohne daß es zur Inselbildung im Stranski-Krastanov-Modus kommt [115]. Der Ausgangspunkt ist die Tatsache, daß sich durch die Bildung von Inseln eine Relaxation der aufgebauten Verspannungen ergibt. Die Inseln entstehen durch das bevorzugte Wachstum von kleinen Hut-Clustern mit vielen nichtabgesättigten Bindungen. Durch das Beimischen eines dritten Elements in geringer Konzentration beim epitaktischen Wachstum können diese Bindungen aber abgesättigt und so der frühe Übergang zum Inselwachstum verhindert werden [115]. Das dritte Element wird als "*Surfactant*" bezeichnet und man nennt diese Art des Wachstums "*surfactant mediated*". Mit Antimon konnte dadurch eine Germanium-Schicht von mehr als 200 Monolagen Dicke auf Silizium(001) realisiert werden [115], wobei die Verspannungen im Verlauf des Wachstums stetig durch Versetzungen abgebaut werden. Der Reiz des Verfahrens liegt insbesondere darin durch kontrollierte Zugabe des Surfactant' die Art und das Ausmaß des Relaxationsmechanismus (Inselbildung oder Entstehung eines Versetzungsnetzwerks) bestimmen zu können.

Ein weiteres Problem, das durch diese Art des Wachstums gelöst werden kann, ist die sog. Segregation des δ -Schichtmaterials. Darunter versteht man die Tendenz bestimmter Materialien in der Halbleiter-Heteroepitaxie bei der Deposition eines anderen Materials auf der Wachstumsfront aufzuschwimmen. Dadurch verlaufen die Schichtprofile und die Grenzflächen sind nicht mehr gut definiert. Auch dieses Verhalten sollte durch die Verwendung eines Surfactant' ganz erheblich eingeschränkt werden [123].

Der Surfactant selbst muß möglichst so beschaffen sein, daß er nicht innerhalb der epitaktischen Schicht bleibt, da er dort die elektrischen Eigenschaften stören würde. Ideal ist bei ihm gerade die Segregation an die Oberfläche der aufwachsenden Schicht.

Diese gesamte Technologie bietet völlig neue Perspektiven für eine verstärkte Anwendung epitaktischer Verfahren. Sie ist aber bis jetzt noch wenig erforscht. Insbesondere die Auswirkung des Surfactant' auf die frühen Stadien des Wachstums sind unbekannt. Diese können aber beim Wachstum eines δ -Schichtsystems untersucht werden.

2.1.3 Die epitaktischen Proben

Zur strukturellen Charakterisierung wurden 3 Proben hergestellt, die als Modellsysteme für die Eigenschaften von Germanium- δ -Schichten in Silizium dienen können. Grundlage für die Herstellung waren sorgfältig orientierte und nach dem aktuellen Stand der Technik polierte Silizium(001)-Substrate. Der Wachstumsprozeß selbst wurde in der MBE-Anlage der Universität der Bundeswehr München in Neubiberg durchgeführt. Es handelt sich dabei um eine Mehrkammer-Ultrahochvakuum-Anlage, die

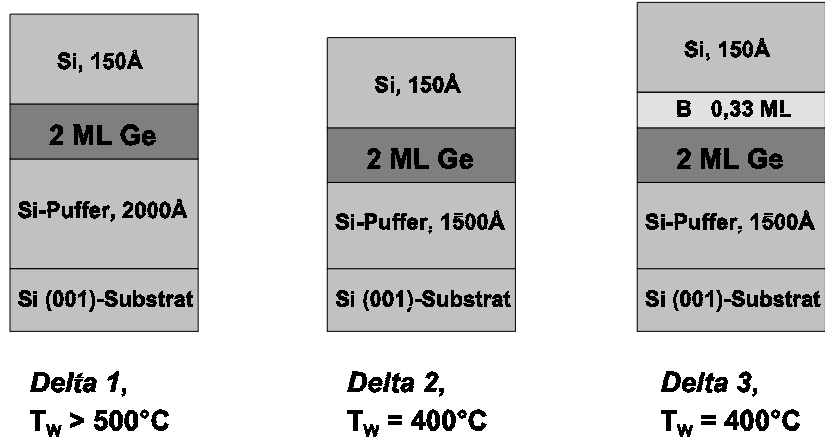


Abbildung 2.2: Die schematische Schichtstruktur für die epitaktisch gewachsenen Germanium- δ -Schichtsysteme.

es erlaubt sämtliche Prozessschritte auf einmal durchzuführen. Gleichzeitig kann der Zustand der wachsenden Oberfläche ständig durch Elektronenbeugung in situ beobachtet werden.

Der erste Schritt des epitaktischen Prozesses ist die Desorption des natürlichen Oxids nach dem Transfer in die Vakuumkammer. Dazu wird das Substrat auf über 900°C erhitzt und solange bei dieser Temperatur gehalten bis das Oxid abgedampft ist. Das macht sich durch das Auftreten scharfer Reflexe aufgrund der kristallinen Oberflächenrekonstruktion in der Elektronenbeugung bemerkbar. Zur Glättung der zurückbleibenden rauhen Substratoberfläche wird danach eine Silizium-Puffer-Schicht mit einer Dicke von 1500 \AA - 2000 \AA bei etwa 700°C gewachsen. Anschließend wird das System auf die Wachstumstemperatur der δ -Schicht abgekühlt und das Germanium wird mit einem sehr kleinen Fluß ($0,15\text{ \AA/s}$) abgeschieden. Danach wird die etwa 150 \AA dicke Silizium-Deckschicht bei derselben Temperatur gewachsen. Erst nach der Abkühlung auf Raumtemperatur wird das so entstandene System aus dem Ultrahochvakuum entnommen. Dabei bildet sich im oberen Bereich der Deckschicht wieder ein natürliches Oxid.

Die Proben unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Wachstumstemperatur ($> 500^\circ\text{C}$ bei *Delta 1*, sowie 400°C bei *Delta 2* und *Delta 3*) und hinsichtlich der Verwendung von $1/3$ Monolage Bor als Surfactant-Material (bei *Delta 3* im Gegensatz zu *Delta 2*). Der Surfactant wurde dabei im Anschluß an die δ -Schicht aufgebracht, um seinen Einfluß auf die Germanium-Segregation zu untersuchen. Der Probenaufbau ist für alle Proben in Abbildung 2.2 schematisch dargestellt.

Die Temperaturen liegen insgesamt im Bereich der sog. Niedrigtemperaturepita-

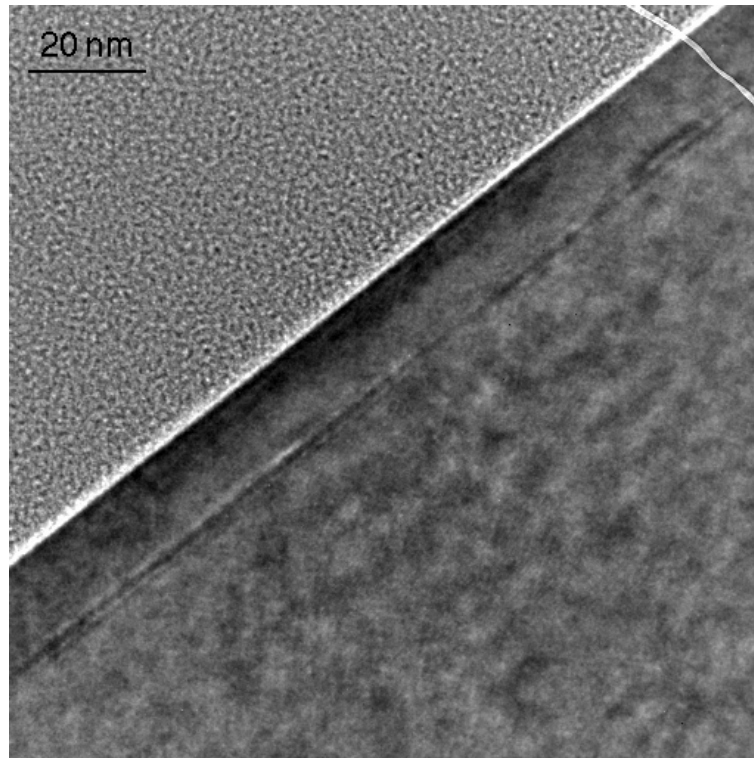


Abbildung 2.3: TEM-Aufnahme der Probe *Delta 2*, wobei die Probe senkrecht zur Oberfläche geschnitten wurde. Diese ist als dicke weiße Linie erkennbar, die von rechts oben nach links unten durch das Bild läuft. Die δ -Schicht ist die parallel dazu verlaufende dünne schwarze Linie.

xie, so daß gut definierte Grenzflächen zu erwarten sind. Außerdem wurden die einzelnen Wachstumsschritte nicht unmittelbar nacheinander ausgeführt, sondern nach dem Abschluß jeder Schicht wurde eine Wartezeit von etwa 5 Sekunden eingehalten, bevor das Wachstum der nächsten Schicht begonnen wurde. Dadurch hat das System Zeit sich zu equilibrieren ohne daß aber bereits eine wirksame Belegung der Oberfläche mit den Atomen des Restgases stattfindet [122].

2.1.4 Charakterisierung durch Transmissionselektronenmikroskopie

Zur Qualitätskontrolle wurden die gewachsenen δ -Schichtsysteme mit Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) charakterisiert. Ziel dieser Untersuchungen war es die Bildung einer vollständigen, vergrabenen Schicht mit einer Dicke im Monolagenbereich zu verifizieren. Eine typische derartige Aufnahme ist für die Probe *Delta 2* in

Abbildung 2.3 dargestellt.

Auf dem Bild ist die δ -Schicht deutlich zu erkennen. Sie ist - soweit es die mikroskopische Auflösung zuläßt - klar definiert und über den gesamten Probenbereich durchgehend ausgebildet.

Gleichzeitig macht die Aufnahme deutlich, daß die Struktur auf atomarer Ebene nicht mehr mit derartigen mikroskopischen Methoden aufgelöst werden kann, insbesondere weil der Kontrast bei hochauflösenden transmissionselektronenmikroskopischen Messungen nicht ausreichend ist. Dies kann nur mit den Methoden der Röntgenstreuung geschehen.

2.2 Bor- und Arsen-implantiertes Silizium(001)

Die Motivation zur detaillierten Untersuchung von ionenimplantiertem Silizium auf der Suche nach Realstrukturen im Nanometerbereich entspringt aus der fortschreitenden Miniaturisierung der mit diesem Verfahren hergestellten Bauelemente. Da die Größenordnung der Strukturen inzwischen in den Submikrometerbereich abgesunken ist, ist das Verständnis der durch die Herstellung bedingten Defekte bis hin zur atomaren Ebene entscheidend für die weitere Entwicklung (vgl. Kapitel 1 und [30]).

Bei der Implantation wird dabei das Dotiermaterial ionisiert und je nach Element und gewünschter Implantationstiefe auf Energien zwischen 1 keV und etwa 500 keV beschleunigt. Diese Ionen treffen auf den perfekt kristallinen Silizium-Substratkristall und deponieren ihre Energie in Form einer Kollisionskaskade bevor sie in der entsprechenden Tiefe zur Ruhe kommen. Dadurch wird im Verlauf der Implantation das Kristallgitter in Oberflächennähe weitgehend zerstört und der größte Teil der implantierten Ionen befindet sich auf elektrisch inaktiven Zwischengitterplätzen.

Daher muß nach jeder Implantation ein thermischer Ausheilschritt erfolgen, der eine Rekristallisation der Silizium-Matrix bewirkt. Außerdem wird dadurch der größte Teil der Dotieratome in elektrisch aktive Gitterplätze eingebaut. Grundsätzlich gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten des Ausheilens [9]. Beim *schnellen thermischen Ausheilen* (*"Rapid Thermal Annealing"* - RTA) wird das Material in einer Argon- oder Stickstoff-Atmosphäre durch Bestrahlen mit einer Lampe erhitzt. Das *Ofenausheilen* (*"Furnace Annealing"*) dagegen erfolgt durch direktes Heizen der Probe im Ultrahochvakuum.

Die wichtigsten Elemente für die Silizium-Dotierung sind Bor zur Herstellung von positiv und Arsen für die Erzeugung von negativ dotierten Bereichen. Von diesen beiden ist die Wechselwirkung von Bor mit Silizium noch am wenigsten verstanden. Daher steht das Bor-Silizium-System im Mittelpunkt der hier angestellten Untersuchungen.

2.2.1 Das System Bor in Silizium

Von anderen Dotiermaterialien unterscheidet sich das in Silizium implantierte Bor insbesondere durch das Phänomen der vorübergehend erhöhten Diffusion (*"Transient Enhanced Diffusion"* - TED). Dabei kann sich das Implantationsprofil im Frühstadium des Ausheilens um mehrere tausend Å verbreitern [30], wobei die Diffusionskonstante des Bor im Vergleich zum Gleichgewichtswert um bis zu 3 Größenordnungen erhöht sein kann [30].

Dieser Effekt ist bisher hauptsächlich mit Hilfe der Sekundärionenmassenspektroskopie (*"Secondary Ion Mass Spectroscopy"* - SIMS) an implantierten sowie an epitaktisch gewachsenen und anschließend mit Silizium implantierten Bor-Dotier-Profilen untersucht worden. Die epitaktischen Profile haben dabei den Vorteil, daß sie eine Entkopplung der implantationsgeschädigten und der dotierten Region ermöglichen. Es konnte beobachtet werden, daß die erhöhte Diffusion mit einer charakteristischen Zerfallszeit abklingt, die mit steigender Temperatur sehr stark abnimmt [100]. Ausserdem tritt der Effekt nur dort auf wo die Bor-Konzentration einen bestimmten, mit der Temperatur ansteigenden Wert c_c nicht überschreitet [34]. Das hat zur Folge, daß in der Regel nur das Bor in den Ausläufern des Dotierprofils an der erhöhten Diffusion teilnimmt, während in der Mitte ein statisches Konzentrationsmaximum nahezu unbeeinflusst zurückbleibt.

Aus der Tatsache, daß die kritische Konzentration c_c mit der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration skaliert und daß die diffundierende Bor-Komponente elektrisch aktiv ist [34], folgt, daß das diffundierende Bor substitutionelle Plätze im Silizium einnimmt. Die statische Bor-Komponente dagegen wird durch interstitielle und immobile Cluster erklärt [159]. Diese entstehen durch das Wachstum von unbeweglichen Cluster-Vorläufern [62], die als Verbindungen zwischen Bor-Atomen (B) und Silizium-Zwischengitteratomen (I) identifiziert wurden, wobei hauptsächlich die Form BI_2 auftritt, die dann vorwiegend durch die Kondensation von Bor-Atomen weiterwächst [121].

Die vorübergehend erhöhte Diffusion des substitutionellen Bor wird durch einen vorübergehend starken Überschuß an Silizium-Zwischengitteratomen erklärt, der nach der Implantation vorhanden ist [47]. Diese Zwischengitteratome kondensieren zunächst in sog. $\{311\}$ -Defekte, die aus zusätzlichen (311)-Netzebenen des Silizium-Gitters bestehen, in denen das Silizium 5 bis 8-atomige Ringe bildet, so daß keine freien Bindungen übrig bleiben [167]. Diese Defekte sind in die $\langle 110 \rangle$ oder äquivalente Richtungen stark ausgedehnt, während sie in die anderen Richtungen nur die Abmessungen der zusätzlichen Silizium-Ringe besitzen, so daß sich insgesamt eine Stabform ergibt [167], [30]. Im Verlauf des Ausheilens sind sie nicht stabil. Sie schrumpfen unter Emission von Silizium-Zwischengitteratomen, die dann für die erhöhte Bor-Diffusion zur Verfügung stehen [47]. Die Bor-Diffusion erfolgt dabei durch Platztausch eines substitutionellen Bor-Atoms mit einem Silizium-Zwischengitteratom und durch den umgekehrten Vorgang am Ende der Diffusionsstrecke. Sie ist daher nur solange erhöht bis alle $\{311\}$ -Defekte aufgebraucht sind, wobei die Temperaturabhängigkeit dieses

Vorgangs auch die Temperaturabhängigkeit der anomalen Diffusion insgesamt erklärt.

Dieses Bild für den Ablauf des TED-Effekts wird weiterhin durch jüngste Untersuchungen gestützt, bei denen die erhöhte Diffusion verringert oder ganz unterdrückt werden konnte, wenn Maßnahmen getroffen wurden, die den Silizium-Zwischengitterüberschuß verringern. Beispiele sind die zusätzliche Dotierung mit Phosphor [74], die verstärkte Oberflächen-Annihilation der Silizium-Zwischengitteratome durch die zusätzliche Implantation sehr niederenergetischer Silizium-Ionen [3] oder das reaktive Plasma-Ätzen [129].

Trotzdem bleiben viele Fragen offen. Unklar ist welche Größe und Verteilung in Oberflächennähe die elektrisch inaktiven, Bor-haltigen Cluster besitzen, die für den statischen Peak verantwortlich sind. Davon hängt ihr Einfluß auf die Qualität der durch Implantation und Ausheilen hergestellten Schaltelemente entscheidend ab. Insbesondere unbekannt ist außerdem der Verbleib der Silizium-Zwischengitteratome nach dem Abklingen der anomalen Bor-Diffusion. Denkbar ist, daß sie an der Kristalloberfläche ausheilen. Sie könnten aber auch zum Wachstum bereits vorhandener Defekte beitragen oder sogar neuartige Defekte bilden.

Da sich die bisherigen SIMS-Untersuchungen auf die Bestimmung von Bor-Profilen beschränken, sind sie nicht in der Lage diese Fragen zu beantworten. Die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzte diffuse Röntgenstreuung bildet dagegen die ideale Voraussetzung, um diese Probleme anzugehen.

2.2.2 Arsen in Silizium

Die Implantation von Arsen in Silizium ist die am weitesten verbreitete Methode zur negativen Dotierung von Silizium. Aber auch abgesehen von der Art der dadurch generierten Ladungsträger ergeben sich in diesem System grundlegende Unterschiede im Vergleich zum Bor-dotierten Silizium.

Beispielsweise wird eine hochgradige elektrische Aktivierung der implantierten Atome v.a. durch anschließendes Laser-Schmelzen erreicht [51]. Die im Verlauf der weiteren prozeßtechnischen Bearbeitung durchgeführten normalen Ausheilschritte reduzieren dagegen diese elektrische Aktivität wieder ganz erheblich [51]. Durch umfangreiche theoretische [116] und experimentelle [24] Untersuchungen konnte festgestellt werden, daß dies durch die Bildung von elektrisch inaktiven Komplexen aus Arsen und Leerstellen (V) des Silizium-Gitters bedingt ist. Dabei spielt der As_4V -Cluster eine dominante Rolle, es treten aber auch andere Defekt-Cluster der Form $As_nSi_{4-n}V$ auf [95].

Diese relativ kleinen Cluster sind das bestimmende Element für die Realstruktur des Arsen-Silizium-Systems. Erst bei sehr hohen Arsen-Implantationsdosen ($7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) wird das Auftreten von größeren Arsen-Prezipitaten mit einem Durchmesser von etwa 50 \AA beobachtet [170]. Daher eignet sich das Arsen-Silizium-System in Bezug auf die diffuse Streuung sehr gut als Vergleichsmaßstab für die Bor-implantier-

ten Systeme.

2.2.3 Die untersuchten Proben

2.2.3.1 Bor-implantierte Proben

Alle untersuchten Systeme wurden auf der Basis von Silizium(001)-Kristallen hergestellt, die nach dem Zonenziehverfahren (*"Float Zone Silicon"* - FZ-Si) produziert wurden. Dieses Verfahren garantiert eine höchstmögliche chemische Reinheit des Siliziums und stellt dadurch sicher, daß die angestellten Untersuchungen nicht von Verunreinigungenseffekten beeinflusst werden. Die Implantation wurde unter Standardbedingungen durchgeführt, wobei teilweise in einem zweiten Implantationsschritt zusätzliche Silizium-Ionen eingeschossen wurden, um den Effekt nachfolgender Implantationsschritte auf das ursprünglich hergestellte System zu ermitteln. Insgesamt wurden folgende Proben hergestellt und anschließend untersucht:

Probe	Implantat 1 (E, c)	Ausheilen 1 (T, t)	Implantat 2 (E, c)	Ausheilen 2 (T, t)
b1a	32 keV B, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 10 sec		
b1c	32 keV B, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 15 min		
b1d	32 keV B, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	1060° C, 10 sec		
b2a	32 keV B, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	1070° C, 10 sec	80 keV Si, $4e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 10 sec
b2c	32 keV B, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	1070° C, 10 sec	80 keV Si, $4e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 15 min
b3a	32 keV B, $6e14 \text{ cm}^{-2}$	1070° C, 10 sec	80 keV Si, $2e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 10 sec
b3c	32 keV B, $6e14 \text{ cm}^{-2}$	1070° C, 10 sec	80 keV Si, $2e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 15 min
cd	reines Si	1070° C, 10 sec	-	750° C, 10 sec
cc	reines Si	1070° C, 10 sec	-	750° C, 15 min

2.2.3.2 Epitaktisch Bor-dotierte Referenzproben

Genau wie bei den Untersuchungen zur anomalen Diffusion von Bor in Silizium ist es aber auch in diesem Fall interessant die Schädigung des Kristalls durch Implantation von der Dotierung mit Bor zu trennen und das Ausheilverhalten eines solchen Systems zu untersuchen. Zu diesem Zweck wurden Proben hergestellt bei denen epitaktisch Silizium auf Silizium gewachsen wurde. Während dieses Wachstums wurde durch gleichzeitige Evaporation von Bor eine gleichmäßige Dotierung der Oberflächenschicht erreicht. Anschließend wurden die Proben mit Silizium implantiert und nachfolgend ausgeheilt. Im einzelnen sieht das folgendermaßen aus:

Probe	$c(B)$	Ausheilen 1 (T, t)	Implantat 1 (E, c)	Implantat 2 (E, c)	Ausheilen (T, t)
be319b	$4e19 \text{ cm}^{-3}$	1070° C, 10 sec	30 keV Si, $4e13 \text{ cm}^{-2}$	100 keV Si, $1, 2e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 255 sec
be420b	$4e20 \text{ cm}^{-3}$	1070° C, 10 sec	30 keV Si, $4e13 \text{ cm}^{-2}$	100 keV Si, $1, 2e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 255 sec

Die beiden Systeme unterscheiden sich nur durch die Bor-Konzentration, wobei die beiden Werte ziemlich genau den Konzentrationen entsprechen, die bei einer Implantation von $6e14 \text{ cm}^{-2}$ bzw. $6e15 \text{ cm}^{-2}$ und einer Eindringtiefe von ca. 2000 Å im Material deponiert werden. Dadurch sind diese epitaktischen Systeme unmittelbar mit den Bor-implantierten vergleichbar.

2.2.3.3 Arsen-implantierte Proben

Um einen Vergleich zwischen dem Bor-implantierten und dem Arsen-implantierten Silizium-System zu ermöglichen, wurden auch einige Arsen-Proben analog zum Bor-System präpariert. Dabei handelt es sich um folgende Systeme:

Probe	Implantat 1 (E, c)	Ausheilen 1 (T, t)	Implantat 2 (E, c)	Ausheilen 2 (T, t)
As1d	32 keV As, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	1060° C, 10 sec		
As2a	32 keV As, $6e15 \text{ cm}^{-2}$	1070° C, 10 sec	80 keV Si, $4e14 \text{ cm}^{-2}$	750° C, 10 sec

Kapitel 3

Methoden der Röntgenstreuung zur Untersuchung oberflächennaher Realstrukturen

Dieses Kapitel behandelt die verschiedenen Methoden der Röntgenstreuung, die zur Bearbeitung der in Kapitel 2 dargestellten Fragestellung eingesetzt wurden. Zunächst werden die physikalischen Grundlagen und die Einsatzmöglichkeiten der spekulären Reflektivität behandelt. Diese gehört bereits zu den auch industriell eingesetzten Standardmethoden, die in der Literatur ausführlich dargestellt ist, angefangen von den historischen ersten Messungen [81] über die theoretischen Originalarbeiten (z.B. von Parratt [117]) bis hin zu neueren Übersichtsartikeln, z.B. von Russell [144] oder Spirkel [161]. Danach wird die diffuse Reflektivität behandelt, die im folgenden immer als nichtspekuläre Reflektivität bezeichnet wird, um sie von der diffusen Streuung in der Großwinkelbeugung zu unterscheiden. Im nächsten Abschnitt wird die Methode der Bragg-Beugung unter streifendem Einfall diskutiert. Diese Technik basiert im wesentlichen auf den Originalarbeiten ([183], [97], [177], [40], [41], [43], [45]), die die für die meisten realen Kristallstrukturen ausreichende kinematische Beschreibung enthalten. Die für weitgehend perfekte Kristalle erforderliche dynamische Herleitung findet sich in [2], [4], [5], [136], [133], [164]. Die Methode hat inzwischen v.a. für die Charakterisierung oberflächennaher Schichtsysteme breite Anwendung gefunden (vgl. [134], [126], [163], [15]). Insbesondere wird in diesem Zusammenhang aber auf die in dieser Arbeit intensiv eingesetzte diffuse Streuung und ihre unter den Begriffen "Huang-" bzw. "Stokes-Wilson-Streuung" bekannten theoretischen Beschreibungen eingegangen. Eine umfassende und aktuelle Darstellung dazu bietet der Übersichtsartikel von Ehrhart [48] für die diffuse Streuung in der Umgebung von Volumenreflexen. Die systematische Anwendung dieser Ergebnisse auf die bei der Beugung unter streifendem Einfall untersuchten Oberflächenreflexe ist einer der wesentlichen Aspekte dieser Arbeit. Ausserdem wird noch kurz auf die - auf der dynamischen Theorie beruhende - Methode der stehenden Röntgenwellen für die Positionsbestimmung von Fremdatomen einge-

gangen, die ebenfalls in der Literatur bereits in grundlegenden Übersichtsartikeln - z.B. von Batterman [13] und Zegenhagen [187] - dargestellt wurde.

3.1 Die spekuläre Reflektivität

3.1.1 Brechungsindex und Totalreflexion

Die Grundlage für das Verständnis der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie ist der material- und wellenlängenabhängige Brechungsindex n , der über das Verhältnis der Phasengeschwindigkeiten im Vakuum (c) und im Medium (v) definiert wird $n = \frac{c}{v}$. Für Röntgenstrahlen mit Photonenenergien in der Größenordnung von 10 keV, d.h. weit oberhalb der Bindungsenergien der äußeren Elektronen in den Atomhüllen liegt die Strahlungsfrequenz stark über den Resonanzfrequenzen der Elektronen, so daß diese nur zu gegenphasigen Oszillationen angeregt werden. Die Phasengeschwindigkeit der Röntgenwelle wird dadurch in Materie größer als c und man erhält $n < 1$. Für ein im allgemeinen aus m Elementen bestehendes Material läßt sich schreiben [75]:

$$n = 1 - \frac{r_e}{2\pi} \lambda^2 \sum_{j=1}^m \frac{N_A \rho_j f_j}{A_j}, \quad (3.1)$$

wobei $r_e = 2,813 \times 10^{-15}$ m den klassischen Elektronenradius bezeichnet. λ ist die Wellenlänge, N_A die Avogadro-Konstante, ρ_j , A_j und f_j sind die partielle Massendichte, die relative Atommasse, sowie der Atomformfaktor des j -ten Elements. Der Atomformfaktor beschreibt das wellenlängenabhängige Streuvermögen der Atome und besitzt die komplexe Darstellung [13]:

$$f = f_0 + f' + i f'', \quad (3.2)$$

wobei f' und f'' die Dispersions- und Absorptionskorrektur darstellen, während f_0 näherungsweise gleich der Anzahl der Elektronen und damit der Ordnungszahl des Elements ist. Der Brechungsindex besitzt daher die komplexe Darstellung

$$n = 1 - \delta - i \beta \quad (3.3)$$

deren Imaginärteil β proportional zum linearen Absorptionskoeffizienten des Materials ist. Der Realteil δ liegt für die in dieser Arbeit eingesetzten harten Röntgenstrahlen ($\lambda \simeq 1,5 \text{ \AA}$) in der Größenordnung von 10^{-5} .

Zur Charakterisierung der Dispersionseigenschaften der Materie wird aber häufig auch die dielektrische Suszeptibilität herangezogen

$$\chi = n^2 - 1, \quad (3.4)$$

für die sich bei Vernachlässigung der in δ und β quadratischen Terme ergibt:

$$\chi = -2\delta - i 2\beta. \quad (3.5)$$

Die Tatsache, daß $Re(n) < 1$ gilt, führt, zusammen mit dem Snellius'schen Brechungsgesetz

$$n_1 \cos\alpha_1 = n_2 \cos\alpha_2 \quad (3.6)$$

beim Übergang von der Luft (n_1) ins Medium ($n_2 < n_1 = 1$) zum Effekt der Totalreflexion. Unterhalb eines kritischen Winkels $\alpha_c \approx \sqrt{2} \delta$ errechnet sich ein theoretischer Ausfallswinkel von $\alpha_t \leq 0$, so daß keine propagierende Wellenlösung innerhalb des Materials erzeugt und der einfallende Strahl von der Oberfläche total reflektiert wird.

3.1.2 Die Reflektivität von Schichtsystemen

Bei kleinen Einfallswinkeln sind die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten an der Grenzfläche zweier Medien unabhängig von der Polarisationsrichtung [23] :

$$r_{1,2} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad t_{1,2} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = 1 + r_{1,2}, \quad (3.7)$$

wobei gilt

$$k_i = \frac{(2\pi)^2}{\lambda} \sqrt{\chi_i + \sin^2 \alpha_i} \quad (3.8)$$

mit der Wellenlänge λ , sowie den für das Material i charakteristischen Werten für die dielektrische Suszeptibilität χ_i und für den Einfallswinkel aus der Luft α_i . Dieser wird im Gegensatz zur Konvention in der Optik immer in Bezug auf die Grenzfläche definiert. Da sich meßbare Intensitäten nur bei - im Vergleich zum Brewster-Winkel - kleinen α -Werten finden, sind die in Gleichung 3.7 bereits enthaltenen Näherungen gerechtfertigt [23],[149]. Insbesondere kann daher auf eine Berücksichtigung des vektoriellen Charakters der Röntgenstrahlen verzichtet und eine rein skalare Theorie angewandt werden, bei der k_i jeweils die Komponente des Wellenvektors senkrecht zur Grenzfläche innerhalb des Materials darstellt. Sie enthält über χ_i implizit die Elektronendichte.

Diese *Fresnel'schen Formeln* (3.7) beschreiben die Verhältnisse an einer Grenzfläche. Sind mehrere übereinanderliegende Grenzflächen vorhanden, so müssen zur Ermittlung sowohl des reflektierten wie auch des transmittierten Signals sämtliche Beiträge von allen Grenzflächen addiert werden. Durch diese sog. Airy-Summation werden alle Mehrfachreflexionen berücksichtigt und man erhält beispielsweise bei zwei Grenzflächen - entsprechend einer dünnen Schicht auf Substrat [144]:

$$r_{1,3} = \frac{r_{1,2} + r_{2,3} e^{2ik_2d}}{1 + r_{1,2}r_{2,3} e^{2ik_2d}}, \quad (3.9)$$

wobei $r_{i,j}$ den Reflexionskoeffizienten an der Grenzfläche von i nach j bezeichnet (1: Luft, 2: dünne Schicht der Dicke d , 3: Substrat) und $r_{1,3}$ den gesamten Reflexionskoeffizienten des Systems darstellt.

Eine Verallgemeinerung auf ein System aus m Schichten auf Substrat ist ausgehend von Gleichung (3.9) durch einfache Rekursion möglich. Bezeichne "1" wieder die Luft, "2... $m + 1$ " die verschiedenen Schichten und " $m + 2$ " das Substrat, so kann zunächst der Reflexionskoeffizient $r'_{m+2,m+1}$ an der Grenzfläche zwischen unterster Schicht und Substrat bestimmt werden. Dieser ist durch Gleichung (3.7) gegeben, wenn die Ersetzungen $k_2 \rightarrow k_{m+2}$ und $k_1 \rightarrow k_{m+1}$ vorgenommen werden. Für die Reflexion zwischen unterster und zweitunterster Schicht ergibt sich dann aus Gleichung (3.9):

$$r_{m,m+1} = \frac{r'_{m,m+1} + r'_{m+1,m+2} e^{2ik_{m+1}d_{m+1}}}{1 + r'_{m,m+1}r'_{m+1,m+2} e^{2ik_{m+1}d_{m+1}}}, \quad (3.10)$$

wobei die gestrichenen Größen den Reflexionskoeffizienten an der entsprechenden Grenzfläche nach dem Muster von Gleichung (3.7) bezeichnen, während der ungestrichene Koeffizient bereits alle Mehrfachreflexionen in den darunter liegenden Schichten berücksichtigt. Dieser kann nun benutzt werden, um die Reflexionsverhältnisse an der darüberliegenden Grenzfläche zu bestimmen [144]:

$$r_{m-1,m} = \frac{r'_{m-1,m} + r_{m,m+1} e^{2ik_m d_m}}{1 + r'_{m-1,m}r_{m,m+1} e^{2ik_m d_m}}. \quad (3.11)$$

Diese Rekursion wird solange fortgesetzt bis $r_{1,2}$ - der Reflexionskoeffizient für die Grenzfläche zwischen der obersten Schicht und der Luft - erreicht ist. Er wird kurz als der Reflexionskoeffizient r des Materials bezeichnet.

Im Experiment zugänglich ist schließlich nur die vom Schichtsystem reflektierte Intensität

$$\mathcal{R} := I_{ref} := |r|^2. \quad (3.12)$$

Ihre Berechnung mit der beschriebenen Rekursion wird als *Parratt-Algorithmus* bezeichnet und sie stellt die am häufigsten eingesetzte Methode dar, um Reflexionskurven theoretisch zu berechnen. Die Anwesenheit mehrerer Grenzflächen führt zu Interferenzeffekten und dadurch zu Oszillationen mit Periodenlängen, die den Schichtdicken entsprechen. Allerdings geht bei der Intensitätsberechnung die Phaseninformation verloren, so daß eine direkte Rekonstruktion des Elektronendichteprofiles aus einer gemessenen Reflektivitätskurve nicht möglich ist. Schichtdicken und Suszeptibilitäten müssen daher iterativ durch Anpassung einer simulierten Reflektivität an die gemessenen Daten bestimmt werden. Die Details dieses Verfahrens insbesondere bei sehr kleinen Schichtdicken und beim Vorliegen eines Elektronendichtegradienten werden bei der Darstellung der entsprechenden experimentellen Ergebnisse in den Kapiteln 5 und 6 diskutiert.

3.1.3 Der Einfluß der Rauigkeit

Die bisherigen Überlegungen gelten allerdings nur für ideal glatte Grenzflächen. In realen Systemen findet man immer raue Grenzflächen vor, deren Position senkrecht zur Oberfläche des Materials lateral fluktuiert: $z = z(x, y)$.

Im allgemeinen wird davon ausgegangen, daß die fluktuierende Lage $z_{i,j}(x, y)$ der Grenzfläche zwischen den Medien i und j um einen Mittelwert $z_{0;i,j}$ Gauß-verteilt ist ([149], [9]), so daß für die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Position $z_{i,j}$ gilt:

$$P(z_{i,j}) = \frac{1}{\sigma_{i,j} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{z_{i,j} - z_{0;i,j}}{\sigma_{i,j}} \right)^2}. \quad (3.13)$$

Es ergibt sich dadurch im Bereich der Grenzfläche ein von z abhängiger mittlerer Brechungsindex $n(z)$:

$$n(z) = n_i + \int_{-\infty}^z \frac{n_j - n_i}{\sigma_{i,j} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{t - z_{0;i,j}}{\sigma_{i,j}} \right)^2} dt \quad (3.14)$$

$$= \frac{n_j + n_i}{2} + \frac{n_j - n_i}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{z}{\sigma_{i,j} \sqrt{2}} \right) \quad (3.15)$$

mit der Definition [1]

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n! (2n+1)}. \quad (3.16)$$

Der entscheidende Parameter ist dabei $\sigma_{i,j}$, das die Halbwertsbreite der durch die Rauigkeit ausgeschmierten Grenzfläche repräsentiert. Er stellt ein lateral gemittelt quantitatives Maß für die Rauigkeit dar. Sowohl die Verteilung der Grenzflächenposition nach Gleichung (3.13) als auch der Verlauf des mittleren Brechungsindex' in (3.14) sind in Abbildung 3.1 dargestellt.

Die Konsequenz einer solchen Gauß-förmigen Verteilung der Grenzflächenposition auf die Reflektivität wurde in der Literatur ausführlich diskutiert. Névot und Croce [106], sowie Vidal und Vincent [176] haben ermittelt, daß die Fresnel'schen Gleichungen (3.7) für den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten folgendermaßen modifiziert werden müssen:

$$r_{1,2}^{rauh} = r_{1,2} e^{-2k_1 k_2 \sigma_{1,2}^2} \quad t_{1,2}^{rauh} = t_{1,2} e^{\frac{1}{2}(k_2 - k_1)^2 \sigma_{1,2}^2}. \quad (3.17)$$

Zum gleichen Ergebnis kommen auch Sinha et al. [158], die das Problem mit Hilfe der "Distorted Wave Born Approximation" (DWBA) behandelt haben (vgl. Abschnitt 3.2.2).

Die Reflektivität verringert sich also mit einem von $\sigma_{1,2}$ abhängigen Faktor, der große Ähnlichkeit mit dem Debye-Waller-Faktor besitzt welcher in der Braggstreuung die Intensitätsverringerng der Reflexe beispielsweise durch thermische Schwingungen der Atome beschreibt. Die Intensitätsreduzierung macht sich dabei v.a. bei

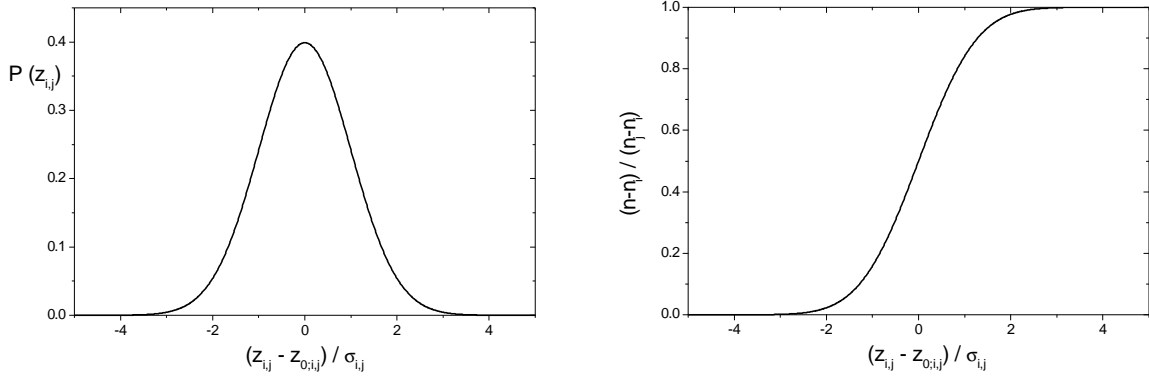


Abbildung 3.1: Wahrscheinlichkeit für die Position der Grenzfläche zwischen den Medien i und j , sowie Brechungsindexverlauf jeweils als Funktion von z .

größeren Impulsüberträgen bemerkbar, d.h. mit steigendem Einfallswinkel α_i wird die Reflektivitätskurve "nach unten gezogen". Dies ist in Abbildung 3.2 für die von einer Grenzfläche reflektierte Intensität veranschaulicht. Die Transmission durch die rauhe Grenzfläche erhöht sich dagegen mit steigender Rauigkeit.

Diese Aussagen gelten aber streng genommen nur für den Fall hinreichend kleiner Rauigkeitswerte, nach Pynn [131] solange die Beziehung

$$\sigma_{1,2} \leq \frac{1}{10 \sqrt{\rho_e r_e}} \quad (3.18)$$

erfüllt ist, wobei ρ_e die Elektronendichte und r_e den klassischen Elektronenradius darstellt. Bei größeren Rauigkeiten bzw. auch bei sehr großen lateralen Korrelationslängen der Rauigkeit gilt Gleichung (3.17) nicht mehr, insbesondere verringert sich dann auch die Transmission mit steigendem $\sigma_{1,2}$ wieder [149].

In der Rekursionsformel des *Parratt-Algorithmus* wirkt sich die Rauigkeit ebenfalls in Form einer Intensitätsreduzierung für Einfallswinkel $\alpha_i \gg \alpha_c$ aus. Zusätzlich werden die vom Schichtsystem induzierten Schichtdickenszillationen ausgedämpft.

Der *Parratt-Algorithmus* mit Berücksichtigung der Rauigkeit stellt heute die Standardmethode dar, um Reflektivitätskurven theoretisch zu simulieren bzw. um gemessene Kurven zur Ermittlung der Strukturparameter anzupassen ("Fit"). Auf seiner Grundlage wurden in den letzten Jahren zahlreiche Computerprogramme zur Datenanpassung von Reflektivitätsmessungen entwickelt ([56], [83], [164]), die teilweise auch im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt wurden.

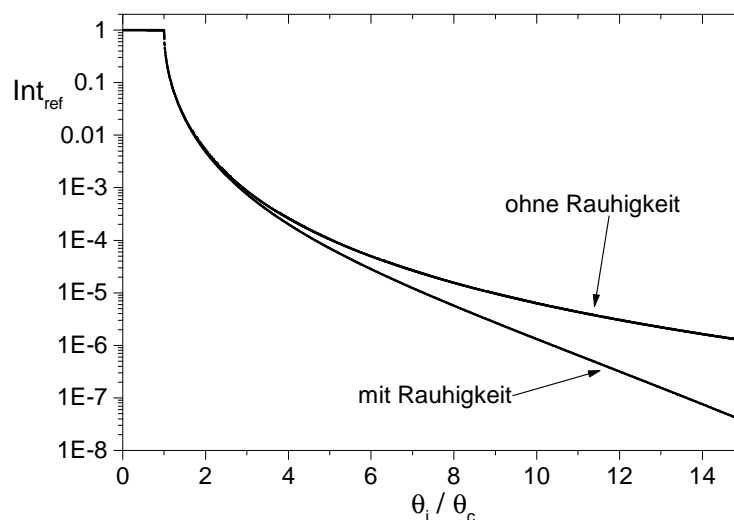


Abbildung 3.2: Reflektivität von einer Grenzfläche mit und ohne Rauigkeit.

3.2 Nichtspekuläre oder diffuse Reflektivität

Die in Abschnitt 3.1 vorgestellte Theorie beschreibt nur die spekulär reflektierte Intensität, d.h. die gestreute Intensität für die Einfallswinkel- und Ausfallswinkel gleich sind: $\alpha_i = \alpha_f$. Eine solche rein spekuläre Reflektivität tritt aber nur bei einer Grenzfläche ohne laterale Fluktuationen auf.

Immer wenn die Grenzfläche aber lateral strukturiert ist oder wenn ihre Rauigkeit nicht nur zu einer intrinsischen Verbreiterung führt sondern auch Höhenfluktuationen in lateraler Richtung erzeugt, sind entsprechende laterale Impulsüberträge möglich. Dann werden auch nichtspekuläre Streubeiträge auftreten, die auf beiden Seiten des spekulären Pfades gemessen werden können. Dies ist in Abbildung 3.3 veranschaulicht.

Diese nichtspekuläre Reflektivität wird teilweise auch als *diffuse Röntgenstreuung in Vorwärtsrichtung* bezeichnet [149]. Diese Bezeichnungsweise wird in der vorliegenden Arbeit bewußt vermieden, um eine Verwechslung mit der diffusen Streuung in der Umgebung von Großwinkel-Braggreflexen zu verhindern. Um die nichtspekulär gestreute Intensität zu bestimmen, muß der Streuvorgang detaillierter betrachtet werden, als dies in Abschnitt 3.1 geschehen ist.

3.2.1 Die Born Approximation (BA)

Da die Röntgenstrahlen nur eine schwache Wechselwirkung mit der Materie aufweisen, ist die Born'sche Näherung aus der allgemeinen Streutheorie, die für die Streuung an einem schwachen Potential gilt [156] der geeignete Ausgangspunkt. Bezeichne \vec{Q} den

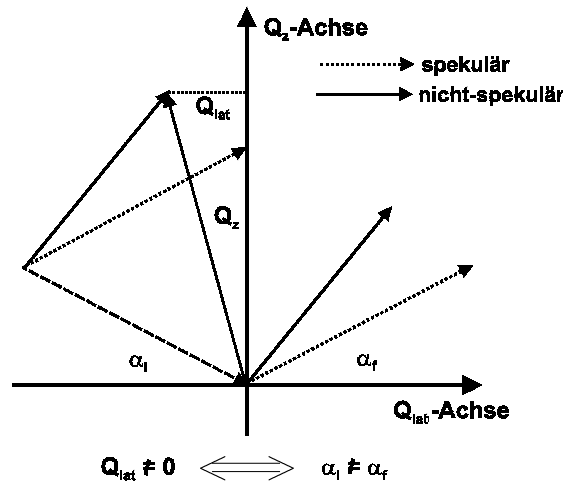


Abbildung 3.3: Zusammenhang zwischen lateralem Impulsübertrag und Verlassen des spekulären Pfades.

allgemeinen Impulsübertrag (vgl. Abbildung 3.3) gegeben durch

$$\vec{Q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i \quad (3.19)$$

mit dem einfallenden Wellenvektor \vec{k}_i und dem ausfallenden Wellenvektor \vec{k}_f , so ist der Wirkungsquerschnitt für den Streuvorgang gegeben durch [158]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N^2 e^4}{m^2 c^4} \iint_V d\vec{r} d\vec{r}' e^{-i\vec{Q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \quad (3.20)$$

Die Volumenintegrale können in Oberflächenintegrale umgewandelt werden. Ausserdem werde angenommen, daß der lateral fluktuierenden Oberfläche eindeutig eine glatte, mittlere Oberfläche zugeordnet ist, die als (x, y) -Ebene angesehen wird. z sei die Richtung entlang der entsprechenden Oberflächennormalen. Dann kann Gleichung (3.20) umgeformt werden zu [158]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N^2 e^4}{m^2 c^4} \frac{1}{Q_z^2} \iint_{S_0} dx dy \iint_{S_0} dx' dy' e^{-iQ_z[z(x, y) - z(x', y')]} e^{-i[Q_x(x - x') + Q_y(y - y')]} \quad (3.21)$$

S_0 ist der Flächeninhalt der beleuchteten Oberfläche und $z(x, y)$ beschreibt die "Auslenkung" der tatsächlichen gegenüber der mittleren Oberfläche.

Um nun Ausdrücke für die gestreute Intensität abzuleiten, wird angenommen, daß es sich bei $z(x, y) - z(x', y')$ um eine Gauß'sche Zufallsvariable handelt [158], deren

Verteilung nur von den relativen Abständen $(X, Y) := (x - x', y - y')$ abhängig ist. Für die Verteilungsfunktion gilt:

$$g(X, Y) = \langle [z(x, y) - z(x', y')]^2 \rangle, \quad (3.22)$$

wobei für die meisten Festkörperoberflächen folgende funktionale Form angesetzt werden kann [158]:

$$g(X, Y) = A (X^2 + Y^2)^h. \quad (3.23)$$

Eine solche Oberfläche wird als selbstaffine Oberfläche bezeichnet, wobei der Koeffizient h v.a. bestimmt wie "glatt" bzw. "gezackt" die Oberfläche erscheint. Für praktische Berechnungen ist Gleichung (3.23) aber noch nicht geeignet, da die Verteilungsfunktion für große Abstände $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$ divergiert. In realen Systemen bleibt sie immer auf endliche Werte beschränkt, allein schon wegen der endlichen Systemgröße. Eine diese Tatsache in Betracht ziehende geeignete Formulierung der Verteilungsfunktion lautet [158]:

$$g(R) = 2\sigma^2 \left[1 - e^{-\left(\frac{R}{\xi}\right)^{2h}} \right]. \quad (3.24)$$

Wenn nun die beleuchtete Fläche die Abmessungen s_x und s_y besitzt, so läßt sich schreiben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N^2 b^2}{Q_z^2} s_x s_y \iint_{S_0} dX dY e^{-Q_z^2 \frac{1}{2} g(X, Y)} e^{-i(Q_x X + Q_y Y)}. \quad (3.25)$$

Damit kann der in Streuexperimenten zugängliche Strukturfaktor

$$S(\vec{Q}) := \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{1}{N^2 b^2 s_x s_y} \quad (3.26)$$

explizit berechnet werden.

Zunächst werde eine völlig glatte Oberfläche ohne Rauigkeit angenommen. Dann gilt $g(R) = 0$ und

$$S(\vec{Q}) = \frac{4\pi^2}{Q_z^2} \delta(Q_x) \delta(Q_y), \quad (3.27)$$

so daß eine von 0 verschiedene Streuintensität nur auftritt, wenn die spekuläre Bedingung erfüllt ist.

Liegt dagegen eine Rauigkeit vor, deren Größe für $R \rightarrow \infty$ nicht divergiert, so gilt:

$$S(\vec{Q}) = S_{\text{spek}}(\vec{Q}) + S_{\text{diff}}(\vec{Q}), \quad (3.28)$$

wobei $S_{spek}(\vec{Q})$ durch Gleichung (3.27) gegeben ist, während für den diffusen Anteil gilt:

$$S_{diff}(\vec{Q}) = \frac{2\pi}{Q_z^2} e^{-Q_z^2 \sigma^2} \int_0^\infty dR R \left[e^{Q_z^2 (\sigma^2 - \frac{1}{2}g(R))} - 1 \right] J_0(Q_r R), \quad (3.29)$$

wobei $Q_r = \sqrt{Q_x^2 + Q_y^2}$ und J_0 die Besselfunktion nullter Ordnung darstellt.

3.2.2 Die Distorted-Wave Born Approximation (DWBA)

Die obigen Überlegungen gelten nur, wenn Q_z hinreichend groß und für die spekulär reflektierte Intensität $I_{spek} \ll 1$ gilt. Dies ist im Totalreflexionsbereich und in der Nähe des kritischen Winkels α_c aber nicht mehr der Fall. Um hierfür die spekuläre und nichtspekuläre Reflektivität zu berechnen, geht man von der stationären Wellengleichung aus, der das elektrische Feld der Röntgenstrahlen gehorcht:

$$(\Delta + k^2) E = V(\vec{r}) E, \quad (3.30)$$

wobei das Streupotential gegeben ist durch

$$V(\vec{r}) = k^2 [1 - n^2(\vec{r})] \quad (3.31)$$

mit dem Betrag des Vakuumwellenvektors k und dem ortsabhängigen Brechungsindex $n(\vec{r})$.

Das Streupotential wird nun in zwei Anteile aufgespalten

$$V(\vec{r}) = V_1(\vec{r}) + V_2(\vec{r}). \quad (3.32)$$

V_1 repräsentiert das System ohne Rauigkeit, während V_2 die durch die Rauigkeit eingeführte Störung beschreibt. Einfallender und ausfallender Strahl werden durch ebene Wellen (E_1, \vec{k}_1) und $(\tilde{E}_2, -\vec{k}_2)$ beschrieben, wobei \tilde{E}_2 einen zeitinvertierten Eigenzustand des Systems beschreibt. Das Matrixelement für den Übergang zwischen den beiden Zuständen ist dann [158]:

$$\langle 2 | S | 1 \rangle = \langle \tilde{E}_2 | V_1 | E_1 \rangle + \langle \tilde{E}_2 | V_2 | E_1 \rangle \quad (3.33)$$

und daraus ergibt sich der Streuquerschnitt über:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\langle 2 | S | 1 \rangle|^2}{16\pi^2} \quad (3.34)$$

Das Matrixelement des ungestörten Systems aus Gleichung (3.33) beschreibt wieder die rein spekuläre Reflektivität \mathcal{R} beim Fehlen jeglicher Rauigkeit [68]:

$$M_1 := |\langle \tilde{E}_2 | V_1 | E_1 \rangle|^2 = s_x s_y k^2 \sin^2 \alpha_1 \mathcal{R} \delta(\vec{k}_{2,\parallel} - \vec{k}_{1,\parallel}). \quad (3.35)$$

Wenn mit $u(x, y)$ die Abweichung der aktuellen Oberflächenposition von der mittleren Oberfläche bezeichnet wird, dann ist s_{\pm} der Teil der rauhen Oberfläche, für den $u(x, y) > 0$ bzw. < 0 gilt. Damit können dann die Zufallsfunktionen F_{\pm} definiert werden [68]:

$$F_{\pm}(\vec{Q}) = \int_{s_{\pm}} dx dy \int_z^{z+u(x,y)} dz e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \quad (3.36)$$

und für das Matrixelement der Störung läßt sich schreiben [158]:

$$M_2 := |\langle \tilde{E}_2 | V_2 | E_1 \rangle|^2 = k^2 (1 - n^2) \times \quad (3.37)$$

$$\left[F_+(\vec{Q}) + r^{2'} F_+(\vec{Q}_1) + r^1 F_+(\vec{Q}_2) + r^{2'} r^1 F_+(\vec{Q}_3) + t^2 t^1 F_-(\vec{Q}_4) \right].$$

Dabei sind die verschiedenen Streuvektoren gegeben durch:

$$\begin{aligned} \vec{Q} &= \vec{k}_2 - \vec{k}_1 \\ \vec{Q}_1 &= \vec{k}'_2 - \vec{k}_1 \\ \vec{Q}_2 &= \vec{k}_2 - \vec{k}'_1 \\ \vec{Q}_3 &= \vec{k}'_2 - \vec{k}'_1 \\ \vec{Q}_4 &= \vec{k}_2^t - \vec{k}_1^t, \end{aligned} \quad (3.38)$$

wobei die ungestrichenen Größen die Wellenvektoren im Vakuum, die gestrichenen dagegen die Vektoren im Medium darstellen. Die mit t gekennzeichneten Vektoren beschreiben die transmittierten Wellen. Die r^1 , $r^{2'}$, t^1 und t^2 sind die entsprechenden Reflexions- und Transmissionskoeffizienten aus Gleichung (3.7) für die Wellen \vec{k}_1 , \vec{k}_2 und \vec{k}'_2 an der betrachteten Grenzfläche.

Auf der Basis dieser Überlegungen kann der Streuquerschnitt aus Gleichung (3.34) ebenfalls wieder in einen spekulären und diffusen Anteil aufgespalten werden [68]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{spek} + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} \\ &= \frac{1}{16\pi^2} |M_1 + M_2|^2 + \frac{1}{16\pi^2} [\langle |M_2|^2 \rangle - |\langle M_2 \rangle|^2] \end{aligned} \quad (3.39)$$

Die entsprechenden Teil-Streuquerschnitte lassen sich jetzt direkt berechnen. Man erhält unter Verwendung von (3.39), (3.35) und (3.37):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{spek} = s_x s_y \delta(Q_x) \delta(Q_y) k^2 \sin^2 \theta_1 |\tilde{R}(\vec{k}_1)|^2 \quad (3.40)$$

mit

$$\begin{aligned}
\tilde{R}(\vec{k}_1) &= r^1 - \frac{Q_c^2}{4} \left[\frac{1}{2Q_z^2} \left(1 - e^{-\frac{1}{2}Q_z^2\sigma^2} \right) (1 - (r^1)^2) + \frac{(t^1)^2}{2Q_z Q_z^t} \left(1 - e^{-\frac{1}{2}(Q_z^t)^2\sigma^2} \right) \right. \\
&\quad + \frac{i2\sigma r^1}{\sqrt{2\pi}Q_z} + \frac{i\sigma}{Q_z} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(2j-1)!!} (-Q_z^2\sigma^2)^{j-1} (1 + (r^1)^2) \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(2j-1)!!} (-(Q_z^t)^2\sigma^2)^{j-1} (t^1)^2 \right] \right] \quad (3.41)
\end{aligned}$$

und

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} = s_x s_y \frac{|k^2(1-n^2)|^2}{16\pi^2} |t^1|^2 |t^2|^2 S(\vec{Q}_t) \quad (3.42)$$

mit

$$\begin{aligned}
S(\vec{Q}_t) &= \frac{1}{|Q_z^t|^2} e^{-\frac{\sigma^2}{2}[(Q_z^t)^2 + (Q_z^{t*})^2]} \times \\
&\quad \iint_{S_0} dX dY \left(e^{|Q_z^t|^2(\sigma^2 - \frac{1}{2}g(R))} - 1 \right) e^{i(Q_x X + Q_y Y)} \quad (3.43)
\end{aligned}$$

Damit sind zunächst nur die Verhältnisse an einer Grenzfläche beschrieben. Die Verallgemeinerung auf ein beliebiges Schichtsystem ist im Rahmen der vorliegenden Ableitung aber einfach möglich [68]. Für jede Grenzfläche j , die die Schichten j und $(j+1)$ voneinander trennt, werden die Größen s_{\pm}^j , u^j und F_{\pm}^j analog zu dem Fall einer Grenzfläche definiert. Genau wie in (3.38) erhält man die Streuvektoren \vec{Q}^j , \vec{Q}_1^j , \vec{Q}_2^j und \vec{Q}_3^j mit Hilfe der entsprechenden Wellenvektoren \vec{k}_1^j , $\vec{k}_1^{j'}$, \vec{k}_2^j und $\vec{k}_2^{j'}$. Die transmittierten Wellen fehlen in diesem Zusammenhang, sie werden jeweils der nächsttieferen Schicht $j+1$ zugeordnet.

Damit lassen sich bereits die für die Bestimmung der Streuquerschnitte erforderlichen Matrixelemente ausrechnen. M_1 ergibt sich wieder aus Gleichung (3.35) und die dort eingehende spekuläre Reflektivität wurde in Abschnitt 3.1.2 beschrieben, siehe Gleichung (3.10) - (3.12). Für M_2 gilt:

$$\begin{aligned}
M_2 &= k^2 \sum_{j=1}^n (n_j^2 - n_{j+1}^2) \times \\
&\quad [t_{j,j+1}^1 t_{j,j+1}^2 F_+^j(\vec{Q}^j) + t_{j,j+1}^2 r_{j,j+1}^1 F_+^j(\vec{Q}_2^j) + r_{j,j+1}^2 t_{j,j+1}^1 F_+^j(\vec{Q}_1^j) \\
&\quad + r_{j,j+1}^1 r_{j,j+1}^2 F_+^j(\vec{Q}_3^j) + t_{j+1,j+2}^1 t_{j+1,j+2}^2 F_-^j(\vec{Q}^{j+1}) + t_{j+1,j+2}^2 r_{j+1,j+2}^1 F_-^j(\vec{Q}_2^{j+1}) \\
&\quad + t_{j+1,j+2}^1 r_{j+1,j+2}^2 F_-^j(\vec{Q}_1^{j+1}) + r_{j+1,j+2}^1 r_{j+1,j+2}^2 F_-^j(\vec{Q}_3^{j+1})]. \quad (3.44)
\end{aligned}$$

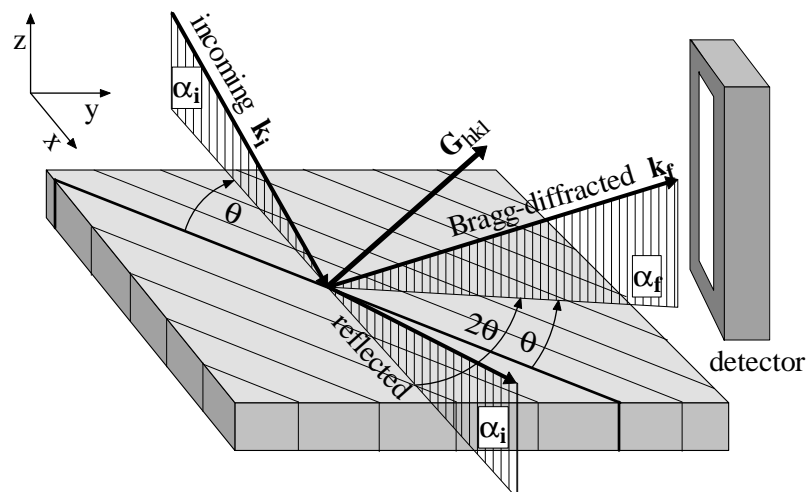


Abbildung 3.4: Experimentelle Anordnung für Beugungsmessungen bei streifendem Ein- und Ausfall.

Damit lassen sich nun im Prinzip die spekulären und nichtspekulären Reflektivitätsbeiträge von beliebigen Schichtsystemen bestimmen. Die DWBA gilt streng genommen nur für kleine senkrechte Impulsüberträge Q_z , für große Q_z ist der Übergang zur BA erforderlich.

Allerdings bewegen sich alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen in einem Bereich, in dem die Beschreibung mit Hilfe der DWBA unbegrenzt gültig ist.

3.3 Beugung unter streifendem Einfall

3.3.1 Grundlagen

Die bisher diskutierten Streusignale in Vorwärtsrichtung sind nur auf die Elektronendichte des Materials empfindlich. Die Kristallinität hat dagegen keinen Einfluß, so daß amorphe und perfekt kristalline Schichtsysteme, deren Strukturparameter und Elektronendichten gleich sind, auch dieselbe Reflektivität besitzen.

Um auch die kristalline Qualität oberflächennaher Bereiche zu untersuchen, muß die Geometrie des streifenden Einfalls mit der Röntgenbeugung kombiniert werden. Die dazu verwendete experimentelle Anordnung ist in Abbildung 3.4 dargestellt.

Als Ausgangspunkt für die Berechnung der in den Detektor gestreuten Intensität dient Gleichung (3.7), wobei aber im Gegensatz zu den vorangegangenen Abschnitten

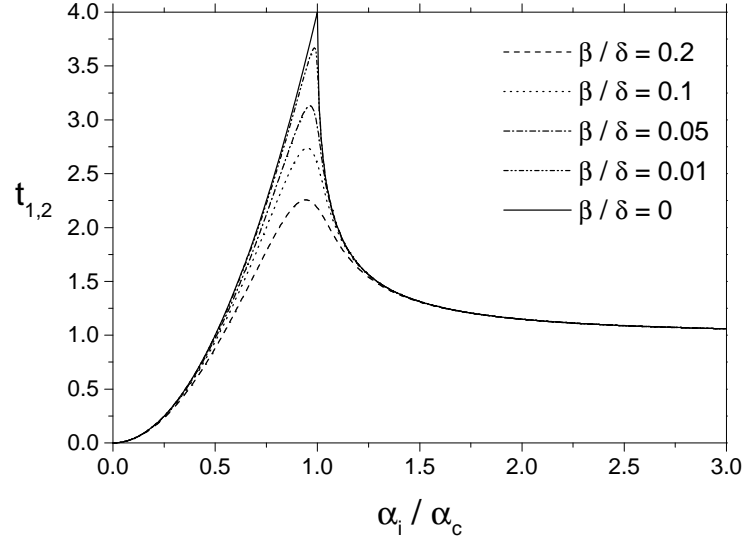


Abbildung 3.5: Der Transmissionskoeffizient $t_{1,2}$ aus Gleichung (3.7) für verschieden starke Absorption.

die Transmission näher beleuchtet werden soll. Der Transmissionskoeffizient ist in Abbildung 3.5 für verschiedene Verhältnisse zwischen dem Absorptionsanteil β und dem Dispersionsanteil δ des Brechungsindex' dargestellt.

Man erkennt deutlich wie die Transmission in der Umgebung des kritischen Winkels deutlich erhöht wird. Die Ursache dafür ist die kohärente Kopplung zwischen den einfallenden, reflektierten und transmittierten Wellenfeldern im Bereich der Oberfläche. Die transmittierte Welle wird dabei in das Material hinein exponentiell gedämpft mit einer charakteristischen Eindringtiefe von [45]:

$$x_E = \frac{1}{2} \sqrt{2} \frac{\lambda}{\pi \sqrt{(2\delta - \sin^2 \alpha_i) + \sqrt{(2\delta - \sin^2 \alpha_i)^2 + 4\beta^2}}}, \quad (3.45)$$

die in Abbildung 3.6 wieder für verschiedene Absorptionsstärken veranschaulicht ist.

Für $\alpha_i \rightarrow 0$ erhält man dann die minimale Eindringtiefe. Sie beträgt im Fall von Silizium für eine Wellenlänge von $1,5 \text{ \AA}$ ca. 65 \AA . Durch diese begrenzte Eindringtiefe breitet sich die transmittierte Welle im wesentlichen nur parallel zur Oberfläche aus. Sie wird daher als *evaneszente Welle* bezeichnet. Diese kann nun an Netzebenen des Kristalls, die senkrecht zur Oberfläche stehen, gebeugt werden und ist daher auf die oberflächennahe kristalline Struktur des Materials in lateraler Richtung empfindlich [97], [177]. Die Bragg-Bedingung lautet in diesem Fall: $\vec{Q}_{\parallel} = \vec{G}_{hkl}$, wobei \vec{G}_{hkl} einen reziproken Gittervektor parallel zur Oberfläche repräsentiert. Die unter dem entsprechenden Bragg-Winkel $2\theta_B$ gebeugte Welle kann das Material anschließend unter ei-

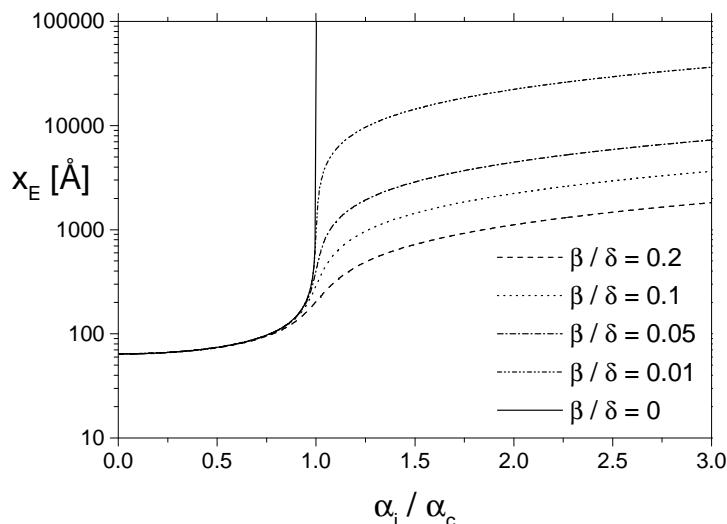


Abbildung 3.6: Die charakteristische Eindringtiefe für die gleichen Absorptionsverhältnisse wie in Abbildung 3.5.

nem streifenden Ausfallswinkel α_f wieder verlassen (vgl. Abbildung 3.4). Das optische Reziprozitätstheorem erfordert, daß dieser Ausfall von derselben Art von Transmissionskoeffizient bestimmt wird wie in Gleichung (3.7), nur daß der Einfallswinkel α_i durch den Ausfallswinkel α_f zu ersetzen ist.

3.3.2 Ableitung der gebeugten Intensität

Zur genauen Beschreibung des Beugungsvorgangs wird wieder die Distorted Wave-Born Approximation herangezogen (siehe Abschnitt 3.2.2). Die Aufspaltung des Streupotentials von Gleichung (3.31) erfolgt diesmal so, daß V_1 das Material mit dem mittleren Brechungsindex aus Gleichung (3.3) beschreibt, während V_2 die Abweichungen von diesem Mittelwert durch die atomare Struktur enthält [177]. Die Strategie zur Behandlung des Streuprozesses ist zweigeteilt. Zunächst wird das von V_1 repräsentierte Streuproblem für eine einfallende ebene Welle gelöst. Dadurch erhält man neben den spekulär und nichtspekulär reflektierten Wellen die transmittierte Welle, die sich bei entsprechend kleinem α_i parallel zur Oberfläche ausbreitet. Diese evaneszente Welle dient dann als einfallende Welle für das durch V_2 gegebene Streuproblem [177], wobei die Streuintensität rein kinematisch berechnet wird. Insgesamt ergibt sich durch diese Zerlegung ein semikinematischer Ansatz, der die Brechungsverhältnisse, die ansonsten nur der dynamischen Theorie inhärent sind, exakt berücksichtigt. Die Streuung wird abgesehen davon weiterhin kinematisch behandelt. Die genaue mathematische Rechnung liefert für die bei vorgegebenen Einfallswinkel und Ausfallswinkeln in den Detektor

von Abbildung 3.4 gestreute Intensität [40], [44], [45]:

$$I_{GID}(\vec{Q}') \propto |t_i|^2 |S(\vec{Q}')|^2 |t_f|^2 \quad (3.46)$$

mit dem Impulsübertrag \vec{Q}' innerhalb des Materials und den Transmissionskoeffizienten für Einfall und Ausfall.

Neben der Berücksichtigung der Transmissionen ergibt sich eine weitere Besonderheit im Vergleich mit der Volumenstreuung aus der Tatsache, daß die z -Komponente des Impulsübertrages eine komplexe Grösse darstellt [44]:

$$Q'_z = k_f^{(z)'} - k_i^{(z)'} \quad (3.47)$$

mit

$$k_{i,f}^{(z)'} = \pm \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) \sqrt{\sin^2 \alpha_{i,f} - 2\delta - i2\beta}. \quad (3.48)$$

Dadurch ergibt sich letztendlich die Oberflächensensitivität der Methode, denn die in den Detektor gestreute Strahlung resultiert aus einer charakteristischen *Streutiefe* Λ , die im Gegensatz zur reinen Eindringtiefe (Gleichung (3.45)) von beiden streifenden Winkeln abhängig ist. Es gilt [44], [45]:

$$\Lambda = \frac{1}{|Im(Q'_z)|} = \frac{\lambda}{2\pi(l_i + l_f)} \quad (3.49)$$

und

$$l_{i,f} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(2\delta - \sin^2 \alpha_{i,f}) + \sqrt{(2\delta - \sin^2 \alpha_{i,f})^2 + 4\beta^2}}. \quad (3.50)$$

Der Verlauf dieser Streutiefe als Funktion von α_f ist für ein bestimmtes Verhältnis β/δ und für verschiedene α_i in Abbildung 3.7 dargestellt (vgl. [45]). Es zeigt sich, daß Λ nicht nur für $\alpha_i < \alpha_c$ auf den unmittelbaren Oberflächenbereich beschränkt ist, sondern daß dies auch für $\alpha_f < \alpha_c$ unabhängig von dem Wert von α_i der Fall ist. D.h. auch bei ausreichender Eindringtiefe der Strahlung kann das im Volumen erzeugte, gebeugte Signal nicht unter beliebig kleinen Ausfallswinkeln aus dem Material austreten.

Der Strukturfaktor in Gleichung (3.46) ergibt sich aus dem Betragsquadrat der Streuamplitude. Zur Berechnung wird der Streuvektor in die Komponenten parallel und senkrecht zur Oberfläche aufgespalten. Nur für die lateralen Koordinaten ergibt sich dann eine de facto unendlich ausgedehnte Struktur, während in z -Richtung die Zahl der Streuer eng begrenzt ist.

Für die kohärente Bragg-Streuung erhält man daher [45]:

$$S_{Bragg}(\vec{Q}_{||}, Q'_z) = |F_{hkl}|^2 \delta(\vec{Q}_{||} - \vec{G}_{hkl}) \frac{1}{|1 - e^{iQ'_z a_{\perp}}|^2}, \quad (3.51)$$

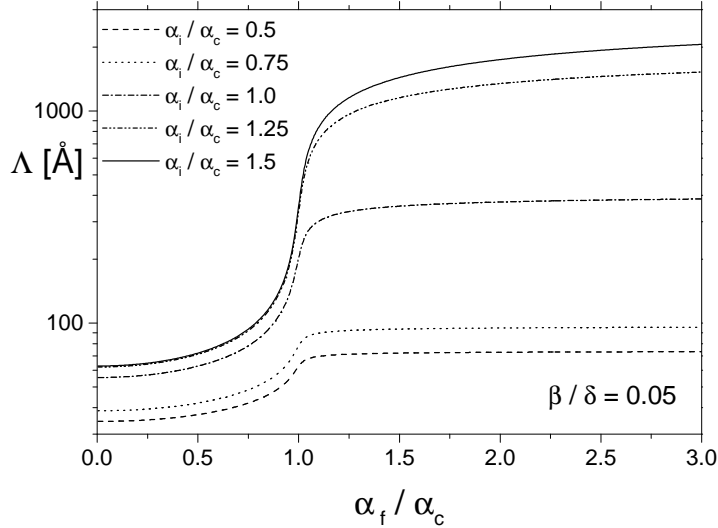


Abbildung 3.7: Die Streutiefe bei der Beugung unter streifendem Ein- und Ausfall für festes β bei verschiedenen Einfallswinkeln als Funktion von α_f .

mit dem Strukturfaktor F_{hkl} der Einheitszelle und der Gitterkonstanten a_{\perp} senkrecht zur Oberfläche. Dabei wird vorausgesetzt, daß die durch die δ -Funktion in Gleichung (3.51) gegebene *Oberflächen-Bragg-Bedingung* durch eine Variation von Q'_z nicht verletzt wird.

Dabei ist zu beachten, daß die Bragg-Bedingung immer dann exakt erfüllt werden kann, wenn für die streifenden Winkel $\alpha_i = \alpha_f = \alpha$ gilt, weil dann die Projektionen der ein- und ausfallenden Wellenvektoren auf die Oberfläche gleich lang sind. Der Bragg-Winkel ist allerdings jeweils von α abhängig [45]:

$$\theta_{Bragg}(\alpha) = \arcsin \left(\frac{|\vec{G}_{hkl}|}{2k \cos \alpha} \right). \quad (3.52)$$

Wenn die streifenden Winkel nicht gleich sind ergibt sich eine systematische Abweichung von der Bragg-Bedingung [2]:

$$\sin 2\theta \Delta\theta \approx \frac{1}{2}(\alpha_f^2 - \alpha_i^2), \quad (3.53)$$

die aber in der Praxis nur wenige Winkelsekunden ausmacht und daher immer dann vernachlässigt werden kann, wenn keine dynamisch streuenden Kristalle vorliegen. Der typische Verlauf der Bragg-Streuung entlang α_f (α_f -Spektrum) ist in Abbildung 3.8 für verschiedene α_i -Werte dargestellt.

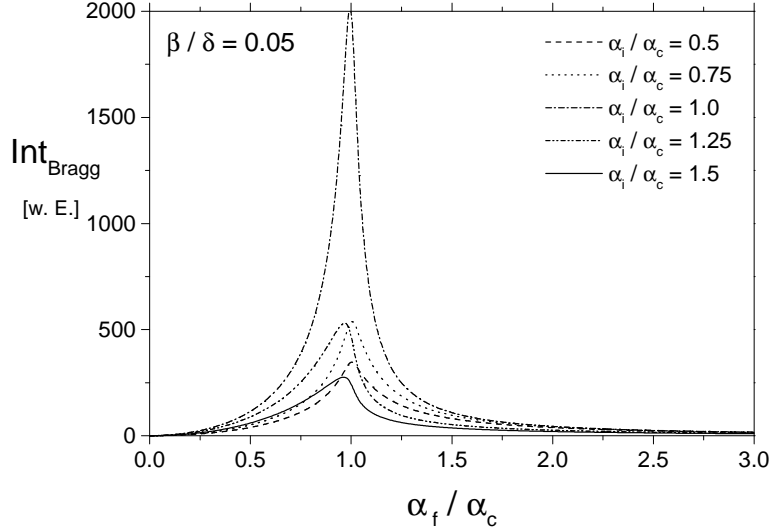


Abbildung 3.8: Intensitätsverlauf entlang α_f für einen Oberflächen-Bragg-Reflex.

Außerhalb der Bragg-Bedingung tritt genau wie bei der Volumenbeugung diffuse Streuung für jeden nichtperfekten realen Kristall auf. Der diffuse Strukturfaktor ist zur Anzahl der streuenden Ebenen und damit zur Eindringtiefe proportional. Wenn die entsprechende inkohärente Streuamplitude nur eine langsam variierende Funktion der lateralen Impulsüberträge Q_x und Q_y ist, so kann diese Abhängigkeit zunächst vernachlässigt werden und es gilt [44], [45]:

$$S_{diff}(\vec{Q}_{||}, Q'_z) \propto f_{diff}^2 \Lambda. \quad (3.54)$$

Hier ist nur die Abhängigkeit von Q'_z implizit über Λ enthalten. Auch in diesem Fall wurde die Streuintensität für verschiedene Einfallswinkel berechnet. Sie ist in Abbildung 3.9 dargestellt. Diese reine Q'_z -Abhängigkeit kann selbst dann isoliert werden, wenn die inkohärente Streuamplitude explizit von den lateralen Impulsüberträgen abhängt, diese aber im Verlauf der Messung konstant gehalten werden.

Auch bei der diffusen Streuung ist - wie beim Bragg-Reflex - die Intensität im Bereich des kritischen Winkels deutlich erhöht. Das ist eine Konsequenz der Transmissionsfunktion und damit ein rein optischer Effekt, der nicht von der Struktur des Materials bestimmt wird.

Allerdings sind auch starke Unterschiede zu erkennen. Während der Bragg-Reflex im wesentlichen nur bei Ein- und Ausfallswinkeln in der Nähe des kritischen Winkels gemessen werden kann, ist die diffuse Intensität um so größer je größer α_i gewählt wird. Für $\alpha_i > \alpha_c$ bleibt sie schließlich im Bereich $\alpha_f > \alpha_c$ praktisch konstant unabhängig von der Wahl des Ausfallswinkels. Diese Tatsache ist die Grundlage für die

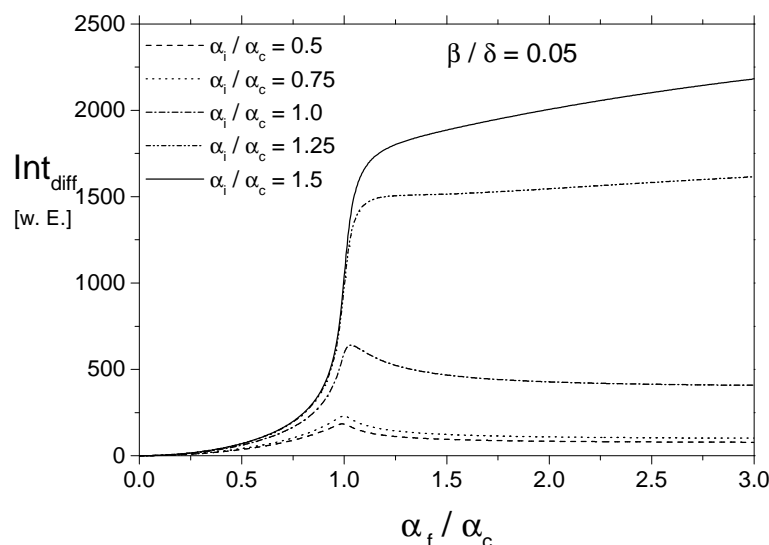


Abbildung 3.9: Verlauf der diffus gestreuten Intensität entlang α_f .

in Kapitel 5 diskutierten Messungen, bei denen Ein- und Ausfallswinkel beide deutlich größer als α_c gewählt wurden. In diesem Regime erreicht man eine größtmögliche Unabhängigkeit von der genauen Justage der streifenden Winkel und die diffuse Intensität kann als Funktion des lateralen Impulsübertrages detailliert bestimmt werden.

3.3.3 Röntgenstreuung unter streifendem Einfall an Kristallen mit Defekten

Wenn ein Kristall Defekte enthält, so können diese auch in geringen Konzentrationen zu erheblichen Veränderungen der Kristallstruktur führen. Man unterscheidet interstitielle Defekte, die das Gitter der Kristallmatrix aufweiten und Leerstellendefekte, die das Gitter kontrahieren. Die einfachsten Defekte sind dabei einzelne Zwischengitteratome, einzelne Leerstellen und einzelne substitutionelle Fremdatome. Diese werden als Punktdefekte bezeichnet. Sie können sich auch zu ausgedehnten Punktdefekt-Clustern zusammenlagern, deren räumliche Ausdehnung aber in der Regel gering ist (Radius $< 100 \text{ \AA}$). Daneben treten Gitterdefekte auf, die ihrer Natur nach eine sehr große Ausdehnung besitzen. Insbesondere sind dies Schrauben- und Linienversetzungen, Versetzungsringe und Stapelfehler.

Im allgemeinen werden als Folge der Defekte die Gitteratome der Matrix aus ihren idealen Positionen verschoben. Außerdem kann sich auch die mittlere Gitterkonstante der Kristallmatrix ändern. Dadurch kommt es bei der Röntgenstreuung ebenfalls zu starken Veränderungen. Insbesondere verringert sich durch die Abweichung von

der perfekten dreidimensionalen Ordnung die Intensität der Bragg-Reflexe, wobei die Intensitätsdifferenz im Vergleich zum perfekten Kristall als diffuse Streuung in der Umgebung der Reflexe wieder auftaucht. Dieses Phänomen ist in der Literatur ausführlich beschrieben worden - ausgehend von den grundlegenden Arbeiten von Ekstein [49] und Huang [73], über die detaillierten Darstellungen von Dederichs [36], [37], [38], [39], Trinkaus [171], [172], [173], [174], und Krivoglaz [88], [89] - bis hin zu neueren Arbeiten [42], [79]. Auch die Form der Bragg-Reflexe kann sich ändern [67]. Da dieser Effekt aber im Rahmen der vorliegenden Arbeit keine Rolle spielte (vgl. Kapitel 5), wird auf eine ausführliche Diskussion an dieser Stelle verzichtet.

In diesem Abschnitt wird zunächst ausgehend von den Verhältnissen im Volumen die diffuse Streuung durch Punktdefekte beschrieben. Danach werden ausgedehnte Defekte diskutiert und anschließend wird der Einfluß der Geometrie des streifenden Einfalls auf die gemessenen diffusen Intensitäten behandelt.

3.3.3.1 Die diffuse Streuung durch Punktdefekte

Während einzelne Punktdefekte im allgemeinen keine starken lokalen Änderungen der Kristallstruktur bewirken, so besitzen sie doch ein *langreichweitiges Verzerrungsfeld*, das nur langsam mit der Entfernung vom Defekt abnimmt. Dabei werden die atomaren Positionen im Kristall beschrieben durch $\vec{r}_m = \vec{r}_m + \vec{u}_m$, wobei \vec{r}_m die Position des m -ten Atoms im mittleren Gitter darstellt und \vec{u}_m die Auslenkung aus dieser Position. Es ist dann [39], [172]

$$\sum_{m=1}^{\infty} \vec{u}_m = 0. \quad (3.55)$$

In unmittelbarer Nähe des Defekts besitzen die Verschiebungen \vec{u}_m einen komplizierten Verlauf, in großer Entfernung dagegen ergibt sich ein einfaches Verschiebungsfeld und es gilt mit dem Abstand R_m vom Defektzentrum:

$$|\vec{u}_m| \propto \frac{1}{R_m^2}. \quad (3.56)$$

Unabhängig von den tatsächlichen Kräften läßt sich dieses Fernfeld durch 3 orthogonale Kräftepaare beschreiben, die in einem bestimmten Abstand l vom Defektzentrum radial nach außen angreifen. Ihre Stärke und Orientierung im Raum wird durch den sog. *Kraftdipoltensor* $P_{i,j}$ beschrieben. Wird dieser diagonalisiert, dann erhält man die Einzelkräfte unmittelbar über die Beziehung

$$f_i = \frac{P_{i,i}}{l}. \quad (3.57)$$

Diese Kräfte, die sog. *Kanzaki-Kräfte* [78] erzeugen ein Fernfeld der Verschiebungen, das mit dem des Defekts identisch ist. Sie entsprechen analog der elektromagnetischen

Theorie einer Dipolentwicklung des Kraftfeldes, die für die Beschreibung des Fernfeldes der Verschiebungen ausreicht. Auch das Nahfeld der Verschiebungen kann mit diesem Ansatz erfaßt werden. Allerdings müssen dann weitere Terme der Multipolentwicklung hinzugenommen werden. Dieses Verzerrungsfeld bewirkt eine Schwächung der Bragg-Reflexe durch einen statischen Debye-Waller-Faktor in Abhängigkeit vom reziproken Gittervektor:

$$e^{-L} := \langle e^{i\vec{G}\cdot\vec{u}_m} \rangle, \quad (3.58)$$

wobei für den *statischen Debye-Parameter* L in Abhängigkeit von der Defektkonzentration c bei hinreichend kleinen Konzentrationswerten gilt:

$$L = c \sum_m (1 - \cos \vec{G} \cdot \vec{u}_m). \quad (3.59)$$

In dieser Einzeldefektnäherung ($c \ll 1$) sind die Verschiebungen in der Umgebung eines Defekts im wesentlichen durch diesen selbst bestimmt.

Gleichzeitig ergibt sich im allgemeinen eine Verschiebung der Bragg-Reflexe aufgrund der durch die Defekte verursachten Gitterkonstantenänderung. Diese läßt sich ebenfalls mit Hilfe des Kraftdipoltensors bestimmen [48]:

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{c}{3V_a} \frac{Sp(P_{i,j})}{c_{11} + 2c_{12}} \quad (3.60)$$

Für die von den Defekten verursachte diffuse Streuung gilt an einem beliebigen Ort \vec{Q} des reziproken Raumes:

$$I_{diff}(\vec{Q}) = I(\vec{Q}) - I_{Bragg}(\vec{Q}), \quad (3.61)$$

wobei das gesamte Streuproblem in kinematischer Näherung behandelt werden kann. Es werde angenommen, daß sich die Defekte selbst an den Orten $\vec{r}_\mu = \vec{r}_\mu + \delta\vec{r}_\mu$ befinden und das Streuvermögen f_μ besitzen. Für unkorrelierte Defekte und den Fall, daß sich die Verschiebungsbeiträge von den einzelnen Defekten linear überlagern $\vec{u}_m = \sum_\mu \vec{u}_m^\mu$ (Einzeldefektnäherung) gilt dann bei insgesamt kleinen Verschiebungen ($\vec{Q} \cdot \vec{u}_m \ll 1$) [39], [48]:

$$I_{diff}(\vec{Q}) = c |f_D(\vec{Q}) + \sum_m f_m e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_m} (e^{i\vec{Q}\cdot\vec{u}_m} - 1)|^2. \quad (3.62)$$

f_D bezeichnet dabei den Streubeitrag durch den Defekt selbst (*Laue-Streuung*), während der andere Term die diffuse Streuung aufgrund des Verzerrungsfeldes beschreibt. Im Fall eines monoatomaren Gitters gilt $f_m = f$, wobei f das Streuvermögen

der Gitteratome darstellt. Dann sind für das Streuvermögen des Punktdefektes folgende Fälle denkbar:

$$f_D = \begin{cases} -f & \text{für eine Leerstelle} \\ f' e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}^{int}} & \text{für ein Fremdatom mit } f' \text{ an der Stelle } \vec{r}^{int} \\ f' - f & \text{für ein substitutionelles Fremdatom mit } f' \\ f(2 \cos \frac{1}{2}\vec{Q}\cdot\vec{l} - 1) & \text{im Fall einer Hantel der Länge } \vec{l} \text{ im Zwischengitter.} \end{cases} \quad (3.63)$$

Für Punktdefekte ist die Streuung durch das Verzerrungsfeld in der Regel wesentlich größer als diejenige durch den Defekt selbst. Die Verschiebungen machen sich aber nur auf großen Längenskalen bemerkbar, während die Abstände zwischen benachbarten Atomen kaum verändert werden. Entsprechend findet sich die Verzerrungsfeldstreuung im reziproken Raum in unmittelbarer Nähe der Bragg-Reflexe. Daher kann die Exponentialfunktion in (3.62) entwickelt und auf den linearen Term reduziert werden. Es ergibt sich mit $\vec{Q} = \vec{G} + \vec{q}$ für die Intensität als Quadrat der Streuamplitude [93]:

$$I_{diff}(\vec{Q}) \propto \langle |A(\vec{Q})|^2 \rangle = \langle (|\vec{G} \cdot \vec{s}(\vec{Q})|^2 - 2i\vec{G} \cdot \vec{s}(\vec{q})L) \rangle e^{-2L}. \quad (3.64)$$

$\vec{s}(\vec{q})$ ist dabei die Fourier-Transformierte des Verzerrungsfeldes $\vec{u}(\vec{r})$ und die Mittelung bezieht sich auf alle im Material möglichen Defektorientierungen.

Der erste symmetrische Term läßt sich mit Hilfe des Kraftdipoltensors und der elastischen Greens-Funktion bestimmen. Diese ist

$$Gr_{in} = \frac{1}{q^2} \left(\frac{\delta_{in}}{c_{44} + de_n^2} - \frac{e_i e_n}{(c_{44} + de_i^2)(c_{44} + de_n^2)} \frac{c_{12} + c_{44}}{1 + \sum_k \left(\frac{c_{12} + c_{44}}{c_{44} + de_k^2} \right) e_k^2} \right) \quad (3.65)$$

mit der Größe $d = c_{11} - c_{12} - 2c_{44}$, die die elastische Anisotropie beschreibt [155]. Es gilt schließlich:

$$\langle | \vec{G} \cdot \vec{s}(\vec{q}) |^2 \rangle = \frac{G}{q^2} \sum_{i=1}^3 \gamma_i \pi_i \quad (3.66)$$

mit den von der Greens-Funktion bestimmten Größen:

$$\gamma_1 = \frac{1}{3} (Sp(T_{ij}))^2 \quad (3.67)$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{3} \sum_{i>j} (T_{ii} - T_{jj})^2 \quad (3.68)$$

$$\gamma_3 = \frac{1}{2} \sum_{i>j} (T_{ij} + T_{ji})^2, \quad (3.69)$$

wobei

$$T_{ij} = \left(\frac{G_k}{|\vec{G}| V_a} q^2 Gr_{ki} e_j \right) \quad (3.70)$$

ist. In ähnlicher Weise ergeben sich die durch den Kraftdipoltensor bestimmten Größen [93]:

$$\pi_1 = \frac{1}{3} (Sp(P_{ij}))^2 \quad (3.71)$$

$$\pi_2 = \frac{1}{6} \sum_{i>j} (P_{ii} - P_{jj})^2 \quad (3.72)$$

$$\pi_3 = \frac{2}{3} \sum_{i>j} (P_{ij})^2. \quad (3.73)$$

Beim zweiten antisymmetrischen Term in Gleichung (3.64) liefert die Mittelung das einfache Ergebnis [93]:

$$\langle i \vec{G} \cdot \vec{s}(\vec{q}) \rangle = \frac{G}{q} \sqrt{\gamma_1 \pi_1} \quad (3.74)$$

Der erste symmetrische Term in Gleichung 3.64 enthält insbesondere die Information über die Symmetrie der Defekte aus dem langreichweitigen Verzerrungsfeld und er ist proportional zu q^{-2} . Der antisymmetrische Teil dagegen ist proportional zu q^{-1} und für Defekte, die das Gitter aufweiten hat er dasselbe Vorzeichen wie q , während er für Defekte, die das Gitter kontrahieren das Vorzeichen von $-q$ besitzt. Das sind die charakteristischen Eigenschaften der *Huang-Streuung*.

3.3.3.2 Die diffuse Streuung von Defekt-Clustern

Zunächst kann man davon ausgehen, daß ein Cluster einen neuen Punktdefekt darstellt, der aus n Einzeldefekten besteht, wobei die diffuse Streuung der n Einzeldefekte gegeben ist durch $I_{diff}^{einzel} = c |A^{einzel}|^2$. Unter der Annahme, daß es durch die Clusterbildung zu einer linearen Superposition der langreichweitigen Verzerrungsfelder der Einzeldefekte kommt, gilt für die diffuse Streuung des Clusters [48]

$$I_{diff}^{Cluster} = \frac{c}{n} |n A^{einzel}|^2 = n I_{diff}^{einzel}. \quad (3.75)$$

Es ergibt sich also eine Intensitätserhöhung um den Faktor n , die dadurch entsteht, daß sich die Streubeiträge der vorher unabhängig und inkohärent streuenden Einzeldefekte nun kohärent aufaddieren.

Die Näherungen, die bei der Berechnung der diffusen Streuung von Punktdefekten gemacht wurden, sind jetzt nur noch im Bereich $q \ll 1/R_{cl}$ gültig, wobei R_{cl}

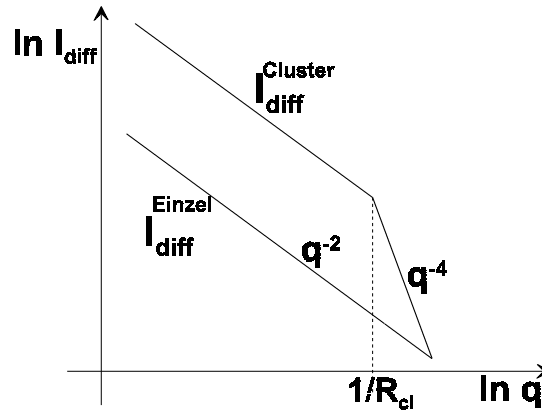


Abbildung 3.10: Schematischer Verlauf der diffus gestreuten Intensität von Einzeldefekten und Clustern mit dem Abstand q vom Bragg-Reflex.

den Cluster-Radius darstellt. Für größere q -Werte gilt im Fall eines isotropen Verzerrungsfeldes bzw. bei Mittelung über alle äquivalenten Cluster-Orientierungen die asymptotische Näherung [174]:

$$I_{\text{diff}} \propto c \frac{G}{q^4} \phi, \quad (3.76)$$

wobei ϕ nur vom Winkel zwischen \vec{G} und \vec{q} abhängig ist. Dieser Verlauf der diffusen Streuung wird auch als *Stokes-Wilson-Streuung* bezeichnet. Die Verhältnisse sind im Überblick in Abbildung 3.10 dargestellt.

Charakteristisch für die asymptotische Streuung sind die Proportionalität zu q^{-4} , der lineare Zusammenhang mit der Konzentration der Einzeldefekte und die Unabhängigkeit von der Cluster-Größe.

Auch wenn die obige Beziehung für Defekt-Cluster abgeleitet wurde, so gelten diese Prinzipien aber für alle ausgedehnten Defekte.

3.3.3.3 Die diffuse Streuung von Versetzungen und Stapelfehlern

Versetzungslinien und Stapelfehler sind große Defekte, die häufig in Halbleitermaterialien auftreten, v. a. als Folge der Ionenimplantation am Ende des von der Implantation betroffenen Bereichs ("end of range defects"). Sie erzeugen im Kristall genau wie die Defekt-Cluster starke Verzerrungen und führen dadurch zu erheblicher diffuser Streuung [173]. Beide Defektarten hängen eng miteinander zusammen und die Stapelfehler können im Prinzip als Spezialfälle von Versetzungen angesehen werden [66].

Die geometrische Beschreibung von Versetzungen und Stapelfehlern Eine Versetzungslinie ist nichts anderes als die Begrenzungslinie eines im Vergleich zur restlichen Kristallmatrix verschobenen Bereichs und ihre Stärke wird durch das Ausmaß der Verschiebung charakterisiert. Formal geschieht dies mit Hilfe des sog. Burgers-Vektors. Nach der Definition von Frank [55] wird die Versetzung dabei zunächst durch einen Einheitsvektor $\vec{\xi}$ beschrieben, der tangential an der Versetzungslinie anliegt und die Richtung der Versetzung beschreibt. Anschließend wird in einer Ebene senkrecht zu $\vec{\xi}$ eine geschlossene kreisförmige Verbindungslinie zwischen Atomen erzeugt, die vollständig in ungestörten Bereichen des Kristalls verläuft und die Versetzung umschließt [66]. Die Richtung dieser Linie entspricht dem Uhrzeigersinn, wenn $\vec{\xi}$ in die Ebene hineinzeigt und umgekehrt [66]. Die Verbindungslinie wird nun in ein perfektes Referenzgitter übertragen. Dort ist sie keine geschlossene Linie mehr und der Vektor \vec{b} , der notwendig ist um die Linie zu schließen, wird als Burgers-Vektor bezeichnet [66].

Durch das Verhältnis der Richtungen von \vec{b} und $\vec{\xi}$ zueinander werden die möglichen Spezialfälle definiert:

- Falls beide Vektoren senkrecht aufeinander stehen ($\vec{b} \cdot \vec{\xi} = 0$) handelt es sich um eine reine Stufenversetzung.
- Wenn sie parallel oder antiparallel zueinander sind ($\vec{b} \cdot \vec{\xi} = \pm b$) spricht man von einer reinen Schraubenversetzung.
- Alle anderen Versetzungen sind gemischt; sie besitzen sowohl eine Stufen- als auch eine Schraubenkomponente.

Aus der Definition ist klar, daß der Burgers-Vektor in der Regel Gitterpunkte miteinander verbindet. Daher kommen nur solche \vec{b} in Frage, die Verbindungslinien zwischen äquivalenten Gitterpunkten entsprechen [72]. Solche Versetzungen werden als *”perfekte Versetzungen”* bezeichnet.

Im Gegensatz dazu spricht man immer dann von *”partiellen Versetzungen”*, wenn diese Bedingung nicht erfüllt ist. Solche nichtperfekten Versetzungen können nur in bestimmten Gittertypen bei einer begrenzten Anzahl von Ebenen und Burgers-Vektoren existieren [66].

Ein Beispiel sind die Stapelfehler in fcc- und Diamant-Gittern. Sie entstehen dadurch, daß die Stapelfolge ($\dots ABCABCABC \dots$) der verschiedenen (111)-Ebenen in $\langle 111 \rangle$ -Richtung gestört ist, wobei die einzelnen Schichten A, B, C im Falle des Diamant-Gitters Doppelschichten repräsentieren. Dadurch entstehen große planare Defekte, die an ihrem Rand durch geschlossene, partielle Versetzungen begrenzt sind. Insbesondere von Bedeutung sind dabei [66], [98]:

- *Intrinsische Stapelfehler (ISF)*; sie entstehen durch Entfernung einer atomaren Schicht aus der gewöhnlichen Stapelfolge.

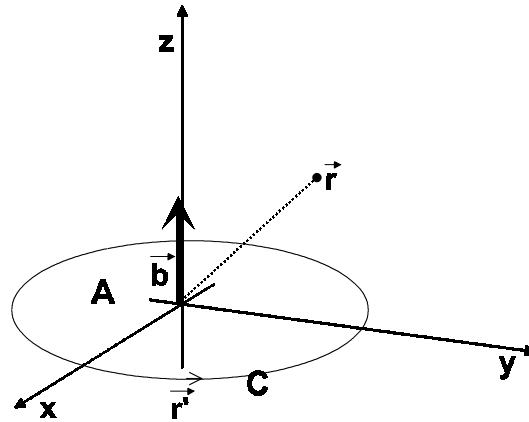


Abbildung 3.11: Scheibenförmiger Stapelfehler bzw. Versetzungsring der Fläche A mit der Begrenzungslinie C.

- *Extrinsische Stapelfehler (ESF)*; bei ihnen wird eine zusätzliche Schicht an Atomen in das Gitter eingefügt.

Beide werden von partiellen Versetzungsringen vom Frank-Typ ($\vec{b} = \frac{1}{3} \langle 111 \rangle$) begrenzt [66]. V.a. die extrinsischen Stapelfehler sind bereits häufig beobachtet worden, z.B. in fcc-Legierungen [96] und in sauerstoffhaltigem Silizium, das nach dem Czochralski-Verfahren hergestellt wurde [155].

Die diffuse Streuintensität von Versetzungen und Stapelfehlern Von besonderer Bedeutung in der Praxis sind geschlossene Versetzungslinien, sog. Versetzungsringe oder -Schleifen [155]. Sie unterscheiden sich von den Stapelfehlern nur dadurch, daß die Versetzungen bei ihnen einen perfekten Charakter haben. Daher können Stapelfehler und Versetzungsringe hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf die Streuung zusammen behandelt werden. Da in beiden Fällen eine bestimmte Ebene oder Fläche im Material ausgezeichnet wird, kann auch diese zur Charakterisierung herangezogen werden. Die zugehörigen geometrischen Verhältnisse sind zusammen mit den entsprechenden Bezeichnungen in Abbildung 3.11 dargestellt.

Zur Berechnung der diffusen Streuung können die Auswirkungen von Versetzungsringen und Stapelfehlern auf das Material zunächst genauso wie bei Punktdefekten mit Hilfe eines Kraftdipoltensors beschrieben werden [93]. Wenn der Burgers-Vektor mit $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$ und der Flächenvektor mit $\vec{A} = (A_1, A_2, A_3)$ bezeichnet wird, dann gilt [93]

$$P_{i,j} = (c_{12} Sp(\Omega_{i,j}) + d \Omega_{i,j}) \delta_{i,j} + 2 c_{44} \Omega_{i,j}, \quad (3.77)$$

wobei d genau wie in Abschnitt 3.3.3.1 definiert ist. Der Tensor $\Omega_{i,j}$ hängt vom Flächen- und vom Burgers-Vektor ab:

$$\Omega_{i,j} = \frac{1}{2} (A_i b_j + A_j b_i). \quad (3.78)$$

Damit läßt sich die diffus gestreute Intensität genauso wie in Abschnitt 3.3.3.1 ableiten.

Allerdings ist hierbei die Tatsache, daß die vom Versetzungsring umschlossene Fläche endlich ausgedehnt ist und eine spezifische Form besitzt noch nicht berücksichtigt. Um dies zu erreichen kann man nicht mehr von drei Kanzaki-Kräften ausgehen wie in Abschnitt 3.3.3.1. Die durch die Versetzung bzw. den Stapelfehler verursachten Verzerrungen müssen vielmehr auf eine Verteilung von Doppelkräften über die ganze eingeschlossene Fläche hinweg zurückgeführt werden [154]. Die gesamte Kraftwirkung wird dann durch Integration über diese Fläche ermittelt [94] und die detaillierte Berechnung ergibt, daß die Ausdrücke in den Gleichungen (3.66) und (3.74), die die diffuse Intensität direkt bestimmen, noch mit dem Formfaktor der umschlossenen Fläche multipliziert werden müssen [94]. Im Fall einer kreisförmigen Scheibe gilt für diesen Formfaktor [94]:

$$FF = \frac{2 J_1(Q_p R_D)}{Q_p R_D}, \quad (3.79)$$

wobei Q_p den Betrag der Projektion des Vektors $\vec{Q} = \vec{G} + \vec{q}$ auf die Fläche des Versetzungsringes bzw. des Stapelfehlers bezeichnet und R_D den Radius dieser Fläche angibt.

Im Prinzip werden Versetzungsringe und Stapelfehler dabei aber immer noch wie große Punktdefekte behandelt, deren detaillierte Struktur bei der Berechnung nicht berücksichtigt wird. Die daraus folgende diffuse Streuung ist daher mit Unsicherheiten behaftet, so daß eventuelle Meßergebnisse unter Umständen nicht im Detail nachvollzogen werden können. Um dieses Problem zu vermeiden, kann das zugehörige Verzerrungsfeld auch ohne den Umweg über die Kanzaki-Kräfte direkt berechnet werden. Dies kann mit Hilfe der bei Hirth und Lothe dargestellten Theorie beliebig gekrümmter Versetzungen geschehen [66].

Das im Material verursachte Verzerrungsfeld setzt sich demnach aus drei Komponenten zusammen [66]:

$$\begin{aligned} \vec{u}(\vec{r}) &= \vec{u}_1(\vec{r}) + \vec{u}_2(\vec{r}) + \vec{u}_3(\vec{r}) \\ &= \frac{\vec{b}}{4\pi} \iint_A \frac{\vec{R} \cdot d\vec{A}}{R^3} - \frac{1}{4\pi} \oint_C \frac{\vec{b} \times d\vec{r}'}{R} + \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \vec{\nabla}_r \oint_C \frac{(\vec{b} \times \vec{R}) \cdot d\vec{r}'}{R}, \end{aligned} \quad (3.80)$$

wobei $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$ den Abstand zwischen dem Punkt an dem die Verzerrung berechnet wird und dem Aufpunkt auf der Versetzungslinie darstellt. Die Richtungen dieser drei

Beiträge sind nicht identisch. \vec{u}_2 und \vec{u}_3 besitzen Richtungen, die nicht mit der des Burgers-Vektors \vec{b} übereinstimmen. Im Gegensatz dazu ist \vec{u}_1 immer parallel zu \vec{b} . Das ist entscheidend, denn für diese Komponente gilt in der Praxis [125]:

$$|\vec{u}_1| \gg |\vec{u}_2 + \vec{u}_3|. \quad (3.81)$$

Das vom Stapelfehler bzw. vom Versetzungsring herrührende Verzerrungsfeld ist also immer näherungsweise parallel zum Burgers-Vektor ausgerichtet. Auch die Fourier-Transformierte des Verzerrungsfeldes besitzt dieselbe Richtung. Sie muß in der Regel numerisch berechnet werden.

3.3.3.4 Defekte in dünnen Oberflächenschichten

Sind die Defekte im oberflächennahen Bereich konzentriert - was beispielsweise bei implantierten Systemen immer der Fall ist - dann erhält man natürlich ebenfalls defektinduzierte diffuse Streuung. Diese wirkt sich bei Volumenreflexen allerdings in wesentlich geringerem Maße aus, weil nur ein kleiner Teil des von der Röntgenstrahlung erfaßten Kristallbereichs Defekte enthält. Zur Charakterisierung solcher oberflächennaher Defekte sind dagegen die Oberflächenreflexe optimal geeignet, weil sich bei ihnen das bestrahlte Kristallvolumen auf den defekthaltigen Bereich beschränken läßt.

Wenn die diffuse Streuung in der Nähe dieser Reflexe in der Geometrie des streifenden Ein- und Ausfalls (Abbildung 3.4) gemessen wird, dann muß der diffuse Strukturfaktor wieder mit den Transmissionskoeffizienten multipliziert werden

$$I_{GID}^{diff}(\vec{Q}') \propto |t_i|^2 S_{diff} |t_f|^2, \quad (3.82)$$

wobei \vec{Q}' den gesamten Impulsübertrag im Material darstellt. Das gilt prinzipiell für jede Art diffuser Streuung egal von welcher Defektverteilung sie herrührt.

Bei Defekten, die in einer dünnen Oberflächenschicht konzentriert sind, ergeben sich aber auch prinzipielle Änderungen gegenüber einer homogenen Verteilung der Defekte im Kristallvolumen. Diese haben ihre Ursache in der räumlichen Beschränkung der Defekte und den sich daraus ergebenden Restriktionen für die Verzerrungsfelder. Diese können nämlich an der Oberfläche relaxieren und diese Relaxation wirkt sich im allgemeinen stark auf die diffuse Streuung aus, wobei die entsprechenden Modifikationen von der genauen Form der Randbedingungen abhängen [10]. Das Problem wurde von Barabash und Krivoglaz genau untersucht und entsprechend ihren Ergebnissen sind qualitativ drei Fälle zu unterscheiden [11]:

1. Die Defekte sind in einem halbusendlichen Kristall in Oberflächennähe konzentriert;
2. Die Defekte befinden sich in einem dünnen Oberflächenfilm, wobei die Verzerrungsfelder an der Oberfläche und an der inneren Grenzfläche zwischen Film und Substrat relaxieren können;

3. Ein defekthaltiger Oberflächenfilm ist fest an ein perfektes Substrat ohne Defekte gebunden (z.B. durch pseudomorphes Wachstum).

Im Fall 1 bleiben die Verhältnisse des Volumens zunächst erhalten, d.h. bei Punktdefekten wird der allein durch die Auflösung begrenzte Bragg-Reflex von diffuser Streuung begleitet, die einem q^{-2} -Gesetz folgt, das bei ausgedehnten Defekten schließlich in das q^{-4} -Verhalten der Stokes-Wilson-Näherung übergeht. Nur wenn einer der beiden streifenden Winkel kleiner als der kritische Winkel α_c gewählt wird, ergeben sich auch hier Abweichungen, die im Bereich der Huang-Streuung zu einem q^{-1} - anstelle des q^{-2} -Verhaltens führen [59].

In jedem Fall ändert sich aber die Form der Intensitätsverteilung um den Reflex grundsätzlich. Bei der Volumenstreuung ist die Form der diffusen Isointensitätslinien im allgemeinen durch charakteristische Linien bzw. Ebenen verschwindender diffuser Intensität geprägt. Diese spiegeln die Symmetrie des Kraftdipoltensors wider [93], [48]. In der Situation von Fall 1 dagegen ergibt sich immer eine kontinuierliche diffuse Intensitätsverteilung um den Reflex herum, so daß die Symmetrie des Verzerrungsfeldes nicht mehr ablesbar ist [10].

Im Fall 2 ergibt sich für alle Defektarten grundsätzlich ein q^{-4} -Abfall der diffusen Streuung [11], [10], wobei zur genauen analytischen Behandlung des Problems der Abstand vom Bragg-Reflex in die senkrechte Komponente q_z und die laterale Komponente $q_r = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ zerlegt werden muß [10]:

$$I_{GID}^{diff}(q_r, q_z) \propto \frac{(q_z + G_z)^2}{d^4 q_r^4 q_z^2} |e^{iq_z d} - 1|^2. \quad (3.83)$$

d stellt dabei die Dicke des Oberflächenfilms dar. Diese Gleichung gilt prinzipiell für alle Reflexe. Bemerkenswert daran ist aber die Tatsache, daß die q_z -Abhängigkeit gegenüber der Volumentheorie praktisch nicht verändert ist, so daß sich eine Änderung der diffusen Streuung - im Vergleich zu der von Volumendefekten hervorgerufenen - hauptsächlich in der Umgebung von Oberflächenreflexen auswirkt [10] - und zwar abhängig vom Betrag von d . Das hat zur Folge, daß für $q_r d \gg 1$ wieder die Volumentheorie gültig ist [9]. Gleichzeitig stellt sich auch eine charakteristische Verbreiterung des Bragg-Reflexes selbst ein. Für dessen Halbwertsbreite gilt [10]:

$$FWHM \propto \sqrt{\frac{c}{d^3}}. \quad (3.84)$$

Sie steigt also mit der Defektkonzentration an und sinkt mit wachsender Filmdicke stark ab, so daß sie bei hinreichend dicken Filmen wieder nur durch die experimentelle Auflösung begrenzt ist.

Im Fall 3 schließlich gibt es gar keine erhöhte diffuse Streuung in der Umgebung der Oberflächenreflexe, weil die pseudomorphe Kopplung die lateralen Verzerrungen

durch die Defekte weitgehend unterdrückt. Die Wirkung des Substrats läßt nur vertikale Verzerrungen zu, die aber auf die Oberflächenreflexe kaum Einfluß haben.

Die Messung der diffusen Streuung und ihrer Intensitätsverteilung in der Umgebung der Oberflächenreflexe stellt daher das geeignete Mittel dar, um zwischen diesen drei Fällen zu unterscheiden.

3.4 Positionsbestimmung von Fremdatomen mit stehenden Röntgenwellen

3.4.1 Totalreflexionsbereich und stehendes Wellenfeld

Da Defekte und Realstrukturen in Halbleitern häufig mit dem Einbau von Fremdatomen in das Gitter verbunden sind ist es oft erforderlich eine genaue Charakterisierung der Fremdatompositionen in Bezug auf das Gitter vorzunehmen. Dazu dient die Methode der stehenden Röntgenwellen bei der zusätzlich zum Intensitätsverlauf bei einem Bragg-Reflex auch die charakteristische Fluoreszenz der Fremdatome aufgezeichnet wird.

Die Basis dieser Methode ist die dynamische Streutheorie und daher läßt sie sich nur bei relativ perfekten, dynamisch streuenden Kristallen anwenden. In diesen Systemen sind Mehrfachreflexionen nicht mehr vernachlässigbar und die Bragg-Reflexion liefert auch kein δ -förmiges Maximum, das direkt am reziproken Gitterpunkt lokalisiert ist. Vielmehr wirkt der Kristall in einem kleinen, endlichen, den Bragg-Reflex definierenden Winkelbereich praktisch totalreflektierend. Für die auf die Einfallintensität normierte reflektierte Intensität gilt dabei die Formel [13]:

$$I_{\text{Bragg}} = |b| \left(\eta \pm \sqrt{\eta^2 - 1} \right)^2. \quad (3.85)$$

b ist dabei der sog. Asymmetriefaktor, der mit Hilfe des Einheitsvektors der Oberflächennormalen \vec{n} sowie der Einheitsvektoren des einfallenden Strahls \vec{s}_0 und des ausfallenden Strahls \vec{s}_G definiert wird [13]:

$$b := \frac{\vec{n} \cdot \vec{s}_0}{\vec{n} \cdot \vec{s}_G} \quad (3.86)$$

und η stellt den Winkelparameter dar, der im wesentlichen von der Abweichung $\Delta\alpha = \alpha_i - \alpha_B$ zwischen dem Einfallswinkel und dem kinematischen Bragg-Winkel abhängt.

Im Idealfall eines nichtabsorbierenden Kristalls gilt dafür [13]:

$$\eta = \frac{b \Delta\alpha \sin(2\alpha) + \frac{1}{2}\Gamma F_0(1-b)}{\Gamma |P| \sqrt{|b|} \sqrt{F_G F_{\bar{G}}}}, \quad (3.87)$$

wobei Γ nur vom Material abhängt und die F_x die entsprechenden Strukturfaktoren darstellen, während P die Polarisation der Strahlung beschreibt. Aus Gleichung (3.85) folgt dann sofort, daß die Reflektivität in dem endlichen Winkelbereich, in dem die Bedingung $|\eta| < 1$ erfüllt ist, den Wert 1 erreicht [75]. Die entsprechende Reflektivitätskurve oder Rocking-Kurve wird als "*Darwin-Kurve*" bezeichnet.

Bei einem realen absorbierenden Kristall sind die Strukturfaktoren im allgemeinen komplex [13] und dadurch wird auch η zur komplexen Größe $\eta = \eta' + i\eta''$. Analog zur Zerlegung des Brechungsindex' bestimmt der Imaginärteil auch hier allein die Absorption. Der Realteil dagegen ist genau wie in Gleichung (3.87) definiert, wobei die Strukturfaktoren durch ihre Realteile ersetzt werden. Der einzige Unterschied zum nichtabsorbierenden Fall ist die Tatsache, daß die Reflektivität im Totalreflexionsbereich ($|\eta'| < 1$) nicht mehr den Wert 1 erreicht, weil ein Teil der einfallenden Intensität absorbiert wird.

Werden die einfallenden und gebeugten Wellen im Detail behandelt, dann stellt man fest, daß die einfallende Amplitude E_0 sehr viel größer als die gebeugte Amplitude E_G ist, wenn η' stark vom Totalreflexionsbereich abweicht. Innerhalb des Totalreflexionsbereiches dagegen sind beide in etwa gleich groß. Die Addition der entsprechenden Wellen liefert dann keine propagierende Röntgenwelle, sondern im Gegensatz dazu ein stehendes Wellenfeld [13]. Dessen Ebenen maximaler und minimaler Intensität sind parallel zu den beugenden Ebenen des Kristallgitters angeordnet und die Intensitätsmodulation des Wellenfeldes besitzt ebenfalls die dem Netzebenenabstand entsprechende Periodenlänge d [13].

Die genaue Lage des stehenden Wellenfeldes ist dabei von η' abhängig [16]. Für $\eta' = 1$ sind die Wellenfeldebene verschwindender Intensität mit den Atomebenen identisch. Für $\eta' = -1$ dagegen gilt dies für die Ebenen maximaler Intensität. Wenn der Wert von η' zwischen diesen beiden Extremwerten verstellt wird kommt es zu einer linearen Verschiebung der Wellenfeldebene maximaler Intensität von der Zwischengitterposition auf die Netzebenenposition.

Dadurch kann ein kontrollierter, winkelabhängiger Intensitätsverlauf an den Netzebenen realisiert werden. Er ist die Grundlage für die Meßmethode.

3.4.2 Röntgenfluoreszenz und Positionsbestimmung

Entscheidend für die Bestimmung der Fremdatompositionen ist die Wechselwirkung dieser Atome mit dem stehenden Wellenfeld. In der Dipolnäherung gilt für den Wirkungsquerschnitt der Photoabsorption durch die Fremdatome eine lineare Proportionalität zur Stärke des Wellenfeldes [187]:

$$\sigma_A \propto I_{WF} \quad (3.88)$$

Damit ist auch die von den Fremdatomen emittierte Fluoreszenzstrahlung direkt proportional zur Intensität des stehenden Wellenfeldes. Dieses wiederum kann in

Abhängigkeit von der Bragg-Reflektivität beschrieben werden durch [187]:

$$I_{WF}(\vec{r}) = 1 + I_{Bragg} + 2\sqrt{I_{Bragg}} \cos\left(\nu - 2\pi\vec{G} \cdot \vec{r}\right). \quad (3.89)$$

Dabei ist der Phasenfaktor ν durch die aktuelle Lage des Wellenfeldes und damit durch η' bestimmt [187].

Da die Fluoreszenzintensität Y zum Absorptionswirkungsquerschnitt σ_A proportional ist, ergibt sich dafür ein völlig analoger funktionaler Zusammenhang, wobei nur die Beiträge der einzelnen Fremdatome an den Orten \vec{r}_j aufsummiert werden müssen. Ersetzt man diese Summe durch ein Integral, das die Verteilungsfunktion der Fremdatome enthält, dann läßt sich für die Fluoreszenzintensität eine einfache Parametrisierung einführen [187]. Die Gesamtintensität kann dabei geschrieben werden als [187]:

$$Y = 1 + I_{Bragg} + 2\sqrt{I_{Bragg}} f_C \cos(\nu - 2\pi\Phi_C). \quad (3.90)$$

Aus den Parametern f_C und Φ_C folgt unmittelbar die Information über die Positionierung der Fremdatome in Bezug auf die beugenden Netzebenen:

- Die "kohärente Position" Φ_C ist ein Wert zwischen 0 und 1, der den mittleren relativen Ort der Fremdatome wiedergibt. Die Extrempunkte 0 und 1 stehen dabei für Positionen, die mit den Netzebenen identisch sind, während $\Phi_C = 0,5$ die ideale Zwischengitterposition beschreibt [186].
- Der "kohärente Anteil" f_C liegt ebenfalls zwischen 0 und 1 und er ist ein Maß für die Eindeutigkeit der Position Φ_C . Ein Wert nahe bei 1 bedeutet, daß sich der überwiegende Teil der zur Fluoreszenz beitragenden Atome in der durch Φ_C beschriebenen Position befindet. Ein kleiner Wert von f_C dagegen zeigt, daß die Position Φ_C nur ein Mittelwert aus verschiedenen von Fluoreszenzatomem eingenommenen Positionen sein kann [186].

Da nur relative Positionen bestimmt werden können, läßt sich mit einer Reflexion in der Regel noch keine Ortsmessung der Fremdatome vornehmen. Bei Kombination mehrerer Bragg-Reflexionen ist dies aber ohne weiteres möglich [187].

Kapitel 4

Experimentelle Aspekte

Das Ziel dieses Kapitels ist es die besonderen experimentellen Vorkehrungen zu erläutern, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit zur Durchführung der Röntgenmessungen entwickelt wurden. Die Darstellung soll sich aber auf diejenigen Aspekte beschränken, die echte Neuerungen darstellen und noch nicht in der Literatur zu finden sind.

4.1 Trennung zwischen spekulärer und diffuser Reflektivität

Die in Kapitel 6 vorgestellten Reflektivitätsmessungen erfordern eine sorgfältige Trennung zwischen dem spekulär reflektierten Signal und der inkohärent d.h. diffus gestreuten Intensität. Diese besitzt ebenfalls auf dem spekulären Pfad ein Maximum [149] und kann daher einen erheblichen, unter Umständen sogar dominanten Beitrag zu der an dieser Position insgesamt gemessenen Intensität liefern. Das gilt v.a. im Bereich großer senkrechter Impulsüberträge Q_z , in dem das "wahre" spekuläre Signal sehr klein ist.

Bei bisherigen spekulären Reflektivitätsmessungen wurde immer ein Punktdetektor herangezogen, der spekuläre und diffuse Anteile nur zusammen registrieren kann (z.B. in [9]), wobei die Messung mit Hilfe eines θ - 2θ -Scans entlang des spekulären Pfades erfolgt [14]. Anschließend wird ein zweiter derartiger Scan durchgeführt bei dem die spekuläre Bedingung ($\theta = 2\theta$) um einen bestimmten Wert $\Delta\theta$ dejustiert ist (sog. "Offset-Scan"). Dieser dient als nachträgliche Abschätzung der diffusen Intensität auf dem spekulären Pfad. Die bei diesem zweiten Scan ermittelten Intensitäten werden von denen des ersten Scans subtrahiert, um die wahre spekuläre Intensität zu ermitteln.

Dieses Verfahren ist allerdings mit erheblichen Ungenauigkeiten verbunden. Der Abstand zwischen Offset-Scan und spekulärem Pfad nimmt mit zunehmendem Einfallswinkel θ und d.h. mit zunehmendem senkrechten Impulsübertrag Q_z zu, so daß

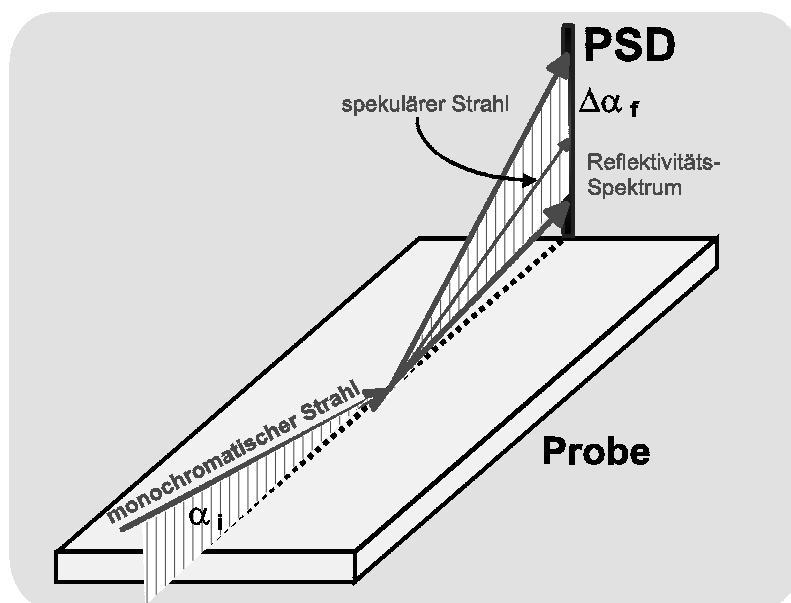


Abbildung 4.1: Experimentelle Anordnung zur Bestimmung der spekulären Reflektivität mit Hilfe eines eindimensionalen positionsempfindlichen Detektors, der senkrecht zur Probenoberfläche in der Einfallsebene angeordnet ist.

die Abschätzung der diffusen Streuung gerade in den Bereichen immer ungenauer wird wo sie besonders ins Gewicht fällt.

Für die im Rahmen dieser Arbeit diskutierten Messungen wurde daher eine verbesserte Methode zum Einsatz gebracht. Das Grundprinzip ist die Messung der spekulären Reflektivität mit Hilfe eines eindimensionalen positionsempfindlichen Detektors (*"Position Sensitive Detector"* - PSD), der senkrecht zur Probenoberfläche in der Einfallsebene plaziert wird. Diese Anordnung ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

Dabei wird nicht nur die Intensität an der spekulären Position, sondern für jeden einzelnen Meßpunkt auch die Umgebung dieser Position ausfallswinkelaufgelöst registriert. Die entsprechende Situation im reziproken Raum ist in Abbildung 4.2 veranschaulicht.

Die Lage des PSD ist für zwei verschiedene Meßpunkte - bei kleinem und bei großem Q_z - dargestellt. Die beiden dunkelgrau gefärbten Halbkreise zu beiden Seiten des über $Q_x = Q_z = 0$ definierten Ursprungs des reziproken Raumes stellen den sog. "verbotenen Bereich" dar, der in Reflexionsgeometrie nicht erreicht werden kann, weil dann entweder der Einfalls- oder der Ausfallswinkel einen negativen Wert annehmen müßte.

Die Trennung zwischen spekulärer und diffuser Intensität erfolgt nun durch de-

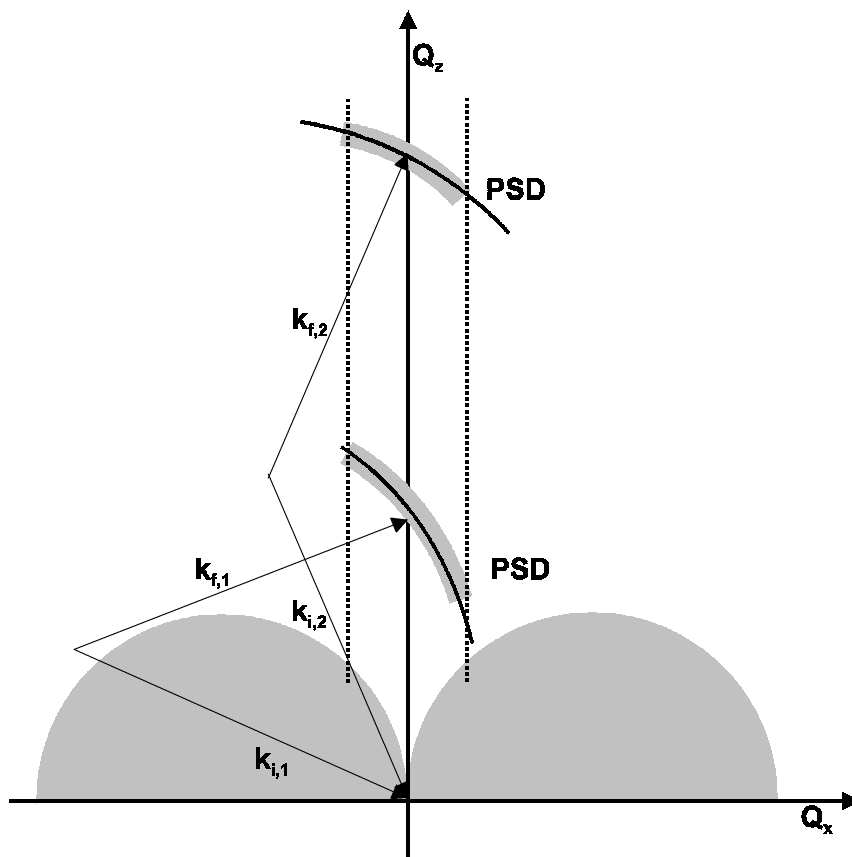


Abbildung 4.2: Die Lage des positionsempfindlichen Detektors aus Abbildung 4.1 im reziproken Raum. Qualitativ dargestellt ist die Situation bei kleinem Einfallswinkel mit den Wellenvektoren $\vec{k}_{i,1}$ und $\vec{k}_{f,1}$, sowie bei großem Einfallswinkel mit $\vec{k}_{i,2}$ und $\vec{k}_{f,2}$.

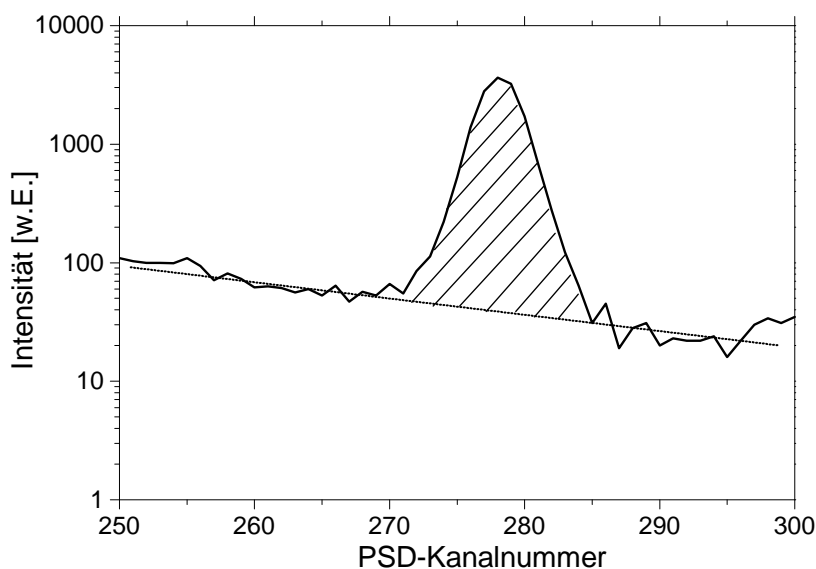


Abbildung 4.3: Beispiel für die Ermittlung der wahren spekulären Reflektivität: Die gestrichelte Linie markiert den diffusen Untergrund und aus der schraffierten Fläche ergibt sich das spekuläre Signal.

taillierte Betrachtung eines geeigneten Q_x -Bereiches in der Umgebung des spekulären Pfades (in Abbildung 4.2 durch die beiden gestrichelten Linien angedeutet). Der entsprechende Bereich entlang des PSD ist für die beiden Stellungen in Abbildung 4.2 grau unterlegt. Aus einem solchen Ausschnitt kann dann der jeweilige diffuse Untergrund genau ermittelt werden. Dies ist in Abbildung 4.3 dargestellt.

Dieses Beispiel macht deutlich, daß sich der diffuse Untergrund eindeutig vom spekulären Signal separieren läßt, wobei auch eine nichtkonstante diffuse Intensität im Bereich des spekulären Pfades berücksichtigt werden kann. Sogar ein diffuser Streubeitrag, der selbst wieder an der spekulären Position maximal ist, läßt sich damit ermitteln. Die wahre spekuläre Intensität ergibt sich dann aus der Fläche des zurückbleibenden spekulären Maximums (in Abbildung 4.3 schraffiert dargestellt). Dieser Flächeninhalt wird für jedes Spektrum und damit für jeden Meßpunkt entlang des spekulären Pfades durch Anwendung einer geeigneten Fitprozedur ermittelt.

Erst dieses neuartige Verfahren zur Reflektivitätsmessung ermöglicht es die Datenqualität so entscheidend zu verbessern, daß die detaillierte Auswertung in Kapitel 6 durchgeführt werden kann.

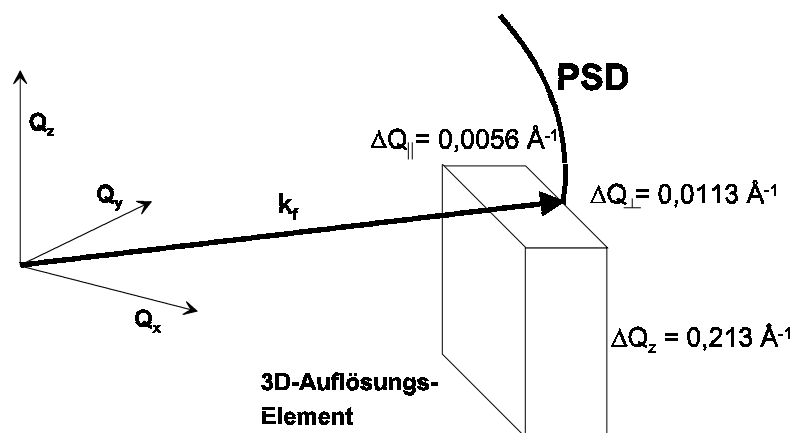


Abbildung 4.4: Skizze des Auflösungselements bei Messung der integrierten Intensität in der PSD bei der traditionellen Meßanordnung für Beugung unter streifendem Einfall.

4.2 Meßmethoden für die diffuse Streuung

Bei den Beugungsmessungen unter streifendem Einfall soll die diffuse Streuung in der Umgebung der Oberflächenreflexe möglichst effizient gemessen werden, um auf dieser Basis die oberflächennahen Defekte in den ionenimplantierten Systemen zu charakterisieren. Auch für diesen Zweck wurden die bisherigen Meßmethoden modifiziert.

4.2.1 Der "parallele" Modus

Aus der diffusen Streuung in der Umgebung der Bragg-Reflexe läßt sich im allgemeinen die Symmetrie des langreichweitigen Verzerrungsfeldes ermitteln (vgl. Abschnitt 3.3.3). Da aber in die Messung ein aus allen möglichen Defektorientierungen gemittelttes Signal eingeht, müssen in der Regel zweidimensionale Intensitätsverteilungen in der Umgebung mehrerer Reflexe gemessen und mit theoretischen Modellrechnungen verglichen werden, um verlässliche Aussagen über die Defektsymmetrie zu ermöglichen (vgl. die entsprechenden Darstellungen von Ehrhart [48] und Larson et al. [93]).

Die traditionelle Meßanordnung wie sie in Abbildung 3.4 dargestellt ist, erscheint für diesen Zweck ungeeignet. Wird hierbei die über den gesamten PSD integrierte Intensität gemessen, so lassen sich zwar vernünftige Zählzeiten mit guter Statistik auch bei der diffusen Streuung in der Umgebung der Oberflächenreflexe erzielen. Weil aber über einen großen Bereich an Ausfallswinkeln $\Delta\alpha_f$ integriert wird, ergibt sich dann eine schlechte Auflösung, denn die Variation von α_f bewirkt eine Veränderung von $Q_{||}$ - also des lateralen Impulsübertrages parallel zum ausfallenden Wellenvektor \vec{k}_f . Wegen der gleichzeitigen Variation von Q_z kann auch nicht mehr eine bestimmte

Streutiefe eingestellt werden. Man erhält vielmehr eine Mittelung über den gesamten oberflächennahen Bereich. Außerdem kann wegen der geringen Intensitäten der diffusen Streuung auch die 2θ -Genauigkeit durch Blendensetzung nicht beliebig groß gewählt werden. Die dadurch ermöglichte Variation der Richtung von \vec{k}_f führt dazu, daß ein deutlich ausgedehnter Bereich verschiedener lateraler Impulsüberträge \vec{Q}_\perp (die in der lateralen Ebene senkrecht zu \vec{k}_f gerichtet sind) bei einer bestimmten Winkeleinstellung in den Detektor fällt.

Das sich dadurch ergebende dreidimensionale Auflösungselement ist in Abbildung 4.4 skizziert. Die Zahlenwerte gelten für eine typische Meßanordnung, bei der bei einer Wellenlänge von $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$ ein α_f -Bereich von 3° im PSD aufgezeichnet wird. Aus diesem Winkelbereich ergibt sich die Ausdehnung ΔQ_z genauso wie der Wert für ΔQ_\parallel , der von der Krümmung des linearen Detektors im reziproken Raum herrührt. Weiterhin wird von einer Gesichtsfeldblende der Größe $0,5 \text{ mm}$ im Abstand von 200 mm zur untersuchten Probe sowie von einer Detektorblende der Größe 1 mm in einem Abstand von 800 mm zur Probe ausgegangen. Aus diesen Werten errechnet sich der eingezeichnete Wert von ΔQ_\perp .

Diese Nachteile sind vermeidbar, wenn zusätzlich zur Verwendung kleinerer Blenden nur ein kleiner α_f -Bereich aus dem PSD-Spektrum ausgewählt wird, denn dann sind neben Q_\perp sowohl Q_z als auch Q_\parallel gut definiert. Allerdings sind dann wesentlich größere Zählzeiten erforderlich, um die diffuse Intensität an einer bestimmten Q_x - Q_y -Position des reziproken Raumes mit guter Statistik zu bestimmen. Für die Messung von zweidimensionalen Intensitätsverteilungen ("*Reciprocal Space Maps*" - RSM) müßte das entsprechende Gebiet dann punktweise abgerastert werden. Eine solche Messung läßt sich selbst am Synchrotron nicht mehr in einem zeitlich sinnvollen Rahmen realisieren.

Ein Ausweg aus diesen Problemen kann erreicht werden, wenn man die klassische Geometrie verläßt und den positionsempfindlichen Detektor parallel zur Oberfläche anordnet, wie dies in Abbildung 4.5 dargestellt ist.

Der Detektor ist jetzt auf einen festen Ausfallswinkel α_f eingestellt und registriert ein ganzes Spektrum an Strahlen mit verschiedenen Streuwinkeln 2θ . Der einfallende Strahl trifft bei festem Einfallswinkel α_i auf die Probe. Dadurch wird die entsprechende Messung bei konstantem senkrechten Impulsübertrag Q_z durchgeführt.

Im reziproken Raum wird dadurch die Intensitätsverteilung entlang eines gekrümmten, in der Q_x - Q_y -Ebene liegenden Pfades gemessen. Durch gleichzeitige kontrollierte Änderung von θ sowie des im PSD registrierten 2θ -Bereiches (durch Modifikation der Detektorposition) kann dieser Pfad kontinuierlich entlang der radialen oder der angularen Richtung durch den Bragg-Punkt bewegt werden. Dadurch entsteht ein RSM der gesamten Umgebung des entsprechenden Oberflächenreflexes.

Die Ortsauflösung des PSD beträgt etwa $80 \mu\text{m}$ pro Kanal. Gleichzeitig ist unmittelbar hinter der Probe eine enge horizontale Gesichtsfeldblende angebracht. Dadurch entsteht für jeden Kanal eine Art Kollimationsstrecke die dafür sorgt, daß jeder PSD-

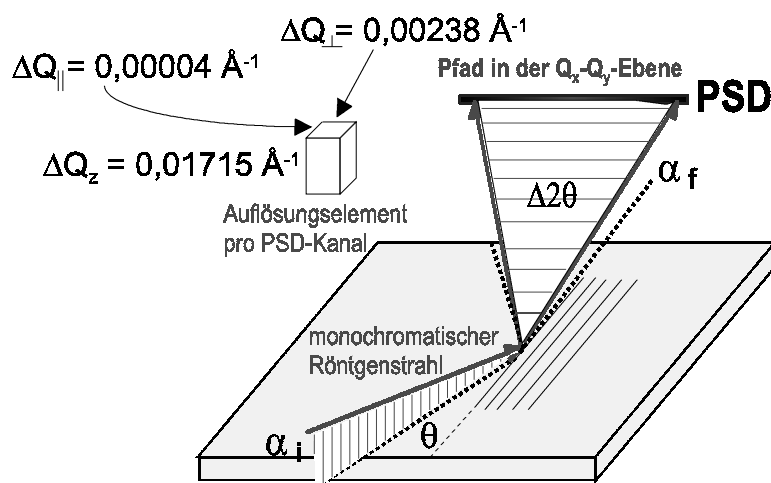


Abbildung 4.5: Neue Anordnung zur Messung der diffusen Streuung in der Umgebung von Oberflächenreflexen. Der positionsempfindliche Detektor befindet sich parallel zur Probenoberfläche und ist auf einen festen Ausfallswinkel α_f eingestellt.

Kanal nur ausfallende Strahlen mit einem eng definierten Wellenvektor \vec{k}_f , d.h. mit einem klar definierten Wert von 2θ sieht. Es ergibt sich dann eine hochauflösende Anordnung, wenn nur der einfallende Wellenvektor \vec{k}_i hinreichend gut definiert ist. Dies ist aber an modernen Synchrotronstrahlungsquellen (z.B. am Instrument TROIKA I der ESRF mit einem praktisch parallelen Eingangsstrahl, an dem der wesentliche Teil der Messungen vorgenommen wurde) ohne Probleme realisierbar.

Besonders deutlich wird dies angesichts des in Abbildung 4.5 eingezeichneten Auflösungselements für den einzelnen PSD-Kanal. Wiederum basieren die Werte auf einer typischen, realen Meßanordnung wie sie an der *Europäischen Synchrotronstrahlungsquelle* (*European Synchrotron Radiation Facility - ESRF*) in Grenoble, Frankreich mit einer Wellenlänge von $\lambda = 1,53495 \text{ \AA}$ verwendet wurde. Der PSD befand sich dabei in einem Abstand von 960 mm zur Probe und sein Eintrittsfenster wurde durch eine horizontal entlang des PSD ausgedehnte, vertikale Blende von 4 mm Breite begrenzt. Die horizontale Gesichtsfeldblende war 1 mm groß und befand sich 50 mm von der Probe entfernt. Der im Detektor registrierte α_f -Bereich schrumpft dadurch auf $0,24^\circ$. Dies determiniert den Wert von ΔQ_z genauso wie das jetzt verschwindend geringe ΔQ_{\parallel} . ΔQ_{\perp} dagegen ergibt sich aus dem Zusammenspiel von horizontaler Gesichtsfeldblende und horizontaler Breite des PSD-Kanals.

Insgesamt ist dieses Auflösungselement in allen Richtungen deutlich kleiner als das entsprechende Auflösungsvolumen in Abbildung 4.4 für die Messung der integrierten Intensität entlang des senkrechten PSD.

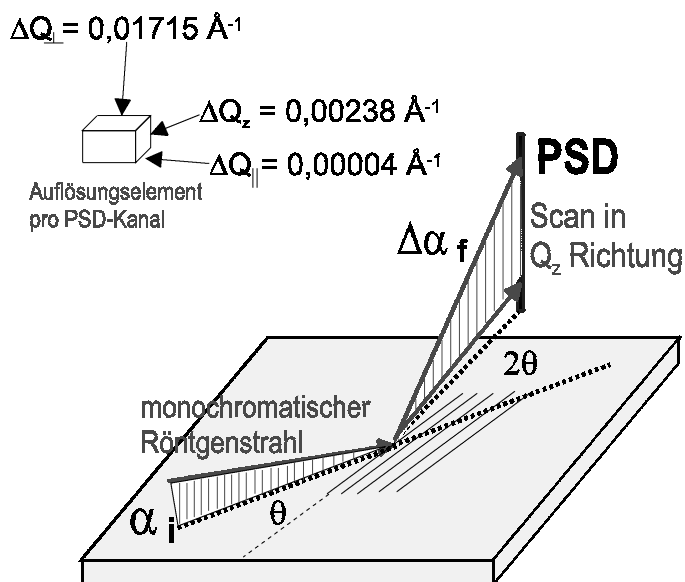


Abbildung 4.6: Traditionelle Anordnung zur Messung der diffusen Streuung in der Umgebung von Oberflächenreflexen. Der positionsempfindliche Detektor steht senkrecht zur Probenoberfläche. Schematisch ist das Auflösungselement dargestellt. \perp und \parallel sind die Richtungen bezogen auf den ausfallenden Wellenvektor \vec{k}_f , wobei die \parallel -Richtung mit der im Text erwähnten Q_{\parallel} -Achse identisch ist.

4.2.2 Der "senkrechte" Modus

Der in Abschnitt 4.2.1 beschriebene parallele Meßmodus vereint zwar eine hochauflösende Anordnung mit effizienter Datengewinnung. Er hat aber den Nachteil, daß die Messung selbst noch keine tiefenaufgelöste Information enthält, weil die Intensitätsverteilung in der Q_x - Q_y -Ebene bei konstantem senkrechten Impulsübertrag Q_z aufgezeichnet wird.

Daher wurden zusätzlich zu den Messungen im parallelen Modus auch solche in der traditionellen Geometrie für die Beugung unter streifendem Einfall vorgenommen, bei denen der PSD senkrecht zur Probenoberfläche steht. Die Anordnung ist in Abbildung 4.6 dargestellt.

Da sich die Tiefenverteilung der Defekte in jedem Punkt des reziproken Raumes niederschlägt, in dem die defektinduzierte diffuse Streuung überwiegt, ist es in der Regel ausreichend an einigen ausgewählten Stellen in der Umgebung eines Oberflächenreflexes derartige Messungen durchzuführen.

Mit diesem senkrechten Modus kann die zweidimensionale Intensitätsverteilung in einer Q_{\parallel} - Q_z -Ebene des reziproken Raumes effizient aufgezeichnet werden, wobei

die Q_{\parallel} -Achse entlang einer beliebigen Richtung in der Q_x - Q_y -Ebene verlaufen kann. Für eine derartige Messung erhält man ein ganz ähnliches Auflösungselement wie das in Abbildung 4.5 skizzierte nur daß sich seine Orientierung im Raum entsprechend der veränderten PSD-Stellung gewandelt hat. Dies ist in Abbildung 4.6 gezeigt, wobei im Vergleich zu Abbildung 4.5 die geometrischen Verhältnisse ansonsten gleich geblieben sind. Wie in Kapitel 5 zu sehen ist können mit dieser Meßanordnung im Zusammenwirken mit dem parallelen Modus komplexe Streuphänomene aufgeklärt werden.

Kapitel 5

Oberflächennahe Nanostrukturen in ionenimplantiertem Silizium

5.1 Charakterisierung der Bor-implantierten Systeme mit Hilfe der Intensitätsverteilung in der Umgebung der Oberflächenreflexe

5.1.1 Meßergebnisse

Zunächst wurden die zweidimensionalen diffusen Intensitätsverteilungen in der Umgebung der Oberflächenreflexe mit dem parallelen Modus gemessen. Der Hauptteil der Untersuchungen wurde dabei am Instrument "TROIKA I" der *Europäischen Synchrotronstrahlungsquelle (European Synchrotron Radiation Facility - ESRF)* in Grenoble, Frankreich durchgeführt, ein Teil der Messungen fand aber auch am Strahlrohr 10-2 der Synchrotronstrahlungsquelle in Stanford, USA (*Stanford Synchrotron Radiation Laboratory - SSRL*) statt. Dabei wurde vornehmlich die Umgebung des Silizium-(220)-Oberflächenreflexes untersucht, es sind aber auch ergänzende Messungen am (400)-Reflex durchgeführt worden.

Die verwendete Strahlung hatte an beiden Instrumenten die Wellenlänge $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ und zusammen mit den konstanten Werten für Einfallswinkel und Ausfallswinkel ($\alpha_i = 0,37^\circ$, $\alpha_f = 0,32^\circ$) ergibt sich daraus ein senkrechter Impulsübertrag von $Q'_z = 0,0587 \text{ \AA}^{-1}$ (nach Gleichung (3) in [135]). Nach Gleichung (3.49) und (3.50) entspricht dies einer charakteristischen Streutiefe von $\Lambda = 1455 \text{ \AA}$. Diese Größe wurde bewußt auf diesen Wert eingestellt, um sicherzustellen, daß der gesamte von der Implantation betroffene Bereich und damit auch alle darin enthaltenen Defekte zur diffusen Streuung beitragen können. Die Justage von α_i und α_f diente bei diesen Messungen noch nicht dazu eine Tiefenauflösung zu erreichen; der Zweck bestand vielmehr darin zunächst eine Optimierung des Signal-Untergrundverhältnisses für die Messung der diffusen Intensität zu erzielen.

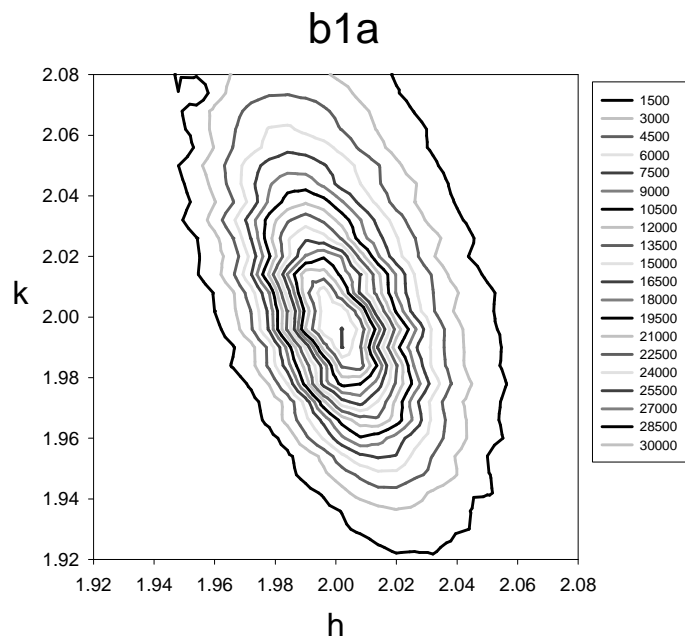


Abbildung 5.1: RSM um den (220)-Reflex für b1a ($6e15 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 750° C , 10 sec).

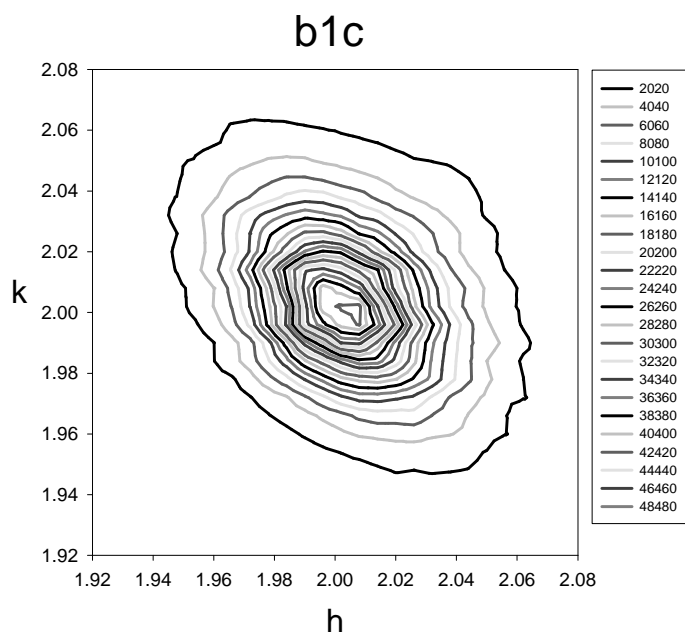


Abbildung 5.2: RSM um den (220)-Reflex für b1c ($6e15 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 750° C , 15 min).

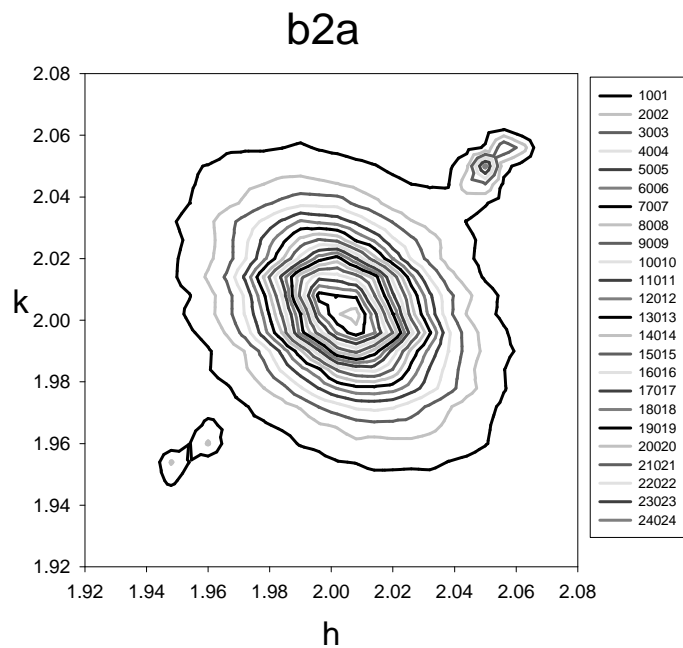


Abbildung 5.3: RSM um den (220)-Reflex für b2a ($6e15 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 1070° C , 10 sec mit Silizium-Koimplantation und 750° C , 10 sec).

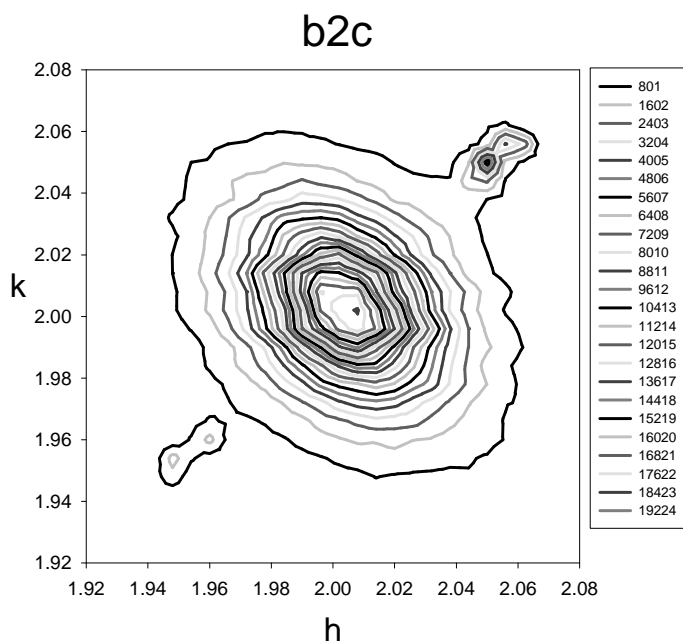


Abbildung 5.4: RSM um den (220)-Reflex für b2c ($6e15 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 1070° C , 10 sec mit Silizium-Koimplantation und 750° C , 15 min).

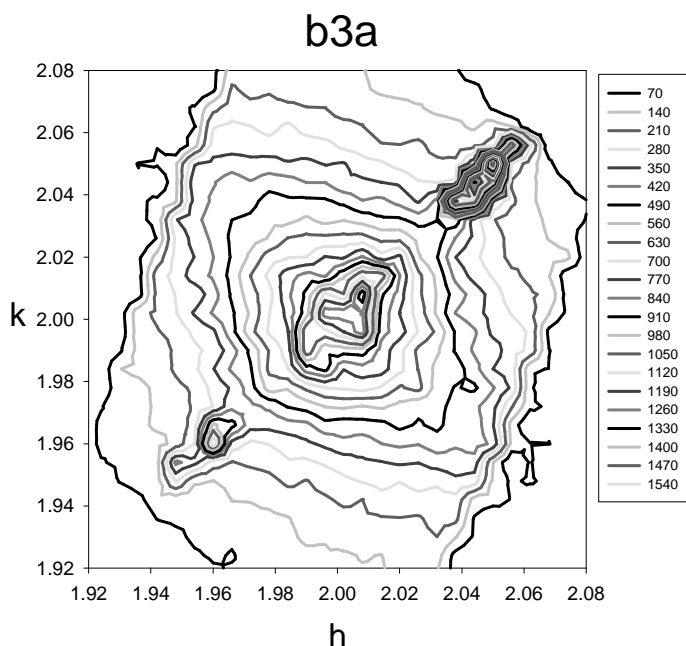


Abbildung 5.5: RSM um den (220)-Reflex für b3a ($6e14 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 1070° C , 10 sec mit Silizium-Koimplantation und 750° C , 10 sec).

Außerdem wird durch diese Wahl von α_i und α_f eine stabile Meßkonfiguration erreicht. Es gilt nämlich mit den obigen Zahlenwerten $\alpha_i = 1,68\alpha_c$ und $\alpha_f = 1,45\alpha_c$. Wenn man den typischen Verlauf der diffusen Streuintensität in Abhängigkeit von α_f bei konstantem α_i betrachtet wie er in Abbildung 3.9 dargestellt ist, dann erkennt man, daß sich die gemessene diffuse Intensität ab einem Wert von $1,3\alpha_c$ nur noch wenig ändert. Das Gleiche gilt aufgrund des optischen Reziprozitätstheorems auch für den Verlauf der diffusen Streuung in Abhängigkeit von α_i bei konstantem α_f . Die gewählten Werte für α_i und α_f stellen daher sicher, daß die Messungen auch durch eine kleine Dejustage dieser Winkel nicht beeinflußt werden.

5.1.1.1 Resultate am (220)-Reflex

Die zweidimensionalen Intensitätsverteilungen sind nun in Abbildung 5.1 - 5.6 für die Proben b1a, b1c, b2a, b2c, b3a und b3c dargestellt, wobei die in Abbildung 5.7 gezeigte Intensität des reinen Silizium bereits subtrahiert ist, so daß nur die defektinduzierte diffuse Streuung zu sehen ist. Für jede dieser Verteilungen ist die lineare Intensitätskala in willkürlichen Einheiten rechts neben dem Kontur-Bild angegeben. Die Skalen sind so normiert, daß alle Messungen am (220)-Reflex unmittelbar miteinander verglichen werden können. In Abbildung 5.7 sind außerdem die radialen (entsprechend der $\langle 110 \rangle$ -Richtung) und die angularen Schnitte ($\langle 1-10 \rangle$ -Richtung) skizziert, die

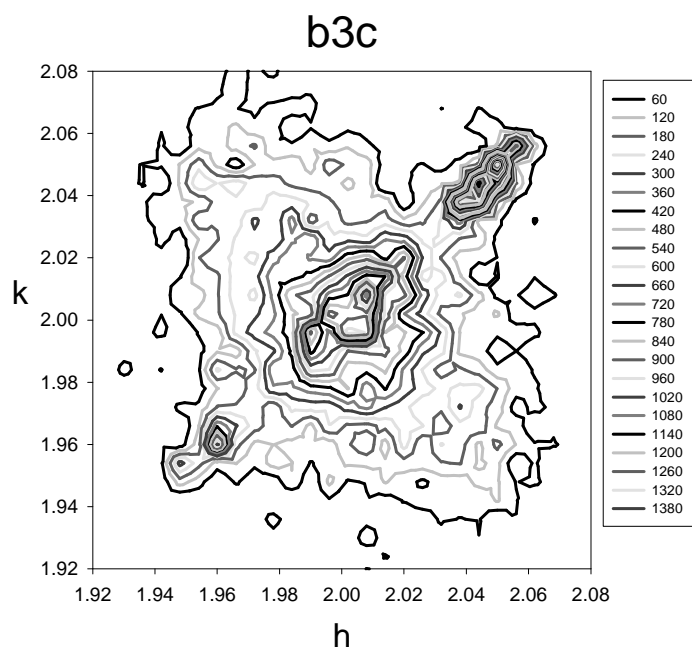


Abbildung 5.6: RSM um den (220)-Reflex für b3c ($6e14 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 1070° C , 10 sec mit Silizium-Koimplantation und 750° C , 15 min).

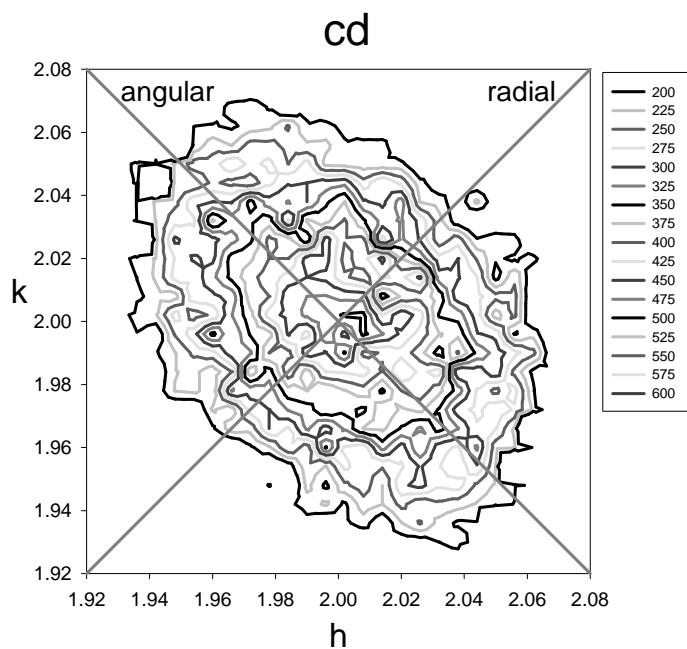


Abbildung 5.7: RSM um den (220)-Reflex für die Probe cd (reines Silizium).

später zur detaillierteren Analyse der diffusen Streuung herangezogen werden.

Qualitativ ist festzustellen, daß die diffuse Streuung bei allen Bor-implantierten und ausgeheilten Systemen wesentlich größer ist als beim reinen Silizium. Die durch die Defekte hervorgerufene diffuse Streuung ist zwischen 3-mal und 80-mal so groß wie die beim reinen Silizium dominierende thermisch diffuse Intensität.

Von den implantierten Systemen wiederum haben die Proben *b1a* und *b1c*, die $6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ Bor enthalten und nur bei $T = 750^\circ \text{ C}$ ausgeheilt wurden, die höchste diffuse Intensität. Sie sind auch die einzigen Systeme, bei denen ein signifikanter Unterschied zwischen den Ausheilzeiten (10 sec und 15 min) besteht. Die Konturlinien der diffusen Intensitätsverteilung sind erst nach 15 min symmetrisch zur radialen und angularen Richtung. Dann besitzen sie auch die gleiche elliptische Form, die als Folge der elastischen Konstanten bei der thermisch diffusen Streuung des reinen Silizium anzutreffen ist [179]. Auch bei der defektinduzierten diffusen Streuung nehmen die Konturlinien eine solche Gestalt an, wenn die spezielle Form des Kraftdipoltensors keine Ebenen oder Linien verschwindender Intensität erzeugt. Dieser allgemeine Fall tritt z.B. bei einem Kraftdipoltensor mit orthorhombischer Symmetrie auf [48]. Aber auch wenn solche Ebenen oder Linien verschwindender Intensität auftreten, ergeben sich immer Konturlinien, die zu den $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 1-10 \rangle$ -Richtungen symmetrisch sind [48]. Nach 10 sec Ausheilen ist das noch nicht der Fall. Dies kann dadurch bedingt sein, daß das Gitter nach dieser kurzen Zeit bei der relativ niedrigen Ausheiltemperatur noch nicht vollständig rekristallisiert ist [124]. Von einer vollständigen Silizium-Matrix mit stabiler Defektkonfiguration kann daher erst nach 15 min Ausheilzeit ausgegangen werden.

Die Ergebnisse für die Proben *b2a* und *b2c* dagegen unterscheiden sich nicht hinsichtlich der Form der Konturlinien. Das 10 sec lange Ausheilen bei $T = 1070^\circ \text{ C}$ im Anschluß an die Bor-Implantation war hier anscheinend ausreichend, um die vollständige Rekristallisierung der Silizium-Matrix sicherzustellen und die anschließende Implantation mit Silizium erfolgte in einer so geringen Dosis, daß auch 10 sec bei $T = 750^\circ \text{ C}$ schon genügen, um einen stabilen Endzustand zu erreichen. Auch bei diesen Systemen besitzen die Konturlinien der diffusen Streuung in Reflexnähe die schon bei *b1c* beobachtete elliptische Form, allerdings ist ihre Intensität im Vergleich dazu deutlich vermindert.

Das eigentliche Hauptergebnis bei diesen Systemen ist aber das zusätzliche Auftreten von zwei Satelliten-Peaks, die im Vergleich zum Oberflächenreflex genau in radialer Richtung um $\pm 0,080 \text{ \AA}^{-1}$ versetzt sind. Der Satellit an der Stelle mit $h, k > 2$ (d.h. mit $q > 0$ im Vergleich zum Hauptreflex) ist dabei wesentlich stärker als der andere. Diese Satelliten lassen sich nicht durch die klassische Theorie der diffusen Streuung erklären, da diese für alle homogen im Material verteilten Punktdefekte und Punktdefekt-Cluster eine auf das langreichweitige Verzerrungsfeld zurückzuführende diffuse Intensität in unmittelbarer Umgebung der Bragg-Reflexe vorhersagt (vgl. Abschnitt 3.3.3). Nur bei Zwischengitterkomplexen machen sich die lokalen Verzerrungen

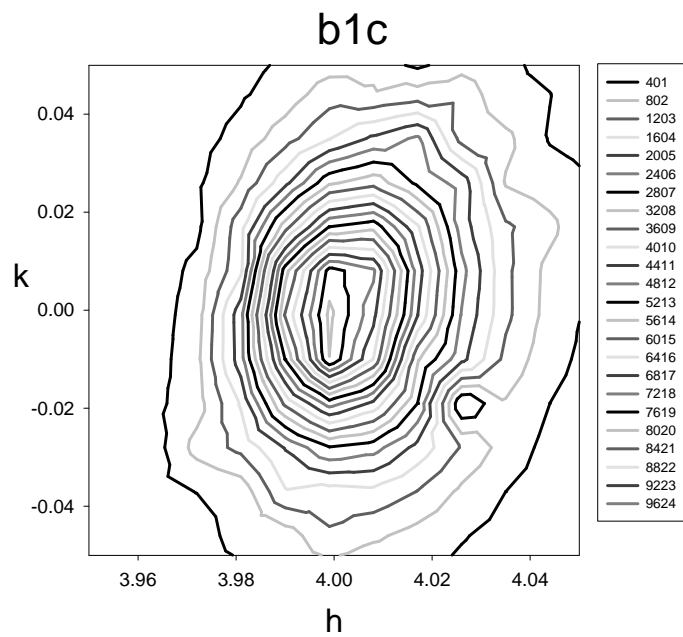


Abbildung 5.8: RSM um den (400)-Reflex für b1c ($6e15 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 750° C , 15 min).

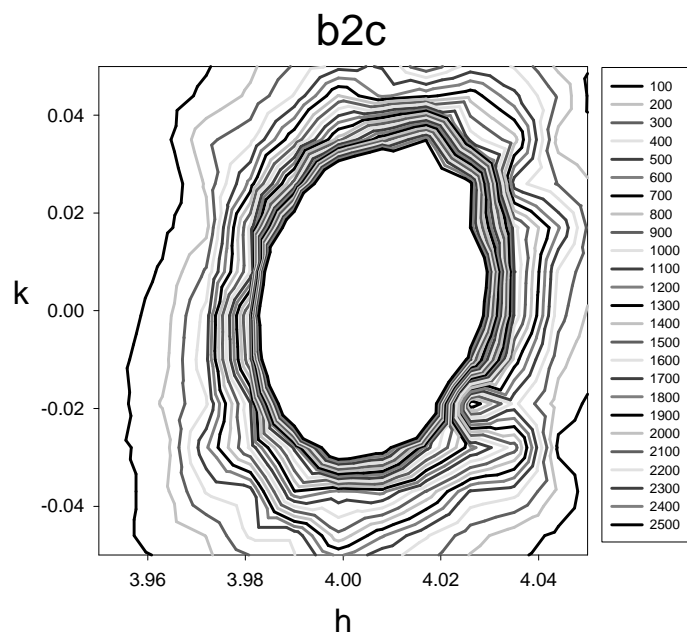


Abbildung 5.9: RSM um den (400)-Reflex für b2c ($6e15 \text{ cm}^{-2}$ Bor, 1070° C , 10 sec mit Silizium-Koimplantation und 750° C , 15 min).

auch an der Grenze der Brillouin-Zone zwischen den Bragg-Reflexen durch die sog. "Zwischenreflexstreuung" bemerkbar [61], die aber von der Intensität her um bis zu zwei Größenordnungen unterhalb der thermisch diffusen Streuung liegt und keine scharfen Maxima im reziproken Raum erzeugen kann [61].

Das Auftauchen von Satelliten-Reflexen an einer derartigen Position im reziproken Raum (gegenüber dem Hauptreflex in radialer Richtung versetzt) ist ein völlig neuer Effekt, der in Bor-implantierten Systemen bisher noch nie beobachtet wurde. Er kommt entweder durch die höhere Ausheiltemperatur oder durch die zusätzliche Implantation mit Silizium-Atomen zustande. Diese Frage sowie die Ursache der Satelliten konnte erst durch weitere ausführliche Untersuchungen geklärt werden (vgl. Abschnitt 5.4.2).

Bei den Systemen $b3a$ und $b3c$ stimmen die Ergebnisse qualitativ mit $b2a$ und $b2c$ überein. Wieder ist nach 10 sec Ausheilen bei $T = 1070^\circ \text{C}$ ein stabiler Endzustand erreicht und neben der normalen diffusen Streuung treten auch radiale Satelliten in etwa der gleichen Entfernung zum Bragg-Reflex auf. Sowohl die diffuse Intensität als auch die Intensität der Satelliten ist diesmal deutlich niedriger. Daraus folgt, daß beide Intensitäten mit den Implantationsdosen skalieren, die hier entsprechend kleiner sind.

5.1.1.2 Resultate am (400)-Reflex

Um zusätzliche Einblicke in die defektinduzierte diffuse Streuung zu gewinnen, wurde auch die Umgebung des (400)-Oberflächenreflexes untersucht. Die entsprechenden zweidimensionalen Intensitätsverteilungen sind in den Abbildungen 5.8 - 5.10 für die Proben $b1c$, $b2c$ und $b3c$ dargestellt. Auch hier wurde die äquivalente Intensitätsverteilung des reinen Silizium subtrahiert, um die reine defektinduzierte diffuse Streuung zu extrahieren. Die Bilder zeigen wieder eine lineare Intensitätsskala in willkürlichen Einheiten, wobei aber die drei Messungen so aufeinander normiert sind, daß sie unmittelbar verglichen werden können.

Wegen des im vorigen Abschnitt festgestellten Einflusses der Ausheilzeiten wurden hier nur noch die am Ende 15 min lang getemperten Proben untersucht. Diese Zeitspanne stellt die Rekristallisation des implantationsgeschädigten Bereiches sicher, führt aber nicht zur Bildung von zusätzlichen Strukturen oder Defekten.

Qualitativ gesehen erhält man wie in Abbildung 5.8 zu sehen wieder elliptische Konturlinien der diffusen Streuung um den reziproken Gitterpunkt, wobei die Halbachse der Ellipse in radialer Richtung (in diesem Fall $\langle 100 \rangle$) kleiner ist als diejenige in angularer Richtung (hier $\langle 010 \rangle$). Ebenen oder Linien verschwindender diffuser Intensität sind auch bei diesem Reflex nicht feststellbar.

Im Prinzip ergibt sich bei der Probe $b2c$ der gleiche Befund. Bei genauerer Untersuchung stellt man allerdings fest, daß die Intensitätsverteilung in den Bereichen niedriger Intensität vier Ausläufer in die $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 1-10 \rangle$ -Richtungen besitzt. Um diese ansatzweise sichtbar zu machen wurde daher in Abbildung 5.9 der zen-

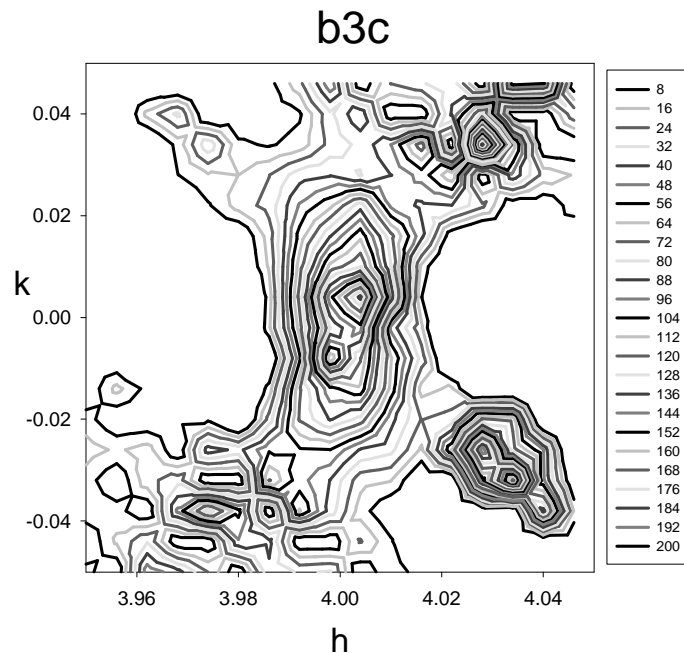


Abbildung 5.10: RSM um den (400)-Reflex für *b3c* ($6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ Bor, 1070° C , 10 sec mit Silizium-Koimplantation und 750° C , 15 min).

trale Bereich unmittelbar um den Reflex bei der Konturliniendarstellung ausgespart. Solche Ausläufer konnten bei *b1c* nicht festgestellt werden.

Einen sehr deutlichen Effekt erhält man dagegen bei dem System *b3c*. Hier sind neben der normalen diffusen Streuung insgesamt 4 Satellitenreflexe unterschiedlicher Stärke zu sehen, die entlang der $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 1-10 \rangle$ -Richtungen gegenüber dem Hauptreflex um $\approx 0,05 \text{ \AA}^{-1}$ versetzt sind. Die beiden Satelliten an den Stellen mit $h > 4$ sind dabei sehr intensiv, während die anderen demgegenüber kaum ins Gewicht fallen und nur schwer zu erkennen sind.

5.1.1.3 Zusammenfassung

Die Bor-implantierten und ausgeheilten Systeme zeigen alle eine defektinduzierte diffuse Intensität in der Umgebung der Oberflächenreflexe, die die thermisch diffuse Streuung teilweise ganz erheblich übersteigt. Sie skaliert in erster Linie mit der implantierten Bor-Konzentration. Bei gleicher Konzentration ist sie noch einmal deutlich erhöht, wenn das Ausheilen nur bei einer Temperatur von 750° C erfolgt und auf einen zweiten Silizium-Implantationsschritt verzichtet wird.

Zusätzlich treten bei den bei $T = 1070^\circ \text{ C}$ ausgeheilten und nachimplantierten Proben Satellitenreflexe mit einem charakteristischen Abstand zum Hauptreflex auf. In der Umgebung des (220)-Reflexes sind dies zwei Satelliten entlang der $\langle 110 \rangle$ -

Richtung und am (400)-Reflex erhält man vier Satelliten entlang von $\langle 110 \rangle$ und $\langle 1-10 \rangle$. Sie lassen sich nicht mit defektinduzierter diffuser Streuung als Folge von Punktdefekten erklären.

5.1.2 Analyse der diffusen Streuung

Genauere Schlußfolgerungen über die in den Systemen enthaltenen Defekte lassen sich erst ziehen, wenn man die diffuse Intensität näher betrachtet. Dazu wurden entlang der in Abbildung 5.7 skizzierten angularen und radialen Pfade durch den (220)-Reflex Schnitte aus der zweidimensionalen Intensitätsverteilung extrahiert.

Zunächst werden die radialen Schnitte betrachtet, die entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung laufen. Damit kann zunächst das Vorzeichen des langreichweitigen Verzerrungsfeldes für den vorherrschenden Defekttyp ermittelt werden, weil die diffuse Streuung normalerweise eine Asymmetrie besitzt, die von diesem Vorzeichen abhängt [48], [93]. Nach der in der Literatur üblichen Vorzeichenkonvention wird eine Gitteraufweitung dabei als positive und eine Gitterkontraktion als negative Verzerrung beschrieben. Sei \vec{q} die Abweichung eines Punktes im reziproken Raum vom Bragg-Reflex, dann gilt im Fall einer positiven Verzerrung [93]

$$I_{diff}(\vec{G} + \vec{q}) > I_{diff}(\vec{G} - \vec{q}) \quad \text{falls} \quad \vec{G} \cdot \vec{q} > 0 \quad (5.1)$$

und entsprechend bei negativer Verzerrung:

$$I_{diff}(\vec{G} + \vec{q}) < I_{diff}(\vec{G} - \vec{q}) \quad \text{falls} \quad \vec{G} \cdot \vec{q} > 0. \quad (5.2)$$

Für die Punkte auf dem radialen Pfad ist das Vorzeichen von q selbst identisch mit dem Vorzeichen des in (5.1) und (5.2) auftretenden Skalarprodukts, so daß die diffusen Intensitäten auf beiden Seiten des Reflexes unmittelbar miteinander verglichen werden können.

Ein derartiger Vergleich ist in Abbildung 5.11 für die Probe *b1c* dargestellt. Man erkennt aus der klaren Asymmetrie sofort, daß die Defekte das Gitter aufweiten, d.h. positiv verzerren.

Ein ähnlicher Vergleich wurde auch für alle anderen Bor-implantierten und ausgeheilten Proben angestellt, wobei sich ebenfalls immer eine positive Gitterverzerrung ergab. Allerdings ist bei den Systemen *b2c* und *b3c* die Analyse durch das Auftreten der zusätzlichen Satellitenreflexe erschwert. Diese stellen in radialer Richtung das dominante Streuphänomen dar, wie sich aus Abbildung 5.12 anhand des Verlaufs der diffusen Intensität entlang dieses Pfades für $q > 0$ ablesen läßt. Im Vergleich dazu zeigt die Probe *b1c* einen kontinuierlichen Abfall der Intensität. Die Intensität der Satelliten selbst ist wiederum von der Bor-Konzentration abhängig, wie sich aus dem Vergleich der Ergebnisse für *b2c* und *b3c* unmittelbar ergibt, wobei allerdings die Satellitenstärke nicht unmittelbar mit der Menge der Bor-Atome skaliert - im vorliegenden Fall führt die 10-fach höhere Bor-Konzentration bei *b2c* nur zu einem 5-fach stärkeren Satelliten.

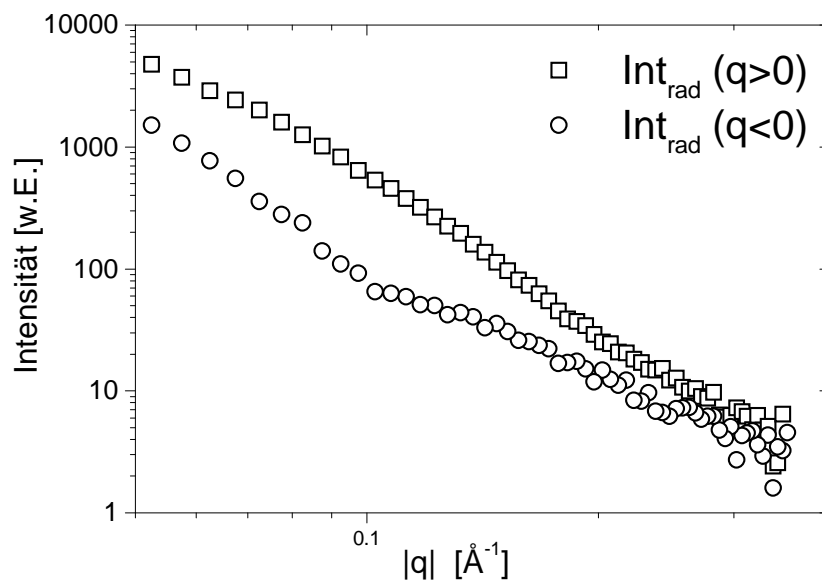


Abbildung 5.11: Vergleich der diffusen Intensität entlang des radialen Pfades zu beiden Seiten des (220)-Reflexes für die Probe b1c.

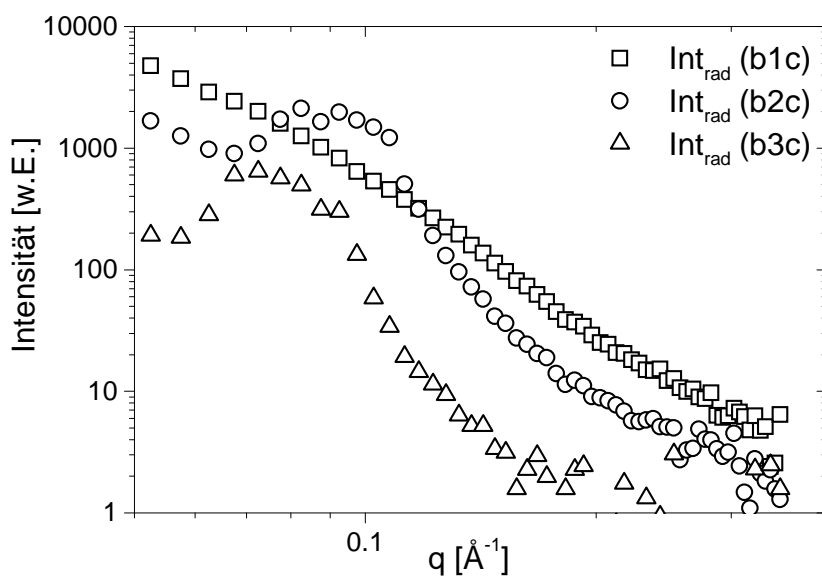


Abbildung 5.12: Zerfall der diffusen Intensität entlang des radialen Pfades auf der $q > 0$ -Seite des (220)-Reflexes.

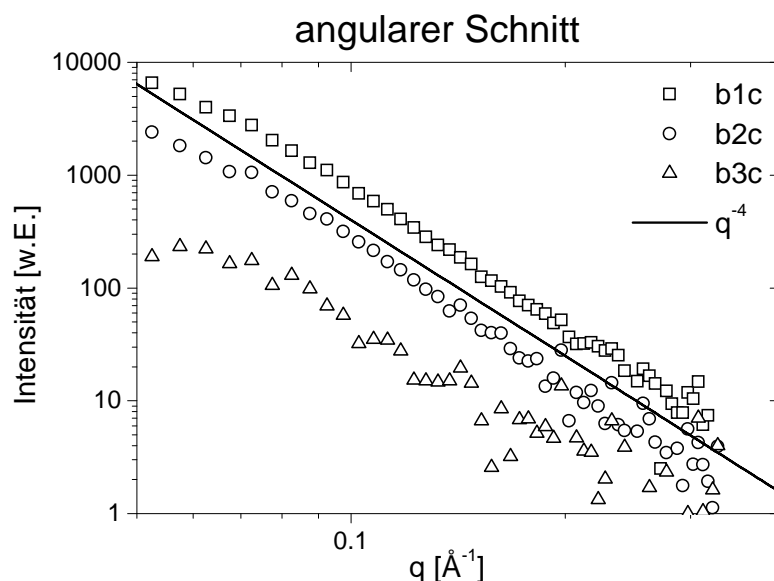


Abbildung 5.13: Zerfall der diffusen Intensität entlang des angularen Pfades auf einer Seite des (220)-Reflexes für die Bor-implantierten Systeme im Vergleich.

Anschließend wurden die angularen Schnitte durch die zweidimensionale Intensitätsverteilung analysiert. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.13 für die Proben *b1c*, *b2c* und *b3c* dargestellt. Außerdem wird in Abbildung 5.14 das Resultat für *b1c* nochmal mit dem reinen Silizium *cd* verglichen. Zusätzlich wurden die von der Theorie her zu erwartenden Zerfallsgesetze $I_{diff} \propto q^{-2}$ (Huang-Streuung) und $I_{diff} \propto q^{-4}$ (Stokes-Wilson-Streuung) als Linien aufgenommen. Sie erscheinen in dieser doppelloarithmischen Darstellung als Geraden unterschiedlicher Steigung.

Man erkennt sofort, daß die implantierten und ausgeheilten Systeme für große q den Zerfall der Stokes-Wilson-Streuung zeigen. Da die vorherrschenden Defekte eine positive Gitterverzerrung bewirken, kann daraus geschlossen werden, daß es sich um interstitielle Defekte bzw. Defekt-Cluster handelt. Aus dem q -Wert für den Übergang in den q^{-4} -Zerfall kann der Radius der Cluster abgeschätzt werden (vgl. Abschnitt 3.3.3 und Abbildung 3.10). Es ergeben sich dabei folgende Werte:

	<i>b1c</i>	<i>b2c</i>	<i>b3c</i>
R_{cl}	20,8 Å	19,6 Å	13,0 Å

Das reine Silizium, das keine implantationsinduzierten Defekte enthält, zeigt im wesentlichen nur thermisch diffuse Intensität. Diese zerfällt viel langsamer, ebenfalls nach einem q^{-x} -Gesetz. Dessen Exponent x liegt zwischen den für die Volumenstreuung ($x = 2$) und den für die reine Oberflächenstreuung ($x = 1$) [59] vorhergesagten Werten. Das ist ein aufgrund der verwendeten Streugeometrie plausibles Verhalten,

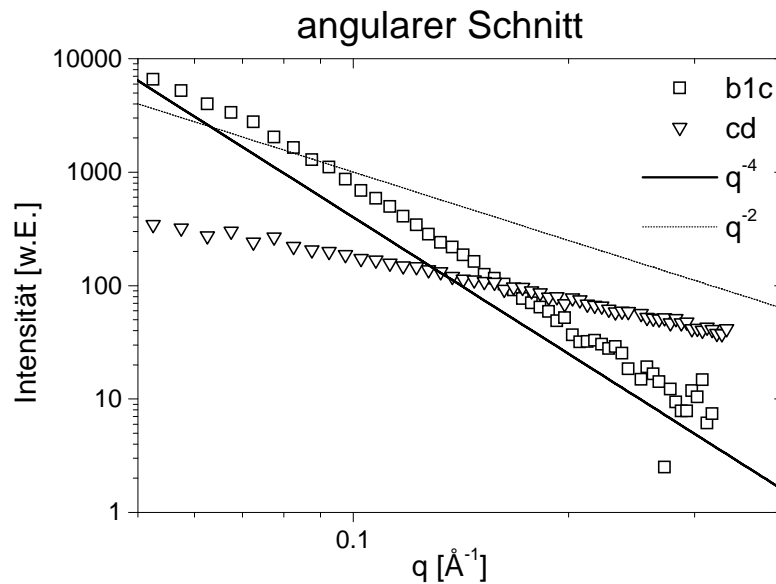


Abbildung 5.14: Die gleiche Messung wie in Abbildung 5.13 für *b1c* im Vergleich zum reinen Silizium.

weil die Eindringtiefe bei diesen Messungen mit $\Lambda \approx 1500 \text{ \AA}$ ebenfalls zwischen den Werten für ein reines Oberflächenexperiment ($\Lambda_O \approx 50 \text{ \AA}$) und für eine Volumensmessung ($\Lambda_V \approx 100000 \text{ \AA}$) liegt, so daß eine Mischung der Potenzgesetze denkbar ist.

Aus den Daten in Abbildung 5.13 läßt sich unmittelbar der Einfluß der implantierten Bor-Konzentration ablesen. Für kleine q ($q < \frac{1}{R_{cl}}$) unterscheiden sich die diffusen Intensitäten von *b3c* und *b2c* etwa um den Faktor 10, sie skalieren also mit der Anzahl der implantierten Bor-Atome. Bei großen q nähern sich die beiden Intensitätsabfälle an, weil die diffuse Streuung von *b2c* früher in den q^{-4} -Abfall übergeht oder anders ausgedrückt die Zahl der Cluster bei *b3c* beträgt mehr als ein Zehntel des Wertes von *b2c*, weil die Cluster der obigen Analyse entsprechend jetzt kleiner sind. Diese direkte Abhängigkeit von der Bor-Konzentration bedeutet, daß die Cluster entweder aus Bor bestehen oder zumindest Bor als wesentlichen Bestandteil enthalten. Das ist ein Befund, der genau dem Bild immobilier Zwischengitter-Cluster entspricht, das in der bisherigen Literatur zur Erklärung des statischen Bor-Anteils bei der anomalen Diffusion entwickelt wurde (vgl. Abschnitt 2.2.1).

Außerdem ergibt sich aus dem Vergleich zwischen den Proben *b1c* und *b2c*, daß die höhere Ausheiltemperatur zusammen mit der zusätzlichen Silizium-Implantation eine drastische Auswirkung auf die diffuse Intensität besitzt. Sie wird dadurch bei gleicher Bor-Konzentration um einen Faktor 3 - 4 kleiner. Die Entstehung der Satelliten-Reflexe geht mit einer starken Reduzierung der sonstigen diffusen Streuung einher. Dies läßt sich nur durch eine entsprechende Reduzierung der Zahl der interstitiellen

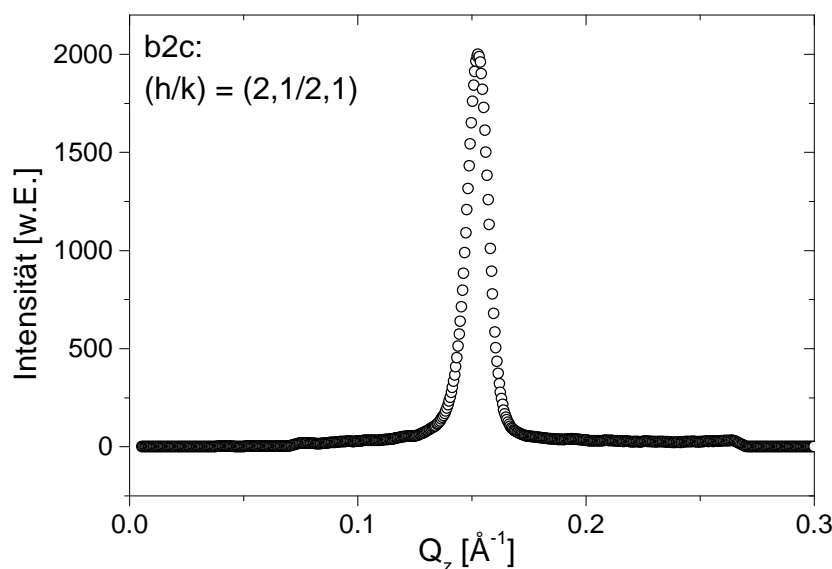


Abbildung 5.15: Q_z -Abhängigkeit für die Probe *b2c* an der radialen Position $(2,1/2,1)$, gewonnen aus einem α_f -Spektrum im senkrechten Modus.

Cluster erklären, weil ihr Radius entsprechend der obigen Tabelle gleich bleibt.

5.1.3 Untersuchung der Satellitenreflexe

Durch die Analyse der zweidimensionalen Intensitätsverteilungen der diffusen Streuung im vorherigen Abschnitt ist es nicht möglich gewesen die Ursache und Natur der beobachteten Satelliten-Reflexe aufzuklären. Um dies zu erreichen wurden Messungen im senkrechten Modus (vgl. Abschnitt 4.2.2) durchgeführt. Dabei sollte auch geklärt werden, ob die Satelliten (und damit die sie verursachenden Realstruktureffekte) durch die höhere Ausheiltemperatur, durch die zusätzliche Silizium-Implantation oder durch eine Kombination aus beidem verursacht werden. Gerade im Hinblick auf mögliche Implikationen für die prozeßtechnische Bearbeitung von Silizium-Systemen ist die Beantwortung dieser Frage von zentraler Bedeutung.

Daher wurde in die Reihe der zu untersuchenden Proben auch das System *b1d* aufgenommen, das sich von *b1c* nur durch die höhere Ausheiltemperatur von $T = 1060^\circ \text{C}$ unterscheidet. Bei den Messungen wurde der radiale Pfad in der Umgebung der (220) - und $(2-20)$ -Oberflächenreflexe mit der in Abbildung 4.6 gezeigten Anordnung punktwise untersucht, wobei an jedem Meßpunkt ein Q_z -Scan in Form eines α_f -Spektrums entsteht. Ein typisches Ergebnis für ein solches Spektrum ist in Abbildung 5.15 für die Probe *b2c* dargestellt.

Man erkennt, daß sich der Satellit auch in Bezug auf seine Q_z -Ausdehnung als scharfes Maximum darstellt. Wird der Abstand q_{\parallel} vom Hauptreflex durch gleichzei-

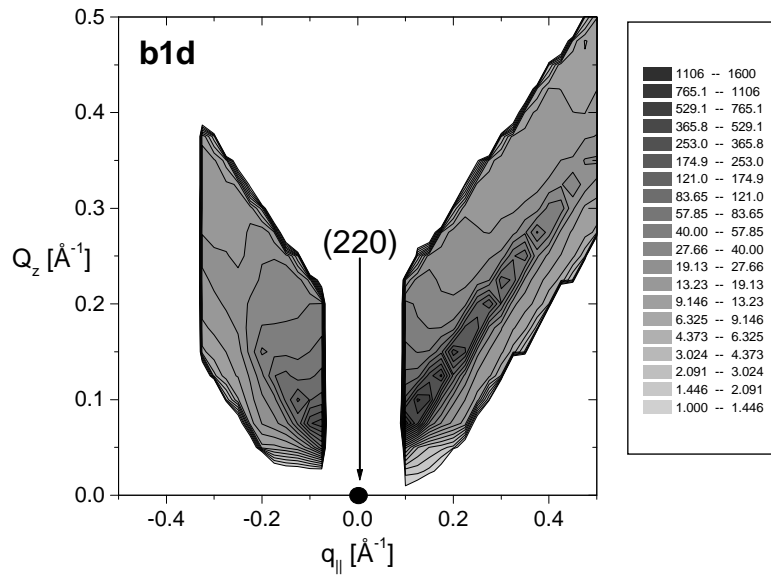


Abbildung 5.16: Intensitätsverteilung in der reziproken Ebene, die durch die radiale Richtung ($h = k$) und durch die Richtung des senkrechten Impulsübertrags (l) gegeben ist, für *b1d* in der Umgebung des (220)-Oberflächenreflexes.

tige Variation von h und k variiert, so ändert sich auch die Q_z -Position dieses Satellitenmaximums. Der Satellit kann daher detailliert ausgemessen werden, wenn mit Hilfe des positionsempfindlichen Detektors die zweidimensionale Intensitätsverteilung in der $q_{||} - Q_z$ -Ebene des reziproken Raumes ermittelt wird, wobei die $q_{||}$ -Richtung mit der radialen Richtung identisch ist und die so untersuchte Ebene des reziproken Raumes genau senkrecht auf derjenigen steht, die in den Abbildungen 5.1 - 5.10 dargestellt ist. Das Ergebnis einer derartigen Messung ist in den Abbildungen 5.16 - 5.18 jeweils für die Umgebung des (220)-Reflexes anhand der Proben *b1d*, *b2c* und *b3c* dargestellt. Für alle anderen Systeme findet man keinerlei Satelliten-Reflexe, was mit derartigen Messungen im senkrechten Modus noch einmal bestätigt wurde.

Aus diesen Ergebnissen lassen sich sofort einige wichtige Schlußfolgerungen ziehen:

- Die Satelliten sind allein eine Folge der hohen Ausheiltemperatur, weil sie bei dem System *b1d* genauso auftreten wie bei *b2c* und *b3c*.
- Sie werden durch flächenhafte Strukturen verursacht, da sie als stabförmige Intensitätsmaxima erscheinen. Es handelt sich also streng genommen nicht um Satelliten sondern um eindimensional ausgedehnte Intensitätsverteilungen (sog. "Streaks").

Die Situation scheint dabei analog zu der in die Q_z -Richtung stabförmig ausgeschmierten Intensität der gewöhnlichen Oberflächen-Reflexe zu sein. Diese

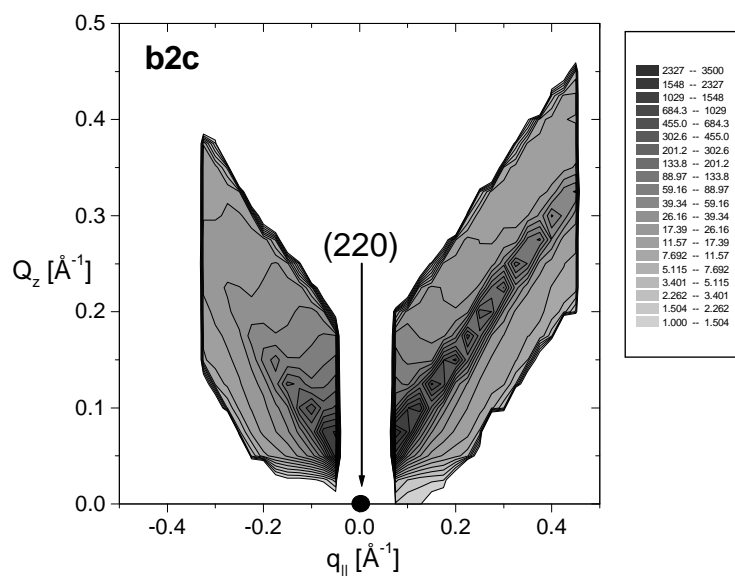


Abbildung 5.17: Intensitätsverteilung in der reziproken Ebene, die durch die radiale Richtung ($h = k$) und durch die Richtung des senkrechten Impulsübertrags (l) gegeben ist, für *b2c* in der Umgebung des (220)-Oberflächenreflexes.

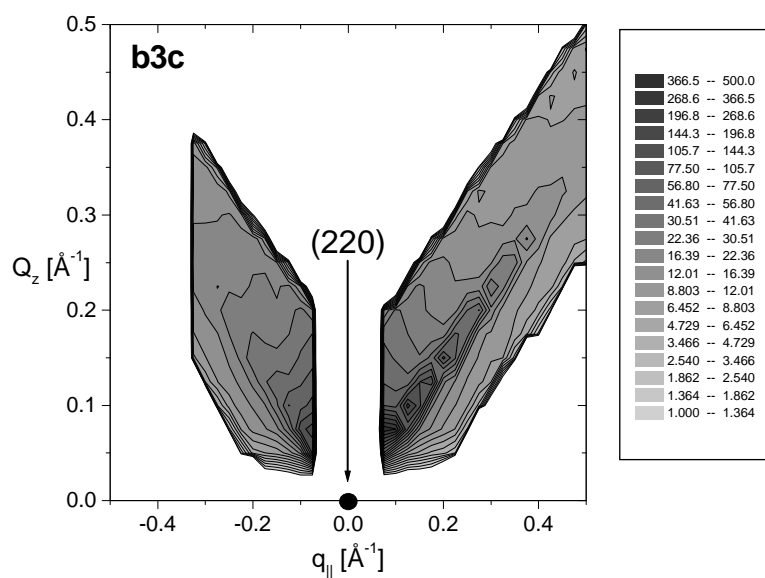


Abbildung 5.18: Intensitätsverteilung in der reziproken Ebene, die durch die radiale Richtung ($h = k$) und durch die Richtung des senkrechten Impulsübertrags (l) gegeben ist, für *b3c* in der Umgebung des (220)-Oberflächenreflexes.

werden durch den Abbruch der perfekten dreidimensionalen Ordnung an der zweidimensionalen Oberfläche des Kristalls hervorgerufen [137], [139]. Daher werden sie als "Crystal Truncation Rods" (CTR) bezeichnet.

Die Berechnungen von Robinson [137] zeigen dabei aber auch, daß stabförmige Intensitäten im reziproken Raum immer auf planare Strukturen im Realraum zurückzuführen sind und es wurde explizit gezeigt, daß auch innere Grenzflächen dieselbe Art von CTR-Streuung hervorrufen können wie die Oberfläche [138].

Ob tatsächlich eine weitreichende Analogie zwischen den hier gemessenen Streaks und dem CTR-Phänomen besteht, muß aber erst noch geklärt werden.

- Die flächenhaften Strukturen, die für die Streaks verantwortlich sind, bestehen aus reinem Silizium, da die stabförmigen Intensitätsmaxima aus dem normalen Silizium-Oberflächenreflex herauswachsen.
- Aus der Breite der Intensitätsverteilung senkrecht zur Stabrichtung läßt sich sofort der Radius der planaren Strukturen bestimmen, wobei diese in erster Näherung als kreisförmige Scheiben angesehen werden. Dabei ergeben sich folgende Werte:

System	$b1d$	$b2c$	$b3c$
R	299 Å	353 Å	344 Å

Um die genaue Orientierung der planaren Realstrukturen zu ermitteln, wurde für jeden Meßpunkt $q_{||}$ die genaue Q_z -Position des Maximums des Intensitätsstabes ermittelt. Diese Punkte lassen sich dann wieder in ein $q_{||}$ - Q_z -Koordinatensystem eintragen. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.19 am Beispiel des Systems $b1d$ dargestellt.

Man erkennt deutlich wie die stabförmigen Intensitätsverteilungen unmittelbar aus dem Oberflächenreflex ($Q_z = q_{||} = 0$) herauswachsen und jeweils einen Winkel der Größe $\gamma = 35,3^\circ$ mit der radialen Richtung $\langle 110 \rangle$ bilden. Daraus folgt, daß es sich bei diesen Streaks um CTR-ähnliche Intensitätsverteilungen entlang der $\langle 111 \rangle$ - und $\langle -1-11 \rangle$ -Richtungen des reziproken Raumes handelt. Für die hier nicht gezeigten Proben $b2c$ und $b3c$ erhält man das gleiche Ergebnis. Die planaren Strukturen müssen daher bei allen drei Proben parallel zu den (111)- und (-1-11)-Ebenen des Silizium-Gitters liegen.

In diesem Zusammenhang ist es bemerkenswert, daß in den mit dem parallelen Modus gemessenen Intensitätsverteilungen in der Umgebung des (220)-Reflexes keine Intensitätsstäbe auftauchen, die den Richtungen $\langle 1-11 \rangle$ und $\langle -111 \rangle$ entsprechen würden (vgl. Abbildungen 5.4 und 5.6), obwohl die insgesamt 4 Richtungen $\langle 111 \rangle$, $\langle -111 \rangle$, $\langle 1-11 \rangle$ und $\langle -1-11 \rangle$ innerhalb der Silizium-Struktur völlig äquivalent sind, so daß planare Realstrukturen eigentlich gleichverteilt über alle vier Orientierungen auftreten sollten.

Daß das in der Tat der Fall ist zeigt das Ergebnis in Abbildung 5.10 für die Umgebung des (400)-Reflexes bei dem System $b3c$ wo diese 4 Satelliten auftauchen. Das

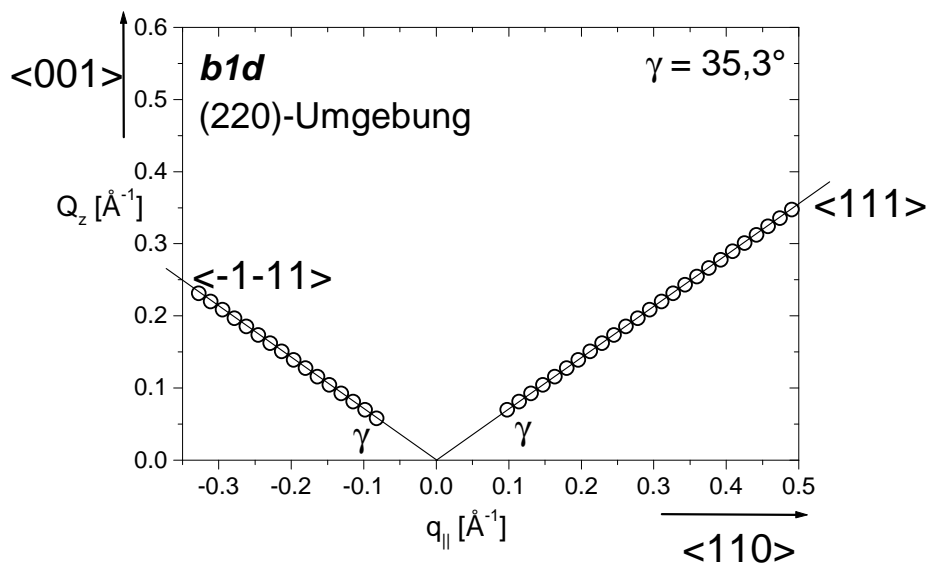


Abbildung 5.19: Position der Streak-Maxima bei *b1d* im reziproken Raum. Gezeigt ist auch der Winkel γ zwischen den Streaks und der radialen Richtung zusammen mit den sich daraus ergebenden reziproken Raumrichtungen für die Streaks.

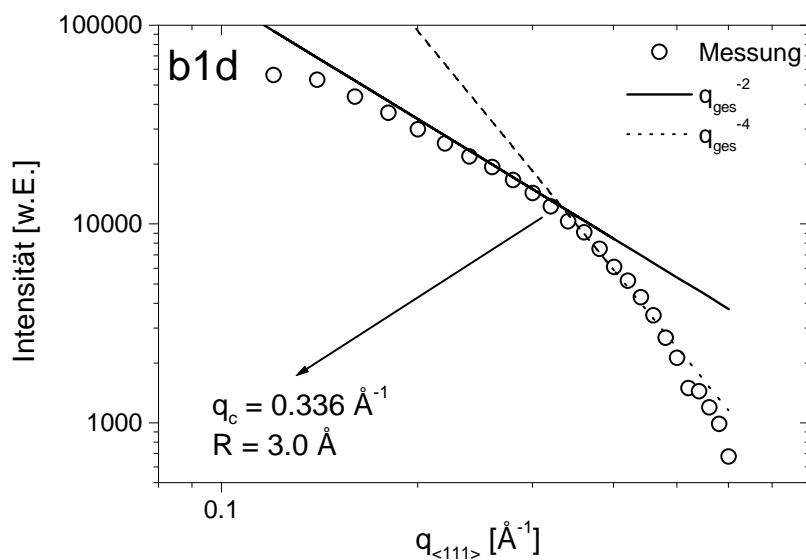


Abbildung 5.20: Zerfall der Streak-Intensität in $\langle 111 \rangle$ -Richtung für das System *b1d* mit zunehmender Entfernung $q_{\langle 111 \rangle}$ vom (220) -Reflex.

für die - die Satelliten erzeugende Realstruktur - zu entwickelnde Modell, muß deswegen in der Lage sein diesen experimentellen Unterschied zwischen den Ergebnissen an beiden Reflexen zu erklären.

Außer der Position im reziproken Raum sollten aber auch aus dem Intensitätszerfall der stabförmigen Intensitätsverteilungen ("*Streaks*") mit zunehmender Entfernung vom Hauptreflex Informationen über die zugrundeliegende Realstruktur gewonnen werden können.

Ein solches Verfahren wird bei der Analyse der CTR-Streuung der gewöhnlichen Oberflächenreflexe angewandt. Dort steht die stabförmige Intensitätsverteilung senkrecht auf der Probenoberfläche, so daß sich ein Intensitätszerfall entlang Q_z ergibt. Dieser Intensitätszerfall kann berechnet werden, wenn man das dreidimensionale Gitter mit einer Funktion faltet, die die Dichteänderung des Materials an der Oberfläche enthält. Es ergibt sich [7]:

$$I_{CTR} \propto Q_z^{-\eta}. \quad (5.3)$$

Dabei gilt für den Idealfall einer glatten Oberfläche $\eta = 2$, während man bei einer rauhen Oberfläche mit ihrem ausgeschmierten Dichteprofil (vgl. Abschnitt 3.1.3) $\eta > 2$ und damit einen schnelleren Zerfall entlang Q_z erhält [7].

Die von den theoretischen Arbeiten zur CTR-Streuung vorhergesagten stabförmig ausgeschmierten Intensitätsverteilungen begleiten aber nicht nur die Oberflächenreflexe, sondern - wie Robinson gezeigt hat [137] - im Prinzip alle reziproken Gitterpunkte des dreidimensionalen Gitters. D.h. alle Volumenreflexe (hkl) mit $l > 0$ sind ebenfalls in die l - bzw. Q_z -Richtung stabförmig ausgedehnt [139]. Bezeichne q_z die entsprechende Abweichung vom Reflex, so kann bei den Volumenreflexen der entsprechende Intensitätsabfall sowohl auf der ($q_z < 0$)- wie auch auf der ($q_z > 0$)-Seite gemessen werden. Für glatte oder ausschließlich rauhe Oberflächen erhält man dabei auf beiden Seiten ein völlig symmetrisches Verschwinden der stabförmigen Intensität mit zunehmendem $|q_z|$. Wenn allerdings die oberflächennahen Schichten relaxieren und eine vom Volumen abweichende Gitterkonstante besitzen, so stellt sich eine charakteristische Asymmetrie zwischen beiden Seiten ein aus der das Vorzeichen und der Betrag der Relaxation ablesbar sind [60].

Eine ähnliche Situation erhält man auch bei den planaren Strukturen auf (111)-Ebenen. Auch die durch sie induzierten Streaks begleiten alle Reflexe - zumindest soweit dies aufgrund der hier durchgeführten Messungen ausgesagt werden kann. Bei der hier beobachteten charakteristischen Asymmetrie der Intensität der $\langle -1-11 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Satelliten allerdings endet offensichtlich die Analogie mit dem CTR-Phänomen, da es sich hier um verschiedene Streaks handelt und nicht um die gleiche stabförmige Intensitätsverteilung auf verschiedenen Seiten des Bragg-Reflexes wie im CTR-Fall.

Auch die CTR-Streuung kann aber noch in einem ganz anderen Kontext als dem

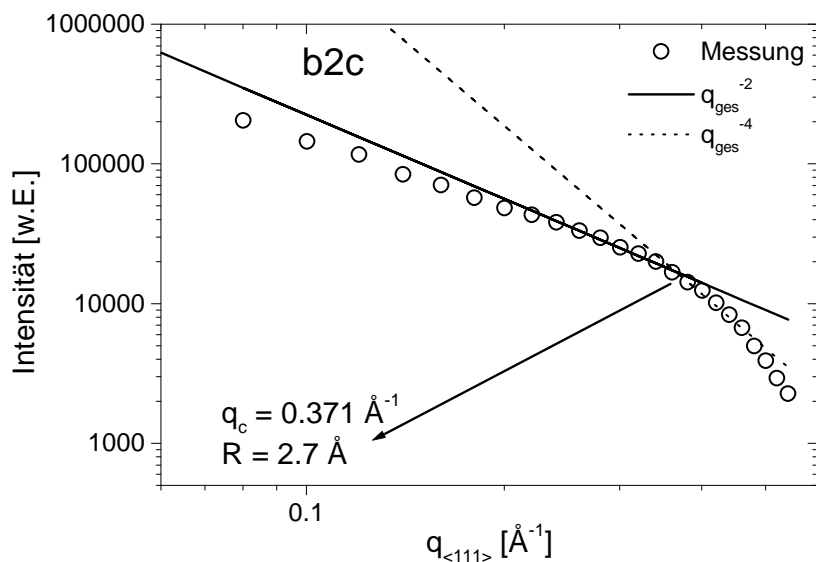


Abbildung 5.21: Zerfall der Streak-Intensität in $\langle 111 \rangle$ -Richtung für das System b2c mit zunehmender Entfernung $q_{\langle 111 \rangle}$ vom (220)-Reflex.

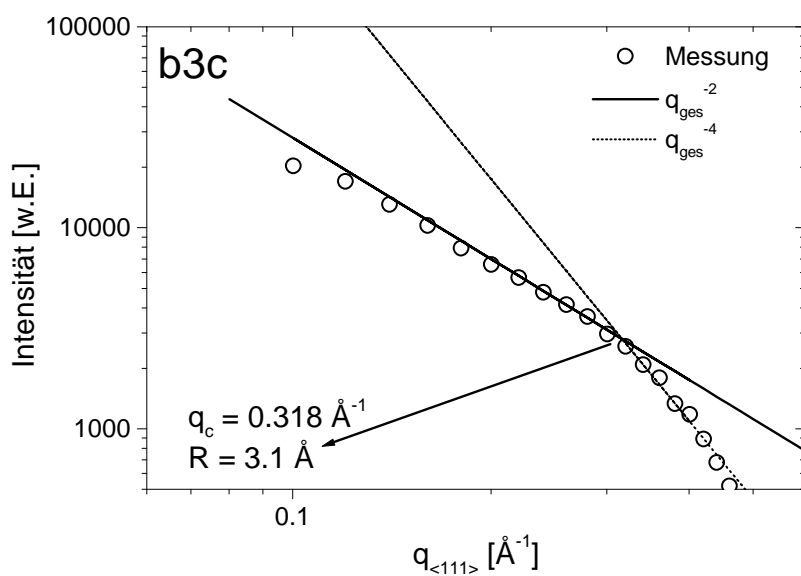


Abbildung 5.22: Zerfall der Streak-Intensität in $\langle 111 \rangle$ -Richtung für das System b3c mit zunehmender Entfernung $q_{\langle 111 \rangle}$ vom (220)-Reflex.

von Robinson et al. erarbeiteten [137], [139] interpretiert werden. Im Grunde genommen stellt sie ebenfalls einen Spezialfall defektinduzierter diffuser Streuung dar, nur daß diesmal die Oberfläche den Defekt darstellt. In diesem Sinne wird jede Symmetriebrechung im Kristall wie ein klassischer Defekt behandelt, wobei sich die Defektwirkung je nach Ausdehnung auch auf ein oder zwei Dimensionen beschränken kann. Das ist bei der in zwei Dimensionen ausgedehnten Kristalloberfläche der Fall, so daß diese nur in einer Richtung als Defekt wirksam ist. Die von der perfekt glatten Oberfläche hervorgerufene CTR-Intensität ist äquivalent zu der von einer dünnen zweidimensionalen Oberflächenschicht induzierten Streuung [137]. Sie entspricht dabei sozusagen der Laue-Streuung des Defekts Oberfläche. Beim Auftreten von Oberflächenfluktuationen kommt es zu einem zusätzlichen - vom Standpunkt der Silizium-Matrix aus - ebenfalls diffusen Streubeitrag [7] und wenn die Oberfläche das Gitter verzerren würde dann müßte auch eine der Huang-Streuung äquivalente Verzerrungsstreuung auftreten. Zusätzlich entspricht die von Betrag und Vorzeichen einer Oberflächenrelaxation abhängige Asymmetrie der CTR-Intensität auf beiden Seiten eines Volumen-Reflexes der Asymmetrie der gewöhnlichen diffusen Streuung, die durch die lokale Kontraktion bzw. Expansion des Gitters bei normalen Punktdefekten hervorgerufen wird (vgl. Abschnitt 3.3.3).

Eine derartige Sichtweise kann auch unmittelbar auf die in den Abbildungen 5.16 - 5.18 dargestellten Streaks übertragen werden. D.h. die die stabförmigen Intensitätsverteilungen verursachenden planaren Strukturen werden als Defekte betrachtet und der Intensitätszerfall entlang des Streaks bei Entfernung vom Hauptreflex kann zunächst als normale diffuse Streuung angesehen werden. Um daraus nun eine quantitative Information über die planaren Strukturen zu gewinnen, wurde jeweils die Intensität des $\langle 111 \rangle$ -Satelliten in Abhängigkeit vom Abstand $q_{\langle 111 \rangle}$ zum Silizium-(220)-Reflex doppellogarithmisch aufgetragen. Das Ergebnis ist in den Abbildungen 5.20 - 5.22 dargestellt.

Man erkennt in allen drei Fällen einen Übergang von einem $q_{\langle 111 \rangle}^{-2}$ - zu einem $q_{\langle 111 \rangle}^{-4}$ -Zerfall wie er auch bei der diffusen Streuung von Defekt-Clustern auftritt. Aus dem q -Wert dieses Übergangs kann der Radius des stark gestörten Bereichs ermittelt werden. Für alle drei Systeme ergibt sich ein Wert von $\approx 3 \text{ \AA}$. Die Ausdehnung der planaren Strukturen senkrecht zu ihrer Fläche ist also extrem klein und liegt im Bereich eines Netzebenenabstandes in dieser Richtung ($d_{111} = 3,136 \text{ \AA}$). Diese Analyse steht noch unter dem Vorbehalt, daß es sich bei den Streaks tatsächlich in erster Linie um verzerrungsinduzierte Huang- und Stokes-Wilson-Streuung handelt. Der endgültige Nachweis dieser Tatsache wird in Abschnitt 5.5.2 geführt.

Insgesamt kann daher als Ergebnis der Analyse der Streaks festgestellt werden, daß sich durch das Ausheilen von Bor-implantiertem Silizium bei hohen Temperaturen ($T = 1060 - 1070^\circ \text{ C}$) zusätzliche scheibenförmige planare Strukturen bilden, die einen Radius von $\approx 300 - \approx 350 \text{ \AA}$ besitzen und deren Dicke in der Größenordnung einer atomaren Doppelschicht liegt.

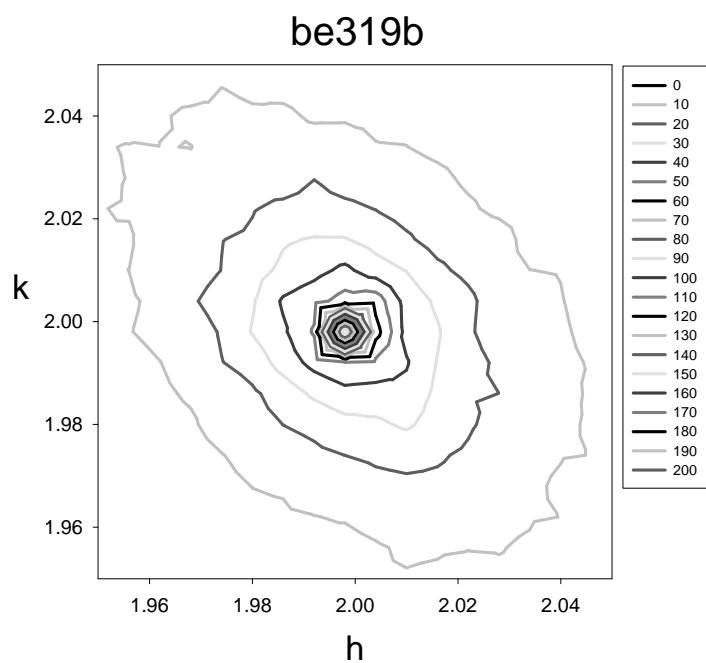


Abbildung 5.23: *RSM* um den (220)-Reflex für die Probe *be319b*.

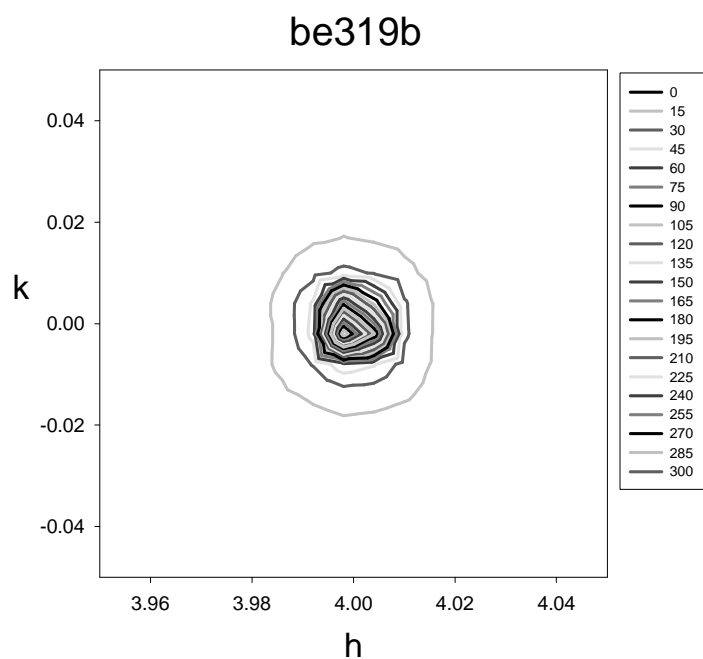


Abbildung 5.24: *RSM* um den (400)-Reflex für die Probe *be319b*.

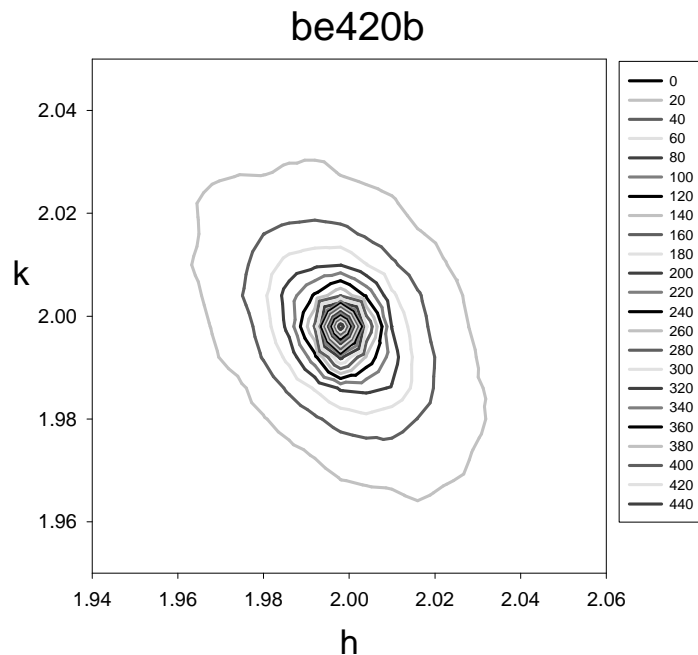


Abbildung 5.25: *RSM um den (220)-Reflex für die Probe be420b.*

5.2 Referenz 1: Epitaktisch Bor-dotiertes Silizium

Um den atomaren Mechanismus für die Bildung der planaren Strukturen besser zu verstehen, wurden als erste Referenz Systeme untersucht bei denen das Bor nicht durch Implantation sondern durch epitaktisches Wachstum eingebracht wurde (vgl. Abschnitt 2.2.3). Auch diese Systeme wurden nach der Bor-Dotierung bei $T = 1070^\circ \text{C}$ ausgeheilt und es stellt sich die Frage ob auch in diesem Fall diffuse Satelliten auftreten. Daher wurden wie in Abschnitt 5.1.1 Messungen mit dem parallelen Modus durchgeführt, diesmal am Strahlrohr W1 des *Hamburger Synchrotronstrahlungslabors (HASYLAB)* mit Synchrotronstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 1,305 \text{ \AA}$. Die entsprechenden Resultate für die diffusen Intensitätsverteilungen in der Umgebung der Oberflächenreflexe sind für das System *be319b* in Abbildung 5.23 und 5.24 und für *be420b* in Abbildung 5.25 und 5.26 jeweils für den (220)- und (400)-Reflex dargestellt.

Daraus wird deutlich, daß in den epitaktisch Bor-dotierten Systemen keine Satelliten-Reflexe auftauchen. Die diffuse Intensität ist hier auch wesentlich stärker in unmittelbarer Nähe des Reflexes konzentriert als bei den implantierten Proben. Eine hier nicht dargestellte Vergleichsmessung des Systems *b2c* - dessen Bor-Konzentration in etwa derjenigen der Probe *be420b* entspricht - unter den genau gleichen Bedingungen zeigt außerdem, daß die diffusen Intensitäten bei den epitaktischen Systemen um etwa zwei Größenordnungen kleiner sind als im Fall der Implantation. Bemerkenswert

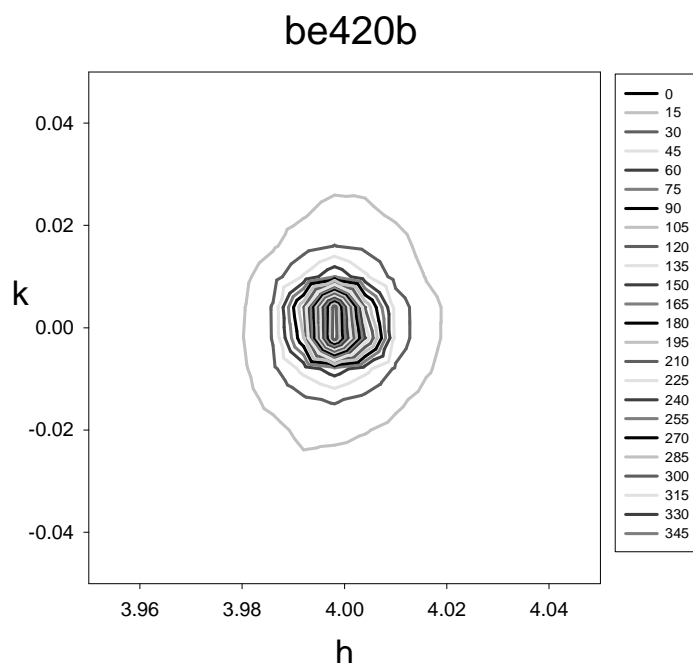


Abbildung 5.26: *RSM* um den (400)-Reflex für die Probe *be420b*.

ist weiterhin, daß die diffuse Streuung nicht mit der Bor-Konzentration skaliert. Wie an den Konturlinien der zweidimensionalen Intensitätsverteilungen ablesbar ist, zeigt das System *be420b* trotz einer 10-fach höheren Bor-Dotierung am (220)-Reflex nur eine um den Faktor 2 erhöhte diffuse Streuung. Am (400)-Reflex sind die diffusen Intensitäten der beiden Systeme sogar fast gleich.

Um nun die Natur der hier wirksamen Defekte zu beleuchten, wurden wieder angulare und radiale Schnitte aus den Intensitätsverteilungen entnommen. Zunächst wurde der Intensitätsverlauf entlang des radialen Pfades auf beiden Seiten des (220)-Reflexes betrachtet, um aus einer eventuellen Asymmetrie den Charakter der Defekte (kontrahierend oder expandierend) zu ermitteln. Das Resultat ist in Abbildung 5.27 für das System *be319b* dargestellt. Eine radiale Asymmetrie läßt sich daraus nicht erkennen. Auch die Probe *be420b* zeigt das gleiche Ergebnis.

Da - im Vergleich zum reinen Silizium - trotzdem defektinduzierte diffuse Streuung vorhanden ist, kann dies nur dadurch verstanden werden, daß sich die kontrahierenden und expandierenden Wirkungen verschiedener Defektarten gegenseitig kompensieren. Aus den Untersuchungen zur anomalen Diffusion von Bor in Silizium ist bekannt, daß selbst in den implantierten Systemen der Großteil des Bor elektrisch aktiv ist und daher auf substitutionellen Plätzen sitzt [34]. Bei epitaktisch Bor-dotiertem Silizium sollte dies für das gesamte eingebrachte Bor gelten. Dieses substitutionelle Bor aber wirkt auf das Silizium-Gitter kontrahierend, wobei der Kontraktionskoeffizient

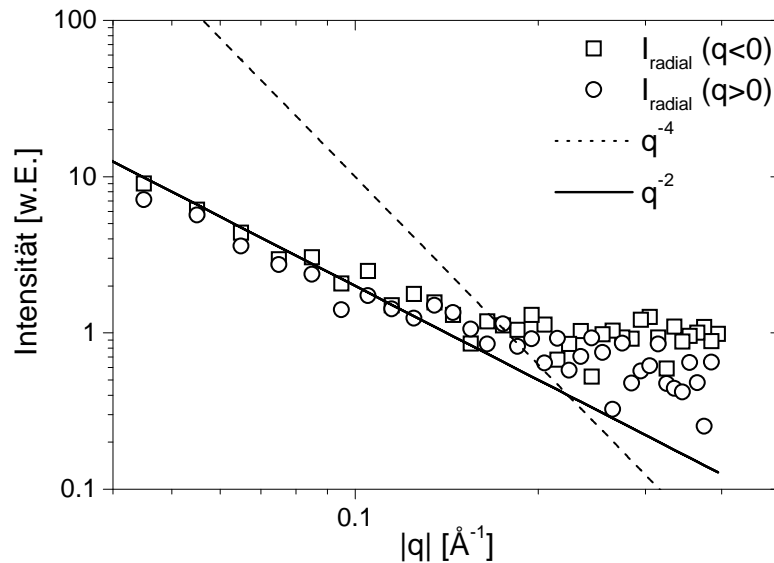


Abbildung 5.27: Vergleich der diffusen Intensität entlang des radialen Pfades zu beiden Seiten des (220)-Reflexes für die Probe *be319b*.

so hoch ist, daß die Wirkung eines substitutionellen Bor-Atoms die Größenordnung einer Silizium-Leerstelle erreicht [140]. Die anschließende Silizium-Implantation dagegen führt Zwischengitteratome ein, die eine expansive Wirkung entfalten [30]. Es ist daher durchaus plausibel, daß sich diese beiden Verzerrungen in der Summe wieder aufheben was den experimentellen Befund in Abbildung 5.27 erklärt.

Zur Gewinnung einer Größeninformation ist es außerdem erforderlich den Intensitätszerfall der diffusen Streuung genau zu beleuchten. Das ist in Abbildung 5.28 wieder für das System *be319b* anhand der radialen und angularen Schnitte am (220)-Reflex gezeigt, wobei auch hier die Probe *be420b* das gleiche Resultat liefert. Man erkennt, daß sich ganz im Gegensatz zu den implantierten Systemen bis zu einem Abstand von $q \approx 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ nur ein q^{-2} -Abfall ergibt. Daraus folgt, daß in den epitaktischen Systemen nur Punktdefekte und kleine Cluster vorhanden sind.

Zusammenfassend kann gefolgert werden, daß epitaktisch Bor-dotierte Systeme weder die planaren Defekte noch die Defekt-Cluster besitzen, die bei den Bor-implantierten Systemen festgestellt wurden, obwohl sie die gleiche Temperaturbehandlung durchlaufen haben. Diese großen Defekte sind daher nicht allein eine Folge des Ausheilens sondern sie entstehen aus dem Zusammenspiel mit einem vorher eingeführten Implantationsschaden.

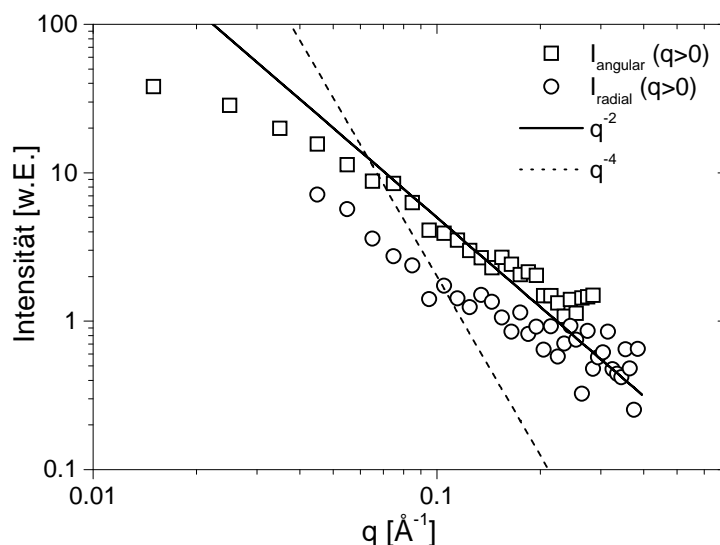


Abbildung 5.28: Zerfall der diffusen Intensität von *be319b* entlang des angularen und radialen Pfades auf einer Seite des (220)-Reflexes.

5.3 Referenz 2: Arsen-implantiertes Silizium

Als nächstes ist zu klären ob die in Kapitel 5.1 beobachteten planaren Strukturen eine spezifische Eigenschaft des Bor-dotierten Systems darstellen oder ob sie auch bei anderen Dotiermaterialien auftreten. Zu diesem Zweck wurden Arsen-implantierte Systeme untersucht, die völlig analog zu den Bor-implantierten Proben hergestellt wurden (vgl. Abschnitt 2.2.3).

Auch hier sind Messungen der diffusen Intensitätsverteilung in der Umgebung der (220)- und (400)-Oberflächenreflexe analog zu den Bor-implantierten Proben durchgeführt worden. Dabei wurden ebenfalls das Instrument "TROIKA I" an der ESRF und das Strahlrohr 10-2 des SSRL verwendet und eine Strahlung der Wellenlänge $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ eingesetzt.

Zunächst wurde der (220)-Reflex untersucht. Die Ergebnisse sind für die Systeme *as1d* und *as2a* in den Abbildungen 5.29 und 5.30 dargestellt. Dabei sind keine radialen Satelliten zu erkennen. Auch die Intensitätsverteilung um den (400)-Reflex, die für das System *as2a* in Abbildung 5.31 dargestellt ist, weist keine Satelliten auf. Planare Strukturen wie sie in den bei hoher Temperatur ausgeheilten Bor-implantierten Proben für die Satelliten verantwortlich sind treten im Fall der Arsen-Implantation also nicht auf.

Welchen Charakter die ansonsten vorhandenen Defekte haben läßt sich wieder anhand von angularen und radialen Schnitten untersuchen, die aus der zweidimensionalen Intensitätsverteilung extrahiert werden. Als Beispiel sei hier nur die Intensität

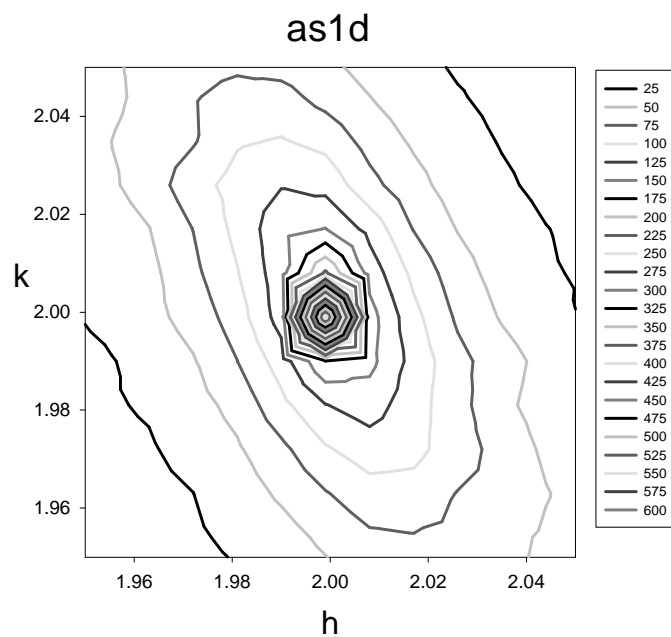


Abbildung 5.29: RSM um den (220)-Reflex für die Probe as1d.

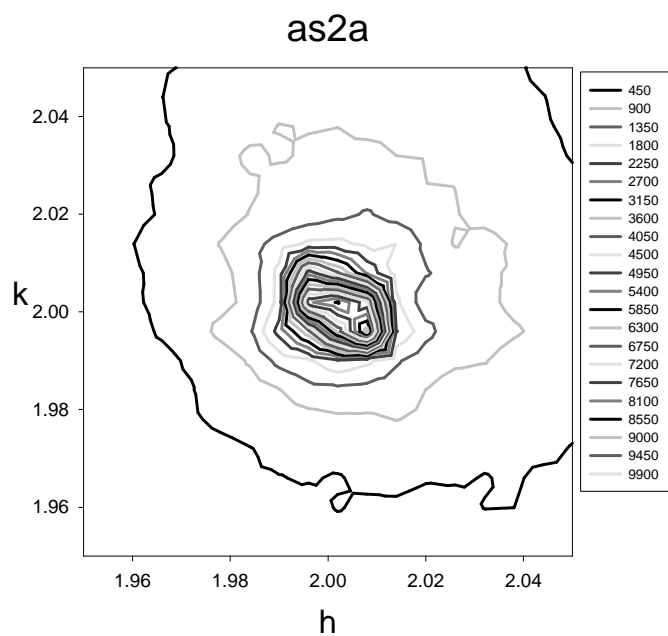


Abbildung 5.30: RSM um den (220)-Reflex für die Probe as2a.

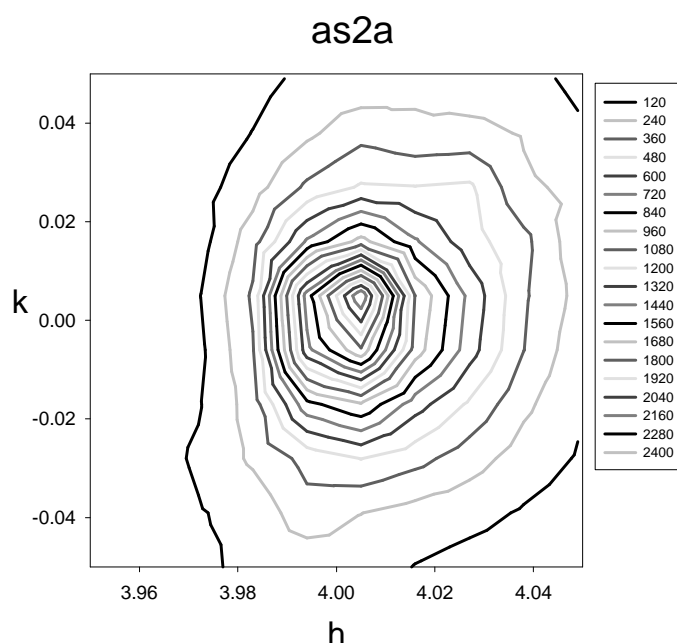


Abbildung 5.31: *RSM* um den (400)-Reflex für die Probe *as2a*.

entlang des radialen Pfades durch den (220)-Reflex für das System *as1d* diskutiert, die in Abbildung 5.32 dargestellt ist.

Wieder tritt keinerlei Asymmetrie der radialen diffusen Streuung auf beiden Seiten des Reflexes auf, d.h. daß die vorhandenen Defekte das Gitter in der Summe weder expandieren noch kontrahieren. Das scheint in diesen Systemen ebenfalls darauf zurückzuführen sein, daß sich expansive und kontrahierende Defekte in ihrer Gesamtwirkung gegenseitig kompensieren. Die kontrahierende Wirkung wird dabei von substitutionellem Arsen ausgeübt [105]. Zwar ist das Arsen im Vergleich zum Silizium das größere Atom, bei substitutionellem Einbau in das Silizium-Gitter wird diese prinzipiell expandierende Wirkung aber durch entgegengesetzte elektronische Effekte überkompensiert [27], so daß sich insgesamt ein kontrahierender Effekt ergibt. Außerdem sind Zwischengitterdefekte vorhanden, die eine expandierende Wirkung auf das Gitter ausüben [105], Diese sind höchstwahrscheinlich mit den in anderen Arbeiten gefundenen $As_nSi_{4-n}V$ -Clustern [95] identisch.

Diese Sichtweise wird auch durch das Potenzgesetz des Abfalls der diffusen Intensität gestützt. Wie aus Abbildung 5.32 ersichtlich ist, ergibt sich wieder ein reiner q^{-2} -Verlauf. Es können also nur Punktdefekte oder kleine Cluster vorhanden sein.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß auch die Arsen-implantierten Systeme weder die planaren Defekte noch die Defekt-Cluster besitzen, die bei den Bor-implantierten Proben auftreten, obwohl sie auf gleiche Art und Weise hergestellt wurden.

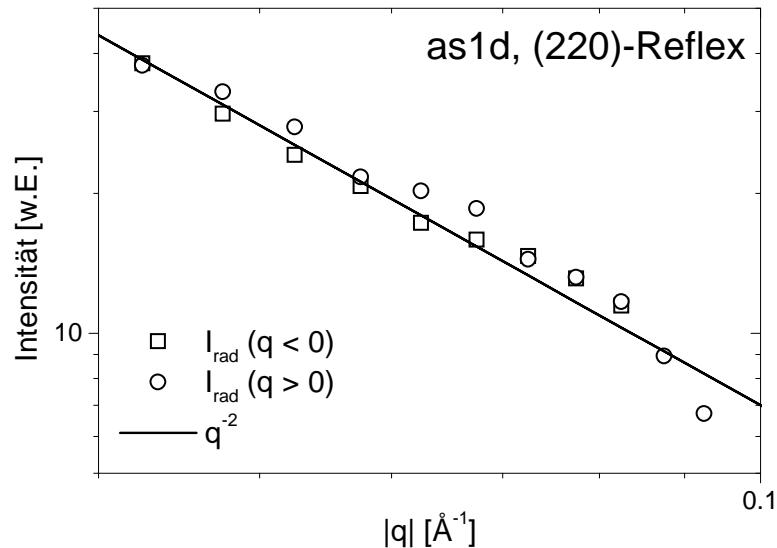


Abbildung 5.32: Vergleich der diffusen Intensität entlang des radialen Pfades zu beiden Seiten des (220)-Reflexes für die Probe as1d.

5.4 Modell für die Defektbildung in Bor-implantiertem und ausgeheiltem Silizium

Insgesamt haben die Messungen an den Referenzsystemen in den Abschnitten 5.2 und 5.3 ergeben, daß die bei einer Ausheiltemperatur von über 1000°C auftretenden planaren Strukturen in den Bor-implantierten Systemen nur durch das Zusammenspiel von Temperaturbehandlung und vorausgehender Schädigung des Kristalls durch Implantation entstehen. Außerdem sind sie ein Spezifikum des Bor-dotierten Systems, weil sie bei in gleicher Weise präparierten Arsen-dotierten Proben nicht auftreten. Das Gleiche gilt auch für die in allen Bor-implantierten Systemen gefundenen großen Zwischengitter-Cluster.

Auf der Basis dieser Tatsachen kann nun ein Modell für die Defektbildung in den Bor-implantierten und ausgeheilten Silizium-Systemen entwickelt werden.

5.4.1 Clusterbildung

Die Bildung von großen Clustern kann auf der Basis der Ergebnisse verstanden werden, die schon bei den zahlreichen Untersuchungen zum TED-Phänomen erzielt wurden. Es ist in diesem Zusammenhang inzwischen unbestritten, daß ein Teil der Bor-Atome schon während der Implantation bzw. in einem sehr frühen Stadium des Ausheilens eine immobile Konfiguration einnimmt [121]. In Systemen, die oh-

ne Implantation mit hohen Bor-Dosen dotiert und die nachträglich einer Silizium-Selbstimplantation unterzogen wurden kann man andererseits feststellen, daß eine immobile Bor-Komponente nur in den Bereichen des Kristalls auftritt, die von der Implantation betroffen sind [121]. Daraus folgt, daß die immobile Bor-Komponente sowohl Bor als auch Silizium-Zwischengitteratome (I) enthalten muß. Als Vorläufer für die Bildung immobiler Bor-haltiger Cluster wurde daraufhin der Komplex BI_2 identifiziert [121].

Auf der anderen Seite kondensieren die aufgrund der Implantation im Überschuß vorhandenen Silizium-Zwischengitteratome vorwiegend in die sog. $\{311\}$ -Defekte, die nur aus Silizium-Atomen bestehen [47]. Im Bor-dotierten Silizium konkurrieren also die Bildung von BI_2 -Cluster-Vorläufern und $\{311\}$ -Defekten miteinander, weil sie beide die überschüssigen Silizium-Zwischengitteratome aufbrauchen. Diese Tatsache wurde durch Untersuchungen bestätigt bei denen die Dichte der $\{311\}$ -Defekte in Abhängigkeit von der Bor-Konzentration gemessen und bei denen festgestellt werden konnte, daß die $\{311\}$ -Dichte mit zunehmendem Bor-Gehalt abnimmt [62].

Insgesamt kann dadurch auch nur eine begrenzte Anzahl an BI_2 -Komplexen entstehen. Sie wirken anschließend als Kondensationskeime, an die sich weitere Bor-Atome anlagern, so daß Komplexe der Form $B_m I_n$ entstehen. Diese haben interstitiellen Charakter und das darin enthaltene Bor ist unbeweglich und elektrisch inaktiv. Ihre Größe ist abhängig von den verfügbaren Bor-Atomen und damit von der Bor-Konzentration. Das zeigt sich bei den in Abschnitt 5.1.2 ermittelten Cluster-Radien von 13 \AA und $\approx 20 \text{ \AA}$.

Damit sind aber erst die Verhältnisse unmittelbar nach der Implantation und im Frühstadium des Ausheilens beschrieben. Bei fortgesetztem Ausheilprozeß lösen sich die $\{311\}$ -Defekte wieder auf und setzen dadurch in kontrollierter Weise Silizium-Zwischengitteratome frei, die dann die anomale Bor-Diffusion bewirken [47] (vgl. Kapitel 2.2.1). Gleichzeitig bleiben die interstitiellen Bor-haltigen Komplexe bestehen, während das an der vorübergehend erhöhten Diffusion beteiligte Bor in einem weiten Bereich auf substitutionellen, elektrisch aktiven Plätzen des Silizium-Gitters abgelagert wird [100].

5.4.2 Wachstum von Stapelfehlern durch Hochtemperatur-Ausheilen

Die im vorigen Abschnitt entwickelte Vorstellung von der Art der Defekte in Bor-implantiertem und ausgeheiltem Silizium läßt einen Punkt offen: den Verbleib der an der Bor-Diffusion beteiligten Silizium-Zwischengitteratome. Das Verhalten der Silizium-Zwischengitteratome ist dabei sehr stark von der Temperatur abhängig.

Bei einer Ausheiltemperatur von 750° C bleiben die Silizium-Atome auf Zwischengitterplätzen liegen, wobei sie entweder eigene Zwischengitter-Cluster bilden oder zu den in Abschnitt 5.4.1 diskutierten Bor-haltigen Clustern beitragen. Beide Konglomerate besitzen einen mittleren Radius von $\approx 20 \text{ \AA}$ wie er in Kapitel 5.1.2 aus der

Analyse der diffusen Streuung ermittelt wurde.

Erreicht die Ausheiltemperatur dagegen Werte von 1060-1070° C, dann erhält man ein völlig anderes Szenario, das sich aus Untersuchungen ergibt, die in der Literatur vorhanden sind und das - wie die weiter unten dargestellten Modellrechnungen zeigen - mit den im Rahmen dieser Arbeit erzielten Meßergebnissen in Einklang steht. Ausgangspunkt sind die Ergebnisse von Patel und Authier für sauerstoffhaltiges Silizium, das im selben Temperaturbereich getempert wurde [119]. Diese Behandlung führt zur Bildung von SiO_2 -Ausscheidungen innerhalb des Materials, wobei ein SiO_2 -Molekül ungefähr das Volumen von zwei Silizium-Atomen einnimmt [128]. Dadurch entsteht ganz ähnlich wie im Gefolge der Implantation ein Überschuß an Silizium-Atomen, die sich auf Zwischengitterplätzen der Kristallmatrix befinden [120]. Bei Temperaturen über 1000° C kondensieren diese Zwischengitteratome in extrinsische Stapelfehler auf (111)-Ebenen, d.h. sie bilden zusätzliche in das Silizium-Gitter eingeschobene (111)-Ebenen mit einer begrenzten Ausdehnung und einer scheibenförmigen Gestalt [120], [168]. Zusätzlich entstehen in diesem sauerstoffhaltigen Silizium noch perfekte Versetzungsringe mit einem Burgers-Vektor \vec{b} parallel zur $\langle 110 \rangle$ -Richtung [119], [155]. Für derartige Strukturen gibt es aber bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchten Systemen keinerlei Anzeichen. Ein Grund dafür dürfte die Tatsache sein, daß diese perfekten Versetzungsringe sehr leicht nach dem Muster $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \rightarrow \frac{1}{6} \langle 11-2 \rangle + \frac{1}{3} \langle 111 \rangle$ in zwei partielle Versetzungen vom Shockley- und Frank-Typus dissoziieren [120]. Die Shockley-Versetzung kann wegdiffundieren und ausheilen, während die partielle Versetzung vom Frank-Typus als Begrenzung eines extrinsischen Stapelfehlers zurückbleibt [120]. Die Bildung von perfekten Versetzungen wäre also auch in den Bor-implantierten und ausgeheilten Systemen theoretisch möglich. Sie würden aber alsbald zerfallen und im Endeffekt ebenfalls zur Bildung von Stapelfehlern beitragen.

Die Untersuchungen von Tan und Gösele haben gezeigt, daß das Wachstum der Stapelfehler allein durch den Überschuß an Silizium-Zwischengitteratomen (I) und durch die Temperatur bedingt ist [168]. Wenn der I -Überschuß definiert wird durch

$$s = \frac{c_I - c_I^0}{c_I^0}, \quad (5.4)$$

wobei c_I die aktuelle Konzentration an Silizium-Zwischengitteratomen und c_I^0 die entsprechende Gleichgewichtskonzentration darstellt, dann läßt sich für die Zeitabhängigkeit des Stapelfehlerradius' schreiben [168]:

$$\frac{dr_{SF}}{dt} \propto s - \frac{\gamma_{SF}}{kT}. \quad (5.5)$$

γ_{SF} stellt dabei die für die Bildung des Stapelfehlers notwendige Energie dar. Daraus folgt sofort, daß die Stapelfehler nur dann entstehen können wenn entweder der Zwischengitteratomüberschuß oder die Temperatur während der thermischen Behandlung

entsprechend hoch ist. Sobald die rechte Seite von Gleichung 5.5 dagegen negativ wird, ist die Bildung von derartigen Stapelfehlern unterdrückt.

In allen drei Systemen $b1d$, $b2c$ und $b3c$, die die in Abschnitt 5.1.3 untersuchten Streaks und die ihnen zugrundeliegenden planaren Strukturen zeigen, sind die gleichen Voraussetzungen gegeben, die in den eben diskutierten sauerstoffhaltigen Silizium-Systemen zur Bildung von Stapelfehlern führen:

- ein durch die Implantation induzierter starker I -Überschuß. Dieser wird auch durch die vorübergehend erhöhte Bor-Diffusion nicht beeinträchtigt, weil die Silizium-Zwischengitteratome, die diese Diffusion bewirken, immer wieder an Zwischengitterplätze zurückkehren [34];
- eine Ausheiltemperatur von mehr als 1000°C .

Daher können die beobachteten planaren Strukturen auf die Bildung von extrinsischen Stapelfehlern auf (111)-Ebenen zurückgeführt werden. Ihre Größe ist dabei im wesentlichen durch die Ausheilzeit bestimmt. Deswegen unterscheiden sich die Werte für die mittleren Stapelfehlerradien (vgl. Abschnitt 5.1.3) auch nur unwesentlich voneinander, da der Temperaturschritt bei mehr als 1000°C immer die gleiche Zeitdauer (10 sec) hatte. Auch die ermittelte Dicke der planaren Strukturen senkrecht zu ihrer Ebene (in Form der räumlichen Ausdehnung des stark gestörten Kristallbereichs) stimmt mit der Ausdehnung von 1 Monolage Silizium in $\langle 111 \rangle$ -Richtung überein.

Alle anderen untersuchten Systeme erfüllen die Voraussetzungen zur Bildung von Stapelfehlern nicht:

- Die anderen Bor-implantierten Proben wurden maximal bei 750°C ausgeheilt.
- Die epitaktisch Bor-dotierten Systeme wurden vor der Temperaturbehandlung bei 1070°C nicht implantiert, so daß auch kein I -Überschuß entstehen konnte.
- Bei den Arsen-implantierten Proben wurde die Implantation mit der gleichen Energie wie beim Bor durchgeführt. Aufgrund der wesentlich größeren Masse der Arsen-Ionen ist die Schädigung des Silizium-Kristalls unmittelbar nach der Implantation größer als bei der Bor-Implantation [28]. Allerdings ist der Implantationsschaden beim Arsen stärker räumlich konzentriert als beim Bor und es bilden sich sogar amorphe Bereiche [28]. Daher ist es denkbar, daß die Auflösung dieser Bereiche während der Temperaturbehandlung dazu führt, daß ein Großteil der Silizium-Zwischengitteratome ebenfalls ausheilt. Dadurch würde sich ein im Vergleich zum Bor deutlich verringerter I -Überschuß ergeben, so daß nach Gleichung (5.5) das Wachstum von Stapelfehlern trotz einer Temperatur von 1070°C nicht möglich ist.

Um diese Modellvorstellung in Bezug auf die Gesamtheit der erzielten Meßdaten zu überprüfen, wurden Modellrechnungen durchgeführt, bei denen die von Stapelfehlern auf (111)-Ebenen verursachte diffuse Streuung berechnet und mit den Meßdaten verglichen wurde. Für diese Rechnungen wurden zwei Ansätze verwendet: eine klassische Methode auf der Basis der Elastizitätstheorie nach V. Holý und ein atomistischer Ansatz im Rahmen der von Nordlund et al. entwickelten Simulationemethode [111].

5.5 Simulation der durch die Stapelfehler induzierten Intensität

5.5.1 Klassische Modellrechnungen

Die theoretische Beschreibung der in die Kristallmatrix eingebetteten Stapelfehler ist in der Literatur ausführlich diskutiert worden [72], [87] und auch ihr Einfluß auf die Röntgenstreuung wurde bereits von Berliner und Werner mit einem statistischen Ansatz behandelt [21]. Hier wird aber wieder auf einen klassischen Ansatz auf der Basis der Elastizitätstheorie zurückgegriffen [155], zu dem von V. Holý eine Simulationsrechnung entwickelt wurde. Die Berechnung der durch die Stapelfehler induzierten diffusen Streuung mit Hilfe der Elastizitätstheorie erfolgt auf der Basis der in Kapitel 3.3.3 entwickelten Theorie, wobei die Streuintensität nach Gleichung (3.64) im wesentlichen von der Fourier-Transformierten des Verzerrungsfeldes abhängt, das in Abschnitt 3.3.3.3 abgeleitet wurde und in Gleichung (3.80) dargestellt ist.

Das vom Stapelfehler herrührende Verzerrungsfeld ist dabei immer näherungsweise parallel zum Burgers-Vektor $\vec{b} = \frac{1}{3} \langle 111 \rangle$ der partiellen Versetzung ausgerichtet, die die zusätzliche (111)-Ebene begrenzt. Da auch die Fourier-Transformierte des Verzerrungsfeldes dieselbe Richtung besitzt, hat das drastische Konsequenzen für die dadurch induzierte diffuse Streuung. Nach Gleichung (3.64) ist sie nämlich vom Betrag des Skalarprodukts der Fourier-Transformierten des Verzerrungsfeldes $\vec{s}(\vec{Q})$ mit dem Vektor des Hauptreflexes \vec{G} abhängig. Für den Burgers-Vektor gibt es nun im Prinzip 8 Orientierungsmöglichkeiten entlang äquivalenter $\langle 111 \rangle$ -Richtungen. Da aber alle hier untersuchten Reflexe Oberflächenreflexe mit $l = 0$ sind, kommt es nicht darauf an welchen Wert b_3 besitzt ($b_3 = \frac{1}{3}$ oder $b_3 = -\frac{1}{3}$). Es bleiben also 4 Orientierungsmöglichkeiten, die für die Streuung interessant und in der folgenden Tabelle im Überblick dargestellt sind:

\vec{b}	\vec{G}_1	$ \vec{G}_1 \cdot \vec{b} $	\vec{G}_2	$ \vec{G}_2 \cdot \vec{b} $
$\langle \frac{1}{3} \frac{1}{3} b_3 \rangle$	$\langle 220 \rangle$	$\frac{4}{3}$	$\langle 400 \rangle$	$\frac{4}{3}$
$\langle -\frac{1}{3} \frac{1}{3} b_3 \rangle$	$\langle 220 \rangle$	0	$\langle 400 \rangle$	$\frac{4}{3}$
$\langle \frac{1}{3} -\frac{1}{3} b_3 \rangle$	$\langle 220 \rangle$	0	$\langle 400 \rangle$	$\frac{4}{3}$
$\langle -\frac{1}{3} -\frac{1}{3} b_3 \rangle$	$\langle 220 \rangle$	$\frac{4}{3}$	$\langle 400 \rangle$	$\frac{4}{3}$

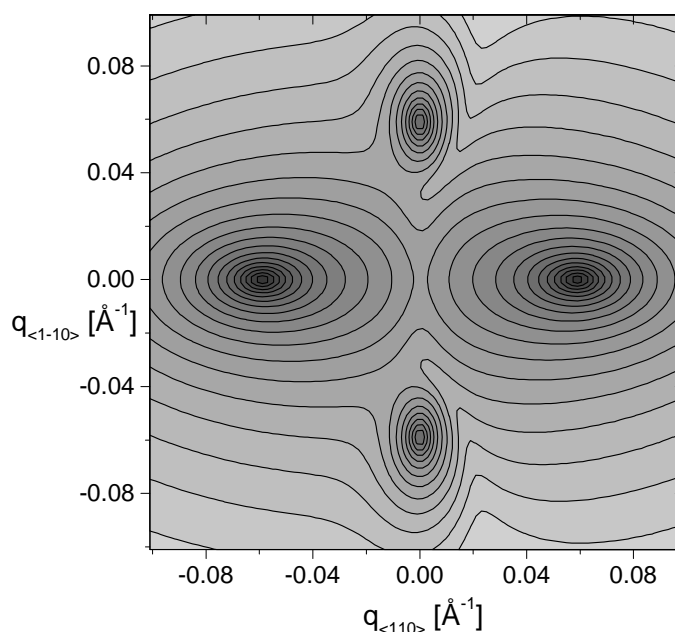


Abbildung 5.33: Ergebnis einer Modellrechnung nach V. Holý für die durch die Stapelfehler induzierte diffuse Streuung in der Umgebung des (220)-Reflexes. Die Konturlinien entsprechen willkürlichen Einheiten in logarithmischer Darstellung.

Daraus folgt unmittelbar, daß in der Umgebung des (220)-Reflexes nur zwei der insgesamt vier möglichen - von den Stapelfehlern induzierten - stabförmigen Intensitätsverteilungen auftreten können. Diese beiden sichtbaren Streaks liegen entlang der radialen Richtung durch den Reflex, da in den beiden Fällen - in denen das Skalarprodukt nicht verschwindet - gerade $b_1 = b_2$ gilt. Die beiden anderen, angularen Streaks können - wenn überhaupt - nur durch die schwachen Komponenten des Verzerrungsfeldes, die nicht parallel zum Burgers-Vektor gerichtet sind, angeregt werden.

Ganz anders sieht es in der Umgebung des (400)-Reflexes aus. Hier sollten alle vier Richtungen des Burgers-Vektors gleichwertig sein und man sollte alle Streaks beobachten können.

Diese Schlußfolgerungen wurden anhand von Modellrechnungen mit einem von V. Holý entwickelten Programm für beide Reflexe überprüft. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.33 für den (220)-Reflex und in Abbildung 5.34 für den (400)-Reflex dargestellt. Man erkennt sofort, daß in der Intensitätsverteilung um den (220)-Reflex zwei dominante radiale Satelliten auftreten. Die angularen Satelliten sind demgegenüber viel schwächer und nur aufgrund der logarithmischen Darstellungsweise sichtbar. In der Umgebung des (400)-Reflexes dagegen sind vier gleichstarke Satelliten zu beobachten, die gegenüber dem Hauptreflex entlang der äquivalenten $\langle 110 \rangle$ -Richtungen versetzt sind (eigentlich entlang äquivalenter $\langle 111 \rangle$ -Richtungen, aber die l -Koordinate hat

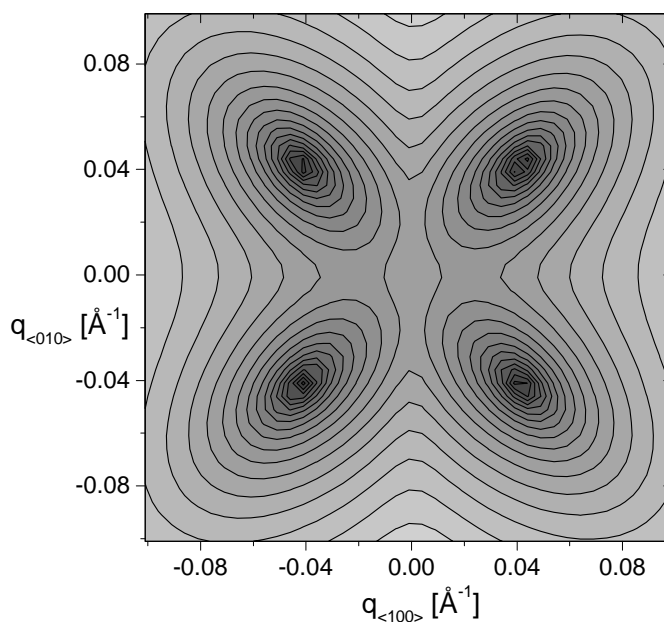


Abbildung 5.34: Ergebnis einer Modellrechnung nach V. Holý für die durch die Stapelfehler induzierte diffuse Streuung in der Umgebung des (400)-Reflexes. Die Konturlinien entsprechen willkürlichen Einheiten in logarithmischer Darstellung.

in der hier gezeigten zur l -Richtung senkrechten Ebene des reziproken Raumes keine Bedeutung).

Berücksichtigt man zusätzlich zu den Stapelfehlern die von den außerdem vorhandenen Defekt-Clustern herrührende diffuse Streuung, die bereits in Kapitel 3.3.3 abgeleitet wurde, dann läßt sich damit auch das gesamte Streubild in der Umgebung der beiden Oberflächenreflexe simulieren.

Damit ist die vollständige qualitative Konsistenz zwischen dem entwickelten Modell und den gemessenen Intensitätsverteilungen gezeigt. Um aber auch quantitative Informationen über die Stapelfehler abzuleiten, müssen wieder die Meßergebnisse im senkrechten Modus herangezogen werden. Dies sei hier beispielhaft anhand der Ergebnisse für das System *b1d* durchgeführt. Gewählt wird einer der im positionsempfindlichen Detektor aufgezeichneten Q_z -Scans an der Stelle $(h/k) = (1,9/1,9)$ des reziproken Raumes. Entlang dieses Pfades im reziproken Raum kann die von den Stapelfehlern induzierte diffuse Streuung berechnet und an die Meßdaten angepaßt werden. Dabei läßt sich ein Ergebnis von der Form erzielen wie es in Abbildung 5.35 dargestellt ist.

Man erkennt, daß mit den in die Berechnung von Abbildung 5.35 eingehenden, großen Stapelfehlern allein keine befriedigende Anpassung der Meßdaten möglich ist. Das berechnete Maximum hat die Form einer Besselfunktion. Dies entspricht der

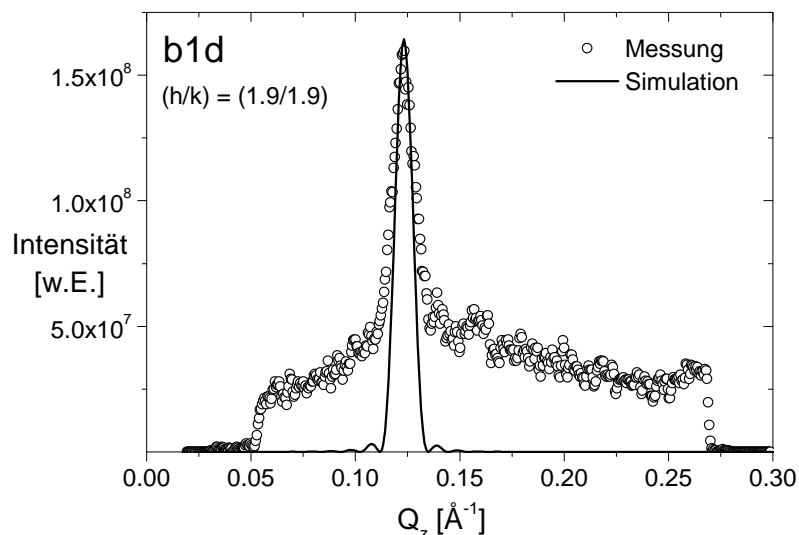


Abbildung 5.35: Vergleich zwischen der Messung und der durch die Stapelfehler induzierten diffusen Streuung bei einem mittleren Radius der Stapelfehlerscheibe von 300 Å.

Fourier-Transformierten des Formfaktors einer Scheibe [80] und die theoretische Intensität ist dadurch sehr stark im Bereich dieses Maximums konzentriert. Der in der Messung vorhandene charakteristische Untergrund kann nicht nachvollzogen werden. Auch wenn man zusätzlich die durch die Cluster-Streuung verursachte homogene diffuse Intensität berücksichtigt, ist ein Fit der Meßdaten nicht möglich.

Eine Lösung dieses Problems ergibt sich, wenn man berücksichtigt, daß die Bildung der Stapelfehler einen dynamischen Prozeß darstellt, der nach 10 Sekunden Ausheilzeit noch nicht beendet ist, wobei das Wachstum an bestimmten Nukleationspunkten beginnen muß [120]. Im Fall der sauerstoffhaltigen Silizium-Systeme wurden diese Nukleationspunkte als kleine SiO_2 -Prezipitate identifiziert [120] in deren Verzerrungsfeld die Kondensation der Zwischengitteratome anscheinend bevorzugt ist. Die Situation ist analog zum Phänomen des internen Getterns, bei dem sich Fremdatome bevorzugt in der Nähe von Gitterfehlern abscheiden, da sie in deren Verzerrungsfeld eine erhöhte Löslichkeit besitzen [155].

Bei den hier untersuchten Systemen kann die Rolle der Nukleationspunkte in analoger Weise von interstitiellen Clustern übernommen werden. Da aber zwei Arten von interstitiellen Komplexen vorhanden sind - die $\{311\}$ -Defekte, die sich unmittelbar nach der Implantation bilden und die Bor-haltigen interstitiellen Cluster, die im Zuge der Analyse in Abschnitt 5.1.2 festgestellt wurden - ergeben sich zwei Arten von Nukleationspunkten. Dabei gilt:

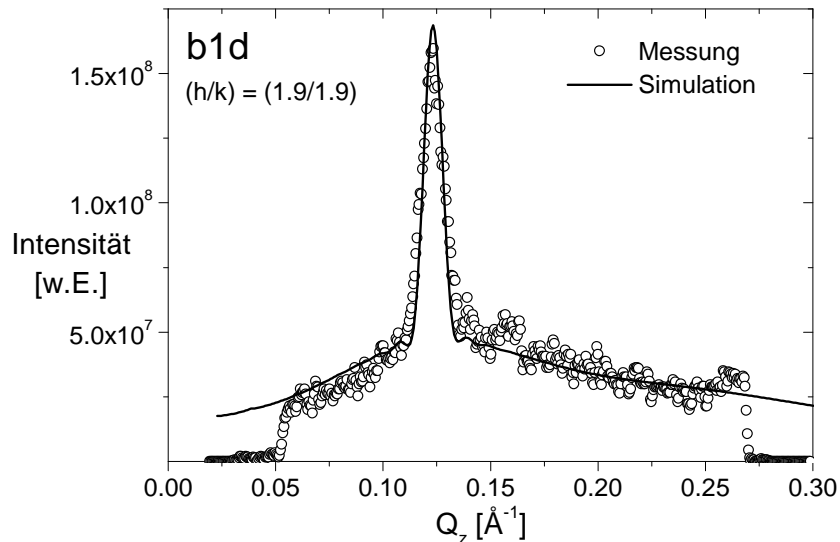


Abbildung 5.36: Vergleich zwischen der Messung und der berechneten diffusen Streuung. Neben einem Untergrund durch interstitielle Cluster werden zwei Arten von extrinsischen Stapelfehlern berücksichtigt, die sich nur durch ihren mittleren Radius - 300 Å und 75 Å - voneinander unterscheiden.

- Nur die {311}-Defekte sind bereits zu Beginn des Ausheilens vorhanden. Daher können nur die in deren Umgebung nukleierenden Stapelfehler bis zur vollen Größe während der Ausheilzeit heranwachsen.
- Die Bor-haltigen interstitiellen Defekte bilden sich erst im Laufe des Ausheilens. Stapelfehler die in ihrer Umgebung entstehen, beginnen erst verspätet zu wachsen und sind daher beim Ende des Ausheilprozesses noch wesentlich kleiner.

Auch diese zweite Art kleiner Stapelfehler muß bei der Simulation der Meßdaten berücksichtigt werden. Damit kann schließlich eine weitgehend optimale Anpassung der Theorie an die Messung erreicht werden, wie in Abbildung 5.36 zu sehen ist.

Diese Rechnung bestätigt also das Modell der Stapelfehler. Sie macht dabei zwei verschiedene Stapelfehlergrößen erforderlich, die aufgrund der physikalischen Bildungsmechanismen in den untersuchten Systemen auch plausibel sind.

5.5.2 Atomistische Modellrechnungen

Zusätzlich kann das Stapelfehler-Modell aufgrund der heute zur Verfügung stehenden Rechenleistungen auch mit Hilfe atomistischer Simulationen überprüft werden. Das ist notwendig weil die im vorigen Abschnitt angewandte Berechnung auf der Basis der Elastizitätstheorie ein Kontinuumsmodell verwendet, das im wesentlichen nur auf die

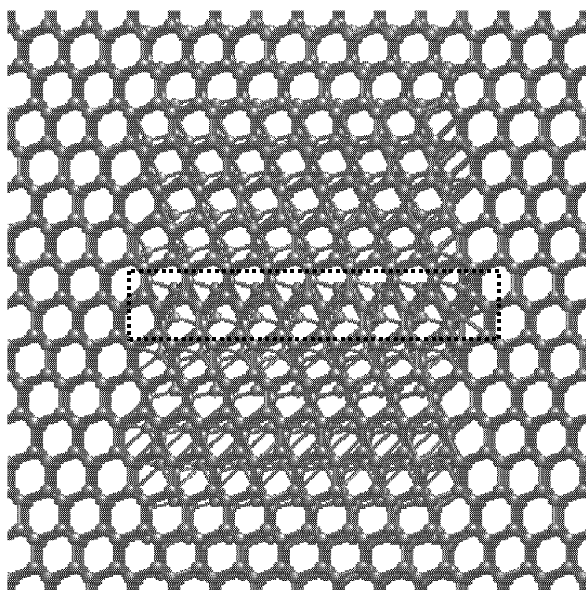


Abbildung 5.37: Verzerrungen des Silizium-Gitters, die durch einen kleinen extrinsischen Stapelfehler auf einer (111)-Ebene verursacht werden - nach einer Berechnung von K. Nordlund. Die zusätzlichen Atome befinden sich innerhalb des von der gestrichelten Linie umrahmten Bereiches.

Größe der vorhandenen Defekt-Cluster empfindlich ist [109]. Daher ist es fraglich, ob diese Theorie in der Lage ist eine komplexere Defektkonfiguration - wie sie der extrinsische Stapelfehler mit seinen extrem unterschiedlichen räumlichen Ausdehnungen in verschiedenen Richtungen darstellt - ausreichend korrekt zu beschreiben. Diese Problematik macht die Durchführung zusätzlicher atomistischer Rechnungen notwendig. Diese wurden von K. Nordlund mit der von ihm entwickelten Methode im Rahmen einer Kollaboration durchgeführt.

Im Prinzip müssen dafür nur die atomaren Koordinaten des realen Systems bekannt sein. Dann kann die gestreute Intensität einfach durch phasenrichtiges Aufsummieren der atomaren Streubeiträge berechnet werden:

$$I(\vec{G}) = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}, \quad (5.6)$$

wobei die \vec{r}_j die Positionen der Atome und die f_j ihr Streuvermögen darstellen.

In der Praxis ist die Anzahl N der Atome, die im Rahmen sinnvoller Rechenzeiten berücksichtigt werden kann, mit $N \lesssim 10^8$ in der Regel immer noch viel zu klein um einen direkten Vergleich mit den experimentellen Daten zu ermöglichen. Daher haben Nordlund et al. eine Methode entwickelt mit der eine atomistische Berechnung in der Umgebung des Defekts und eine kontinuierliche Behandlung des Verzerrungsfeldes in

größeren Abständen miteinander kombiniert werden [109]. Die stärkste Herausforderung ist dabei eine wirklichkeitsgetreue Beschreibung des Defekts und seiner näheren Umgebung in atomaren Koordinaten. Dazu wird die Wechselwirkung der Atome untereinander mit Hilfe halbempirischer, klassischer Potentiale berücksichtigt [109] und der Bereich des Defekts und seiner Umgebung bis zum Erreichen einer Gleichgewichtskonfiguration relaxiert [118], [109].

Derartige Berechnungen wurden auch für den hier vorliegenden Fall des extrinsischen Stapelfehlers auf einer (111)-Ebene unter Verwendung eines Stillinger-Weber Wechselwirkungspotentials für die Silizium-Atome durchgeführt [165]. Zunächst wurden dabei die vom Stapelfehler induzierten Verzerrungen berechnet. Diese erhält man als unmittelbares Ergebnis des Relaxationsprozesses [109]. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.37 für einen relativ kleinen Stapelfehler in Form eines Hexagons mit 8-atomiger Seitenlänge dargestellt.

Man erkennt wie sich die Verzerrungen fast ausschließlich senkrecht zur Stapelfehlerebene ausbilden. Dort klingen sie über einen Bereich von 5 - 6 atomaren Abständen kontinuierlich ab. Der stark gestörte Bereich des Gitters ist sogar noch wesentlich kleiner in Übereinstimmung mit den in Abschnitt 5.1.3 erzielten Ergebnissen zur Ausdehnung dieses Bereiches. Im Gegensatz zur klassischen Elastizitätstheorie werden also sowohl starke lokale Verschiebungen wie auch ein langreichweitiges Verzerrungsfeld innerhalb des Kristalls berücksichtigt.

Das entscheidende Problem des atomistischen Ansatzes nach Nordlund et al. ist die Verwendung einer endlichen Anzahl an Atomen in der unmittelbaren Umgebung des Defekts. Diese einzeln berücksichtigten Atome befinden sich bei dieser Rechenmethode im Innern eines kugelförmigen Gebiets mit dem Defekt als Zentrum. Insbesondere bei den hier auftretenden planaren Defekten kann der Radius dieser Kugel nicht mehr sehr weit über den Defektradius hinaus ausgedehnt werden. Auch wenn außerhalb dieses Bereiches die Defektwirkungen wieder durch eine Kontinuumsbeschreibung in die Berechnung eingehen, stellt sich doch die Frage, ob eine realistische Beschreibung der diffusen Streuintensität gelingt. Eine weitere Unsicherheit ist die Tatsache, daß das der atomaren Wechselwirkung zugrundeliegende Potential selbst nur eine Näherung und daher mit einer inhärenten Ungenauigkeit behaftet ist [109]. Zur Klärung der Frage ob die Berechnungen dadurch verfälscht werden, wurde für einen Stapelfehler mit einem Durchmesser von 140 Å die Intensität entlang von Pfaden parallel zur l -Achse des reziproken Raumes an bestimmten radialen Positionen (h/h) in der Umgebung des (220)-Reflexes (ähnlich der in Abbildung 5.36 dargestellten Messung) sowohl mit dem klassischen Ansatz als auch mit der atomistischen Methode berechnet. Das Ergebnis ist für $h = 2, 2$ in Abbildung 5.38 dargestellt.

Dabei zeigt sich, daß beide Berechnungsarten das gleiche Ergebnis - jeweils ein durch den Stapelfehler induziertes Maximum an der gleichen Stelle und mit der gleichen Breite - ergeben. Daraus kann geschlossen werden, daß sich die Unsicherheiten des atomistischen Ansatzes nicht negativ auswirken und daß die Gewinnung plausibler Resultate dadurch nicht gefährdet ist. Gleichzeitig ist sichergestellt, daß die atomi-

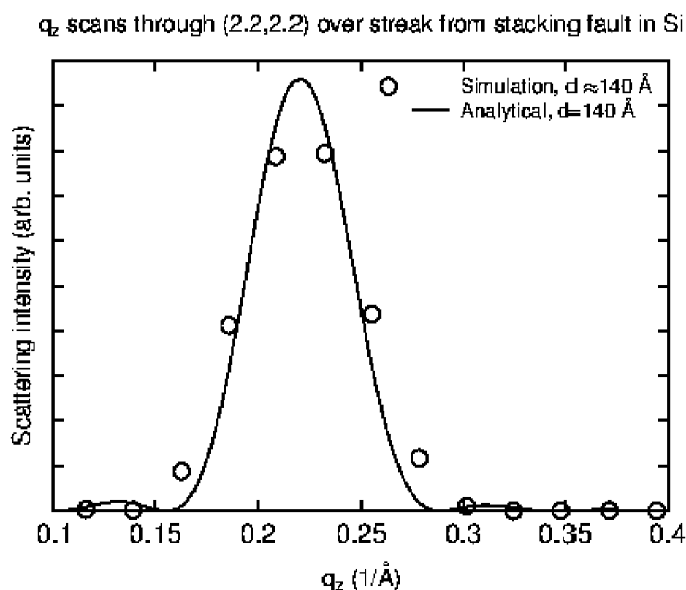


Abbildung 5.38: Vergleich der Ergebnisse einer atomistischen Simulation (von Kai Nordlund) und einer klassischen Berechnung (von Vaclav Holý) der von einem Stapelfehler mit dem Durchmesser 140 Å entlang eines Q_z -Scans durch den Punkt $(h/k) = (2, 2/2, 2)$ gestreuten Intensität.

stische Berechnung auch qualitativ die gleichen Ergebnisse liefert wie der klassische Ansatz und somit die durch die Stapelfehler verursachten Streaks nachvollzieht.

Die entscheidende Frage ist nun ob es durch derartige Berechnungen gelingt den Intensitätsabfall der Streaks mit zunehmender Entfernung vom Hauptreflex zu beschreiben. Der in Abschnitt 5.5.1 dargestellte klassische Ansatz berücksichtigt nur die langreichweitigen Verzerrungen und kann daher nur ein der traditionellen Huang-Streuung äquivalentes q^{-2} -Gesetz liefern (vgl. [93]). Der in den Abbildungen 5.20 - 5.22 beobachtete Übergang in einen wesentlich steileren Abfall wurde im Rahmen der Stokes-Wilson-Streuung und damit im Rahmen eines qualitativ anderen theoretischen Ansatzes durch den Einfluß der lokalen Verzerrungen erklärt. Daher wurden von Kai Nordlund entsprechende Simulationsrechnungen durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.39 dargestellt, wobei sich die folgenden wesentlichen Punkte ergeben:

- Zunächst ist die Kurve für einen nichtrelaxierten Kristall (offene Rechtecke) besonders instruktiv. Ohne Relaxation gibt es nämlich kein langreichweitiges Verzerrungsfeld und damit auch keine Huang-Näherung. In diesem unphysikalischen Fall - bei dem zusätzliche Atome ohne Auslenkung der Gitteratome hinzugefügt sind - würde die Streak-Intensität zunächst konstant bleiben bzw. nur schwach abfallen. Erst für großes q erhält man einen stark beschleunigten Intensitätszerfall. Der Streak ist dabei nichts anderes als die Streuung durch

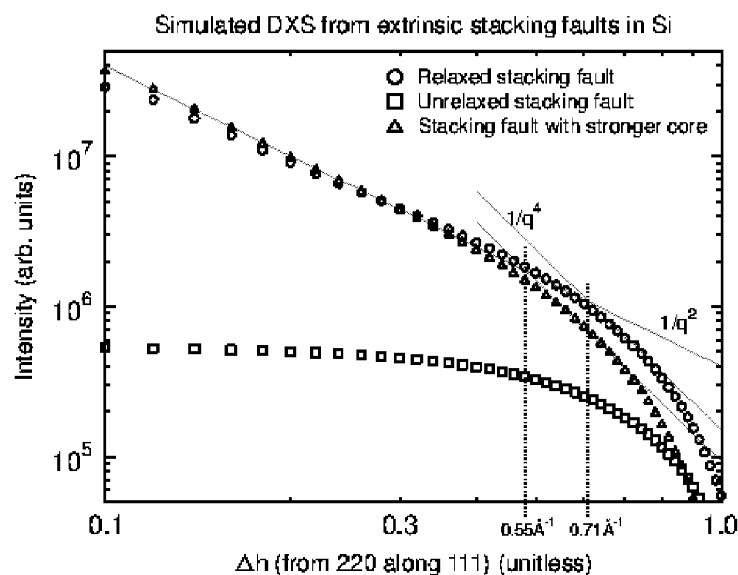


Abbildung 5.39: Zerfall des durch den Stapelfehler verursachten Streaks bei Entfernung vom Hauptreflex für ein relaxiertes und nichtrelaxiertes Gitter sowie für verschieden starke lokale Verzerrung (gemäß einer von Kai Nordlund durchgeführten Simulation).

die zusätzliche atomare Ebene des extrinsischen Stapelfehlers, d.h. die Laue-Streuung durch diesen Defekt (vgl. Fig. 1 in [94]).

- Im Fall eines relaxierten Kristalls (offene Kreise) ergibt sich beginnend mit den kleinsten q -Werten ein Intensitätsabfall nach einem q^{-2} -Gesetz. Es handelt sich dabei eindeutig um verzerrungsinduzierte Huang-Streuung. Diese ist im Vergleich mit der Laue-Streuung um fast zwei Größenordnungen höher. Daraus folgt, daß die von einem extrinsischen Stapelfehler hervorgerufene stabförmige Intensitätsverteilung tatsächlich durch Verzerrungsstreuung dominiert ist. Der Laue-Anteil ist praktisch vernachlässigbar. Daher ist die in Abschnitt 5.1.3 durchgeführte Analyse des Zerfalls der gemessenen Streak-Intensitäten richtig.
- Bei größerem q geht der Intensitätsabfall entlang des Streaks nicht nur in ein q^{-4} -Verhalten sondern anschließend praktisch kontinuierlich in einen noch steileren Zerfall über. Bei genauer Inspektion der Meßergebnisse in den Abbildungen 5.20 - 5.22 ist festzustellen, daß dies den experimentellen Beobachtungen entspricht. Nur der Übergangspunkt zwischen q^{-2} und q^{-4} ist mit $q_c = 0,71 \text{ \AA}^{-1}$ um einen Faktor 2 zu groß, was mit $1,41 \text{ \AA}$ einer unrealistisch kleinen Ausdehnung des Stapelfehlers senkrecht zur (111)-Ebene entsprechen würde.
- Daher wurde in einer weiteren Simulation die Stärke der Wechselwirkung erhöht

(offene Dreiecke). Es ergibt sich dadurch ein qualitativ gleichwertiges Ergebnis mit einem Übergangspunkt $q_c = 0,55 \text{ \AA}^{-1}$, der dem experimentellen Ergebnis wesentlich näher kommt.

Zusammenfassend kann man feststellen, daß die atomistische Simulation in der Lage ist den gemessenen Intensitätszerfall der stabförmigen Intensitätsverteilungen im Detail nachzuvollziehen. Die Ungenauigkeiten des verwendeten Wechselwirkungspotentials wirken sich dabei nur durch eine Verschiebung des Übergangspunktes q_c zwischen dem q^{-2} -Gesetz der Huang-Näherung und dem steileren Zerfall durch die starken lokalen Verzerrungen aus.

5.6 Tiefenverteilung der Stapelfehler

Die Tiefenverteilung ist v.a. für alle prozeßtechnischen Anwendungen eine kritische Information, wobei insbesondere geklärt werden muß ob sich die Stapelfehler als große planare Defekte in unmittelbarer Oberflächennähe oder am Rand des von der Implantation betroffenen Bereiches befinden. Um Anhaltspunkte über die Tiefenverteilung der Stapelfehler zu gewinnen wurde zunächst der oberflächennahe Bereich mit spekulären Reflektivitätsmessungen untersucht. Die Messungen wurden an einer 18kW-Drehanode mit Röntgenstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$ vorgenommen. Bei allen Proben, die die extrinsischen Stapelfehler besitzen zeigen die Meßergebnisse eine langwellige Oszillation. Diese ist dem Fresnel'schen Intensitätsabfall überlagert obwohl das System keine explizite Schichtstruktur besitzt. Um dieses ungewöhnliche Resultat mit den realen Verhältnissen in den Bor-implantierten und ausgeheilten Systemen in Beziehung zu setzen, wurden umfangreiche Simulationsrechnungen durchgeführt.

Als Beispiel ist in Abbildung 5.40 das Ergebnis für die Probe *b1d* zusammen mit der optimalen theoretischen Anpassung dargestellt.

Interessant sind v.a. die im Einsatz der Graphik gezeigten Strukturmodelle, die beide praktisch die gleiche theoretische Kurve liefern, die als Fit der Daten enthalten ist. Das System besitzt demnach nicht nur eine oberflächennahe Schicht größerer Dichte, die als Aufenthaltsort der extrinsischen Stapelfehler interpretiert werden kann. An der Oberfläche befindet sich zudem ein Bereich sehr geringer Materialdichte, der im Rahmen der Sensitivität der Reflektivitätsmessung sowohl als Schicht konstanter Dichte wie auch als Gradientenschicht beschrieben werden kann.

Da dieser Bereich unmittelbar an der Oberfläche liegt kann er auch mit mikroskopischen Verfahren untersucht werden. Es wurden daher zur Aufklärung der Realstruktur der Oberfläche Messungen mit dem Rasterkraftmikroskop vorgenommen. Das Resultat für die Probe *b1d* ist in Abbildung 5.41 dargestellt. Für *b2c* und *b3c* erhält man qualitativ die gleichen Resultate.

Das Bild zeigt eindeutig, daß aus der üblichen rauhen und oxidierten Oberfläche Cluster herauswachsen. Ihre Höhe beträgt im Durchschnitt 25 \AA und ihre Form er-

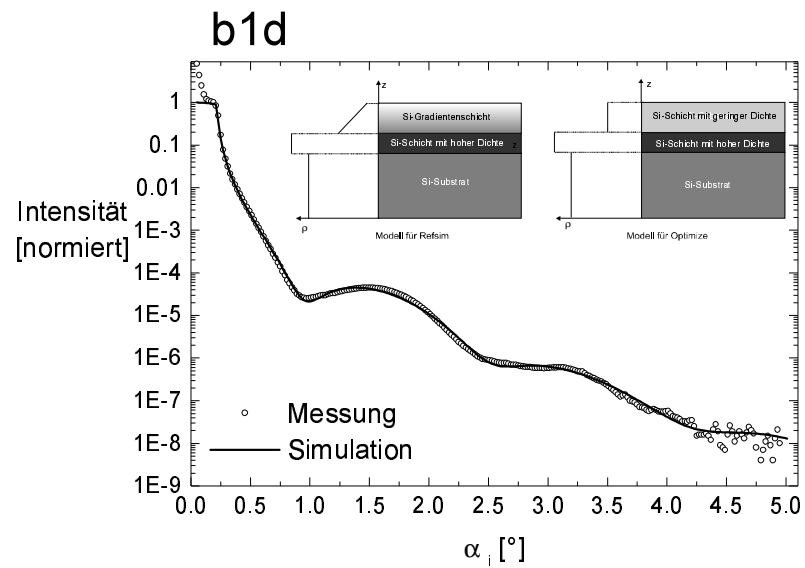


Abbildung 5.40: *Resultat der spekulären Reflektivität für das System b1d zusammen mit dem besten theoretischen Fit. Der Einsatz zeigt die beiden theoretischen Modelle, die jeweils beide denselben theoretischen Kurvenverlauf der Anpassung ergeben.*

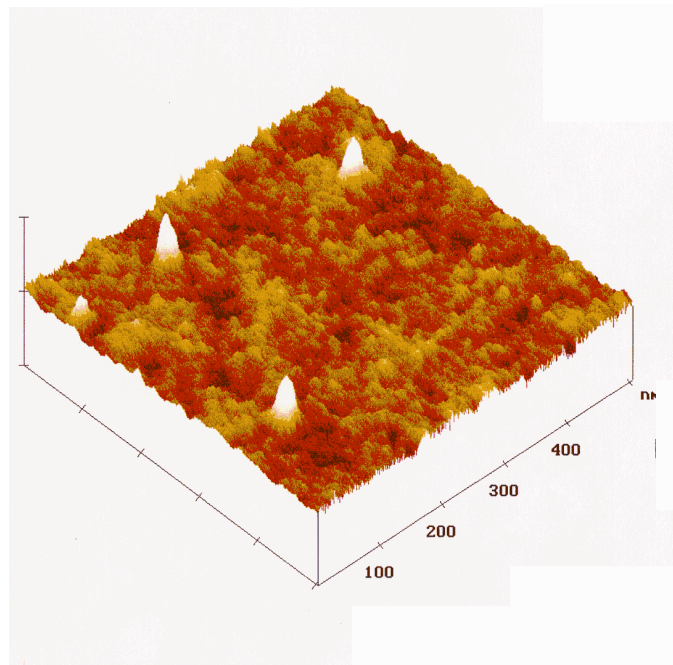


Abbildung 5.41: *Aufnahme der Oberfläche des Systems b1d mit dem Rasterkraftmikroskop. Die Längenskala zeigt Abmessungen in nm.*

scheint nur deshalb so spitz, weil die Längenskala der z -Richtung wesentlich kleiner ist als diejenige der lateralen Richtungen. Die Anordnung der Cluster ist beliebig. Auch bei Abbildung einer wesentlich größeren Fläche sind keine periodischen Strukturen erkennbar. Die Cluster scheinen vielmehr zufällig aus dem Material herauszuwachsen. Da im Rahmen der Beugungsmessungen unter streifendem Einfall niemals eine andere Gitterkonstante als die des Siliziums gefunden wurde, müssen diese Cluster - sofern sie kristallin sind - ebenfalls aus Silizium bestehen. Oder aber es handelt sich um komplett pseudomorph verspannte Cluster, die auch zu ihrer Spitze hin keinerlei Relaxation aufweisen. Das ist aber aufgrund der Ergebnisse von Kegel et al. sehr unwahrscheinlich [80].

Ihr Einfluß auf die Reflektivitätsmessungen läßt sich mit Hilfe einer dünnen Schicht geringer Dichte beschreiben, da die während der Messung beleuchtete Fläche groß genug ist um über viele Cluster und die dazwischenliegenden leeren Bereiche zu mitteln. Damit ist der Ursprung der obersten Schicht in dem Strukturmodell von Abbildung 5.40 geklärt.

Ob die zweite dichtere Schicht mit dem Bereich der Probe identisch ist, in dem sich die extrinsischen Stapelfehler befinden, kann durch eine tiefenaufgelöste Messung der Stapelfehler-induzierten stabförmigen Intensitätsverteilungen überprüft werden. Eine derartige Messung wurde mit Synchrotronstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 1,21788 \text{ \AA}$ am Strahlrohr *ID 3* der ESRF für das System *b1d* durchgeführt. Dabei wurden jeweils ganz analog zu der in Abbildung 5.36 dargestellten Messung Q_z -Scans an der radialen Position $(h/k) = (2, 1/2, 1)$ in der Umgebung des (220)-Reflexes gemessen und zwar diesmal mit unterschiedlichen Einfallswinkeln α_i . Das Resultat ist in Abbildung 5.42 veranschaulicht.

Der kritische Winkel liegt in diesem Fall bei $\alpha_c = 0,177^\circ$ und aus dem Vergleich der in Abbildung 5.42 dargestellten Kurven ergibt sich, daß sich die Stapelfehler bis in unmittelbare Oberflächennähe erstrecken müssen. Bereits für $\alpha_i < \alpha_c$ ist die Andeutung eines Maximums erkennbar und knapp oberhalb des kritischen Winkels ist der durch die Stapelfehler induzierte Peak voll ausgeprägt. Damit ist geklärt, daß es sich bei diesen Stapelfehlern nicht um Defekte handelt, die am Rande der Implantationstiefe auftreten ("*end of range defects*"). Sie befinden sich vielmehr in Oberflächennähe wo sie die im Rahmen einer prozeßtechnischen Bearbeitung herzustellenden integrierten Schaltkreise maximal stören.

Daher kann die bei der Reflektivitätsmessung festgestellte zweite Schicht - die eine etwas höhere Dichte als das reine Silizium selbst besitzt - mit dem die Stapelfehler enthaltenden Bereich der Probe identifiziert werden.

Dadurch ergibt sich auch ein möglicher Zusammenhang mit den an der Oberfläche zu beobachtenden Clustern. Da einige Stapelfehler ebenfalls bis an die Oberfläche vorstoßen ist es durchaus denkbar, daß sie dort ausheilen und dabei die in ihnen gebundenen überschüssigen Silizium-Zwischengitteratome abscheiden. Diese können dann die Oberflächen-Cluster bilden.

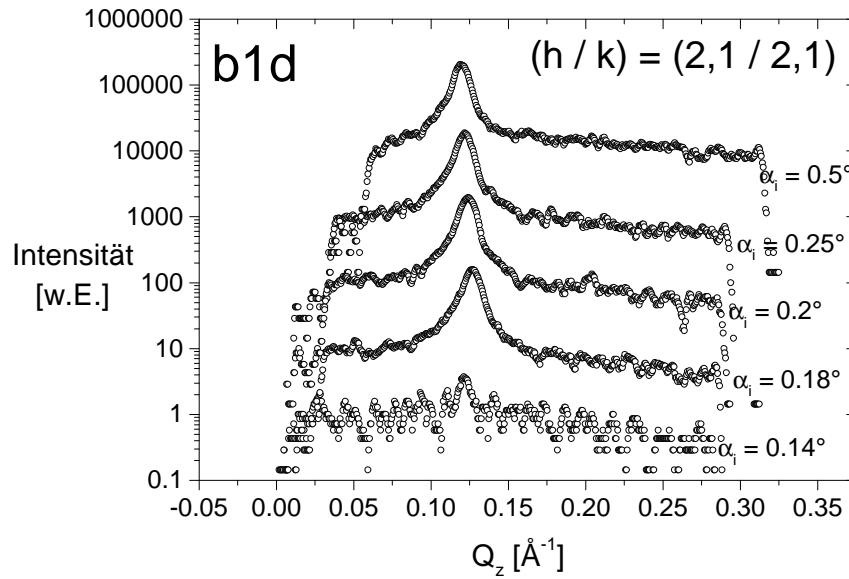


Abbildung 5.42: Intensitätsverteilungen entlang Q_z für das System *b1d* bei verschiedenen Einfallswinkeln α_i an der Position $(2,1/2,1)$. Die einzelnen Messungen sind mit verschiedenen Skalierungsfaktoren multipliziert und dadurch in der logarithmischen Darstellung gegeneinander verschoben.

Die Frage ob dieses Szenario realistisch ist läßt sich nur durch weitere Studien zum Ausheilverhalten der stapelfehlerhaltigen Systeme klären. Darauf wird in Kapitel 7 eingegangen.

Kapitel 6

Charakterisierung von vergrabenen epitaktisch gewachsenen Germanium- δ -Schichten

Im experimentellen Teil dieser Arbeit wurde zunächst die Anwendung der in 3.1 und in 3.2 dargestellten Methoden beschrieben. Nun sollen die Resultate derartiger Messungen an den epitaktisch gewachsenen Germanium- δ -Schichten diskutiert werden.

Ausgangspunkt sind Messungen am Volumen-Bragg-Reflex nach der Methode der stehenden Röntgenwellen, sowie Beugungsmessungen unter streifendem Einfall mit denen die perfekte kristalline Qualität der Systeme, sowie der Einbau der Germanium-Atome auf substitutionellen Gitterplätzen nachgewiesen wird.

Die detaillierte Auswertung der spekulären Reflektivitätsmessungen zeigt, daß sich der strukturelle Aufbau der Systeme nicht mit einem einfachen Modell von zwei Schichten auf Substrat erklären läßt, sondern daß sich für den Probenaufbau in Wachstumsrichtung ein oszillatorisches Germanium-Profil ergibt.

Der anschließende Nachweis atomarer Terrassen erlaubt es zusammen mit transmissionselektronenmikroskopischen Resultaten dieses Phänomen in Zusammenhang mit der lateralen Nanostruktur des Materials zu interpretieren. Durch die detaillierten Ergebnisse der nichtspekulären Reflektivität konnte der Ordnungszustand der terrassierten Oberfläche ermittelt werden, so daß insgesamt eine umfassende strukturelle Charakterisierung des epitaktisch gewachsenen Schichtsystems erreicht werden konnte.

6.1 Bragg-Messungen am System *Delta 1*

6.1.1 Anwendung der Methode der stehenden Röntgenwellen

Zunächst wurde das nach der in Abschnitt 2.1 beschriebenen Methode hergestellte Germanium- δ -Schichtsystem *Delta 1* mit Volumen-Bragg-Messungen untersucht. Das Ziel war die Anwendung des in 3.4 dargestellten Verfahrens der stehenden Röntgenwellen zur Bestimmung der Atompositionen des Germaniums innerhalb der Silizium-Matrix. Die Messungen wurden an der Station E2 des HASYLAB mit Strahlung der Energie 12,5 keV ($\lambda = 0,9919 \text{ \AA}$) durchgeführt, wobei sowohl der symmetrische (004)- als auch der asymmetrische (022)-Reflex untersucht wurden.

Das Diffraktometer wurde im nichtdispersiven Modus mit einem Doppelkristall-Monochromator (symmetrischer Germanium- und asymmetrischer Silizium-Kristall) verwendet, wobei für die Monochromatisierung bei beiden Kristallen dieselben Reflexe wie bei der Messung ((004) bzw. (022)) verwendet wurden. Dies ist die entscheidende Voraussetzung um die Darwin-Kurve der Bragg-Reflexe messen zu können. Die Rocking-Kurve der Probe und die Germanium-Fluoreszenz wurden jeweils simultan gemessen, während die Probe durch entsprechende Variation der Strahlungsenergie durch den Reflex gefahren wurde. Das Ergebnis zeigt Abbildung 6.1 jeweils zusammen mit optimal angepaßten Simulationsrechnungen, wobei die Werte für die entsprechenden Fitparameter, d.h. für den kohärenten Anteil f_c und die kohärente Position Φ_c , in der Grafik angegeben sind.

Der kohärente Anteil liegt mit $f_c = 0,885$ in beiden Fällen sehr hoch. Der Wert bedeutet, daß 88,5 % der Germanium-Atome den durch die kohärente Position Φ_c gegebenen Ort besetzen. Dieser Wert wiederum liegt für beide Reflexe nahe bei 1, so daß von einem substitutionellen Einbau der Germanium-Atome in das Silizium-Gitter ausgegangen werden kann. Die Abweichungen von 1 um +4,8 % (004) bzw. +2,5 % (022) zeigen, daß das Gitter im Bereich der Germanium- δ -Schicht aufgeweitet ist [17]:

$$d_{004}^{\delta} = 1,048 \times d_{004}^{Si} \quad (6.1)$$

$$d_{022}^{\delta} = 1,025 \times d_{022}^{Si} \quad (6.2)$$

Berücksichtigt man die räumliche Orientierung der entsprechenden Netzebenen zueinander (eingeschlossener Winkel 45°) sowie die Netzebenenabstände für das Silizium-Gitter ($d_{004}^{Si} = 1,3578 \text{ \AA}$, $d_{022}^{Si} = 1,9201 \text{ \AA}$), dann folgt aus den Zahlenwerten, daß die Gitterdehnung, die durch den grösseren Atomradius der Germanium-Atome bedingt ist, ausschließlich in Wachstumsrichtung erfolgt. Diese Tatsache steht in Einklang mit dem Modell des *pseudomorphen Wachstums* (vgl. Abschnitt 2.1).

Bei der weiteren Interpretation des Ergebnisses muß man davon ausgehen, daß beim Aufwachsen der geringen Menge an Germanium-Atomen wie sie für die vorhandenen Systeme charakteristisch ist, keine chemisch reine Germanium-Schicht entsteht.

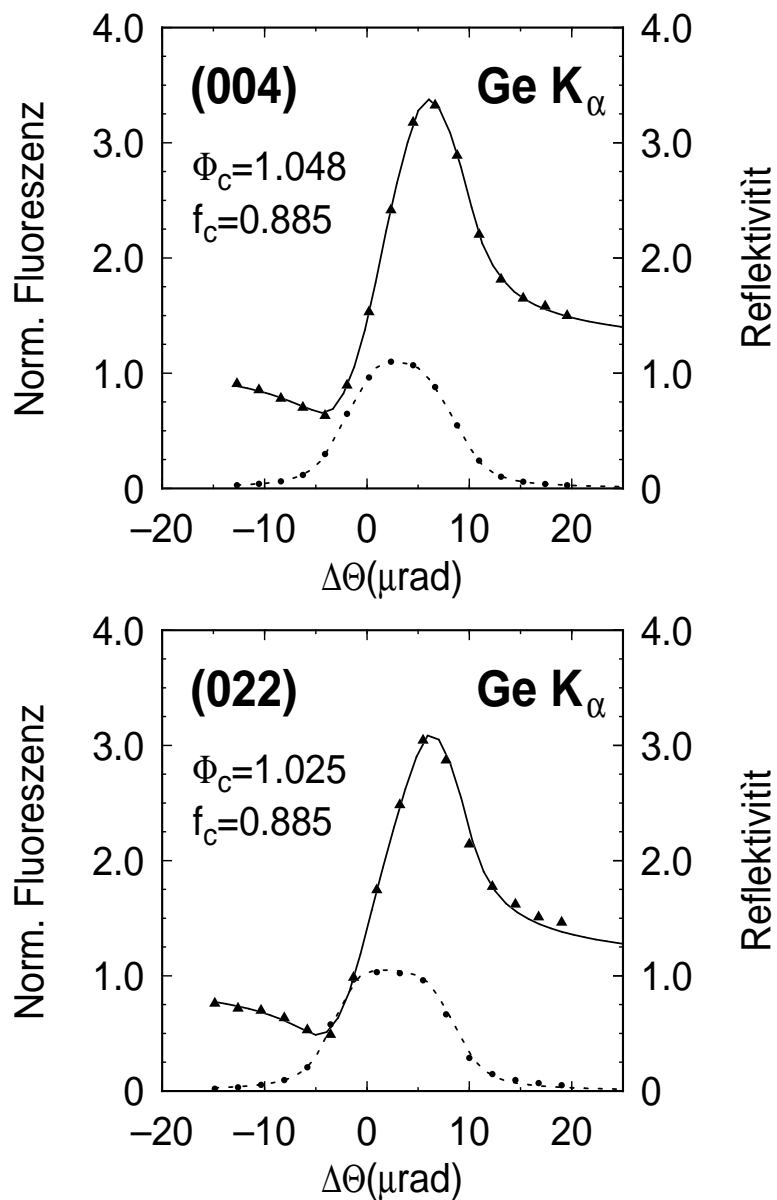


Abbildung 6.1: Ergebnisse der Stehende-Wellen-Messungen mit: Rocking-Kurve: voller Kreis (Messung) und gestrichelte Linie (Fit), Germanium-Fluoreszenz: Dreiecke (Messung) und durchgezogene Linie (Fit).

Durch Interdiffusions- und Segregationseffekte bedingt, sollte auch Silizium in der δ -Schicht vorhanden sein, so daß es sich bei allen Proben dieser Art um Schichtsysteme $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$ handelt. Die δ -Schicht ist dabei eine verspannte Schicht, deren Dicke noch unterhalb der kritischen Schichtdicke liegt. Die genaue chemische Zusammensetzung, d.h. der Wert für x , kann dann aus einem modifizierten Vegard'schen Gesetz bestimmt werden (vgl. Abschnitt 2.1). Die Gitterdehnung in Wachstumsrichtung ist dabei proportional zum entsprechenden Volumenwert multipliziert mit dem durch die elastischen Konstanten gegebenen Poisson-Verhältnis (siehe Beziehung (2.2), bzw. Gleichung (2.8) in [185]). Wenn man davon ausgeht, daß diese Beziehung auch bei sehr dünnen Kristallschichten noch zutrifft, dann kann x aus dem Resultat der Stehende-Wellen-Messung bestimmt werden. Dabei wird angenommen, daß sich auch die elastischen Konstanten zwischen den entsprechenden Werten für Silizium und Germanium nach dem Muster des Vegard'schen Gesetzes interpolieren lassen wie das in der folgenden Tabelle veranschaulicht ist (Zahlenwerte in Einheiten von $10^{11} \frac{N}{cm^2}$ nach [8]):

	Si	Ge	$Si_{1-x}Ge_x$
C_{11}	1,66	1,29	$1,66(1-x) + 1,29x$
C_{12}	0,64	0,48	$0,64(1-x) + 0,48x$
C_{44}	0,80	0,67	$0,8(1-x) + 0,67x$

Da die kohärente Position aber nur eine lokale Information über die Gitterdehnung liefert, ist der daraus bestimmte Wert für x eine obere Grenze. Mit dem obigen Meßergebnis erhält man $x = 0,64$ und dieser maximale Germanium-Anteil erscheint aufgrund des später festgestellten Germanium-Profiles als durchaus realistischer Wert.

6.1.2 Bragg-Beugung unter streifendem Einfall

Anschließend wurden Beugungsmessungen unter streifendem Einfall vorgenommen mit dem Ziel die kristalline Qualität des Materials in tiefenaufgelöster Form zu ermitteln. Die Messungen erfolgten an der HASYLAB-Station D4 mit Synchrotronstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 1,3 \text{ \AA}$, was zu einem kritischen Winkel von $\alpha_c = 0,19^\circ$ führt. Am (220)-Oberflächen-Reflex wurden jeweils α_f -Spektren bei Einfallswinkeln α_i zwischen 0° und $0,9^\circ$ aufgenommen. Die Resultate sind in Abbildung 6.2 dargestellt.

Qualitativ enthält die Intensitätsverteilung entlang α_f das übliche, durch die Transmission bedingte Maximum bei $\alpha_f = \alpha_c$. Bei $\alpha_i \approx \alpha_c$ ist die Form dieses Maximums durch dynamische Beugungseffekte verbreitert [142]. Für $\alpha_i < \alpha_c$ ist die Eindringtiefe der Strahlung zu klein um die δ -Schicht zu erreichen, so daß keinerlei Schichtdickenoszillationen entlang α_f auftreten. Bei grösseren Eindringtiefen dagegen ($\alpha_i \geq 0,3^\circ$) kommt es zur Interferenz zwischen den im Silizium-Substrat und in der Deckschicht gebeugten Signalen, so daß es in ähnlicher Weise wie bei der Reflektivität

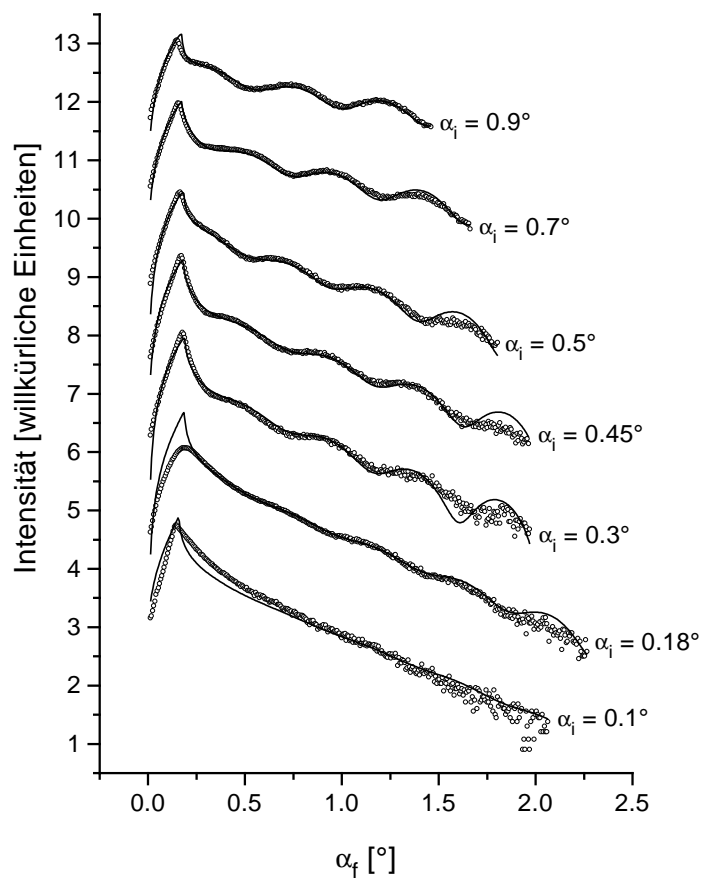


Abbildung 6.2: Beugung unter streifendem Einfall am (220)-Oberflächen-Reflex. Für jeden Einfallswinkel α_i ist die gemessene Bragg-Intensität (offene Kreise) zusammen mit einer kinematischen Modellrechnung (durchgezogene Linien) als Funktion des Ausfallswinkels α_f dargestellt.

zu Oszillationen im Intensitätsverlauf kommt. Die entsprechende theoretische Modellrechnung basiert auf der kinematischen Streutheorie (vgl. Abschnitt 3.3.2, wobei das Schichtsystem in derselben Weise berücksichtigt wurde wie bei der Berechnung der spekulären Reflektivität in 3.1.2). Dadurch wird die Tatsache, daß die Röntgenwellen im Kristall durch Absorption und teilweise Reflexion an den Grenzflächen geschwächt werden, zusätzlich zum rein kinematischen Ansatz, berücksichtigt. Ähnlich wie bei der Reflektivität kann durch die Anpassung der Modellrechnung Information über die Schichtdicken und Rauigkeiten gewonnen werden. Zusätzlich geht auch die chemische Zusammensetzung der Schichten ein, wobei die Simulation wegen der geringen δ -Schichtdicke nur auf den dort vorhandenen gesamten Germanium-Gehalt empfindlich ist [17]. Die Rechnungen verwenden ein simples 2-Schichtmodell (δ -Schicht und Deckschicht auf Substrat), wobei der Germanium-Anteil in der δ -Schicht entsprechend dem Ergebnis der Stehende-Wellen-Messung zu 64 % bei einer Dicke von ≈ 1 Monolage (ML) angesetzt wurde. Für die Dicke der Silizium-Deckschicht erhält man dann $d_{Si} = (163 \pm 2) \text{ \AA}$ und für die Oberflächenrauigkeit $\sigma = (7 \pm 2) \text{ \AA}$. Die Rauigkeiten der vergrabenen Grenzflächen konnten für die Anpassung vernachlässigt werden.

Ein weiteres entscheidendes Ergebnis der Modellrechnung ist die Tatsache, daß keinerlei Änderung der lateralen Gitterkonstante eingeführt werden mußte. Außerdem ergaben sich auch keine Anhaltspunkte für eine nichtkristalline - über das dünne natürliche Oxid hinausgehende - Schicht, die nicht zur Beugung beiträgt (vgl. [178]). Dadurch wird das Modell des perfekt pseudomorphen Wachstums dünner Fremdatomschichten aus Abschnitt 2.1 bestätigt.

6.2 Spekuläre Reflektivitätsmessungen

6.2.1 Meßergebnisse

Mit dem Ziel einer umfassenden Charakterisierung des Materials in Wachstumsrichtung unabhängig von der Kristallinität wurden spekuläre Reflektivitätsmessungen an der Probe *Delta 1* vorgenommen. Dabei wurde zunächst unter Verwendung eines Szintillationszählers das spekuläre Signal an einer 60 kW Drehanode mit $CuK\alpha_1$ -Strahlung ($\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$) registriert. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.3 dargestellt.

Die Modellrechnung wurde mit dem in Abschnitt 3.1 diskutierten Parratt-Formalismus durchgeführt. Es wird das gleiche 2-Schichtmodell verwendet mit dem bereits die Beugungsmessungen in Abbildung 6.2 angepasst wurden. Bis zu Einfallswinkeln von $\approx 1,5^\circ$ ergibt sich zunächst eine hervorragende Übereinstimmung mit der Messung, bei grösseren α_i dagegen beginnt das spekuläre Signal im diffusen Untergrund zu verschwinden, der bei der Modellrechnung nicht berücksichtigt wird. Die aus der Rechnung folgenden Parameter sind: Dicke der Silizium-Deckschicht $(164 \pm 5) \text{ \AA}$ und Oberflächenrauigkeit $(9 \pm 1) \text{ \AA}$ - in guter Übereinstimmung mit den Resultaten der Beugungsmessung unter streifendem Einfall. Für die δ -Schicht wurde ebenfalls wieder

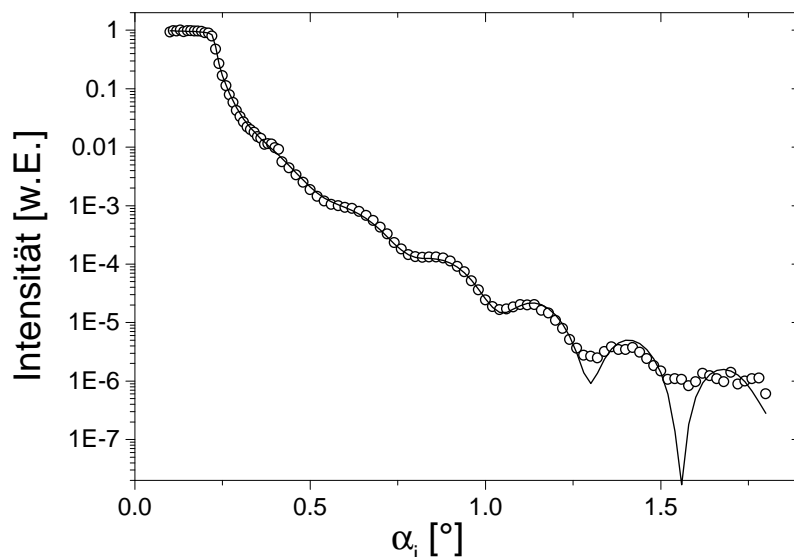


Abbildung 6.3: Reflektivitätsmessung für Probe Delta 1 (offene Kreise) zusammen mit einer einfachen Modellrechnung (durchgezogene Linie).

eine Dicke von 1 ML und ein Germanium-Gehalt von 64 % angenommen. Zusätzliche, hier nicht dargestellte Simulationsrechnungen zeigen, daß die Reflektivität in diesem Bereich ($Q_z < 0,256 \text{ \AA}^{-1}$) nicht auf die δ -Schichtdicke sondern nur auf die Gesamtmenge an Germanium empfindlich ist, denn diese bestimmt die Phasenverschiebung zwischen Substrat und Deckschicht und damit auch die Schichtdickenoszillationen. Ein kleinerer x -Wert zusammen mit einer entsprechend größeren Dicke der δ -Schicht liefert das gleiche Simulationsergebnis.

Der Gehalt an Germanium in der δ -Schicht ist nach diesem vorläufigen Resultat um den Faktor 3 kleiner als die bei der Probenherstellung insgesamt aufgewachsene Menge. Zur Erklärung dieser Diskrepanz gibt es zwei Möglichkeiten: entweder der Großteil des aufgewachsenen Germanium ist in den Bereich der Deckschicht diffundiert oder im Bereich der δ -Schicht hat sich eine komplizierte atomare Struktur aufgebaut, die mit den bisherigen Messungen angesichts des relativ kleinen senkrechten Impulsübertrages nicht detektiert werden konnte. Um daher sichere quantitative Aussagen über die vergrabene δ -Schicht zu gewinnen, müssen die Reflektivitätsmessungen zu wesentlich größeren senkrechten Impulsüberträgen ausgedehnt werden. In diesem Bereich muß dann auch der diffuse Untergrund genau bestimmt werden, um ein verlässliches spekuläres Signal zu gewinnen (vgl. Abschnitt 4.1).

Im nächsten Schritt wurden daher nach der in 4.1 beschriebenen Methode detail-

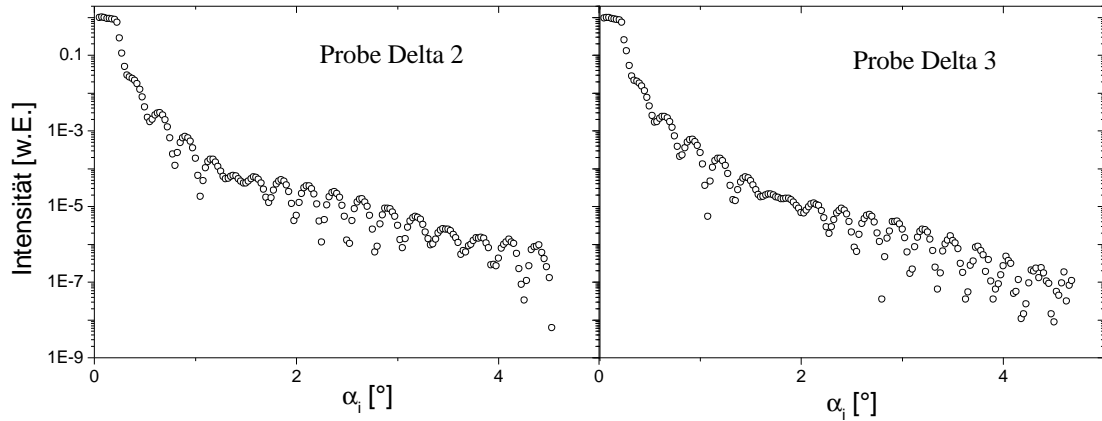


Abbildung 6.4: Wahre spekuläre Reflektivität nach Abzug des diffusen Untergrundes für die Proben *Delta 2* und *Delta 3*.

lierte Messungen an den Proben *Delta 2* und *Delta 3* vorgenommen. Das reflektierte Signal und der diffuse Untergrund wurden zusammen mit einem positionsempfindlichen Detektor am HASYLAB-Instrument D4 mit Synchrotronstrahlung der Wellenlänge $1,603 \text{ \AA}$ registriert. Danach wurde der Untergrund bestimmt und subtrahiert. Dies ist für die Messung sehr kleiner spekulärer Intensitäten unerlässlich, da die diffuse Intensität selbst an der spekulären Position ein Maximum besitzt [149] und dadurch bei großen Q_z leicht die Stärke der spekulären Reflektivität erreicht. Das Ergebnis für die nach dieser Prozedur verbleibende "wahre spekuläre Reflektivität" ist in Abbildung 6.4 dargestellt [20].

Man erkennt sofort, daß nun ein wesentlich größerer dynamischer Bereich erzielt werden konnte. Mit Einfallswinkeln bis zu $\alpha_i = 5^\circ$ konnte der Intensitätsabfall über 8 Größenordnungen mit guter Statistik aufgezeichnet werden. Erstmals zeigen sich tiefe Minima bei den Schichtdickenoszillationen, die bei der vorigen Messung noch von der diffusen Streuung überdeckt wurden. Außerdem ist die Amplitude der Schichtdickenoszillation selbst moduliert, was besonders bei der Probe *Delta 2* deutlich zu erkennen ist. Dort zeigen sich Amplitudenminima bei $\alpha_i \approx 1,5^\circ$ und $\alpha_i \approx 3,5^\circ$, dazwischen befindet sich ein ausgeprägtes Maximum. Dieser Intensitätsverlauf ähnelt einer Schwebung wie sie bei der Überlagerung zweier Oszillationen mit geringem Frequenzunterschied auftritt. Da der Frequenzunterschied hier einem Unterschied in der Schichtdicke der Deckschicht entspricht sollte die beobachtete Schwebung auf den Einfluß der δ -Schicht zurückzuführen sein, z.B. in Form einer Überlagerung der Signale von *Deckschicht* und *Deckschicht plus δ -Schicht*. Die genaue Auswertung dieser Messungen verspricht daher einen detaillierten Informationsgewinn über die Struktur

der δ -Schicht selbst.

6.2.2 Modellbildung und Simulation

Der Ansatzpunkt für die Ermittlung der Struktur der δ -Schicht ist das traditionelle Konzept der Rauigkeit, das in Abschnitt 3.1.3 dargestellt wurde. Deren Beschreibung mit Hilfe einer Halbwertsbreite σ für die Grenzfläche, die durch die lateralen Höhenfluktuationen zustande kommt, ist nur sinnvoll bei Schichten für deren Dicke $d \gg \sigma$ gilt. In Silizium-Systemen liegen die σ -Werte aber immer im Bereich von einigen Å [17], in ungünstigen Fällen können auch 10 Å weit überschritten werden [86]. Daher ist der Parameter σ für die Beschreibung einer δ -Schicht, die selbst nur wenige Å dick ist, ungeeignet. Bei der Modellrechnung für die Probe *Delta 1* in Abschnitt 6.2.1 wurde das Problem umgangen, indem die Rauigkeiten der inneren Grenzflächen insgesamt vernachlässigt wurden. Dies ist für eine genaue Strukturbestimmung aber nicht mehr möglich.

Wie auf der transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahme aus Kapitel 2.1 eindeutig zu sehen ist, enthalten die Proben *Delta 2* (ohne Surfactant) und *Delta 3* (mit Surfactant) jeweils eine klar definierte, geschlossene δ -Schicht. Die Höhenfluktuationen der beiden Grenzflächen zwischen Substrat und δ -Schicht sowie zwischen δ -Schicht und Deckschicht müssen also auf kleinen Längenskalen viel kleiner sein als die Halbwertsbreite σ , die man bei einer normalen Reflektivitätsanpassung erhält [16]. Das läßt sich dadurch erklären, daß der Rauigkeitsparameter σ durch Mittelung über die laterale Korrelationslänge zustande kommt, die typischerweise im μm -Bereich liegt. In diesen Längenbereichen sind Schwankungen der Grenzflächenpositionen möglich, die deutlich über die Dicke der δ -Schicht hinausgehen ohne daß dadurch die Homogenität dieser Schicht zerstört wird. Der Parameter σ enthält also keinerlei Information über die Feinstruktur der inneren Schichten. Wie Simulationsrechnungen zeigen [20], ist mit einem darauf gestützten Schichtmodell auch keine Anpassung der hier gemessenen Kurven mehr möglich.

Eine Alternative bietet ein bereits in [16] diskutierter atomarer Ansatz, bei dem der Bereich der δ -Schicht in mehrere Einzelschichten i mit jeweils eigener Elektronendichte ρ_i und damit eigenem Germanium-Gehalt x_i zerlegt wird. Diese Schichten sind völlig glatt und die Rauigkeit wird mit Hilfe der chemischen Zusammensetzung berücksichtigt. Dadurch wird das reale Elektronendichteprofil modellhaft nachgebildet. Bei der Anpassung der Kurven konnten die Germanium-Anteile der Einzelschichten unabhängig voneinander zwischen 0 und 100 % schwanken. Gleichzeitig wurde aber sichergestellt, daß die Gesamtmenge an Germanium in der δ -Schicht der beim epitaktischen Wachstum deponierten Menge entspricht. Mit dieser Methode war schließlich eine nahezu perfekte Simulation der gemessenen Reflektivitäten möglich und das Ergebnis ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Die daraus ermittelten Ge-Profile zeigt Abbildung 6.6, wobei jeweils nur der Bereich der δ -Schicht veranschaulicht ist.

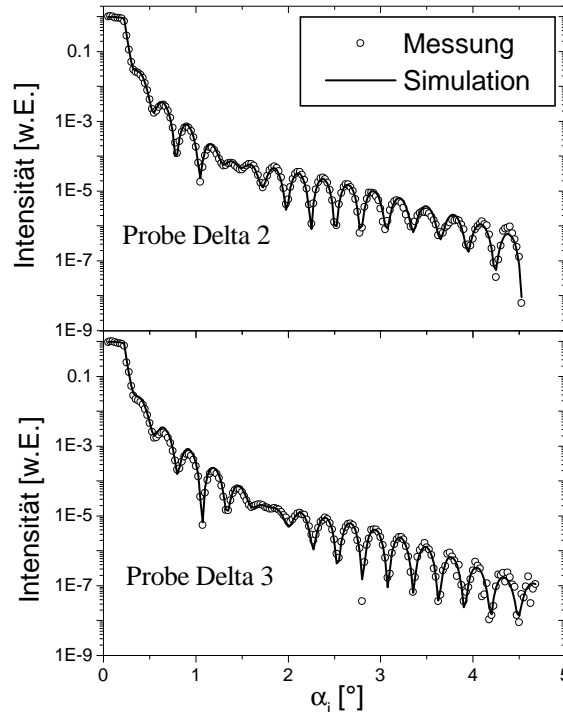


Abbildung 6.5: Gemessene und simulierte Reflektivität mit dem Multischichtmodell zur Beschreibung des Elektronendichteprofiles im Bereich der δ -Schicht.

Die z -Achse zeigt in Wachstumsrichtung; der Nullpunkt von z ist willkürlich gewählt, da es hier nur auf die relativen Abstände ankommt.

Zunächst folgt aus diesem Resultat, daß sich die Germanium-Atome über einen viel größeren Bereich verteilen als dies bisher für vergleichbare δ -Schichtsysteme angenommen wurde ([52], [53], [54]). Bis zu 20 \AA von der Grenzfläche zwischen δ -Schicht und Substrat entfernt ist noch Germanium nachweisbar. Das Profil der δ -Schicht wird durch Germanium-Segregation zur Oberfläche hin ausgeschmiert. Dieser Effekt ist schon für Antimon- δ -Schichten in Silizium vermutet worden, allerdings nicht in dem hier gefundenen Ausmaß [16]. Der Effekt ist für beide Proben gleich, d.h. die Verwendung von Bor als Surfactant-Material während des epitaktischen Wachstums ist nicht geeignet diese Segregation zu verhindern.

Sehr überraschend ist außerdem die Tatsache, daß das Germanium-Profil unmittelbar an der Grenzfläche zum Substrat sehr stark oszilliert. Silizium und Germanium lagern sich in diesem Bereich abwechselnd lagenweise an. Die Oszillation ist für die Surfactant-Probe am deutlichsten ausgeprägt; sie besitzt 3 Maxima der Germanium-Konzentration, während die nicht mit Bor gewachsene Probe *Delta 2* nur 2 Maxima aufweist.

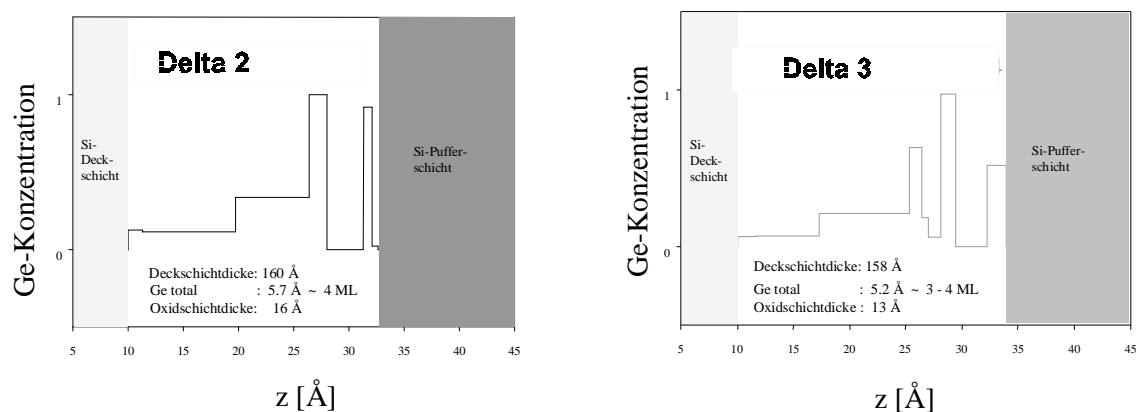


Abbildung 6.6: Aus der Simulation der Reflektivitätsdaten ermitteltes Profil des Germanium-Gehaltes für die Proben Delta 2 und Delta 3.

Das Phänomen könnte man dadurch erklären, daß der Einbau mehrerer benachbarter Lagen der großen Germanium-Atome energetisch ungünstig ist. Die im Rahmen des pseudomorphen Wachstumsmodus' auftretenden Verspannungen lassen sich dagegen merklich reduzieren, wenn sich Silizium und Germanium in abwechselnden Atomlagen anordnen. Der Ordnungsprozeß wird durch den Surfactant Bor offensichtlich begünstigt, wobei die Wirkung des Bor wohl hauptsächlich darin bestehen dürfte, daß es die Mobilität der Silizium-Atome erhöht. Diese Vermutung liegt aufgrund des Diffusionsverhaltens von Bor in Silizium (vgl. Abschnitt 2.2) und aufgrund der Auswirkung von Bor auf die Kondensation von großflächigen Stapelfehlern in Bor-implantiertem Silizium (vgl. Abschnitt 5.4.2) nahe.

Die in die Reflektivitätskurven eingehenden Streuprozesse erlauben nur eine Aussage über die Struktur der δ -Schichtsysteme in Wachstumsrichtung. Um Aussagen über eine eventuell vorhandene laterale Strukturierung der Proben machen zu können, wurden zusätzlich Messungen der nichtspekulären Reflektivität vorgenommen.

6.3 Nachweis vergrabener Terrassen

Die in Abschnitt 4.1 beschriebene Versuchsanordnung zur Reflektivitätsmessung unter Verwendung eines eindimensionalen positionsempfindlichen Detektors ermöglicht es die diffusen und spekulären Anteile der Reflektivität voneinander zu trennen. Dieses Verfahren kann nicht nur zur Bestimmung der wahren spekulären Reflektivität wie im obigen Abschnitt sondern auch zur detaillierten Bestimmung der nichtspekulären Reflektivität herangezogen werden. Für die Probe *Delta 1* ist ein typisches

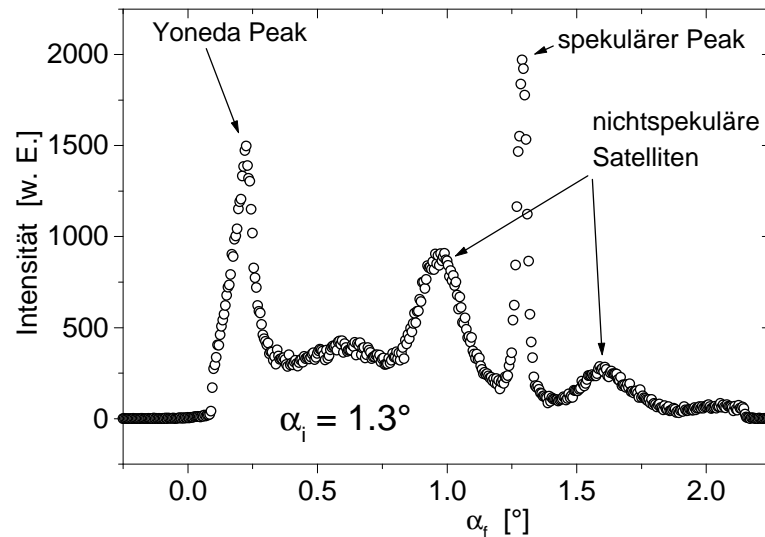


Abbildung 6.7: Im PSD aufgezeichnetes Spektrum der spekulären und nichtspekulären Reflektivität der Probe Delta 1 für ein festes α_i .

Meßergebnis für $\alpha_i = 1,3^\circ$ in Abbildung 6.7 dargestellt.

Das Spektrum zeigt eine reichhaltige Struktur. Neben dem sog. *Yoneda-Peak* bei $\alpha_f = \alpha_c$, der dem Maximum der Transmissionsfunktion entspricht, erkennt man deutlich den spekulären Peak bei $\alpha_f = \alpha_i$. Abgesehen davon zeigt die nichtspekuläre Streuung ganz deutliche Effekte. Zunächst wird durch die Rauigkeit und ihre Korrelationen eine gewisse diffuse Streuung hervorgerufen, die in Vorwärtsrichtung weitgehend konstant ist, aber ebenfalls an der spekulären Position ein Maximum besitzt [68], [149]. Dies ist die Form der diffusen Reflektivität, die bei lateral homogenen Schichtsystemen typischerweise auftritt.

Hier dagegen sind deutlich nichtspekuläre Satelliten auf beiden Seiten des spekulären Strahls erkennbar. Im Bereich kleiner Ausfallswinkel ist sogar ein derartiger Peak zweiter Ordnung schwach auszumachen. Die Positionen dieser Peaks sind mit bestimmten lateralen Impulsüberträgen korreliert, die wiederum durch eine charakteristische Länge im Realraum bestimmt sind. Daher muß das untersuchte System eine periodische, laterale Struktur mit einer charakteristischen Periodenlänge besitzen, die aus der genauen Analyse der nichtspekulären Streuung zu ermitteln sein sollte.

Die Hypothese lautet also, daß die diffusen Satelliten allein durch die laterale Struktur der Probe bedingt sind. Um dies zu überprüfen wurde bei festem $\alpha_i = 1,1^\circ$ eine azimuthale Rotation der Probe durchgeführt. Bei verschiedenen Rotationswinkeln wurde jeweils ein α_f -Spektrum aufgenommen. Für einige Winkel ist das Ergebnis in Abbildung 6.8 dargestellt. Man erkennt deutlich wie sich die Positionen der Satelliten verändern während sowohl der spekuläre als auch der Yoneda-Peak immer

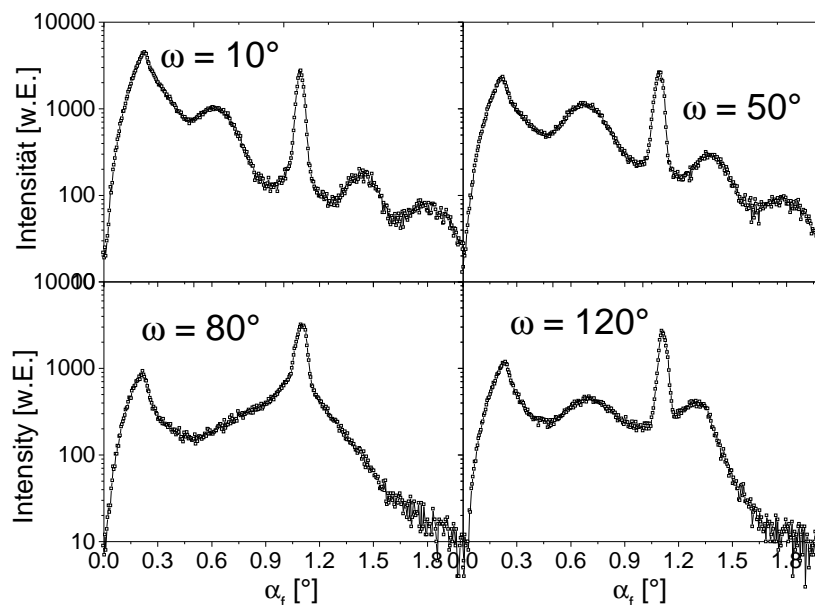


Abbildung 6.8: *Spekuläre und nichtspekuläre Reflektivität bei konstantem $\alpha_i = 1,1^\circ$ und verschiedenen azimuthalen Rotationswinkeln ω .*

konstant bleiben, weil deren Positionen allein durch die Wahl von α_i bzw. durch α_c bedingt sind.

Diese Änderung der Satelliten-Positionen ist für eine laterale periodische Struktur charakteristisch, weil sich mit der azimuthalen Rotation auch die Periodenlänge ändert wie das in Abbildung 6.9 gezeigt ist. Der Röntgenstrahl "sieht" jeweils die Projektion der Periode auf die Einfallsrichtung, so daß für die effektive Periodenlänge d_{eff} gilt:

$$d_{eff} = \frac{d_0}{|\cos(\omega)|} \quad (6.3)$$

Aus den Messungen von Abbildung 6.8 wurden die Abstände der Satelliten 1. Ordnung für jeden Rotationswinkel ω extrahiert und gegen ω aufgetragen. Das Ergebnis zeigt Abbildung 6.10 zusammen mit einem Fit gemäß Gleichung 6.3, wobei sich der Satellitenabstand aus der Periodenlänge über $\Delta Q_{||} = 2(2\pi)/d_{eff}$ ergibt. Man erhält eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung und Theorie. Die Satelliten sind daher Folge einer lateralen periodischen Struktur, die bei dem δ -Schichtsystem zusätzlich zur Schichtstruktur in Wachstumsrichtung vorhanden ist.

Dieser Zusammenhang zwischen dem Abstand der Satelliten und der azimuthalen Rotation wurde anschließend herangezogen, um die Probe für die weitere Untersuchung zu justieren. Anhand von Abbildung 6.10 wurde das Maximum in $\Delta Q_{||}$

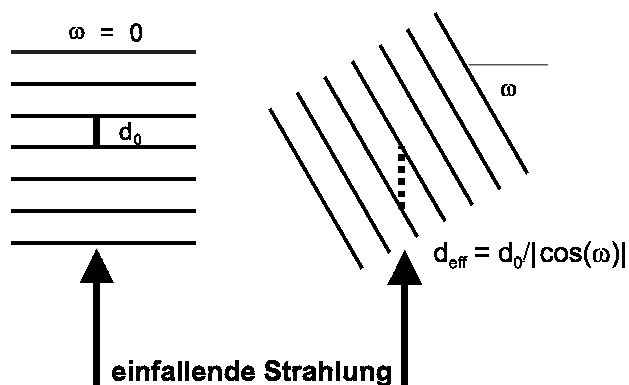


Abbildung 6.9: Zusammenhang zwischen lateraler Periode d_0 und der in die Reflektivität eingehenden effektiven Periodenlänge d_{eff} .

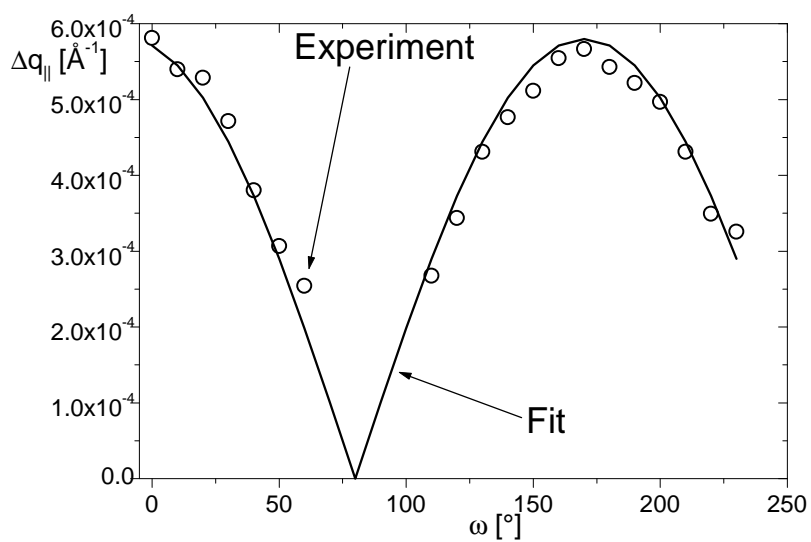


Abbildung 6.10: Abstand der Satelliten 1. Ordnung auf beiden Seiten des spekulären Signals in Abhängigkeit vom azimuthalen Rotationswinkel ω zusammen mit einem Fit nach Gleichung (6.3).

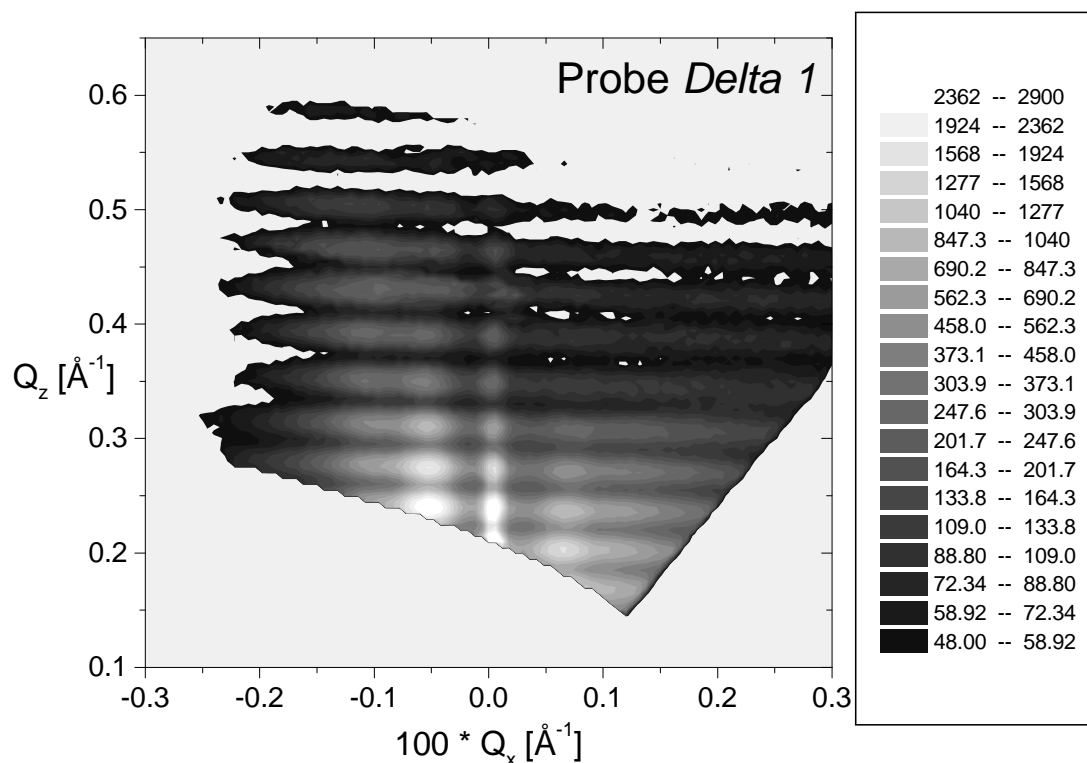


Abbildung 6.11: Intensitätsverteilung der Reflektivität in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes für die Probe Delta 1. Die Kontur-Niveaus entsprechen einer logarithmischen Skala mit den rechts dargestellten Niveau-Grenzen in willkürlichen Einheiten.

bestimmt und der azimuthale Rotationswinkel darauf justiert. Dieses Maximum entspricht einem Minimum in der effektiven Periodenlänge und das bedeutet nach Gleichung (6.3) $d_{eff} = d_0$. Die Einfallrichtung steht dann genau senkrecht auf den periodischen Strukturen. Der Justageprozeß entspricht dabei dem von Salditt et al. angewandten Verfahren [147].

Um eine vollständige Charakterisierung des gewachsenen Schichtsystems sowohl lateral als auch in Wachstumsrichtung zu erreichen, wurde die gesamte Intensitätsverteilung in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes mit Hilfe des PSD aufgezeichnet, indem bei verschiedenen Einfallswinkeln α_i jeweils ein α_f -Spektrum aufgenommen wurde. Über die Beziehungen

$$Q_x = \frac{2\pi}{\lambda} (\cos \alpha_i - \cos \alpha_f) \quad Q_z = \frac{2\pi}{\lambda} (\sin \alpha_i + \sin \alpha_f) \quad (6.4)$$

erfolgt dann die Umrechnung in die Koordinaten des reziproken Raumes. Dadurch

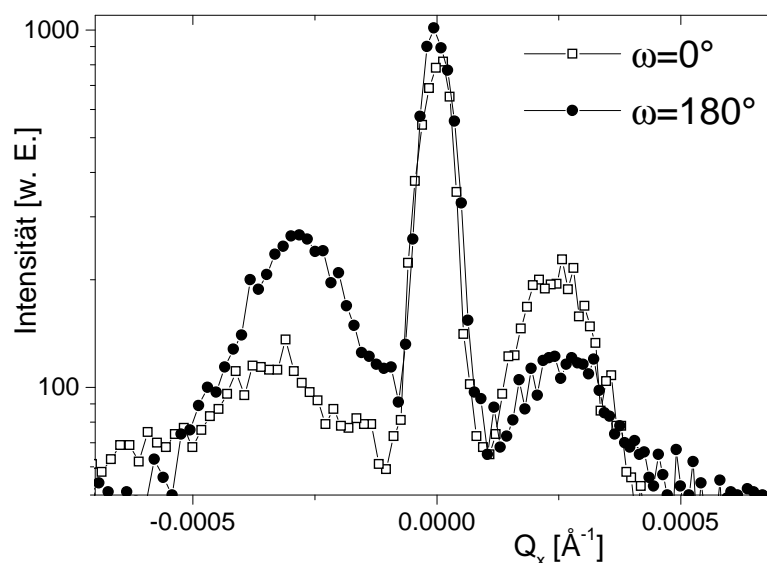


Abbildung 6.12: Intensitätsverlauf entlang Q_x für zwei azimuthale Probenorientierungen, die sich um 180° unterscheiden.

entsteht ein sog. "Reciprocal Space Map" (RSM) in einer reziproken Ebene, die der Einfallsebene entspricht ($Q_y = 0$). Das Ergebnis ist in Abbildung 6.11 dargestellt, wobei die Q_x -Skala mit dem Faktor 100 multipliziert wurde, um die verschiedenen Größenordnungen beim senkrechten und lateralen Impulsübertrag zu betonen.

Aus diesem reich strukturierten Bild können wichtige Tatsachen bereits qualitativ abgeleitet werden. Bei $Q_x = 0$ ist der spekuläre Peak zu sehen, der entlang Q_z von den in Abschnitt 6.2 analysierten Schichtdickenszillationen moduliert ist, die von der Dicke der Deckschicht, der Struktur der δ -Schicht und den Rauigkeiten abhängen. Daneben treten bei konstanten lateralen Impulsüberträgen von $Q_x \approx \pm 0,0005 \text{ \AA}^{-1}$ die nichtspekulären Satelliten auf. Das entspricht einer lateralen Periodenlänge von $\approx 11500 \text{ \AA}$. Sie zeigen ebenfalls in Richtung Q_z Schichtdickenszillationen, die sich mit denjenigen des spekulären Signals in Phase befinden. Auch außerhalb der Satelliten ist die nichtspekuläre Intensität in Streifen näherungsweise parallel zur Q_x -Achse konzentriert. Diese sind eine Folge der Schichtstruktur und der morphologischen Korrelationen in Wachstumsrichtung in Analogie zu den bei amorphen Multischichtsystemen auftretenden sog. "Bragg-Sheets" [148], [150].

Die Satelliten zeigen daß die laterale Struktur sowohl an der δ -Schicht wie auch an der Oberfläche der Deckschicht vorhanden sein muß, da die entsprechende Schichtdickenszillation bei den lateralen Satelliten - genauso wie beim spekulären Strahl - auftritt. Die laterale Struktur ist also der wachsenden Oberfläche inhärent. Für die Interpretation dieser lateralen Struktur ist zu beachten, daß die Parameter bei der Herstellung des Schichtsystems so gewählt waren, daß sie zum Wachstum durch

Stufenwanderung ("Step Flow Mode" - [25]) führen (vgl. Abschnitt 2.1). Zu jedem Zeitpunkt besteht die Oberfläche des epitaktisch wachsenden Systems dabei aus einer bestimmten Anzahl kristalliner Terrassen, die durch Kristallstufen voneinander getrennt sind [113], [12]. Die eigentliche Ursache einer solchen gestuften Oberfläche ist die Fehlorientierung zwischen der physikalischen Oberfläche des Materials und der entsprechenden kristallinen Ebene. Die Stufen sind entweder monoatomar oder es sind multiatomare Stufen, die durch Kondensation monoatomarer Stufen entstehen [169]. Es entsteht insgesamt eine quasiperiodische laterale Überstruktur, die durch die Germanium-Deposition im Bereich der δ -Schicht sozusagen *eingefroren* wird, während sie an der Oberfläche der Deckschicht durch die Beendigung des epitaktischen Wachstums bestehen bleibt. Dadurch ließe sich das Verhalten der nichtspekulären Satelliten vollständig erklären. Diese Hypothese wird zusätzlich durch die Asymmetrie der Intensitätsverteilung in Abbildung 6.11 gestützt. Die nichtspekuläre Intensität ist im Bereich $Q_x < 0$ deutlich größer als für $Q_x > 0$. Das gilt sowohl für die Satelliten wie auch für die Intensität in den "Bragg-Sheet"-ähnlichen Bereichen. Nach Holý et al. [70] ist dies eine Folge des asymmetrischen Formfaktors der Terrassenstufen. Jede andere mögliche laterale Struktur mit einer symmetrischen Form (wie beispielsweise ein aus rechteckigen Stegen bestehendes Oberflächengitter oder eine wellenförmige laterale Modulation der Grenzflächenposition) führt zu einer symmetrischen Intensitätsverteilung in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes [70]. Zur Überprüfung dieser Modellvorstellung wurden bei einem konstanten $Q_z = 0,325 \text{ \AA}^{-1}$ und bei azimuthalen Rotationswinkeln der Probe von $\omega = 0^\circ$ und $\omega = 180^\circ$ jeweils die Intensitätsverteilungen in Q_x -Richtung gemessen. Das Ergebnis zeigt Abbildung 6.12. Neben dem spekulären Peak sind die Satelliten 1. Ordnung zu sehen und man erkennt wie sich deren Intensitätsverhältnis bei der Rotation um 180° umkehrt. Das entspricht der Erwartung aus diesem Terrassenmodell.

Messungen analog der in Abbildung 6.11 wurden auch an den Proben *Delta 2* und *Delta 3* durchgeführt, wobei die Resultate in beiden Fällen sehr ähnlich sind. Daher soll hier nur das Ergebnis für *Delta 2* diskutiert werden. Die Messung beschränkte sich auf den Bereich $Q_x < 0$. Gleichzeitig wurde bei kleinen Q_z der dort sehr intensive spekuläre Strahl ausgeblendet, um die nichtspekuläre Streuung hinreichend genau messen zu können. Die dadurch ermittelte Intensitätsverteilung ist in Abbildung 6.13 dargestellt. Die senkrechten Impulsüberträge sind in diesem Fall so klein, daß bis an den Rand des in Reflexionsgeometrie zugänglichen Bereichs gemessen werden konnte (vgl. Abschnitt 4.1). Der sich an der Grenze dieses Bereiches entlangziehende Intensitätsausläufer ist das allein durch die Transmission bestimmte Yoneda-Maximum. Erst für größere Q_z sind wieder nichtspekuläre Satelliten zu erkennen. Genau wie bei *Delta 1* erhält man eine Schichtdickenoszillation entlang Q_z in Phase mit dem spekulären Signal. Allerdings ist der Abstand zwischen den Satelliten 1. Ordnung und der spekulären Achse wesentlich kleiner als bei der ersten Probe.

Dies wird besonders deutlich, wenn die Intensität entlang Q_z über eine Periode

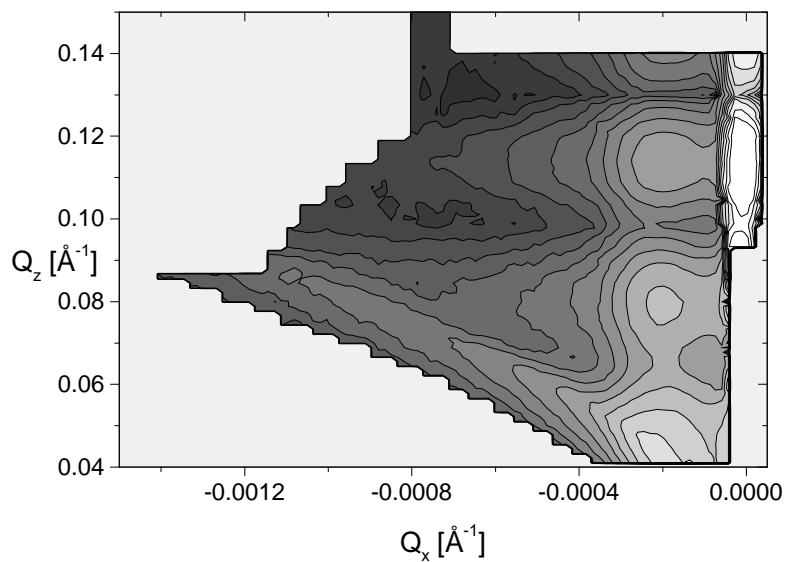


Abbildung 6.13: Intensitätsverteilung der nichtspekulären Reflektivität in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes für die Probe Delta 2. Nur die Halbebene $Q_x < 0$ wurde gemessen und der spekuläre Strahl ist teilweise ausgeblendet.

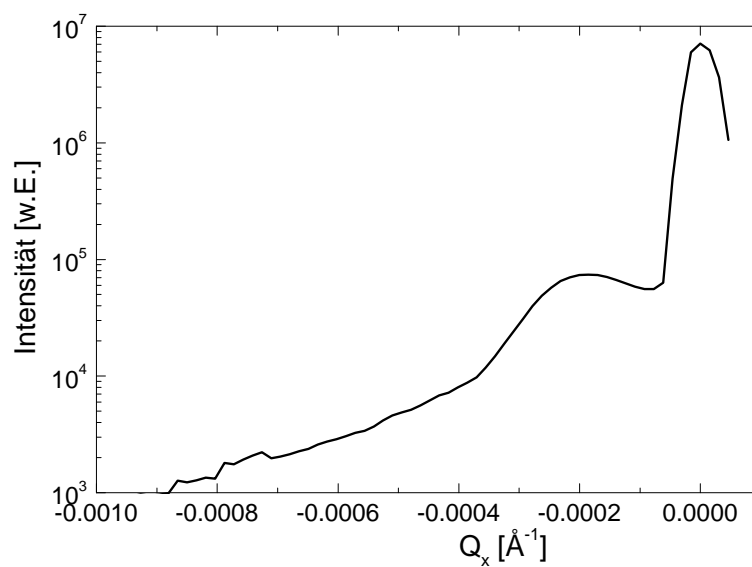


Abbildung 6.14: Intensitätsverlauf entlang Q_x nach Integration über eine Periode der Schichtdickenoszillation.

der Schichtdickenzosillation integriert und anschließend gegen Q_x aufgetragen wird. In Abbildung 6.14 erkennt man dann, daß der Satellit 1. Ordnung im wesentlichen nur eine Schulter des spekulären Peaks darstellt. Sein Maximum befindet sich bei $Q_x = -0,00022 \text{ \AA}^{-1}$ entsprechend einer Terrassenbreite von $\approx 28000 \text{ \AA}$.

6.4 Ordnungszustand einer wachsenden terrassierten Oberfläche

Die Messungen der Intensitätsverteilungen in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes erlauben aber nicht nur strukturelle Aussagen über das Schichtsystem und seine laterale Struktur. Sie stellen vielmehr den Schlüssel für tiefe Einblicke in die Physik der wachsenden Oberfläche dar. Dazu ist eine sorgfältige Analyse des Streubildes nötig, die in den folgenden Abschnitten schrittweise entwickelt wird. Da die umfassendsten Daten von der Probe *Delta 1* vorliegen, wird sich die Analyse auf dieses Beispiel beschränken. Die gleichen Überlegungen und die gleiche Art von Simulationsrechnung sind aber auch für die in Abbildung 6.13 und 6.14 dargestellten Ergebnisse des Systems *Delta 2* möglich. Wie man sehen wird, folgen daraus aber keine neuen Erkenntnisse.

6.4.1 Der statistische Ansatz nach Holý

Dieser - von V. Holý ausgeführte - Ansatz [71] basiert auf dem Prinzip der stationären Zufallsprozesse ("Stationary Random Processes") [130]. Für jede Grenzfläche wird eine Paarkorrelationsfunktion berechnet. Ihre Fourier-Transformierte bestimmt die gestreute Intensität, wobei die Gesamtintensität eines Multischichtsystems analog zu dem in Abschnitt 3.1.2 beschriebenen Verfahren ermittelt werden kann. Es wird angenommen, daß die Oberfläche bzw. jede innere Grenzfläche aus einer unendlich großen Anzahl paralleler Terrassen besteht, die wie absteigende Treppenstufen angeordnet sind (vgl. Abbildung 6.15 und Fig. 1 in [71]).

Das bisher verwendete Koordinatensystem (x, y, z) bezieht sich allein auf die physikalische Probenoberfläche, wobei z in Richtung der Oberflächennormale zeigt und zusammen mit x die Einfallsebene definiert. Zusätzlich werden jetzt Koordinaten (x_1, x_2, x_3) eingeführt, die auf der Kristallstruktur basieren. x_3 steht senkrecht auf den niedrig indizierten Terrassenflächen, während x_1 parallel zu den Terrassenflächen senkrecht zu den Stufen ausgerichtet ist. x_2 bezeichnet dann die mittlere Richtung entlang der Stufenkanten. Wegen der speziellen Justage der Proben für die Messungen der Q_x - Q_z -Intensitätsverteilungen stimmen x_2 und y miteinander überein. x_1 und x , sowie x_3 und z sind gegeneinander um den Winkel α verkippt, der mit der Gitterfehlorientierung der Oberfläche identisch ist. Seien $\langle h \rangle$ die mittlere Höhe der Terrassenstufen und $\langle l \rangle$ die mittlere Breite der Terrassen, dann hängen diese ebenfalls

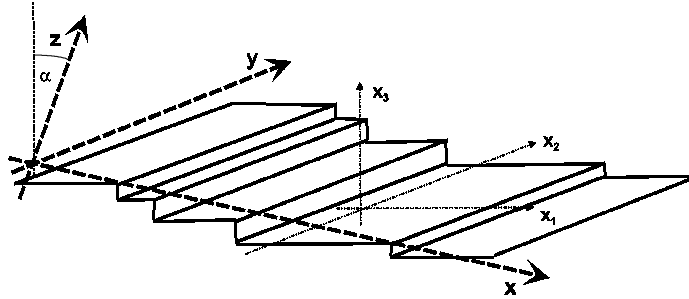


Abbildung 6.15: Skizze einer terrassierten Oberfläche mit dem Koordinatensystem der Probe (x, y, z) und dem Koordinatensystem der Kristallstruktur (x_1, x_2, x_3) .

über den Fehlorientierungswinkel miteinander zusammen:

$$\tan \alpha = \frac{\langle h \rangle}{\langle l \rangle} \quad (6.5)$$

Die Paarkorrelationsfunktion $C(x_1, x_2, x_3)$ für eine Grenzfläche entspricht dann der Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit der Höhe, daß sich zwei Grenzflächenatome mit den lateralen Koordinaten $(0, 0)$ und (x_1, x_2) in ihrer vertikalen Koordinate um den Wert x_3 unterscheiden [71]. Sie kann berechnet werden, wenn angenommen wird, daß die Terrassenbreiten l senkrecht zu den Stufenkanten gemäß einer Gamma-Verteilung der Ordnung m verteilt sind, so daß sich für die Wahrscheinlichkeit eines bestimmten Wertes l ergibt [130], [71]

$$P(l) = \frac{1}{\Gamma(m)} \left(\frac{m}{\langle l \rangle} \right)^m \exp \left(-\frac{m}{\langle l \rangle} l \right) l^{m-1} \quad (6.6)$$

mit der Dispersion

$$\sigma_l^2 = \frac{\langle l \rangle^2}{m}. \quad (6.7)$$

Auch für die räumliche Ausdehnung der Terrassen entlang der Stufenkanten wird solch eine Gamma-Verteilung der Ordnung m' mit der allerdings wesentlich größeren mittleren Dimension l' angenommen [71], während die Stufenhöhen um den mittleren Wert $\langle h \rangle = \langle l \rangle \tan \alpha$ Gauß-verteilt sind mit der Breite σ_h^2 . Die Details der Berechnung sind in Anhang A enthalten.

Die Streuintensität läßt sich dann wieder mit der DWBA-Methode für ein Schichtsystem mit N Schichten berechnen (vgl. Anhang A), wobei für jede Schicht i der Realteil δ_i der Brechungsindexkorrektur eingeführt wird. Interessant ist v.a. die diffuse Streuamplitude, die die nichtspekulären Anteile wiedergibt. Für sie gilt mit

der mittleren Position der j -ten Grenzfläche $\langle z_j \rangle$ in Abhängigkeit von der Fourier-Transformierten C^{FT} der Korrelationsfunktion:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} = \frac{s_x s_y k^4 |t^1 t^2|^2}{4\pi^2 |Q_z|^2} |C^{FT}(Re(\vec{Q}))|^2 \times \quad (6.8)$$

$$\sum_{j,k=0}^N \left[(\delta_{j+1} - \delta_j)(\delta_{k+1} - \delta_k) e^{i(Q_z \langle z_j \rangle - Q_z^* \langle z_k \rangle)} e^{i(\langle z_j \rangle - \langle z_k \rangle)(\vec{Q}_{||} \vec{b}_{||})} e^{-\frac{|\langle z_j \rangle - \langle z_k \rangle|}{\Lambda_{\perp}}} \right]$$

Die kohärente oder spekuläre Streuamplitude erhält man dagegen genauso wie in Abschnitt 3.2.2. Es gilt im Prinzip wieder die Gleichung (3.40).

Diese in [71] entwickelte und in Anhang A ausführlich dargestellte Theorie stellt damit die Grundlage für eine Simulation der gemessenen Intensitätsverteilung der Reflektivität in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes auf der Basis eines rein statistischen Ansatzes dar. Die Besonderheit einer solchen Berechnung besteht in der Wahl der Verteilungsfunktionen für die Terrassendimensionen und die Stufenhöhen. Die Gamma-Verteilungen sind hinreichend flexibel um die erheblichen Schwankungen der Terrassenbreiten und Terrassenlängen um die mittleren Werte $\langle l \rangle$ und $\langle l' \rangle$ wiederzugeben. Gleichzeitig erlauben sie noch eine analytische Lösung des Streuproblems.

Mit diesem Ansatz wurde nun versucht die wichtigsten Strukturparameter der lateralen Ordnung aus einer Simulation der Meßdaten zu gewinnen. Da sowohl die Q_x - als auch die Q_z -Abhängigkeit vollständig in Gleichung (A.17) berücksichtigt sind, kann zusammen mit Gleichung (3.40) die Q_x - Q_z -Intensitätsverteilung vollständig berechnet werden. Dabei werden die Parameter so gewählt, daß sich eine möglichst genaue Anpassung an das gemessene Streubild ergibt. Das Resultat zeigt Abbildung 6.16, wobei die Q_z -Skala bei 0 beginnt und dadurch auch die im Rahmen der Reflexionsgeometrie unzugänglichen Bereiche des reziproken Raumes sichtbar werden.

Man erkennt die gute qualitative Übereinstimmung mit dem experimentellen Ergebnis von Abbildung 6.11. Alle wesentlichen Merkmale der gemessenen Intensitätsverteilung werden von der Simulation reproduziert. Neben dem spekulären Signal mit den im wesentlichen durch die Deckschicht bestimmten Schichtdickenszillationen treten in Phase dazu nichtspekuläre Satelliten 1. und 2. Ordnung auf. Weiterhin führt die asymmetrische laterale Form der Terrassen zu der in der Messung ebenfalls vorhandenen Asymmetrie der Intensitäten bei $Q_x < 0$ und $Q_x > 0$.

Diese qualitative Reproduktion der Messung kann als endgültiger Beleg für das Modell eines Schichtsystems mit atomaren Terrassenstufen an den Grenzflächen angesehen werden.

Dabei wurden folgende Strukturparameter verwendet:

- $\alpha = 0,065^\circ$ (Fehlorientierung zwischen der (001)-Ebene und der Probenoberfläche)
- $m = 12$ (Ordnung der Gammaverteilung der Terrassenbreiten)

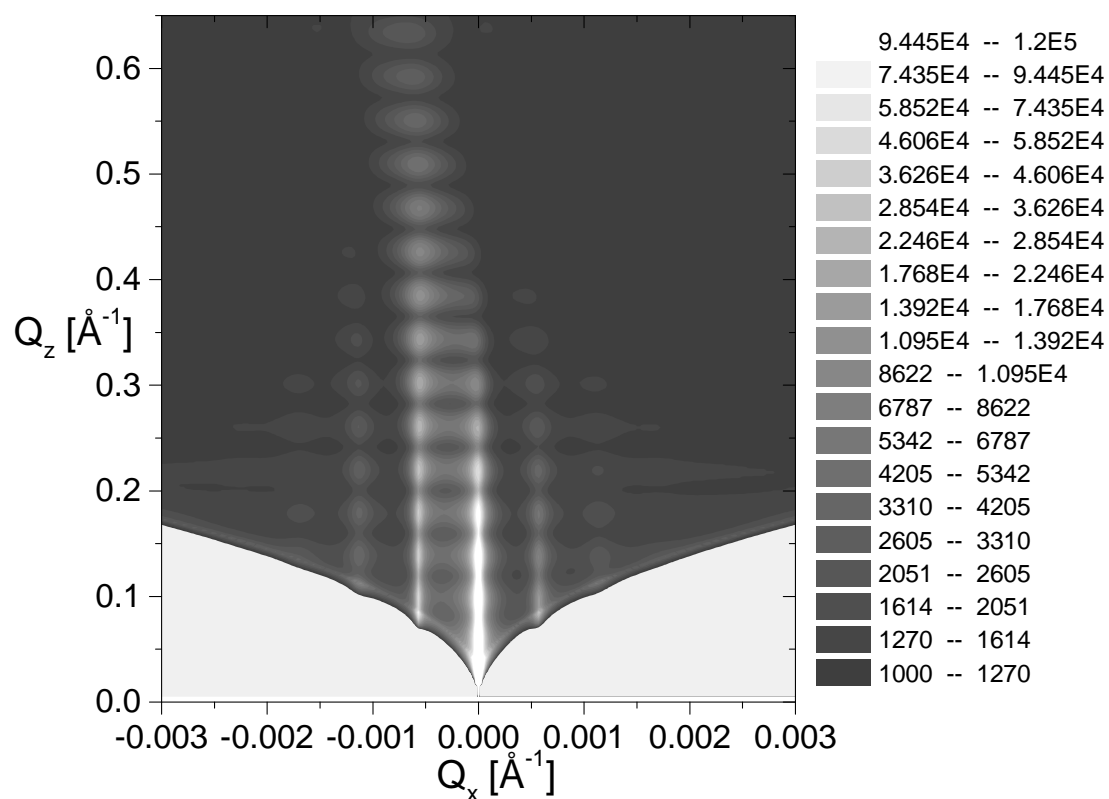


Abbildung 6.16: Simulation der spekulären und nichtspekulären Reflektivität in der Q_x - Q_z -Ebene des reziproken Raumes mit dem statistischen Ansatz von Vaclav Holý. Die Kontur-Niveaus entsprechen einer logarithmischen Skala mit Intensitäten in willkürlichen Einheiten.

- $\langle l \rangle = 11000 \text{ \AA}$ (mittlere Terrassenbreite in x_1 -Richtung)
- $\sigma_l = 1200 \text{ \AA}$
- $\langle h \rangle = 12,5 \text{ \AA}$ (mittlere Stufenhöhe)
- $\sigma_h = 4 \text{ \AA}$
- $\chi = 20^\circ$ (Winkel zwischen der Oberflächennormalen und der Replikationsrichtung beim Wachstum)

Die Abweichungen zwischen Messung und Simulation lassen sich bei Intensitätsverteilungen in einer Ebene nicht so leicht quantifizieren wie bei einer einzelnen Meßkurve. Dort steht über die mittlere quadratische Abweichung ein eindeutiges Maß für die Abweichung zur Verfügung, daß sich im Rahmen einer Simulationsrechnung gezielt minimieren läßt. Eine solche automatische Anpassung an die Meßdaten (Fit) erlaubt erst die Gewinnung quantitativ verlässlicher Parameter. Da die Struktur der δ -Schicht-Proben in Wachstumsrichtung bereits aus den spekulären Reflektivitätsmessungen sehr gut bekannt ist, fehlt eine derart sichere Festlegung der Strukturparameter nur noch in lateraler Richtung. Daher wurden aus der gemessenen zweidimensionalen Intensitätsverteilung in Abbildung 6.11 eindimensionale Schnitte parallel zur Q_x -Achse bei verschiedenen konstanten Q_z -Werten extrahiert. Die Q_z -Werte entsprechen dabei den Maxima der Schichtdickenoszillation in Abbildung 6.11 und die Breite der Schnitte in Q_z -Richtung wurde so gewählt, daß jeweils über das gesamte Maximum integriert wird. Dadurch entstehen Meßkurven, die jeweils den spekulären Peak zusammen mit den diffusen Satelliten bei verschiedenen senkrechten Impulsüberträgen zeigen und die im wesentlichen nur auf die laterale Struktur empfindlich sind.

Diese Schnitte wurden nun ebenfalls mit der obigen Theorie simuliert. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.17 für vier verschiedene Q_z -Werte dargestellt.

Angesichts der guten qualitativen Übereinstimmung zwischen der gemessenen und simulierten zweidimensionalen Intensitätsverteilung fällt dieses zunächst überraschend aus, denn es zeigen sich ganz erhebliche Diskrepanzen zwischen Messung und Simulation. Zwar gibt die Rechnung natürlich den spekulären Peak und die diffusen Satelliten wieder und zwar auch weitgehend mit den richtigen Intensitätsverhältnissen zueinander. Die Formen der Maxima stimmen aber in keiner Weise überein, da die Rechnung für spekuläre und nichtspekuläre Maxima in jedem Fall die gleichen Halbwertsbreiten liefert, während das experimentelle Resultat immer einen im Vergleich zu den Satelliten wesentlich schärferen spekulären Peak aufweist. Außerdem ist die Simulation nicht in der Lage den mit wachsendem Q_z stetig zunehmenden diffusen Untergrund nachzuvollziehen. Die lateralen Strukturparameter sind die gleichen wie für die Simulation der zweidimensionalen Intensitätsverteilung. Ihre oben angegebenen Werte sind bereits das Resultat einer umfangreichen Optimierung sowohl im Hinblick auf die zweidimensionale Intensitätsverteilung als auch in Bezug auf die in Abbildung 6.17 gezeigten Schnitte. Eine bessere Simulation war daher nicht möglich.

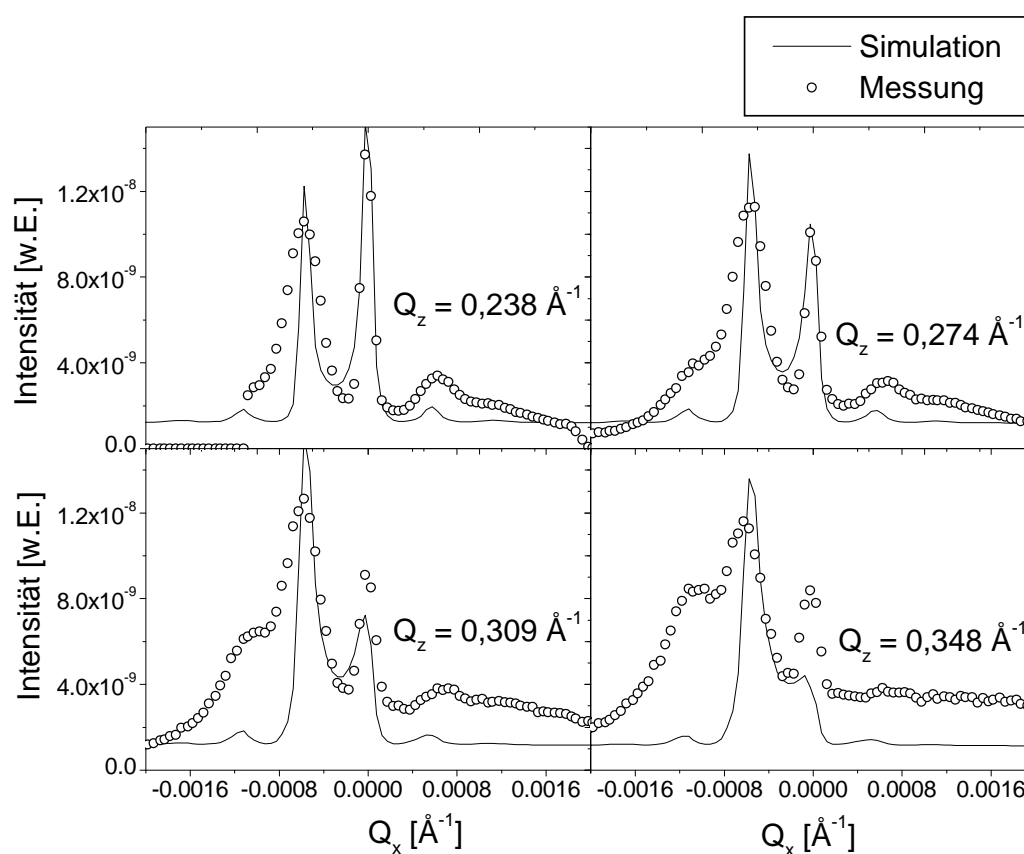


Abbildung 6.17: Schnitte parallel zur Q_x -Achse durch die gemessene Intensitätsverteilung in der Einfallsebene zusammen mit Simulationen nach der statistischen Theorie von Holý mit denselben Parametern, die auch für die Berechnung der simulierten Intensitätsverteilung in Abbildung 6.16 verwendet wurden.

Das entscheidende Problem ist dabei die Tatsache, daß es der Simulation nach dem statistischen Ansatz von Holý nicht gelingt die unterschiedlichen Halbwertsbreiten zu reproduzieren, unabhängig von der Wahl der lateralen Strukturparameter. Dies zeigt sich auch bei allen in [71] gezeigten Simulationsrechnungen. Das deutet auf einen grundsätzlichen physikalischen Mangel dieser Theorie hin. Um eine befriedigende Interpretation der vorhandenen Daten zu erreichen, muß daher ein neuer theoretischer Ansatz entwickelt werden.

6.4.2 Neues Modell: Sterische Wechselwirkung von Domänengrenzen

Für diesen neuen Ansatz - der auf die Anregung von Tim Salditt zurückgeht - ist es notwendig den Blickwinkel zu verändern und statt einer rein statistischen Beschreibung der lateralen Ordnung die zugrunde liegenden physikalischen Vorgänge zu untersuchen. Dazu muß zunächst die Ordnungsbildung in niedrigdimensionalen Systemen betrachtet werden. Daraus kann auf die relevante Wechselwirkung geschlossen werden, die auch in dem System der Kristallstufen dominant ist, wenn diese als fluktuierende Domänengrenzen betrachtet werden. In diesem Kontext kann - wie gezeigt wird - eine wesentlich bessere Beschreibung der nichtspekulär gestreuten Intensität erreicht werden.

6.4.2.1 Ordnung in niedrigdimensionalen Systemen

Um den Grad der Ordnung einer periodischen Struktur zu ermitteln, betrachtet man normalerweise deren Stabilität beim Auftreten von thermischen Fluktuationen, also von Auslenkungen $\vec{u}(x, y, z)$ einzelner Teile dieser Struktur aus ihren jeweiligen Ruhelagen [92]. Diese können in eine Fourier-Reihe nach den möglichen Wellenvektoren \vec{k} entwickelt werden [29]:

$$\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(\vec{r}) = \sum_k \vec{u}_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (6.9)$$

In dieser Entwicklung liefern nur Terme einen Beitrag mit nennenswerter Amplitude, deren Wellenvektoren hinreichend klein sind ($k < z$, wobei z die räumliche Ausdehnung des verschobenen Stücks darstellt).

Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Fluktuation ist bei konstanter Temperatur durch die Änderung der gesamten freien Energie der Struktur aufgrund der Fluktuation bestimmt [29]:

$$P(\vec{u}) \propto \exp\left(-\frac{\Delta F(\vec{u})}{T}\right). \quad (6.10)$$

ΔF kann nach Potenzen der Verschiebungen entwickelt werden. In diese Entwicklung geht aber u selbst nicht ein, sondern nur seine Ableitung, weil für $u = const$, was

einer linearen Verschiebung des gesamten Körpers entspricht, $\Delta F = 0$ gilt. Weiterhin können in der Entwicklung auch keine in den Ableitungen lineare Glieder auftreten, weil die freie Energie an der Stelle $\vec{u} = 0$ ein Minimum haben muß. Da aber nur kleine k von Bedeutung sind, können die Terme dritter und höherer Ordnung ebenfalls vernachlässigt werden, so daß ΔF allein nach Termen entwickelt werden kann, die in den ersten Ableitungen von u quadratisch sind.

Die Berechnung von ΔF und die anschließende Anwendung des Gleichverteilungssatzes erlaubt es nun die mittlere quadratische Abweichung $\langle u^2 \rangle$ durch die Fluktuationen zu ermitteln [29], [6]. Deren Verhalten wiederum ist besonders im Grenzfall $k \rightarrow 0$, also für besonders langwellige Fluktuationen, die von einer beliebig kleinen thermischen Energie angeregt werden können, interessant. Es erlaubt Aussagen über die Stabilität und den Ordnungszustand einer bestimmten Struktur.

Bei einem dreidimensionalen Kristall mit einer perfekten dreidimensionalen Periodizität beispielsweise ergibt eine derartige Berechnung [29]:

$$\langle u_{3D}^2 \rangle \longrightarrow const \quad \text{für } k \rightarrow 0, \quad (6.11)$$

wobei die Konstante unabhängig ist vom Volumen des Kristalls. Die Fluktuationen bleiben also immer beschränkt und die Kristallstruktur wird daher den Zustand einer langreichweitigen Ordnung ("Long Range Order" - LRO) einnehmen.

Ganz anders sieht es dagegen bei einem zweidimensionalen Körper mit zweidimensionaler Periodizität aus. Hier liefert die analoge Rechnung das Ergebnis [29]:

$$\langle u_{2D}^2 \rangle \longrightarrow \infty \quad \text{für } k \rightarrow 0 \quad \text{bei } |\vec{r}| \rightarrow \infty. \quad (6.12)$$

Die Fluktuationen sind also divergent. Das System kann daher keine stabile langreichweitige Ordnung ausbilden, weil diese selbst von minimalen thermischen Anregungen wieder zerstört werden würde. Es handelt sich dabei um eine grundlegende Gesetzmäßigkeit, die besagt, daß n -dimensionale Strukturen mit n -dimensionaler Periodizität keinen langreichweitig geordneten Zustand einnehmen können, wenn $n \leq 2$ gilt. Diese Tatsache ist als Landau-Peierls-Instabilität bekannt [29] und steht auch in Zusammenhang mit der Existenz von Phasenübergängen in niedrigdimensionalen Systemen (vgl. [99]).

Ein dritter Typus von Materialsystemen sind die dreidimensionalen Körper mit eindimensionaler Periodizität in einer Richtung. Für die Stabilität kommt es bei ihnen nur auf die Fluktuationen in die periodische Richtung (x) an. Für diese läßt sich zeigen [6]:

$$\langle u_x^2 \rangle \longrightarrow \ln(l_x) \quad \text{für } k \rightarrow 0, \quad (6.13)$$

wobei l_x die Systemgröße in x -Richtung darstellt. Auch hier ist eine langreichweitige Ordnung nicht möglich, wenn auch die Fluktuationen durch die lediglich logarithmische Divergenz relativ begrenzt bleiben.

Trotzdem weisen die Systeme, die dieser dritten Materialklasse angehören im allgemeinen eine eindimensionale Ordnung auf. Dies wurde sowohl für smektische Flüssigkristalle [6], [145], [141] als auch für biologische Membransysteme eindeutig nachgewiesen [151], [152], [84], [85], wobei sich herausgestellt hat, daß in diesen Systemen nicht die energetischen sondern die entropischen Beiträge dominieren und dadurch den Mechanismus für die Ausbildung der eindimensionalen Ordnung bereitstellen.

Auch das hier betrachtete System von Terrassenstufen an der Kristalloberfläche entspricht im allgemeinen diesem dritten Typus. Solange nämlich ein beliebiger kleiner Fehlorientierungswinkel α vorliegt, ist das System der Kristallstufen zum darunterliegenden Silizium-Gitter in der Regel inkommensurabel, d.h. die reale Oberfläche ist keine Facette des Silizium-Gitters und sie läßt sich nicht durch ganze Zahlen als Miller-Indizes im Rahmen dieses Gitters indizieren. Dann tritt die dreidimensionale Periodizität des Silizium-Kristalls in den Hintergrund und es kommt nur auf die Periodizität durch die Überstruktur der Terrassen selbst an. Dadurch kommen die divergierenden Fluktuationen von Gleichung (6.13) zustande.

Das ändert sich erst dann, wenn die Fehlorientierung zu einer realen Oberfläche führt, die als hochindizierte Facette des Kristallgitters beschrieben werden kann. In diesem Fall wäre die gestufte Oberfläche kommensurabel zum Silizium-Gitter und es würde sich auch an der Oberfläche ein langreichweitig geordnetes Stufengitter einstellen, dessen Ordnung durch das periodische Potential des Volumengitters vermittelt wird [108].

6.4.2.2 Das Modell der fluktuierenden Domänengrenzen

Im allgemeinen stellt das Stufengitter im Vergleich zum Volumen ein inkommensurables System dar. Solche Systeme sind bereits in der Literatur ausführlich diskutiert worden, v.a. im Hinblick auf Adsorbate an Festkörperoberflächen [32], [50], [64], [102]. Ein solches inkommensurables Adsorbat bildet sich oberhalb einer bestimmten kritischen Temperatur immer dann, wenn die Gitterkonstante des adsorbierten Materials nicht mit derjenigen des Substrats kompatibel ist. Der inkommensurable Zustand wird dann durch lokale kommensurable Bereiche gekennzeichnet, die durch regelmäßig angeordnete Domänengrenzen voneinander getrennt sind [33]. Besteht die Inkommensurabilität nur in einer Dimension wie beispielsweise bei Brom auf Graphit [50], dann erhält man näherungsweise geradlinige Domänengrenzen, die einzelne kommensurable Streifen voneinander trennen. Ein solches System wird als *"Streifen-Domänen-Phase"* (*Stripe-Domain System*) bezeichnet [103].

Die Analogie zu den Terrassen auf vizinalen Oberflächen ist offensichtlich. Hier ist die Richtung der Gitterfehlorientierung die inkommensurable Richtung. Die Terrassen stellen die kommensurablen Domänen dar, während die Kristallstufen als Domänengrenzen fungieren. Diese Beschreibung ist immer dann gerechtfertigt, wenn die gestufte Oberfläche oder Grenzfläche im wesentlichen keine Inseln, Fehlstellen oder Überhänge aufweist, wenn sie sich also durch das *"Terrace-Step-Kink Model"* aus

Abschnitt 2.1 beschreiben läßt. Dies sollte aber bei allen hier verwendeten Systemen der Fall sein, da diese mit dem Verfahren der Niedrigtemperatur-Epitaxie hergestellt wurden (vgl. Abschnitt 2.1), so daß die Temperatur des Systems immer unterhalb des Aufrauungsübergangs lag.

Die Grundlage für das Verständnis eines solchen Systems von inkommensurablen Domänengrenzen bildet die Arbeit von Pokrovsky und Talapov [127]. Ausgangspunkt ist die Tatsache, daß die Domänengrenzen durch thermische Fluktuationen ihre Abstände zueinander variieren. Gleichzeitig können sie sich nicht durchdringen weil eine derartige doppelte Grenze energetisch extrem ungünstig ist. Im Fall der Kristallstufen ist das anschaulich klar, weil die Durchdringung mehrerer Stufen zu unphysikalischen Überhängen führen würde.

Für die Kristallstufen ist die Situation dadurch - bis auf die Dimensionalität - genauso wie bei zweidimensionalen fluktuierenden Grenzflächen, d. h. es handelt sich um ein System elektrisch neutraler Objekte in großer Verdünnung. Ein derartiger Sachverhalt wurde bisher schon bei bestimmten biologischen Membransystemen beobachtet [146]. Als einzige klassische Wechselwirkung bleibt dafür nur die anziehende van-der-Waals Wechselwirkung, deren Stärke mit dem Abstand aber sehr schnell abfällt. Bei großen Abständen der Terrassenstufen voneinander spielt sie nur noch eine geringe Rolle. Diese Situation in Membran-Multischichten ist von Helfrich theoretisch untersucht worden [65], die Überlegungen lassen sich aber auf beliebige fluktuierende Grenzflächen verallgemeinern. Für die freie Energie eines solchen Systems gilt grundsätzlich:

$$F = U_{WW} + U_{elast} - T\Delta S, \quad (6.14)$$

wobei mit der obigen Argumentation der Beitrag der nichtelastischen Wechselwirkungen U_{WW} sehr klein wird. Die elastische Energie aber ist ebenfalls klein, da sie nur Beiträge aus der Krümmung enthält [145], [152] - eine Tatsache die ebenfalls auf das System der Kristallstufen übertragbar ist. Für die Minimierung von F ist daher die Maximierung der Entropie entscheidend. Bezeichne $u(x, y, z)$ wieder die Abweichung von der idealen Position, dann gilt für die elastische Energie im Einheitsvolumen [65]:

$$e = \frac{1}{2}B \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{2}K \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)^2. \quad (6.15)$$

Wendet man wieder eine Fourier-Entwicklung an, dann können die einzelnen Komponenten u_q für jede Fluktuationsmode q getrennt betrachtet werden. Nach Anwendung des Gleichverteilungssatzes ergibt sich für das Probenvolumen V und jede Mode q [65]:

$$\frac{1}{2} (Bq_{\parallel}^2 + Kq_{\perp}^4) \langle |u_q|^2 \rangle V = \frac{1}{2} k_B T, \quad (6.16)$$

wobei q_{\parallel} die Komponente entlang der x -Achse (d.h. im Fall der Kristallstufen senkrecht zu den Stufen in der Ebene der physikalischen Oberfläche) und q_{\perp} die Komponente in der Ebene der fluktuierenden Grenzfläche darstellt (d.h. im Fall der Kristallstufen parallel zu den Stufenkanten).

Jetzt kann eine Multischicht aus einzelnen fluktuierenden Grenzflächen zusammengesetzt werden. Dann läßt sich für jede Fluktuationsmode die Änderung der Energie und die Entropieänderung berechnen [65]. Für die Änderung der freien Energie ergibt sich daraus:

$$\Delta F_q = -\frac{1}{2}k_B T \ln \frac{K q_{\perp}^4}{B q_{\parallel}^2 + K q_{\perp}^4}. \quad (6.17)$$

Wenn n die Anzahl der Grenzflächen pro Volumeneinheit und r den mittleren Abstand darstellt, dann erhält man für die gesamte Änderung der freien Energie pro Fläche A [65]:

$$\frac{\Delta F}{A} = \frac{3\pi^2 n (k_B T)^2}{128 K} \frac{1}{r^2}. \quad (6.18)$$

Die einzelnen Grenzflächen erfahren also eine repulsive Abstoßung, wenn sie sich im Rahmen der Fluktuation einander annähern. Bedingt durch das quadratische Abstandsgesetz ist diese Abstoßung wesentlich langreichweitiger als die attraktive van-der-Waals Wechselwirkung. Insgesamt ergibt sich daher eine resultierende repulsive Kraft, die dazu führt, daß die Grenzflächen einen größtmöglichen Abstand zueinander einnehmen. Dadurch erhält man eine näherungsweise periodische Struktur mit einem mittleren Abstand d . Obwohl also das System nach den im vorherigen Abschnitt angestellten Überlegungen keine wahre langreichweitige Ordnung ausbilden kann, wird trotzdem eine geordnete Struktur gebildet. Diese wird als *quasi-langreichweitige Ordnung* ("Quasi Long Range Order" - QLRO) bezeichnet.

Diese Überlegungen für zweidimensionale fluktuierende Grenzflächen können nahtlos auf das System der Kristallstufen übertragen werden. Der eigentliche Grund dafür ist, daß sich beide Systeme wie freie, neutrale Fermionen verhalten, die sich in lediglich einer räumlichen Dimension bewegen können. Das Verbot der Durchdringung entspricht dann dem Pauli-Prinzip und die Wechselwirkung der Grenzflächen bzw. Stufen ist analog der Fermionen-Wechselwirkung. Außerdem ist die räumliche Bewegung insgesamt eingeschränkt durch die endliche Probengröße. Ein solches eindimensionales, quantenmechanisches, fermionisches Vielteilchensystem ist in der Literatur ausführlich diskutiert worden. Sein komplexes thermodynamisches Verhalten wurde von Calogero und Sutherland aufgeklärt [26], [166]. Auch die naheliegende Anwendung auf Kristallstufen auf vizinalen Oberflächen ist in jüngster Zeit untersucht worden [90], [91]. Dabei wurde ebenfalls die Ausbildung einer quasi-langreichweitigen Ordnung der Kristallstufen - zumindest in bestimmten Temperaturbereichen - festgestellt [90].

6.4.2.3 Auswirkungen auf die Röntgenstreuung

Die Auswirkungen auf die Röntgenstreuung sind drastisch. Das Profil der von gestuften Ober- bzw. Grenzflächen gestreuten Intensität wird stark von der Ordnung der Terrassenstufen beeinflusst. Die allgemeine Form des Strukturformfaktors wurde von Noh et al. berechnet [108], wobei die Grundzüge dieser Ableitung in Anhang B dargestellt sind. Daraus folgt zunächst rein qualitativ (vgl. Gleichung (B.5)), daß durch die Überstruktur der Stufen eine Serie von Überstruktur-Maxima auftritt, die jeden reziproken Gittervektor \vec{G} der flachen Oberfläche begleiten ("Step-Superlattice Peaks (SSP)", vgl. auch [160]). Das gilt auch für den reziproken Vektor $\vec{G} = (0, 0, 0)$, so daß auch die spekuläre Intensität von derartigen Satelliten begleitet wird. Ihre Intensitäten werden durch den Formfaktor $F(\vec{Q}_{\parallel} - \vec{G}_{\parallel}, l)$ bestimmt (siehe Gleichung (B.5)). Die Positionen der Satelliten sind gegeben durch die Phasenfaktoren in Gleichung (B.6), so daß gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{G} \cdot \vec{A}}{l} - \frac{Q_z d}{l} + Q_x - G_x &= p \frac{2\pi}{l}, \\ Q_y - G_y &= 0, \end{aligned} \quad (6.19)$$

wobei l die Terrassenbreite darstellt. p ist eine ganze Zahl. Im Rahmen der nichtspekulären Reflektivität erhält man daher stabförmige Satelliten, die genauso wie der Pfad der spekulären Intensität auf der realen Oberfläche senkrecht stehen. Sie sind gegenüber den Terrassenflächen um den Gitterfehlorientierungswinkel α verkippt.

Die Gestalt dieser Satelliten hängt aber empfindlich vom Ordnungszustand der Terrassenstufen ab [108]. Dabei lassen sich prinzipiell drei Fälle unterscheiden:

- perfekt geordnetes Stufengitter:

In diesem Fall, der nur bei einer kommensurablen Oberfläche oder bei $T = 0$ auftreten kann, sind die durch das Stufengitter bedingten Satelliten-Peaks reine δ -Peaks, deren Breite nur durch die experimentelle Auflösung bestimmt ist [108]. Sie verhalten sich genauso wie die Bragg-Peaks selbst.

- quasi-langreichweitig geordnetes Stufengitter:

Dies ist der allgemeine Fall, der bei kleinen Fehlorientierungswinkeln α auftritt. Hier muß wiederum die Korrelationsfunktion des Stufensystems näher betrachtet werden. Sie läßt sich schreiben als [6], [152]

$$C(\vec{r}) = \langle \exp(iQ_0[u(\vec{r}) - u(0)]) \rangle, \quad (6.20)$$

wobei $Q_0 = \frac{2\pi}{l}$ gilt. Die Fluktuationen können als Gauß'sche Zufallsvariable aufgefaßt werden und daher ergibt sich in harmonischer Näherung [6]:

$$C(\vec{r}) = \exp\left(-\frac{1}{2}Q_0^2 \langle |u(\vec{r}) - u(0)|^2 \rangle\right). \quad (6.21)$$

Im Gegensatz zu den fluktuierenden Grenzflächen (vgl. Gleichung (6.16)) gilt hier für das Funktional der freien Energie bezogen auf die Fluktuationsmode q [108], [157]:

$$F_q = \frac{1}{2} (BQ_{\perp}^2 + KQ_{\parallel}^2). \quad (6.22)$$

Auch für dieses lineare Funktional kann die allgemeine Korrelationsfunktion analog zu dem von Als-Nielsen et al. angewandten Verfahren [6] berechnet werden. Als Ergebnis erhält man [108]:

$$C(\vec{r}) \propto \frac{1}{\left(1 + \frac{x^2}{\xi_x^2} + \frac{y^2}{\xi_y^2}\right)^{\frac{1}{2}\eta_{\vec{Q}-\vec{G}}}}, \quad (6.23)$$

wobei die entsprechenden Korrelationslängen senkrecht zu den Stufen (ξ_x) und entlang der Stufen (ξ_y) eingehen. Für den Exponenten gilt:

$$\eta_{\vec{Q}-\vec{G}} = \frac{|\vec{Q} - \vec{G}|^2 k_B T}{2\pi \sqrt{K_x K_y}}, \quad (6.24)$$

wobei K_y die Steifigkeit der Stufenkanten in Bezug auf ihre mögliche Krümmung repräsentiert, während K_x durch die effektive entropische Abstoßung zweier Terrassenstufen bestimmt wird (vgl. Gleichung (6.18)). Die Korrelationen zeigen also einen algebraischen Zerfall mit einer deutlichen Asymmetrie zwischen den beiden Richtungen parallel und senkrecht zu den Stufen ($\xi_y \gg \xi_x$).

Für den sich aus dieser Funktion ergebenden Strukturfaktor erhält man durch Fourier-Transformation:

$$S_p(\vec{Q}) \propto \frac{1}{(q_x^2 \xi_x^2 + q_y^2 \xi_y^2)^{2 - \frac{1}{2}\eta_{\vec{Q}-\vec{G}}}}, \quad (6.25)$$

wobei q_x und q_y die Abstände von den entsprechenden - sich aus Gleichung (6.19) ergebenden - Positionen des Satelliten der Ordnung p im reziproken Raum darstellen. Daraus ergeben sich Satelliten-Peaks mit Singularitäten, die durch ein Potenzgesetz bestimmt werden [108]. Der dafür charakteristische Exponent hängt seinerseits wieder von dem Abstand zum reziproken Gitterpunkt bzw. hier zur spekulären Position und damit auch von der Ordnung des Satelliten ab. Da η mit zunehmendem Abstand ebenfalls ansteigt und die Singularität in Gleichung (6.25) für $\eta > 4$ verschwindet, können nur die niedrigen Satelliten-Ordnungen beobachtet werden.

- kurzreichweitig geordnetes Stufengitter:

Es ist auch denkbar, daß das Stufengitter algebraisch divergierende Positionsfuktuationen aufweist [181]. Diese Situation tritt typischerweise im Nichtgleichgewicht z.B. während des epitaktischen Wachstums auf. Wird die Konfiguration

des Stufengitters in diesem Fall über eine zeitlich eng begrenzte Momentaufnahme der Oberfläche definiert, dann erhält man eine exponentiell zerfallende Korrelationsfunktion [108]:

$$C(\vec{r}) \propto \frac{\exp\left(-\sqrt{\frac{x^2}{\xi_x^2} + \frac{y^2}{\xi_y^2}}\right)}{\sqrt{\sqrt{1 + \frac{x^2}{\xi_x^2} + \frac{y^2}{\xi_y^2}}}}. \quad (6.26)$$

Dies führt zu einem Strukturfaktor der Form

$$S_p(\vec{Q}) \propto \frac{1}{1 + q_x^2 \xi_x^2 + q_y^2 \xi_y^2}, \quad (6.27)$$

der zu Satelliten führt, deren Form nicht von der Ordnung abhängt.

Eine entsprechende Anpassung der Meßdaten sollte es ermöglichen zwischen diesen drei verschiedenen Ordnungszuständen zu unterscheiden.

6.4.2.4 Simulationsrechnungen für die Probe *Delta 1*

Daher wurden auf der Grundlage dieser theoretischen Überlegungen neue Simulationsrechnungen für die in Abbildung 6.17 dargestellten gemessenen Q_x -Schnitte durchgeführt. Es ist dabei sofort klar, daß eine perfekte langreichweitige Ordnung für das Stufengitter nicht in Frage kommt, da die nichtspekulären Satelliten wesentlich breiter sind als der durch die Auflösung begrenzte spekuläre Peak. Es kann sich bei ihnen also nicht um auflösungsdominierte δ -förmige Maxima handeln. Die Annahme einer perfekten Ordnung ist dem Modell von Holý inhärent, weil es Maxima gleicher Breite für das spekuläre Signal und die Satelliten ergibt. Damit sind auch die großen Diskrepanzen zwischen Messung und Simulation bei Anwendung dieses Modells zu verstehen.

Für die Anwendung der oben entwickelten Modelle muß der diffuse Strukturfaktor aus den einzelnen Satelliten zusammengesetzt werden:

$$S_{gesamt}^{diff}(Q_x) = \sum_p S_p(Q_x). \quad (6.28)$$

Das spekuläre Signal wird zusätzlich durch ein die instrumentelle Auflösung berücksichtigendes Gauß'sches Maximum modelliert.

Zunächst wurden nur die Beiträge der Strukturfaktoren berücksichtigt, die für das Auftreten der diffusen Peaks und deren Breite verantwortlich sind. Im Verhältnis zueinander werden die Maxima aber frei skaliert. Dies hat den Vorteil, daß der Formfaktor der Terrassen, der im wesentlichen die Asymmetrie der Intensitätsverteilung in Abbildung 6.11 bestimmt, hier nicht berücksichtigt werden muß. Dieser minimalistische Ansatz erlaubt es den Strukturfaktor allein zu untersuchen.

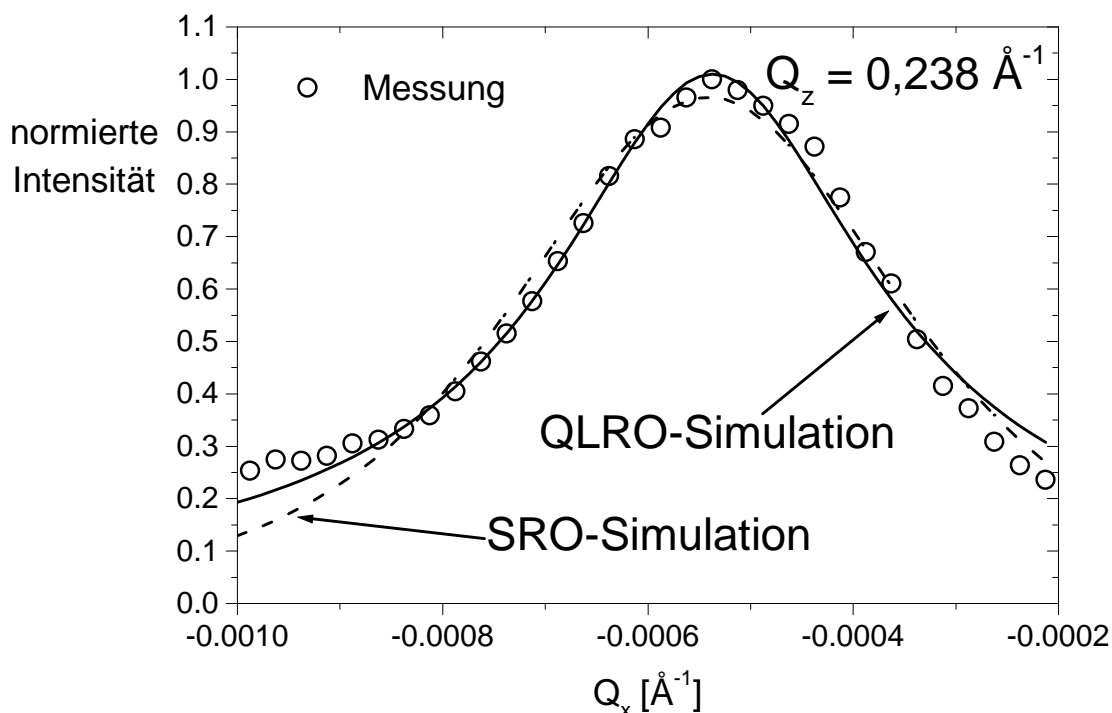


Abbildung 6.18: Nichtspekulärer Satellit der Ordnung -1 aus dem Q_x -Schnitt bei $Q_z = 0,238 \text{ \AA}^{-1}$ zusammen mit jeweils einer besten Anpassung nach den Modellen kurzreichweitig geordneter (SRO) und quasi-langreichweitig geordneter Stufen (QLRO).

Dabei wird zuerst versucht zwischen der quasi-langreichweitigen und der kurzreichweitigen Ordnung zu unterscheiden. Im Prinzip kann diese Unterscheidung an einem einzelnen Satelliten vorgenommen werden, weil sich die unterschiedliche Peak-Form an jedem einzelnen diffusen Maximum auswirkt. Am besten ist es den Schnitt bei $Q_z = 0,238 \text{ \AA}^{-1}$ aus Abbildung 6.17 heranzuziehen und dort den Satelliten der Ordnung -1 zu betrachten, weil dieser insgesamt - auch im Vergleich mit den Schnitten bei anderen Q_z -Werten - am deutlichsten ausgeprägt ist. Für diesen gemessenen Satelliten wurden jeweils Rechnungen auf der Basis von Gleichung (6.25) (QLRO) und von Gleichung (6.27) (SRO) durchgeführt. Die sich daraus ergebende beste Anpassung ist in beiden Fällen zusammen mit den gemessenen Daten in Abbildung 6.18 dargestellt.

Man erkennt bereits rein qualitativ, daß der quasi-langreichweitige Strukturfaktor eine bessere Anpassung ermöglicht. Besonders deutlich zeigt das aber die mittlere

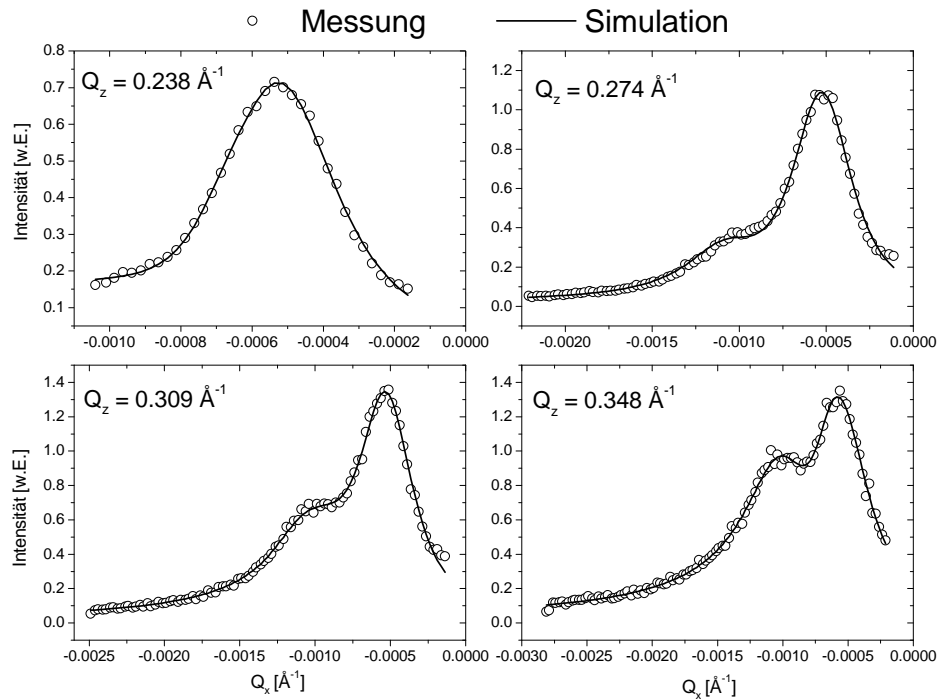


Abbildung 6.19: Nichtspekuläre Satelliten auf der ($Q_x < 0$)-Seite des spekulären Pfades für verschiedene konstante Q_z -Werte zusammen mit einer Simulation nach dem Modell der quasi-langreichweitigen Ordnung.

quadratische Abweichung f zwischen Simulation und Messung. Es gilt

$$f(QLRO) = 0,0296 \quad f(SRO) = 0,0426. \quad (6.29)$$

Daraus folgt, daß der quasi-langreichweitige Strukturfaktor eine bessere Beschreibung der nichtspekulären Satelliten darstellt.

Die Terrassenstufen sowohl an der Oberfläche als auch im Bereich der vergrabenen δ -Schicht befinden sich daher im Zustand quasi-langreichweitiger Ordnung. Dies wurde anscheinend durch die besondere Art der Herstellung erreicht, bei der die epitaktisch wachsende Oberfläche vor der Deposition eines neuen Materials immer Zeit zur Equilibrierung hatte. In diesem Gleichgewichtszustand kann sich dann aufgrund der entropischen Abstoßung zwischen den Terrassenstufen die von der Theorie vorhergesagte quasi-langreichweitige Ordnung des Stufengitters einstellen.

Nachdem der Ordnungszustand geklärt ist, kann der quasi-langreichweitige Strukturfaktor dazu herangezogen werden, um die Strukturparameter des Stufengitters zu bestimmen. Da nach wie vor der Formfaktor und damit die Asymmetrie der Intensitätsverteilung auf beiden Seiten des spekulären Pfades nicht berücksichtigt wird,

kann man sich auf die ($Q_x < 0$)-Seite der experimentellen Schnitte in Abbildung 6.17 beschränken. Dort sind die nichtspekulären Maxima besonders deutlich ausgeprägt und es sind daher entsprechend genaue Informationen zu erwarten. Die Anpassungen wurden mit Gleichung (6.28) unter Berücksichtigung der Satellitenordnungen $p = -2$ und $p = -1$ mit dem Strukturfaktor der quasi-langreichweitigen Ordnung durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.19 dargestellt.

Man erkennt, daß sich mit diesem Modell eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation erzeugen läßt. In den Fit gehen insbesondere die Terrassenbreite l und der charakteristische Exponent η_1 für den Satelliten 1. Ordnung ein ($\eta_2 = 2\eta_1$). Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle dargestellt:

$Q_z [\text{Å}^{-1}]$	0,238	0,274	0,309	0,348	Mittelwert
$l [\text{Å}]$	11136	11118	11017	11760	11258
η_1	0,655	0,522	0,723	0,710	0,653

Der aus den Meßdaten gewonnene Mittelwert von η_1 stimmt erstaunlich gut mit dem in einer früheren experimentellen Arbeit erzielten Wert von 0,6 überein [107]. Diese Übereinstimmung ist ein weiteres gewichtiges Indiz für die Gültigkeit des Modells einer quasi-langreichweitigen Ordnung.

6.5 Aussagen über die Form der Terrassen

Der Strukturfaktor des Terrassensystems ist damit vollständig bestimmt worden. In einem weiteren Schritt kann jetzt versucht werden aus der Messung Informationen über den Formfaktor der Terrassen zu extrahieren.

Zunächst wurde zu diesem Zweck für die Probe *Delta 1* der Fehlorientierungswinkel α zwischen Oberfläche und (001)-Ebene in der Richtung senkrecht zu den Stufen durch ein unabhängiges Experiment genau bestimmt. Dabei ergab sich: $\alpha = 0,4^\circ \pm 0,01^\circ$. Dieser Wert steht in eklatantem Gegensatz zu dem Wert von $0,065^\circ$, der sich aus der Simulation mit dem statistischen Ansatz ergibt. Dies ist ein weiteres Argument gegen die Gültigkeit dieses Ansatzes und für die Entwicklung des neuen Modells der sterischen Abstoßung, das im vorigen Abschnitt durchgeführt wurde.

In Verbindung mit der mittleren Terrassenlänge aus der obigen Tabelle folgt daraus sofort, daß es sich bei den Stufen keinesfalls um monoatomare Stufen handeln kann. Die mittlere Stufenhöhe ergibt sich sogar zu 79 Å was etwa 58 Einzelstufen entspricht. Dadurch wird die Kondensation der Einzelstufen zu großen effektiven Stufen bestätigt, die schon häufig beobachtet wurde [77], [71]. Diese Kondensation ist normalerweise eine Folge der Kinetik beim epitaktischen Wachstum im *Step-Flow Mode* [169], [46]. Es ist aber nicht zu erwarten, daß diese kondensierten Stufen noch eine exakte eckige Stufenform besitzen. Vielmehr dürften sich die Einzelstufen lateral über einen bestimmten Bereich verteilen, so daß sich ein abgerundetes Profil der Stufe ergibt [58]. Diese Situation ist näherungsweise in Abbildung 6.20 dargestellt.

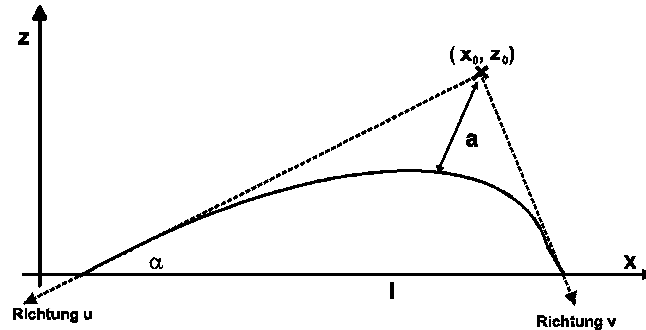


Abbildung 6.20: Modellvorstellung für kondensierte Stufen, die durch laterale Verteilung in einem bestimmten x -Bereich ein ausgeschmiertes Stufenprofil erzeugen.

Die Oberfläche bzw. Grenzfläche ist dann aus einer Folge derartiger Stufenprofile zusammengesetzt. Für derartige Terrassenstufen haben Grim et al. eine einfache Parametrisierung vorgeschlagen, bei der das Stufenprofil durch eine hyperbolische Funktion beschrieben wird [58]. Die eigentliche Stufenform ist dabei im wesentlichen durch den Fehlorientierungswinkel α und durch den Parameter a bestimmt, der die Abweichung von einer exakten Stufenspitze beschreibt [58]. x_0 und z_0 sind die Koordinaten dieser hypothetischen Stufenspitze. Führt man eine Transformation in das u - v -Koordinatensystem aus Abbildung 6.20 durch, dann kann der Formfaktor analytisch berechnet werden und es gilt [58]:

$$F(\vec{Q}) = \int_{u_1}^{u_2} du \left[\left(-\cos \alpha - \frac{a}{u^2} \sin \alpha \right) \exp \left(iQ_x \left(x_0 - u \cos \alpha + \frac{a}{u} \sin \alpha \right) \right) \right. \\ \left. \left(\exp \left(iQ_z \left(z_0 - u \sin \alpha - \frac{a}{u} \cos \alpha \right) \right) - 1 \right) \right] \quad (6.30)$$

mit

$$u_1 = \frac{1}{2 \cos \alpha} \left(x_0 + \sqrt{x_0^2 + 4a \sin \alpha \cos \alpha} \right) \\ u_2 = \frac{1}{2 \cos \alpha} \left(x_0 - l + \sqrt{(x_0 - l)^2 + 4a \sin \alpha \cos \alpha} \right) \quad (6.31)$$

Die Koordinaten der Stufenspitze können ebenfalls in Abhängigkeit vom Fehlorientierungswinkel, von der Terrassenlänge und von der Größe a bestimmt werden. Man

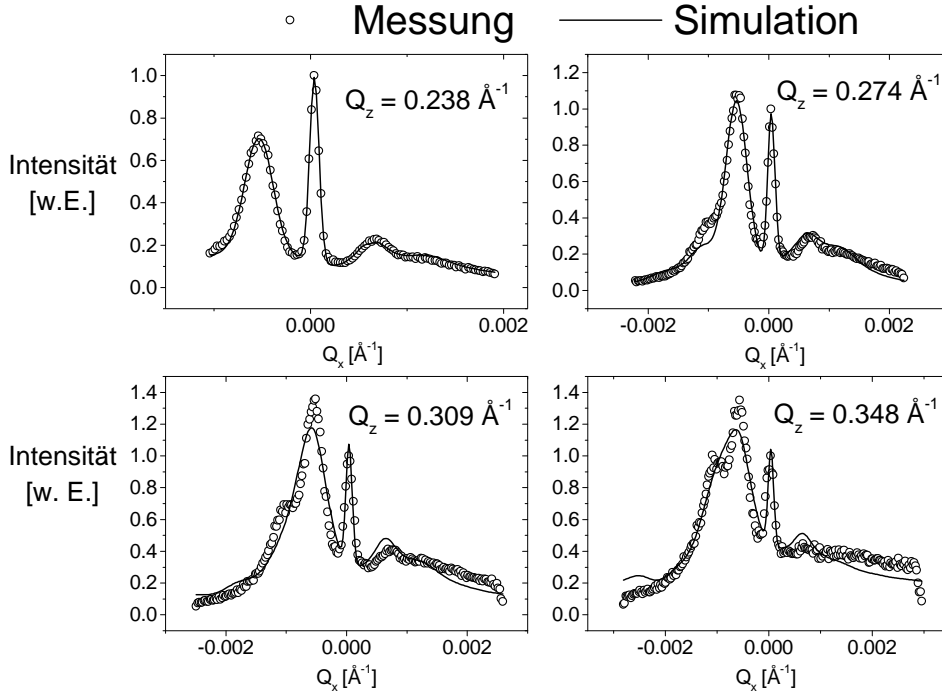


Abbildung 6.21: Die bereits untersuchten Schnitte entlang Q_x zusammen mit einer Anpassung, die sowohl den quasi-langreichweitigen Strukturfaktor als auch den Formfaktor der Terrassen nach Grim et al. berücksichtigt.

erhält aufgrund einfacher geometrischer Überlegungen [58]:

$$\begin{aligned}
 x_0 &= \frac{l}{2} + \frac{1}{2} \cos 2\alpha \sqrt{l^2 + \frac{8a}{\sin 2\alpha}} \\
 z_0 &= \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sqrt{l^2 + \frac{8a}{\sin 2\alpha}}
 \end{aligned} \tag{6.32}$$

Damit kann der gesamte Formfaktor berechnet werden. Da α bereits aus der unabhängigen Messung und l aus der Anpassung des Strukturfaktors bekannt sind, wird die Asymmetrie der nichtspekulären Intensität auf beiden Seiten des spekulären Pfades allein durch den Betrag von a bestimmt. Das ist auch aus Abbildung 6.20 anschaulich klar. Um nun Anpassungen an die Meßdaten vorzunehmen wurde das Betragsquadrat des Formfaktors mit dem Strukturfaktor der quasi-langreichweitigen Ordnung kombiniert. Unter Berücksichtigung eines Untergrundes I_0 ergibt sich damit für die gestreute Intensität [18]:

$$I(Q_x, Q_z) = S(Q_x, Q_z) | F(Q_x, Q_z) |^2 + I_0 \tag{6.33}$$

Damit können nun die bereits ausführlich diskutierten Schnitte entlang Q_x durch die Intensitätsverteilung aus Abbildung 6.11 angepaßt werden. Im Vergleich zur reinen Strukturfaktoranpassung gelingt dies aber jetzt mit einer kleineren Parameteranzahl. Die besten erzielten Anpassungen sind in Abbildung 6.21 dargestellt.

Man erkennt eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation v.a. im Bereich der kleinen Q_z -Werte. Erst ab $Q_z = 0,3 \text{ \AA}^{-1}$ ergeben sich deutliche Abweichungen. Das ist nicht verwunderlich, weil die Messung mit steigendem Q_z immer sensitiver auf die atomaren Details der Struktur reagiert. Im Vergleich zu Abbildung 6.19 ist die Übereinstimmung bei allen Kurven deutlich schlechter, weil jetzt jeweils die ganze Kurve auf beiden Seiten des spekulären Pfades in die Simulation einbezogen wurde. Außerdem konnten die Höhen der Satelliten-Maxima nicht mehr frei skaliert werden. Sie wurden zusammen mit der Asymmetrie zwischen der ($Q_x < 0$)- und der ($Q_x > 0$)-Seite allein durch den im wesentlichen von dem Parameter a abhängigen Formfaktor bestimmt. Unter Berücksichtigung dieser Einschränkungen kann die Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation als zufriedenstellend betrachtet werden. Daher ist das einfache Modell nach Grim et al. [58] ein guter Ansatz, der die Form der Terrassenstufen hinreichend gut beschreibt.

Kapitel 7

Schlußfolgerungen und Ausblick

7.1 Weitere Untersuchungen an Bor-implantiertem Silizium

Aus den in Abschnitt 5.6 dargestellten Ergebnissen zur Tiefenverteilung der Stapelfehler und zur Bildung von Oberflächen-Clustern erwächst sogleich die Frage, ob sich die im Verlauf des Ausheilens gebildeten Stapelfehler bei längerer Temperaturbehandlung selbst wieder an der Oberfläche des Kristalls ausheilen lassen.

Letztendlich geht es darum ob Stapelfehler auf (111)-Ebenen eine stabile Konfiguration für die Silizium-Zwischengitteratome darstellen oder ob es sich bei ihnen nur um ein zeitlich begrenztes Phänomen handelt. Die Beantwortung dieser Frage ist v.a. für mögliche prozeßtechnische Anwendungen entscheidend. Im ersten Fall müßte man versuchen die Temperaturen so einzustellen, daß sich diese planaren Defekte in dem elektrisch aktiven Bereich gar nicht erst bilden können. Im zweiten Fall dagegen würde es genügen die Ausheilzeiten entsprechend groß zu wählen.

Zur Klärung dieser Frage sind detaillierte und umfassende Untersuchungen an Systemen notwendig, die idealerweise bei verschiedenen Temperaturen über 1000° C unterschiedlich lange ausgeheilt wurden.

Erste Messungen in dieser Richtung wurden kürzlich an der "Rossendorf Beamline" (ROBL) der ESRF in Grenoble von T. H. Metzger und I. Kegel vorgenommen. Es wurden jeweils Systeme untersucht, die völlig analog zu *b1d* hergestellt worden waren. Sie wurden aber diesmal bei $T = 1070^\circ \text{C}$ unterschiedlich lange ausgeheilt, wobei ein Zeitfenster zwischen 10 und 120 Sekunden untersucht wurde. Mit Synchrotronstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 1,544 \text{ \AA}$ wurde jeweils die entlang des positionsempfindlichen Detektors auftretende Intensität bei konstantem Einfallswinkel α_i und an einer festen Position $(h/k) = (2 + x/2 + x)$ im reziproken Raum gemessen. Dadurch ergibt sich ein fester Abstand q vom Hauptreflex. Die Ergebnisse sind für die verschiedenen Ausheilzeiten in Abbildung 7.1 dargestellt.

Man erkennt, daß die Peak-Intensität auf die Ausheilzeit extrem empfindlich ist.

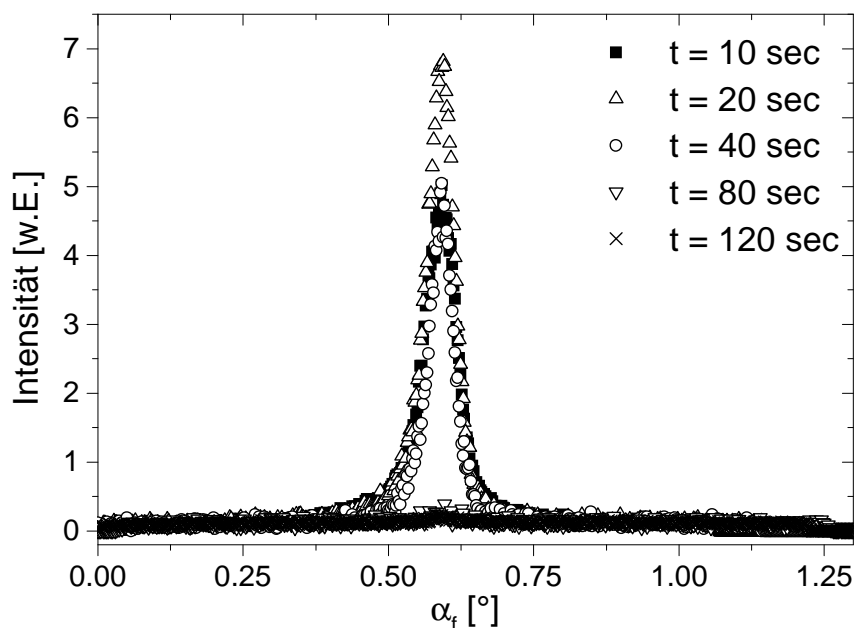


Abbildung 7.1: Stapelfehler-Peak in festem Abstand vom Hauptreflex für analog zu *b1d* hergestellte Systeme, die 10, 20, 40, 80 und 120 Sekunden bei $T = 1070^\circ\text{C}$ ausgeheilt wurden.

Nach einer Zeit von 10 Sekunden - die in den im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Untersuchungen ansonsten immer verwendet wurde - ist das Stapelfehler-Maximum deutlich ausgeprägt. Nach 20 Sekunden ist seine Intensität nochmals um 40 % grösser. Bei einer Ausheilzeit von 40 Sekunden dagegen ist sie wieder in etwa auf den 10-Sekunden-Wert zurückgegangen und nach 80 Sekunden ist der Streak fast vollständig verschwunden. Auch bei 120 Sekunden ist kein durch die Stapelfehler induziertes Maximum mehr feststellbar.

Daraus kann geschlossen werden, daß die Bildung von extrinsischen Stapelfehlern in Bor-implantiertem und bei Temperaturen über 1000°C ausgeheilten Silizium-Systemen ein transientes Phänomen darstellt. Diese planaren Defekte wachsen während des Ausheilens, wobei sich sowohl ihre Anzahl (proportional zur Satelliten-Intensität) als auch ihre mittlere Fläche (ablesbar an der kleiner werdenden Halbwertsbreite des Satelliten-Maximums) mit der Zeit vergrößern. Dieser Vorgang setzt sich solange fort, bis beide Größen im Bereich von 20 Sekunden ihren Maximalwert erreichen. Danach beginnen sowohl die Anzahl der Stapelfehler als auch ihre mittlere Ausdehnung wieder zu schrumpfen und im Bereich $t \gtrsim 80$ Sekunden verschwinden sie vollständig.

Aufgrund der Gesamtheit der in Kapitel 5 diskutierten Ergebnisse zur Tiefenverteilung kann die Schlußfolgerung gezogen werden, daß die extrinsischen Stapelfeh-

ler durch Diffusion an die Oberfläche und durch dort stattfindendes Abscheiden der überschüssigen Silizium-Zwischengitteratome ausheilen. Sowohl die räumliche Verteilung bis unmittelbar unter die Oberfläche als auch die im Rahmen des Ausheilens ausschließlich bei diesen Systemen gefundenen Oberflächen-Cluster untermauern diese Hypothese.

Diese Erkenntnisse haben umfassende Konsequenzen für die Entwicklung eines prozeßtechnischen Verfahrens, daß das Auftreten von Defekten in Bor-implantierten Systemen weitgehend minimiert. Wie die in Kapitel 5 dargestellten Resultate belegen ist eine niedrige Ausheiltemperatur dafür nicht geeignet. Sie führt zur Bildung von Defekt-Clustern, die auch durch langes Tempern nicht aufgelöst werden können.

Erst bei einer Temperatur im Bereich von 1070°C ist das möglich. Allerdings bilden sich dabei zunächst großflächige, planare Defekte in Form von extrinsischen Stapelfehlern auf (111)-Ebenen, die schließlich bei fortschreitender Temperung an der Oberfläche des Kristalls ausheilen. Erst danach liegt ein weitgehend defektfreies System vor.

Zur Erreichung optimaler Ergebnisse müssen daher eine entsprechend hohe Ausheiltemperatur und eine lange Ausheilzeit miteinander kombiniert werden.

7.2 Kristalline Terrassen an Oberflächen

Die bei den epitaktischen δ -Schichtsystemen gefunden kristallinen Terrassenstufen und ihre Wechselwirkung durch sterische Abstoßung legen für die Zukunft weitere Untersuchungen nahe. Dabei sollten durch genaue Spezifizierung des Fehlerorientierungswinkels zwischen realer Oberfläche und Silizium-(001)-Ebene Systeme mit verschiedenen Terrassenbreiten erzeugt werden. Dadurch könnte der Bereich an Stufenabständen ermittelt werden in dem die Wechselwirkung wirksam ist, die die quasi-langreichweitige Ordnung vermittelt.

Außerdem könnten die Ergebnisse mit In-Situ-Messungen an freien Silizium-Oberflächen im Ultrahochvakuum verglichen werden. Dies setzt aber voraus, daß die experimentellen Schwierigkeiten überwunden werden können, die mit einer derartigen Messung verbunden sind.

Anhang A

Die Reflektivität eines Terrassen-Schichtsystems nach V. Holý

Hier soll der statistische Ansatz von V. Holý für die nichtspekuläre Reflektivität eines Schichtsystems dargestellt werden, bei dem die einzelnen Grenzflächen eine laterale Struktur in Form von Terrassen und atomaren Stufen aufweisen. Zunächst wird die Korrelationsfunktion einer solchen Grenzfläche abgeleitet. Anschließend soll die spezielle Anwendung der DWBA zur Berechnung der von einem derartigen Schichtsystem inkohärent oder nichtspekulär gestreuten Intensität diskutiert werden.

A.1 Die dreidimensionale Korrelationsfunktion einer gestuften Oberfläche

Der Ansatz von Holý basiert auf dem Prinzip der stationären Zufallsprozesse ("Stationary Random Processes") [130]. Für jede Grenzfläche wird eine dreidimensionale Paarkorrelationsfunktion berechnet, deren Fourier-Transformierte die Grundlage für die Berechnung der gestreuten Intensität darstellt. Zunächst wird nur eine Grenzfläche betrachtet. Diese besteht aus einer unendlich großen Anzahl paralleler Terrassen, die wie absteigende Treppenstufen angeordnet sind (Abbildung 6.15).

Die Paarkorrelationsfunktion $C(x_1, x_2, x_3)$ für eine Grenzfläche ist die Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit der Höhe, daß sich zwei Grenzflächenatome mit den lateralen Koordinaten $(0, 0)$ und (x_1, x_2) in ihrer vertikalen Koordinate um den Wert x_3 unterscheiden [71]. Wie in Abschnitt 6.4.1 bereits dargestellt sind die Terrassenbreiten senkrecht zu den Stufen mit einer Gamma-Verteilung der Ordnung m um den Mittelwert $\langle l \rangle$, sowie parallel dazu mit einer entsprechenden Verteilung der Ordnung m' um den wesentlich größeren Wert $\langle l' \rangle$ verteilt. Die Stufenhöhen dagegen gehorchen einer Gauß-Verteilung um den Wert $\langle h \rangle$, der sich aus dem Fehlorientierungswinkel α

und dem Wert $\langle l \rangle$ ergibt.

Zuerst werden zwei Grenzflächenatome betrachtet, die sich an den Orten $(0, 0, 0)$ und $(x_1, 0, x_3)$ mit $x_1 > 0$ befinden. Wenn sich zwischen ihnen insgesamt n Stufen befinden, dann gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte einer derartigen Anordnung [71]:

$$w_n(x_1, x_3) = \prod_{i=0}^n \left(\int_0^\infty dl_i \right) \prod_{i=0}^n (P(l_i)) \prod_{i=1}^n \left(\int_{-\infty}^\infty dh_i \right) \prod_{i=1}^n (H(h_i)) \\ \times \delta \left(x_1 - \sum_{j=0}^n l_j \right) \delta \left(x_3 - \sum_{j=1}^n h_j \right). \quad (\text{A.1})$$

Die $H(h_i)$ sind dabei die Gauß'schen Wahrscheinlichkeiten und die $P(l_i)$ die Wahrscheinlichkeiten aus der Gammaverteilung in Gleichung (6.6), wobei die Randwerte $P(l_0)$ und $P(l_n)$ aber nicht die Wahrscheinlichkeiten der tatsächlichen Terrassenbreiten, sondern die der Abstände der betrachteten Atome von den entsprechenden Stufen beschreiben [71]:

$$P(l_0) = \frac{1}{\langle l_0 \rangle} \int_{l_0}^\infty dl P(l) \quad P(l_n) = \frac{1}{\langle l_n \rangle} \int_{l_n}^\infty dl P(l) \quad (\text{A.2})$$

Zusätzlich sei $P_s(x_1)$ die Wahrscheinlichkeit die beiden Atome im Abstand x_1 auf derselben Terrasse zu finden [71]:

$$P_s(l) = \frac{1}{\langle l \rangle} \int_l^\infty dx (x - l) P(x) \quad (\text{A.3})$$

Dann gilt für die entsprechende zweidimensionale Paarkorrelationsfunktion:

$$C(x_1, 0, x_3) = P_s(x_1) \delta(x_3) + \sum_{n=1}^{\infty} w_n(x_1, x_3) \quad (\text{A.4})$$

Anschließend werden die Fourier-Transformierten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen definiert:

$$P^{FT}(q) = \int_0^\infty dl P(l) e^{iq l} \quad H^{FT}(q) = \int_{-\infty}^\infty dh H(h) e^{iq h} \quad (\text{A.5})$$

Damit läßt sich sofort die zweidimensionale Fourier-Transformierte der Korrelationsfunktion C^{FT2} analytisch berechnen. Es ergibt sich eine unendliche Summe, die für $q_1 \neq 0 \vee q_3 \neq 0$ konvergiert. Dadurch erhält man:

$$C^{FT2}(q_1, q_3) = \frac{2}{q_1^2 \langle l \rangle} \text{Re} \left[\frac{(1 - P^{FT}(q_1)) (1 - H^{FT}(q_3))}{1 - P^{FT}(q_1) H^{FT}(q_3)} \right] \quad (\text{A.6})$$

Um nun die allgemeine Form der dreidimensionalen Korrelationsfunktion und ihrer Fourier-Transformierten abzuleiten, muß die Tatsache berücksichtigt werden, daß die beiden Atome im allgemeinen nicht die gleiche Koordinate x_2 besitzen. Daher muß auch die Lateralstruktur der Grenzfläche entlang der Stufenkanten diskutiert werden. Dabei ist anzunehmen, daß die einzelnen Terrassen auch in dieser Richtung nicht unendlich ausgedehnt sind. Vielmehr wird die Grenzfläche entlang x_2 bzw. y aus Domänen der mittleren Größe $\langle l' \rangle$ bestehen, wobei $\langle l' \rangle \gg \langle l \rangle$ gilt. Innerhalb einer solchen Domäne ist die Höhenkoordinate x_3 unabhängig von der Position x_2 und in zwei verschiedenen Domänen sind die Höhenkoordinaten statistisch unabhängig. Entscheidend ist daher nur die Wahrscheinlichkeit $R_s(x_2)$, daß zwei Oberflächenatome, deren Positionen entlang der Stufenkanten sich um den Wert x_2 unterscheiden, in derselben Domäne liegen. Dafür gilt [71]:

$$R_s(|l'|) = \frac{1}{\langle l' \rangle} \int_{|l'|}^{\infty} dl(l - |l'|)R(l), \quad (\text{A.7})$$

wobei $R(l)$ die Wahrscheinlichkeit für die Domänengröße l beschreibt.

Damit ergibt sich nun für die dreidimensionale Korrelationsfunktion die einfache Beziehung:

$$C(x_1, x_2, x_3) = C(x_1, 0, x_3)R_s(x_2). \quad (\text{A.8})$$

Ihre Fourier-Transformierte ist [71]:

$$\boxed{C^{FT}(q_1, q_2, q_3) = \frac{2}{q_2^2 \langle l' \rangle} \text{Re} [1 - R^{FT}(q_2)] C^{FT2}(q_1, q_3)} \quad (\text{A.9})$$

Diese Größe stellt im folgenden die Grundlage für die Berechnung der diffus gestreuten Intensität dar.

A.2 Die nichtspekuläre Streuintensität

Jetzt kann die Streuung von einem Schichtsystem bestehend aus gestuften Grenzflächen berechnet werden. Das System bestehe dabei aus N Schichten mit den Grenzflächen $j = 0, 1, \dots, N$, wobei $j = 0$ die Oberfläche und $j = N$ die Grenzfläche zwischen Substrat und 1. Schicht bezeichnen. Die Grenzfläche j trennt also jeweils die Schichten j und $j+1$ voneinander. Für jede einzelne Schicht bezeichne $n_j = 1 - \delta_j$ den Realteil des Brechungsindex'. $n_S = 1 - \delta_S$ ist die entsprechende Größe für das Substrat.

Die das Streuprobblem beschreibende stationäre Wellengleichung (3.30) kann wieder mit dem Ansatz der *Distorted Wave Born Approximation* gelöst werden. Das Streupotential wird aber in diesem Fall auf andere Art und Weise in einen ungestörten und einen gestörten Teil aufgeteilt als dies in Abschnitt 3.2.2 der Fall war

(vgl. Gleichung (3.32)) und als dies ansonsten bei Schichtsystemen üblich ist [69]. V_1 repräsentiert jetzt das halbbunendliche Substrat mit flacher Oberfläche, während V_2 die "Störung" durch die Schichtstruktur, die Grenzflächenrauigkeiten und die Terrassenstruktur beschreibt. Diese Aufteilung läuft darauf hinaus die dynamischen Effekte in der nichtspekulären Reflektivität zu vernachlässigen, so daß die Rechnung die sog. *Bragg-artigen Peaks* in der nichtspekulären Reflektivität von Schichtsystemen [76] nicht wiedergibt. Diese werden aber bei gestuften Grenzflächen im Experiment ohnehin nicht beobachtet [71].

Werde das Profil der j -ten Grenzfläche wieder wie in Abschnitt 3.2.2 über die Abweichung u_j von der mittleren Grenzflächenposition beschrieben

$$u_j(x, y) = z_j(x, y) - \langle z_j \rangle, \quad (\text{A.10})$$

dann gilt für das Matrixelement der Störung in diesem Fall [71]:

$$\begin{aligned} M_2 &:= |\langle \tilde{E}_2 | V_2 | E_1 \rangle|^2 \\ &= |2k^2 t^1 t^2 \int_{s_x s_y} \left[dx dy e^{i(Q_x x + Q_y y)} \sum_{j=1}^N \left((\delta_j - \delta_S) \int_{\langle z_{j-1} \rangle + u_{j-1}}^{\langle z_j \rangle + u_j} dz e^{iQ_z z} \right) \right]|^2 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Der inkohärente oder nichtspekuläre Streuquerschnitt steht damit in dem einfachen Zusammenhang

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} = \frac{\langle M_2 \rangle}{16\pi^2}. \quad (\text{A.12})$$

Setzt man Gleichung (A.11) in (A.12) ein, dann ergibt sich nach einigen Vereinfachungen

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} &= \frac{s_x s_y k^4 |t^1 t^2|^2}{4\pi^2 |Q_z|^2} \times \\ &\sum_{j,k=0}^N \left[(\delta_{j+1} - \delta_j)(\delta_{k+1} - \delta_k)^* e^{i(Q_z \langle z_j \rangle - Q_z^* \langle z_k \rangle)} \int_{s_x s_y} dx dy e^{i(Q_x x + Q_y y)} F_{jk}(x, y) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Die entscheidende Größe in dieser Beziehung ist die Funktion F_{jk} , die die Korrelation zwischen den Grenzflächenprofilen beschreibt. Sie ist definiert durch [71]:

$$F_{jk}((x, y) - (x', y')) = \langle e^{i[Q_z u_j(x, y) - Q_z^* u_k(x', y')]} \rangle. \quad (\text{A.14})$$

Für $j = k$ ist diese Funktion von der oben berechneten Paarkorrelationsfunktion der entsprechenden Grenzfläche j bestimmt. Wenn man annimmt, daß diese Paarkorrelationsfunktion für alle Grenzflächen gleich ist und die Form von Gleichung (A.8) besitzt, dann gilt für alle j [71]:

$$F_{jj}((x, y) - (x', y')) = \int_{-\infty}^{\infty} d(z - z') C(x - x', y - y', z - z') e^{i(z - z') \text{Re}(Q_z)}. \quad (\text{A.15})$$

Jetzt muß nur noch berücksichtigt werden, daß die Replikationsrichtung der Terrassenstruktur und die Wachstumsrichtung im allgemeinen voneinander verschieden sind [63]. Sei die Replikationsrichtung durch einen Vektor \vec{b} beschrieben, dann kann die Korrelation zwischen den Grenzflächenprofilen schließlich ausgedrückt werden als [71]:

$$F_{jk}((x, y) - (x', y')) = [F_{jj}((x, y) - (x', y') - (b_x, b_y)(\langle z_j \rangle - \langle z_k \rangle)) - |Z|^2] \times \exp\left(-\frac{|\langle z_j \rangle - \langle z_k \rangle|}{\Lambda_\perp}\right) + |Z|^2. \quad (\text{A.16})$$

Der exponentielle Term berücksichtigt dabei die Tatsache, daß die Replikation im allgemeinen nicht vollständig erfolgt und Λ_\perp ist die Replikationslänge (vgl. die Definition in [101]).

Damit kann schließlich die nichtspekuläre Streuamplitude formuliert werden. Mit den Beziehungen (A.16) und (A.13) erhält man in Abhängigkeit von der Fourier-Transformierten C^{FT} der Korrelationsfunktion:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{diff} = \frac{s_x s_y k^4 |t^1 t^2|^2}{4\pi^2 |Q_z|^2} |C^{FT}(Re(\vec{Q}))|^2 \times \sum_{j,k=0}^N \left[(\delta_{j+1} - \delta_j)(\delta_{k+1} - \delta_k) e^{i(Q_z \langle z_j \rangle - Q_z^* \langle z_k \rangle)} e^{i(\langle z_j \rangle - \langle z_k \rangle)(\vec{Q} \parallel \vec{b} \parallel)} e^{-\frac{|\langle z_j \rangle - \langle z_k \rangle|}{\Lambda_\perp}} \right] \quad (\text{A.17})$$

Anhang B

Der Strukturfaktor einer gestuften Oberfläche nach Noh et al.

In diesem Anhang soll der Strukturfaktor einer gestuften Oberfläche nach dem Ansatz von Noh et al. dargestellt werden. Zunächst wird dabei die allgemeine Form dieses Strukturfaktors aus der Born Approximation (BA) entwickelt. Anschließend sollen die Auswirkungen auf die Beugungsprofile diskutiert werden.

B.1 Strukturfaktor nach Noh et al.

Wendet man die Born Approximation in einer - im Vergleich zu Kapitel 3.2.1 - leicht abgewandelten Form an, so läßt sich für den die Streuintensität bestimmenden Strukturfaktor schreiben [8]:

$$S(\vec{Q}) = \int d\vec{r} d\vec{r}' e^{i\vec{Q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \rho(\vec{r}) \rho^*(\vec{r}'). \quad (\text{B.1})$$

Dabei stellt $\rho(\vec{r})$ die Massendichtefunktion der gestuften Oberfläche dar. Sie kann durch eine Fourier-Zerlegung nach Komponenten des reziproken Gitters ausgedrückt werden [108]:

$$\rho(\vec{r}) \propto \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{-i\vec{G}\cdot(\vec{r}_{\perp}-m(\vec{r}_{\perp})\vec{A}_{\perp})} \delta(z + m(\vec{r}_{\perp})d), \quad (\text{B.2})$$

wobei d die Gitterkonstante und \vec{A} den Verbindungsvektor zwischen äquivalenten Atompositionen in benachbarten Schichten der jeweiligen Silizium-Oberfläche darstellt. m ist die Anzahl der Stufenkanten zwischen dem Ursprung und dem Aufpunkt \vec{r} .

In dieser Situation ist nun die z -Integration in Gleichung (B.1) wegen der δ -Funktion in (B.2) trivial und in x kann die Integration als Summe von Integralen

über die einzelnen Terrassen geschrieben werden, wobei die Werte $X_k(y)$ die Positionen der jeweils nächsten Stufenkante beschreiben [108]. k ist dabei sozusagen die Nummer der Stufe.

Führt man mit $u_k(y)$ die Abweichung der Terrassenbreite der k -ten Terrasse vom Mittelwert l ein, so ergibt sich eine einfache Beziehung für die Position der k -ten Stufenkante:

$$X_k(y) = k l + u_k(y). \quad (\text{B.3})$$

Da die Abweichungen die Bedingung $|u_{k+1}(y) - u_k(y)| \ll l$ erfüllen, lassen sich die Integrale über x und x' problemlos ausführen und man erhält das Ergebnis [108]:

$$F(Q_x - G_x, l) e^{i(Q_x - G_x)(k-n)l} e^{i(Q_x - G_x)(u_k(y) - u_n(y'))}, \quad (\text{B.4})$$

wobei F den mittleren Formfaktor der Terrassen darstellt. Damit kann der Strukturfaktor geschrieben werden als

$$\begin{aligned} S(\vec{Q}) \propto \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}}^2 F(Q_x - G_x, l) \sum_{k,n} \int dx dy' [e^{i(Q_y - G_y)(y - y')} \\ \times e^{i(\frac{1}{l}\vec{G} \cdot \vec{A} - \frac{1}{l}Q_z d + Q_x - G_x)(k-n)} \langle e^{i(Q_x - G_x)(u_k(y) - u_n(y'))} \rangle]. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Wandelt man die hier auftretenden Summen über die einzelnen Terrassenstufen in Integrale um, dann ergibt sich daraus der relativ einfache Zusammenhang:

$$\begin{aligned} S(\vec{Q}) \propto \sum_{\vec{G}} F(Q_x - G_x, l) \int dx dy' [e^{i(Q_y - G_y)y} e^{i(\frac{1}{l}\vec{G} \cdot \vec{A} - \frac{1}{l}Q_z d + Q_x - G_x)x} \\ \times \langle e^{i(Q_x - G_x)(u(0,0) - u(x,y))} \rangle]. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Da aber die Korrelationsfunktion der Positionen der einzelnen Stufenkanten geschrieben werden kann als [108]

$$C(\vec{r}_{\perp}) = \langle e^{i(Q_x - G_x)(u(0,0) - u(\vec{r}_{\perp}))} \rangle, \quad (\text{B.7})$$

ist der Strukturfaktor nichts anderes als die Fourier-Transformierte dieser Korrelationsfunktion, die mit einer zusätzlichen Phasenverschiebung um

$$(G_x - \frac{1}{l}\vec{G} \cdot \vec{A} + \frac{1}{l}Q_z d, G_y)$$

versehen ist.

B.2 Beugungsprofil der gestuften Oberfläche

Die Konsequenzen für die Röntgenbeugung können am besten aus Gleichung (B.5) abgelesen werden. Daraus ergibt sich, daß jeder reziproke Gittervektor \vec{G} des Silizium-Gitters von zusätzlichen Beugungsmaxima begleitet wird (*"Step-Superlattice Peaks (SSP)"*, vgl. auch [160]). Diese sind auf die durch die Terrassenstufen eingeführte Überstruktur zurückzuführen und ihre Intensitäten werden durch den mittleren Formfaktor der Terrassenstufen $F(\vec{Q} - \vec{G}, l)$ bestimmt.

Die Positionen dieser Überstrukturmaxima sind durch die Phasenfaktoren in Gleichung (B.5) gegeben [108]:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{G} \cdot \vec{A}}{l} - \frac{Q_z d}{l} + Q_x - G_x &= p \frac{2\pi}{l}. \\ Q_y - G_y &= 0. \end{aligned} \tag{B.8}$$

Daraus folgt unmittelbar, daß die einzelnen Überstrukturmaxima bei festem senkrechten Impulsübertrag Q_z den Abstand $\frac{2\pi}{l}$ voneinander besitzen.

Außerdem ergibt sich aus den Phasenfaktoren, daß diese zusätzlichen Maxima in drei Dimensionen stabförmige Intensitäten darstellen, die sich genau entlang der Oberflächennormalen erstrecken. Sie sind daher gegenüber der Normalen zu den Terrassenflächen um den Fehlorientierungswinkel α der Oberfläche verkippt.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Pocketbook of mathematical functions*, Frankfurt/Main 1984 (Harri Deutsch)
- [2] A. M. Afanas'ev, M. K. Melkonyan, *Acta Crystallographica A*, **39**, 207, (1983).
- [3] A. Agarwal, H.-J. Gossmann, D. J. Eaglesham, L. Pelaz, D. C. Jacobson, T. E. Haynes, Y. E. Erokhin, *Applied Physics Letters*, **71**, 3141, (1997).
- [4] P. A. Aleksandrov, A. M. Afanas'ev, M. K. Melkonyan, S. A. Stepanov, *physica status solidi a*, **81**, 47, (1984).
- [5] P. A. Aleksandrov, A. M. Afanas'ev, A. L. Golovin, R. M. Imamov, D. V. Novikov, S. A. Stepanov, *Journal of Applied Crystallography*, **18**, 27, (1985).
- [6] J. Als-Nielsen, J. D. Litster, R. J. Birgeneau, M. Kaplan, C. R. Safinya, A. Lindegaard-Andersen, S. Mathiesen, *Physical Review B*, **22**, 312, (1980).
- [7] S. R. Andrews, R. A. Cowley, *Journal of Physics C*, **18**, 6427, (1985).
- [8] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Philadelphia 1976 (Saunders College HRC)
- [9] D. Bahr, *Röntgenstreuung an dünnen Filmen mit Defekten: Vergrabene Silizide aus Ionenstrahlsynthese*, Dissertation, Christian-Albrechts-Universität Kiel, Dezember 1992.
- [10] D. Bahr, W. Press, R. Jevasinski, S. Mantl, *Physical Review B*, **51**, 12223, (1995).
- [11] R. I. Barabash, M. A. Krivoglaz, *Soviet Physics Solid State*, **29**, 1768, (1987).
- [12] N. C. Bartelt, T. L. Einstein, E. D. Williams, *Surface Science Letters*, **240**, L591, (1990).
- [13] B. W. Batterman, H. Cole, *Reviews of Modern Physics*, **36**, 681, (1964).
- [14] G. Bauer, W. Richter (Editors), *Optical Characterization of Epitaxial Semiconductor Layers*, Berlin u.a. 1996 (Springer).

-
- [15] G. T. Baumbach, S. Tixier, U. Pietsch, V. Holý, *Physical Review B*, **51**, 16848, (1994).
- [16] U. Beck, *Herstellung von vergrabenen Delta-Schichten in Si-Einkristallen und deren Charakterisierung mit Methoden der Röntgenstreuung*, Diplomarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, Januar 1995.
- [17] U. Beck, P. Yang, T. H. Metzger, J. Peisl, J. Falta, G. Materlik, T. Rupp, H. Baumgärtner, I. Eisele, J. R. Patel, *Il Nuovo Cimento*, **19D**, 403, (1997).
- [18] U. Beck, T. Salditt, T. H. Metzger, J. Peisl, V. Holý, T. Rupp, H. Baumgärtner, I. Eisele, *eingereicht bei Europhysics Letters*, 1999.
- [19] J. D. Becker, H. P. Zeindl, I. Eisele, *Physik in unserer Zeit*, 245, (1990).
- [20] R. Beikler, *Grenzflächenmorphologie beim Wachstum von vergrabenen Ge- δ -Schichten auf Si(100)*, Diplomarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, Januar 1998.
- [21] R. Berliner, S. A. Werner, *Physical Review B*, **34**, 3586, (1986).
- [22] G. Bhagavannarayana, P. Zaumseil, *Journal of Applied Physics*, **82**, 1172, (1997).
- [23] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics*, Oxford u.a. 1980 (Pergamon).
- [24] C. Brizard, J. R. Regnard, J. L. Allain, A. Bourret, M. Dubus, A. Armigliato, A. Parisini, *Journal of Applied Physics*, **75**, 126, (1994).
- [25] W. K. Burton, N. Cabrera, F. C. Frank, *Philosophical Transactions of the Royal Society London, Series A*, **243**, 299, (1951).
- [26] F. Calogero, *Journal of Mathematical Physics*, **10**, 2191, (1969); F. Calogero, *Journal of Mathematical Physics*, **10**, 2197, (1969).
- [27] G. S. Cargill III, J. Angilello, K. L. Kavanagh, *Physical Review Letters*, **61**, 1748, (1988).
- [28] M.-J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, L. A. Marqués, G. H. Gilmer, *Physical Review B*, **54**, 16683, (1996).
- [29] P. M. Chaikin, T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge 1995 (Cambridge University Press).
- [30] E. Chason, S. T. Picraux, J. M. Poate, J. O. Borland, M. I. Current, T. Diaz de la Rubia, D. J. Eaglesham, O. W. Holland, M. E. Law, C. W. Magee, J. W. Mayer, J. Melngailis, A. F. Tasch, *Journal of Applied Physics*, **81**, 6513, (1997).
- [31] A. Y. Cho, *Material Research Society Bulletin*, **Nr. 4**, 21 (1995).

-
- [32] S. N. Coppersmith, D. S. Fisher, B. I. Halperin, P. A. Lee, W. F. Brinkman, *Physical Review Letters*, **46**, 549, (1981).
- [33] S. N. Coppersmith, D. S. Fisher, B. I. Halperin, P. A. Lee, W. F. Brinkman, *Physical Review B*, **25**, 349, (1982).
- [34] N. E. B. Cowern, K. T. F. Janssen, H. F. F. Jos, *Journal of Applied Physics*, **68**, 6191, (1990).
- [35] A. A. Darhuber, V. Hol'y, P. Schittenhelm, J. Stangl, I. Kegel, Z. Kovats, T. H. Metzger, G. Bauer, G. Abstreiter, G. Grübel, *Physica E*, **2**, 789, (1998).
- [36] P. H. Dederichs, *Physical Review*, **188**, 1175, (1969).
- [37] P. H. Dederichs, *Physical Review B*, **1**, 1306, (1970).
- [38] P. H. Dederichs, *Physical Review B*, **4**, 1041, (1971).
- [39] P. H. Dederichs, *Journal of Physics F: Metal Physics*, **3**, 471, (1973).
- [40] S. Dietrich, H. Wagner, *Physical Review Letters*, **51**, 1469, (1983).
- [41] S. Dietrich, H. Wagner, *Zeitschrift für Physik B*, **56**, 207, (1984).
- [42] S. Dietrich, W. Fenzl, *Physical Review B*, **39**, 8873, (1989).
- [43] H. Dosch, B. W. Batterman, D. C. Wack, *Physical Review Letters*, **56**, 1144, (1986).
- [44] H. Dosch, *Physical Review B*, **35**, 2137, (1987).
- [45] H. Dosch, *Critical Phenomena at Surfaces and Interfaces - Evanescent X-ray and Neutron Scattering*, Berlin u.a. 1992 (Springer).
- [46] C. Duport, P. Nozières, J. Villain, *Physical Review Letters*, **74**, 134, (1995).
- [47] D. J. Eaglesham, P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, J. M. Poate, *Applied Physics Letters*, **65**, 2305, (1994).
- [48] P. Ehrhart, *Journal of Nuclear Materials*, **216**, 170, (1994).
- [49] H. Ekstein, *Physical Review*, **68**, 120, (1945).
- [50] A. Erbil, A. R. Kortan, R. J. Birgeneau, M. S. Dresselhaus, *Physical Review B*, **28**, 6329, (1983).
- [51] A. Erbil, G. S. Cargill III, R. F. Boehme, *Material Research Society Symposium Proceedings*, **41**, 275, (1985).

-
- [52] J. Falta, T. Gog, G. Materlik, B. H. Müller, M. Horn-von Hoegen, *Material Research Society Symposium Proceedings*, **375**, 177, (1995).
- [53] J. Falta, T. Gog, G. Materlik, B. H. Müller, M. Horn-von Hoegen, *Physical Review B*, **51**, 7598, (1995).
- [54] J. Falta, D. Bahr, G. Materlik, B. H. Müller, M. Horn-von Hoegen, *Applied Physics Letters*, **68**, 1394, (1996).
- [55] F. C. Frank, *Philosophical Magazine*, **42**, 809, (1951).
- [56] E. E. Fullerton, I. K. Schuller, H. Vanderstraeten, Y. Bruynseraede, *Physical Review B*, **45**, 9292, (1992).
- [57] P. B. Griffin, M. Cao, P. Vande Voorde, Y. L. Chang, W. M. Greene, *Applied Physics Letters*, **73**, 2986, (1998).
- [58] J. Grim, V. Holý, J. Kubena, A. A. Darhuber, S. Zerlauth, G. Bauer, *Semiconductor Science and Technology*, **14**, 32, (1999).
- [59] S. Grotehans, G. Wallner, E. Burkel, H. Metzger, J. Peisl, H. Wagner, *Physical Review B*, **39**, 8450, (1989).
- [60] J. Harada, *Acta Crystallographica A*, **48**, 764, (1992).
- [61] H.-G. Haubold, *Journal of Applied Crystallography*, **8**, 175, (1975).
- [62] T. E. Haynes, D. J. Eaglesham, P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, D. C. Jacobson, J. M. Poate, *Applied Physics Letters*, **69**, 1376, (1996).
- [63] R. L. Headrick, J.-M. Baribeau, Y. E. Strausser, *Applied Physics Letters*, **66**, 96, (1995).
- [64] P. A. Heiney, P. W. Stephens, R. J. Birgeneau, P. M. Horn, D. E. Moncton, *Physical Review B*, **28**, 6416, (1983).
- [65] W. Helfrich, *Zeitschrift für Naturforschung*, **33a**, 305, (1978).
- [66] J. P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations*, New York u.a. 1968 (McGraw-Hill).
- [67] V. Holý, *Acta Crystallographica A*, **39**, 642, (1983).
- [68] V. Holý, J. Kuběna, I. Ohlídal, K. Lischka, W. Plotz, *Physical Review B*, **47**, 15896, (1993).
- [69] V. Holý, T. Baumbach, *Physical Review B*, **49**, 10668, (1994).

-
- [70] V. Holý, A. A. Darhuber, J. Stangl, G. Bauer, J. F. Nützel, G. Abstreiter, *Il Nuovo Cimento*, **19D**, 419, (1997).
- [71] V. Holý, C. Giannini, L. Tapfer, T. Marschner, W. Stolz, *Physical Review B*, **55**, 9960, (1997).
- [72] J. Hornstra, *Journal of the Physical Chemistry of Solids*, **5**, 129, (1958).
- [73] K. Huang, *Proceedings of the Royal Society*, **A190**, 102, (1947).
- [74] M. B. Huang, T. W. Simpson, I. V. Mitchell, *Applied Physics Letters*, **70**, 1146, (1997).
- [75] R. W. James, *The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays*, Woodbridge, Connecticut 1982 (OxBow Press).
- [76] V. M. Kaganer, S. A. Stepanov, R. Köhler, *Physical Review B*, **52**, 16369, (1995).
- [77] D. Kandel, J. D. Weeks, *Physical Review Letters*, **69**, 3758, (1992); D. Kandel, J. D. Weeks, *Physical Review B*, **49**, 5554, (1994).
- [78] H. Kanzaki, *Journal of the Physical Chemistry of Solids*, **2**, 107, (1957).
- [79] K. Karsten, P. Ehrhart, *Physical Review B*, **51**, 10508, (1995).
- [80] I. Kegel, T. H. Metzger, P. Fratzl, J. Peisl, A. Lorke, J. M. Garcia, P. M. Petroff, *Europhysics Letters*, **45**, 222, (1999).
- [81] H. Kiessig, *Annalen der Physik*, **10**, Nr. 6, 715, (1931); H. Kiessig, *Annalen der Physik*, **10**, Nr. 7, 51, (1931).
- [82] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, New York u.a. 1986 (John Wiley & Sons).
- [83] U. Klemradt, *Charakterisierung epitaktischer GaAs/AlGaAs-Schichtsysteme mittels Streuung harter Röntgenstrahlen unter streifendem Einfall sowie Röntgenbeugung*, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, April 1994.
- [84] I. Koltover, T. Salditt, J. O. Rädler, C. R. Safinya, *Science*, **281**, 78, (1998).
- [85] I. Koltover, T. Salditt, J. Rigaud, C. R. Safinya, *Physical Review Letters*, **81**, 2494, (1998).
- [86] Z. Kovats, T. Salditt, T. H. Metzger, J. Peisl, T. Stimpel, H. Lorenz, J. O. Chu, K. Ismail, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **32**, 359, (1999).
- [87] O. L. Krivanek, D. M. Maher, *Applied Physics Letters*, **32**, 451, (1978).

-
- [88] M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals*, Berlin u.a. 1996 (Springer).
- [89] M. A. Krivoglaz, *Diffuse Scattering of X-Rays and Neutrons by Fluctuations*, Berlin u.a. 1996 (Springer).
- [90] M. Lässig, *Physical Review Letters*, **77**, 526, (1996).
- [91] M. Lässig, <http://alkaid.mpikg-teltow.mpg.de/theory/work/Bunching/> (1999).
- [92] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik IV: Statistische Physik*, Berlin 1979 (Akademie-Verlag).
- [93] B. C. Larson, W. Schmatz, *Physical Review B*, **10**, 2307, (1974).
- [94] B. C. Larson, W. Schmatz, *physica status solidi b*, **99**, 267, (1980).
- [95] D. W. Lawther, U. Myler, P. J. Simpson, P. M. Rousseau, P. B. Griffin, J. D. Plummer, *Applied Physics Letters*, **67**, 3575, (1995).
- [96] M. H. Loretto, *Philosophical Magazine*, **10**, 467, (1964); M. H. Loretto, *Philosophical Magazine*, **12**, 125, (1965).
- [97] W. C. Marra, P. Eisenberger, A. Y. Cho, *Journal of Applied Physics*, **50**, 6927, (1979).
- [98] L. F. Mattheiss, J. R. Patel, *Physical Review B*, **23**, 5384, (1981).
- [99] N. D. Mermin, H. Wagner, *Physical Review Letters*, **17**, 1133, (1966).
- [100] A. E. Michel, W. Rausch, P. A. Ronsheim, R. H. Kastl, *Applied Physics Letters*, **50**, 416, (1987).
- [101] Z. H. Ming, A. Krol, Y. L. Soo, Y. H. Kao, J. S. Park, K. L. Wang, *Physical Review B*, **47**, 16373, (1993).
- [102] S. G. J. Mochrie, A. R. Kortan, R. J. Birgeneau, P. M. Horn, *Zeitschrift für Physik B*, **62**, 79, (1985).
- [103] S. G. J. Mochrie, A. R. Kortan, P. M. Horn, R. J. Birgeneau, *Physical Review Letters*, **58**, 690, (1987).
- [104] S. F. Nelson, K. Ismail, J. J. Nocera, F. F. Fang, E. E. Mendez, B. S. Meyerson, *Applied Physics Letters*, **61**, 64, (1992).
- [105] M. Nemiroff, V. S. Speriosu, *Journal of Applied Physics*, **58**, 3735, (1985).
- [106] L. Nénot, P. Croce, *Revue de Physique appliquée*, **15**, 761, (1980).

-
- [107] D. Y. Noh, K. I. Blum, M. J. Ramstad, R. J. Birgeneau, *Physical Review B*, **44**, 10969, (1991).
- [108] D. Y. Noh, K. I. Blum, M. J. Ramstad, R. J. Birgeneau, *Physical Review B*, **48**, 1612, (1993).
- [109] K. Nordlund, P. Partyka, R. S. Averback, *Material Research Society Symposium Proceedings*, **469**, 199, (1997).
- [110] K. Nordlund, R. S. Averback, *Physical Review B*, **56**, 2421, (1997).
- [111] K. Nordlund, P. Partyka, Y. Zhong, I. K. Robinson, R. S. Averback, P. Ehrhart, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **147**, 399, (1999).
- [112] K. Nordlund, J. Keinonen, M. Ghaly, R. S. Averback, *Nature*, **398**, 49, (1999).
- [113] P. Nozières, *Solids Far From Equilibrium*, Cambridge 1991 (Cambridge University Press).
- [114] R. S. Ohl, *Bell System Technology Journal*, **31**, 104, (1952).
- [115] H. J. Osten, G. Lippert, J. Klatt, *Journal of Vacuum Science and Technology B*, **10**, 1151, (1992).
- [116] K. C. Pandey, A. Erbil, G. S. Cargill III, R. F. Boehme, D. Vanderbilt, *Physical Review Letters*, **61**, 1282, (1988).
- [117] L. G. Parratt, *Physical Review*, **95**, 359, (1954).
- [118] P. J. Partyka, R. S. Averback, K. Nordlund, I. K. Robinson, D. Walko, P. Ehrhart, T. Diaz de la Rubia, M. Tang, *Material Research Society Symposium Proceedings*, **439**, (1996).
- [119] J. R. Patel, A. Authier, *Journal of Applied Physics*, **46**, 118, (1975).
- [120] J. R. Patel, K. A. Jackson, H. Reiss, *Journal of Applied Physics*, **48**, 5279, (1977).
- [121] L. Pelaz, M. Jaraiz, G. H. Gilmer, H.-J. Gossmann, C. S. Rafferty, D. J. Eaglesham, J. M. Poate, *Applied Physics Letters*, **70**, 2285, (1997).
- [122] *Persönliche Mitteilung von Thomas Rupp*, (1995).
- [123] *Persönliche Mitteilung von Hermann Baumgärtner*, (1997).
- [124] *Persönliche Mitteilung von Jim Patel*, (1997).
- [125] *Persönliche Mitteilung von Vaclav Holý*, (1998).

- [126] U. Pietsch, H. Metzger, S. Rugel, B. Jenichen I. K. Robinson, *Journal of Applied Physics*, **74**, 2381, (1993).
- [127] V. L. Pokrovsky, A. L. Talapov, *Physical Review Letters*, **42**, 65, (1979).
- [128] F. A. Ponce, T. Yamashita, S. Hahn, *Applied Physics Letters*, **43**, 1051, (1983).
- [129] V. Privitera, F. Priolo, G. Mannino, S. U. Campisano, A. Carnera, G. Arena, C. Spinella, *Applied Physics Letters*, **71**, 1834, (1997).
- [130] P. R. Pukite, C. S. Lent, P. I. Cohen, *Surface Science*, **161**, 39, (1985).
- [131] R. Pynn, *Physical Review B*, **45**, 602, (1992).
- [132] K. Reichelt, *Forschungszentrum Jülich GmbH, 17. IFF-Ferienkurs - Dünne Schichten und Schichtsysteme*, **27**, (1986).
- [133] H. Rhan, U. Pietsch, *Zeitschrift für Physik B*, **80**, 347, (1990).
- [134] H. Rhan, U. Pietsch, S. Rugel, H. Metzger, J. Peisl, *Journal of Applied Physics*, **74**, 146, (1993).
- [135] H. Rhan, J. Peisl, *Zeitschrift für Physik B*, **100**, 365, (1996).
- [136] F. Rieutord, *Acta Crystallographica A*, **46**, 526, (1990).
- [137] I. K. Robinson, *Physical Review B*, **33**, 3830, (1986).
- [138] I. K. Robinson, W. K. Waskiewicz, R. T. Tung, J. Bohr, *Physical Review Letters*, **57**, 2714, (1986).
- [139] I. K. Robinson, D. J. Tweet, *Reports on the Progress of Physics*, **55**, 599, (1992).
- [140] A. Rodriguez, T. Rodriguez, A. Kling, J. C. Soares, M. F. da Silva, C. Ballesteros, *Journal of Applied Physics*, **82**, 2887, (1997).
- [141] D. Roux, C. R. Safinya, *Journal de Physique, France*, **49**, 307, (1988).
- [142] S. Rugel, G. Wallner, H. Metzger, J. Peisl, *Journal of Applied Crystallography*, **26**, 34, (1993).
- [143] T. Rupp, F. Kaesen, W. Hansch, E. Hammerl, D. J. Gravestijn, R. Schorer, E. Silveira, G. Abstreiter, I. Eisele, *Thin Solid Films*, **294**, 27, (1993).
- [144] T. P. Russell, *Materials Science Reports*, **5**, 171, (1990).
- [145] C. R. Safinya, D. Roux, G. S. Smith, S. K. Sinha, P. Dimon, N. A. Clark, A. M. Bellocq, *Physical Review Letters*, **57**, 2718, (1986).

- [146] C. R. Safinya, E. B. Sirota, D. Roux, G. S. Smith, *Physical Review Letters*, **62**, 1134, (1989).
- [147] T. Salditt, H. Rhan, T. H. Metzger, J. Peisl, R. Schuster, J. P. Kotthaus, *Zeitschrift für Physik B*, **96**, 227, (1994).
- [148] T. Salditt, T. H. Metzger, J. Peisl, X. Jiang, *Journal de Physique III, France*, **4**, 1573, (1994).
- [149] T. Salditt, *Diffuse Röntgenstreuung an rauhen Grenzflächen*, Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München, Juni 1995.
- [150] T. Salditt, T. H. Metzger, J. Peisl, Ch. Morawe, H. Zabel, *Material Research Society Symposium Proceedings*, **355**, 269, (1995).
- [151] T. Salditt, I. Koltover, J. O. Rädler, C. R. Safinya, *Physical Review Letters*, **79**, 2582, (1997).
- [152] T. Salditt, I. Koltover, C. R. Safinya, *Physical Review E*, **58**, 889, (1998).
- [153] A. Schmalzbauer, *Einzeldefekte und Defektkorrelationen in Fe und FeSi nach Tieftemperatur-Bestrahlung mit Elektronen und Neutronen*, Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München, Mai 1991.
- [154] W. Schmatz, P. H. Dederichs, H. Scheuer, *Zeitschrift für Physik*, **270**, 337, (1974).
- [155] T. Schmidt, *Beugung hochenergetischer Synchrotronstrahlung zur Untersuchung von Stapelfehlern und Versetzungsschleifen in getemperten Silizium-Einkristallen*, Dissertation, Universität Hamburg, Dezember 1995.
- [156] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Berlin u.a. 1993 (Springer).
- [157] H. J. Schulz, *Physical Review B*, **22**, 5274, (1980).
- [158] S. K. Sinha, E. B. Sirota, S. Garoff, H. B. Stanley, *Physical Review B*, **38**, 2297, (1988).
- [159] S. Solmi, F. Baruffaldi, R. Canteri, *Journal of Applied Physics*, **69**, 2135, (1991).
- [160] S. Song, S. G. J. Mochrie, *Physical Review B*, **51**, 10068, (1995).
- [161] W. Spirkl, *Journal of Applied Physics*, **74**, 1776, (1993).
- [162] A. J. Steinfert, P. M. L. O. Scholte, A. Etema, F. Tuinstra, M. Nielsen, E. Landemark, D. M. Smilgies, R. Feidenhans'l, G. Falkenberg, L. Seehofer, R. L. Johnson, *Physical Review Letters*, **77**, 2009, (1996).

-
- [163] S. A. Stepanov, R. Köhler, *Journal of Applied Physics*, **76**, 7809, (1994).
- [164] S. A. Stepanov, U. Pietsch, G. T. Baumbach, *Zeitschrift für Physik B*, **96**, 341, (1995).
- [165] F. H. Stillinger, T. A. Weber, *Physical Review B*, **31**, 5262, (1985).
- [166] B. Sutherland, *Physical Review A*, **4**, 2019, (1971).
- [167] S. Takeda, *Japanese Journal of Applied Physics*, **30**, L639, (1991).
- [168] T. Y. Tan, U. Gösele, *Applied Physics Letters*, **39**, 86, (1981).
- [169] J. Tersoff, Y. H. Phang, Zhenyu Zhang, M. G. Lagally, *Physical Review Letters*, **75**, 2730, (1995).
- [170] J. M. Tonnerre, M. Matsuura, G. S. Cargill III, L. W. Hobbs, *Material Research Society Symposium Proceedings*, **209**, 505, (1991).
- [171] H. Trinkaus, *Zeitschrift für angewandte Physik*, **31**, 229, (1971).
- [172] H. Trinkaus, *physica status solidi b*, **51**, 307, (1972).
- [173] H. Trinkaus, *physica status solidi b*, **54**, 209, (1972).
- [174] H. Trinkaus, *Zeitschrift für Naturforschung*, **28a**, 980, (1973).
- [175] L. Vegard, *Zeitschrift für Physik*, **5**, 17, (1921).
- [176] B. Vidal, P. Vincent, *Applied Optics*, **23**, 1794, (1984).
- [177] G. H. Vineyard, *Physical Review B*, **26**, 4146, (1982).
- [178] G. Wallner, C. Landesberger, H. Metzger, J. Peisl, S. Rugel, *physica status solidi a*, **135**, 73, (1993).
- [179] B. E. Warren, *X-Ray Diffraction*, New York 1990 (Dover Publications).
- [180] H. Wenzl, *Forschungszentrum Jülich GmbH, 17. IFF-Ferienkurs - Dünne Schichten und Schichtsysteme*, 71, (1986).
- [181] D. E. Wolf, *Physical Review Letters*, **67**, 1783, (1991).
- [182] W. K. Wu, J. Washburn, *Journal of Applied Physics*, **48**, 3742, (1977).
- [183] Y. Yoneda, *Physical Review*, **131**, 2010, (1963).
- [184] A. Zangwill, *Physics at Surfaces*, Cambridge 1988 (Cambridge University Press).

-
- [185] R. Zaus, *Charakterisierung von III/V-Halbleiter-Heterostrukturen mit hochauflösender Röntgendiffraktometrie*, Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München, September 1992.
- [186] J. Zegenhagen, J. R. Patel, *Physical Review B*, **41**, 5315, (1990).
- [187] J. Zegenhagen, *Surface Science Reports*, **18**, 199, (1993).

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft mit einer Sachbeihilfe (Projekt Nr. PE 127/4-1, PE 127/4-2) ermöglicht. Außerdem wurde sie von der NATO über einen Collaborative Research Grant (SA.5-2-05 - CRG.960376 - New) gefördert und vom Deutschen Akademischen Austauschdienst und der Finnischen Akademie der Wissenschaften durch einen projektbezogenen Personenaustausch (Projekt Nr. 313/SF-PPP 6/98 (D), 45481 (SF)) unterstützt.

Den folgenden Personen, die durch ihre Hilfe zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich meinen herzlichen Dank aussprechen:

Meinem Doktorvater Prof. Dr. J. Peisl danke ich für die Möglichkeit, die Arbeit bei größtmöglicher Freiheit an seinem Lehrstuhl anzufertigen. Sein stetiges, niemals aufdringliches Interesse war sehr hilfreich.

Weiterhin danke ich meinem Betreuer Dr. T. H. Metzger für die unzähligen größeren und kleineren Hilfestellungen, sowie den dadurch erheblichen Anteil am Gelingen dieser Arbeit.

Ein ganz besonderer Dank geht an Thomas Edelmann und meinen fränkischen Landsmann Siegbert Schmid. Mit ihnen als Kollegen habe ich über die Jahre hinweg nicht nur das Büro geteilt. Ohne sie, ihre Hilfe, v.a. aber ihre Solidarität und ihren Zuspruch wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Meinen "Plattenleger-Kollegen" Zoltan Kovats und Wolfgang Sauer bin ich zu großem Dank verpflichtet für ihre menschliche Herzlichkeit und für ihre Unterstützung bei den gemeinsamen Meßzeiten.

Außerdem danke ich Dr. Tim Salditt für die faszinierende Erkenntnis, welche großen Gemeinsamkeiten zwischen Kristallstufen und biologischen Membranen bestehen können. Sein umfassendes physikalisches Verständnis war mir eine große Hilfe.

Dr. J. Patel danke ich für sein unermüdliches Interesse an der defektinduzierten Streuung, sowie für die Beschaffung der Bor-dotierten Probensysteme. Seine unschätzbaren und reichhaltigen Verbindungen zu fast allen auf diesem Gebiet tätigen Wissenschaftlern haben sich als äußerst hilfreich erwiesen.

Mein großer und besonders herzlicher Dank geht an Prof. Dr. Vaclav Holý. Er ist der theoretische Mentor dieser Arbeit. Sein umfangreiches und tiefgehendes Wissen war die Basis für den Erfolg der Datenauswertung. Sein engagiertes Interesse, die fruchtbaren Diskussionen und die Überlassung von Simulationsprogrammen waren von unschätzbarem Wert. Gerne werde ich seine Besuche in München, sowie die Gastfreundschaft in seinem Institut in Brno in Erinnerung behalten.

Weiterhin danke ich Dr. Kai Nordlund für die Einführung in die atomistischen Simulationen. Seine Besuche in Deutschland waren Modell-Beispiele für eine fruchtbare europäische Zusammenarbeit, die wir auch jedesmal über die Physik hinaus auf die kulinarische Ebene ausdehnen konnten.

Dankbar bin ich meinen Studenten Jürgen Volz und besonders Robert Beikler für ihren großen Einsatz und für die erfreuliche Zusammenarbeit.

Bei Georg Landmesser, Christian Münster und den siamesischen Zwillingen A. und T. Plech bedanke ich mich für die sympathische Atmosphäre der Zusammenarbeit.

Ein herzlicher Dank geht an Christoph Singer für die Lösung der vielen kleinen und großen technischen Probleme, v.a. für diejenigen, die an den Computern im Microsoft-Universum auftauchen, weil dort nur ein Experte mit tiefem Einblick in das an sich fehlerhafte System weiterhelfen kann.

Außerdem danke ich recht herzlich Reinhard Satzkowski, der immer zuverlässig und perfekt für den Transport der experimentellen Ausrüstung bei den deutschen und europäischen Meßreisen gesorgt hat. Besonders seine Bereitschaft zu vielen Wochenendfahrten war für die Terminplanung sehr hilfreich.

Weiterhin danke ich Stefan Manus und den Mitarbeitern der Werkstatt für schnelle und oftmals unbürokratische Hilfestellungen, letzteren aber auch für die Einsicht in die Macht der Trägheitskraft.

Dr. Robert Feidenhans'l, Dr. Wolfgang Caliebe, Oliver Bunk, Dr. J. Falta und Dr. H. Rhan bin ich zu Dank verpflichtet für ihre Unterstützung während der Meßzeiten am HASYLAB.

Außerdem danke ich Dr. Gerhard Grübel für seine auch nächtliche Hilfe während der Messungen an der ESRF.

I would like to thank Dr. S. Brennan and Dr. Annelie Munkholm for their help and assistance during the beamtimes at Stanford. They enabled us to achieve useful results even at SSRL.

My special thanks are for Dr. Chang-Hwan Chang not only for his help and assistance during beamtimes at ESRF and SSRL. He also introduced me to his family and thus showed me how a Corean life in the USA looks like.

Für die Überlassung und Bearbeitung von Proben danke ich der Forschungsabteilung der Firma Intel - Santa Clara, USA, Dr. Jan Vanhellemont von Wacker Chemitronic - Burghausen, Prof. Dr. Ignaz Eisele, Prof. Dr. Hermann Baumgärtner und Dr. Thomas Rupp von der Universität der Bundeswehr - München und Dr. Peter Hinze von der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt - Braunschweig.

Für die Hilfe und Ermunterung in der Anfangsphase danke ich Dr. Harald Reichert, Dr. Markus Binder und Dr. Ping Yang.

Dankbar bin ich auch Dr. Khalid Haj-Yahja. Von ihm habe ich gelernt, welche überragende Bedeutung den Eigenschaften Durchhaltewillen und Stehvermögen im Wissenschaftsbetrieb zukommt.

Unserem Hausmeister Manfred Reithmeier sowie den Putzfrauen danke ich für die Einsicht in die wahren Macht- und Autoritätsverhältnisse an der Universität.

Für ihre zuverlässige Hilfsbereitschaft danke ich unserer langjährigen Sekretärin Frau Margarete Rüter-Stimpfle.

Schließlich danke ich allen, die mir mit ihrer menschlichen Wärme geholfen haben die Zeit des nuklearen Winters zu überstehen.

LEBENS LAUF

Name Udo Wolfgang Ludwig Beck

Anschrift Karl-Richter-Str. 1
80939 München

Geburtsdatum/-ort 07.07.1967 in Kulmbach

Staatsangehörigkeit deutsch

Familienstand ledig

Eltern Arno Georg Beck
Hildegard Beck, geb. Stutz

Ausbildung

Schulbildung
1974 – 1978 Grundschule in Kulmbach-Ziegelhütten
1978 – 1987 Markgraf-Georg-Friedrich-Gymnasium
in Kulmbach
Abschluß: Abitur

Wehrdienst
1987 — 1988 Panzergrenadierbataillon 102 in Bayreuth

Hochschulstudium
1988 – 1991 Physik an der Ludwig-Maximilians-Universität München
1991 – 1992 Visiting Student, University of Oxford, GB
1992 – 1995 Physik an der Ludwig-Maximilians-Universität München
Abschluß: Diplom-Physiker

seit Juni 1995 Dissertation in Experimentalphysik
am Institut für Röntgen- und Neutronenstreuung
von Prof. Dr. J. Peisl
an der Sektion Physik der
Ludwig-Maximilians-Universität München
gefördert von der Deutschen Forschungsgemeinschaft
und der NATO