

Der Anwendungsbereich: Eine Einführung

Dokumentversion:

v2.1	13.08.2001
v2.2	29.10.2001: vielfältige Detailüberarbeitung
v2.3	20.03.2002: strukturelle Überarbeitung
v2.4	06.08.2002: gerinfügige inhaltliche Überarbeitung
v2.5	14.01.2003: strukturelle und inhaltliche Überarbeitung
v2.6	29.04.2005: kleinere Korrekturen
v2.7	12.05.2006: kleinere Korrekturen
v2.8	10.11.2006: kleinere Korrekturen

Autor:

U. Sacklowski

Diese Übersicht existiert auch als pdf-Datei ([.pdf](#), 0,71 MB)

Inhalt:

1. [Einleitung](#)
2. [Grundlagen](#)
 - 2.1 [Physikalische Grundlagen](#)
 - 2.2 [Technische Grundlagen](#)
3. [Messplätze, Messverfahren, Anwendungsfälle und Gesamtvorgänge \(Szenarien\)](#)
 - 3.1 [Topographie: Messplatz und -Verfahren](#)
 - 3.2 [Diffraktometrie und Reflektometrie: Messplatz und -Verfahren](#)
 - 3.3 [Anwendungsfälle](#)
 - 3.4 [Gesamtvorgänge \(Szenarien\)](#)

1. Einleitung

Am Institut für Physik der HU-Berlin werden in der Arbeitsgruppe "Röntgenbeugung an Schichtsystemen" unter Prof. Köhler kristalline Strukturen von Halbleitern untersucht.

Dafür sind ca. zehn Labor-Messplätze vorhanden, die je nach Ausstattung und Messverfahren unterschiedliche Kristalleigenschaften von Halbleiter-Kristallen untersuchen. An Messverfahren werden die Topographie, die Diffraktometrie und die Reflektometrie durchgeführt.

Grundlage dieser Messverfahren ist die Beugung elektromagnetischer Strahlung an den einzelnen Bausteinen des zu untersuchenden Kristalles (Atome, Ionen oder Moleküle). (Zu den Begriffen Beugung, Brechung und Reflexion siehe > Übersicht > Glossar.) Die gebeugte Strahlung wird anschließend erfasst (z.B. durch einen Detektor oder einen Film) und ausgewertet. Da hierbei die Wellenlänge der Strahlung kleiner als der Abstand

der Kristallbausteine sein muss (Aussage der Wellenoptik), wird Röntgenstrahlung verwendet. Des Weiteren ist es erforderlich, dass die Wellen des Röntgenlichtes, welche auf die Probe fallen, parallel und von einer Wellenlänge (monochromatisch) sind und die Breite des Strahls etwa der des zu untersuchenden Kristallbereiches entspricht.

Parallelität und Breite werden mit einem zusätzlichen Kristall erreicht, dem sogenannten Kollimator (kollimieren: parallelisieren, auffächern), Monochromie durch den Kollimator und dem Abstand zum zu untersuchenden Kristall.

Ein Schema für einen Topographie-Messplatz zeigt Abb. 1.1. (Die meisten darin enthaltenen Elemente sind auch Bestandteile der anderen Messplätze.) Darin wird der von einer Röntgenquelle ausgehende Röntgenstrahl (Primärstrahl) durch einen Kollimator kollimiert und trifft auf den auf dem Probenhalter liegenden Kristall (Probe). Hierin wird die Röntgenstrahlung gebeugt und trifft als gebeugte Strahlung auf das Erfassungsmedium (hier Film). Der zusätzliche Kontrolldetektor ist topographie-spezifisch. Probenhalter und Kollimator sind durch Motoren bewegbar.

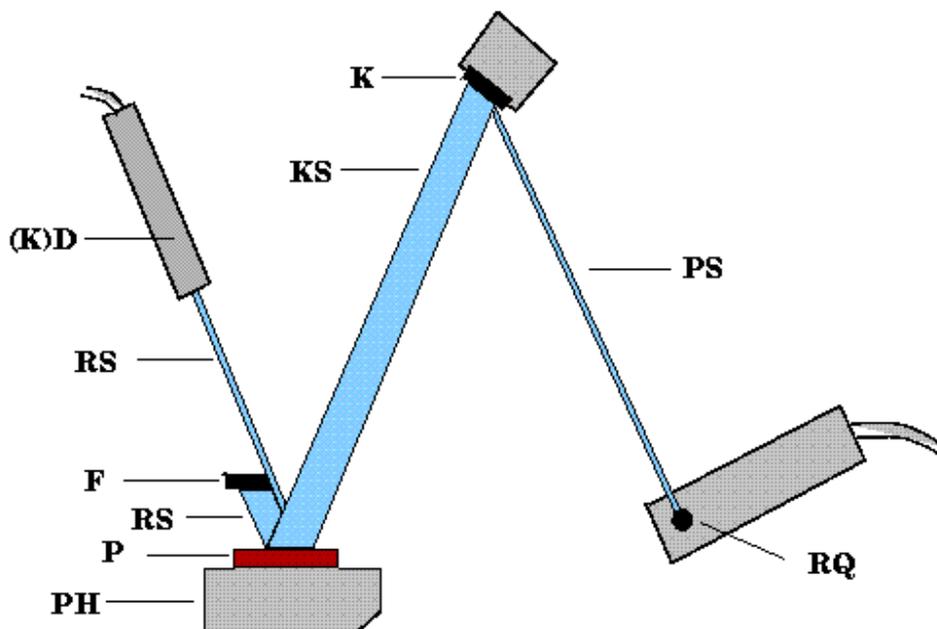


Abb. 1.1: Schema der Zwei-Kristall-Topographiekamera

RQ: Röntgenquelle, PS: Primärstrahl, K: Kollimator

KS: kollimierter Strahl, PH: Probenhalter, P: Probe

RS: reflektierter Strahl, F: Fotoplatte, (K)D: (Kontroll-)Detektor

Jeder Messplatz ist mit einem PC verbunden. Die darauf laufende Software (XCTL-System; **C**ontrol mittels **X**-Strahlung) dient u.a.:

- der Ansteuerung und Koordinierung der Motoren, Detektoren und Kollimatoren zwecks Justage der Messanlage und der Kontrolle des Messvorganges,
- der Erfassung und Transformation der Messdaten.

Eingesetzt werden die programmgesteuerten Messplätze innerhalb der Praktika im Physik-Hauptstudium und zur Analyse von Halbleiterkristallen unterschiedlichster Partner.

In den folgenden Kapiteln werden, ausgehend von den physikalischen und den technischen Grundlagen (Kap. 2), die Vorgänge am Messplatz beschrieben (Kap. 3).

2. Grundlagen

2.1 Physikalische Grundlagen

a) Kristall: Grundlagen

Kristalle zeichnen sich durch eine regelmäßige Anordnung der **Kristallbausteine (Gitterbausteine)** aus. Dies können Atome, Ionen oder Moleküle sein. Die Geometrie der Bausteinanordnung kann vielfältig sein (kubisch, tetragonal, ...). Der Einfachheit halber werden nachfolgend nur kubische Kristalle behandelt und hier auch nur die sogenannten primitiv-kubischen. Hier kann man sich den Kristall als Aneinanderreihung einzelner Würfel vorstellen an deren Ecken die Bausteine liegen. Ein solcher Würfel wird als **Elementarzelle** bezeichnet und seine drei Seiten werden durch **Basisvektoren** beschrieben. Die Beträge der Basisvektoren sind die **Gitterkonstanten**.

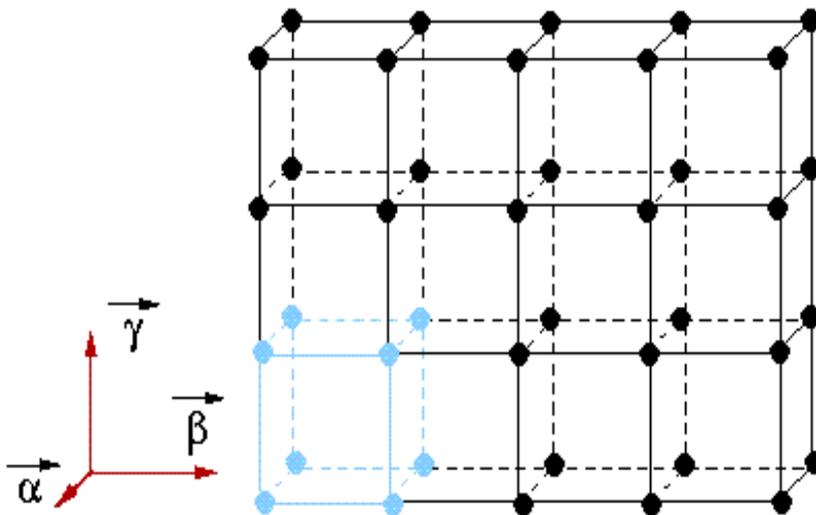


Abb. 2.1 : Primitiv-kubischer Kristall mit Elementarzelle und den drei Basisvektoren

Netzebenen sind ein weiterer wichtiger Begriff. Es sind gedachte durch die Gitterbausteine verlaufene Ebenen. (Allgemein: eine Netzebene wird definiert durch Abschnitte von Vielfachen der Basisvektoren an den durch die Basisvektoren definierten Achsen). Abb. 2.2 zeigt drei unterschiedliche Lagen von Netzebenen. Diese Lagen werden durch Indizes beschrieben. Einfach ist ihre Bestimmung durch die Angabe der Indizes m, n, o . Weitere Netzebenen mit der gleichen Lage (äquivalente Netzebenen) ergeben sich dabei durch pm, pn, po (p : ganze Zahl).

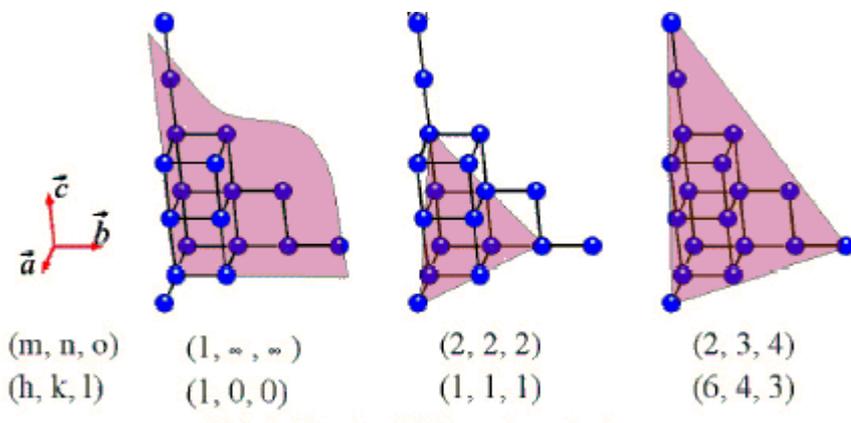


Abb. 2.2: Beispiele für Netzebenen, beschrieben mit den Indizes m, n, o und den Millerschen Indizes h, k, l

Ungünstig sind die Indizes m, n, o , weil hier die Zahl 'unendlich' möglich ist. Deshalb beschreibt man Netzebenen mit den **Millerschen Indizes** h, k, l .

Berechnungsvorschrift für h, k, l :

1. Bildung der Kehrwerte $1/m, 1/n, 1/o$.
2. Sind dies ganze Zahlen, so sind dies bereits die Millerschen Indizes h, k, l .
3. Kehrwerte sind keine ganzen Zahlen: Aus diesen Kehrwerten die Ableitung der kleinst möglichen ganzen Zahlen unter Wahrung des Verhältnisses, wie es zwischen den Kehrwerten galt.

Bsp.:

- m, n, o : 2, 3, 4.
- Kehrwerte: $1/2, 1/3, 1/4$ (keine ganzen Zahlen)
- h, k, l : 6, 4, 3 (kleinst mögliche ganze Zahlen mit gleichen Verhältnissen, wie zwischen den Kehrwerten)

Berechnung:

$\text{kgV}(2,3,4) = 12$; Multiplikation der Kehrwerte mit diesem kgV.

Die Millerschen Indizes sind dann auch die Basis für den **reziproken Raum**, der für die Physiker Grundlage bei der Kristallanalyse ist, hier jedoch nicht weiter beschrieben wird.

Die **Gitterkonstante** der zu untersuchenden Kristalle liegt gewöhnlich bei etwa 0,5 nm.

b) Röntgenbeugung und Bragg-Reflexion

Röntgenbeugung und Bragg-Reflexion sind Grundlagen für ein Verständnis der Messverfahren. Sie sind für den **Kollimator** und die **Messproben** relevant.

Die einfallenden Strahlen werden an den Netzebenen des Kristalls gebeugt (Kollimator und Messprobe). Dabei gilt Einfallswinkel = Ausfallswinkel. Verändert man nun den Einfallswinkel, so stellt man Schwankungen in der Intensität der gebeugten Strahlung fest. Dies liegt an der Wellennatur der gebeugten Röntgenstrahlung und den Interferenzerscheinungen zwischen diesen Wellen. Bei bestimmten Einfallsrichtungen stellt man Maxima fest. Hier

addieren sich die gebeugten Wellen, - sie **interferieren konstruktiv** miteinander. Konstruktive Interferenz findet dann statt, wenn der Gangunterschied der zwischen benachbarten Netzebenen gebeugten Röntgen-Wellen ein Vielfaches der Wellenlänge beträgt (**Konstruktive Interferenz, Positive Interferenz**).

Abb. 2.3 veranschaulicht den Verlauf zweier gebeugter Röntgenstrahlen in einem Kristall (Einfall von links). Der Gangunterschied zwischen den beiden Strahlen entspricht der Strecke (AX + XB) und ist gleich $2d\sin\Theta$.

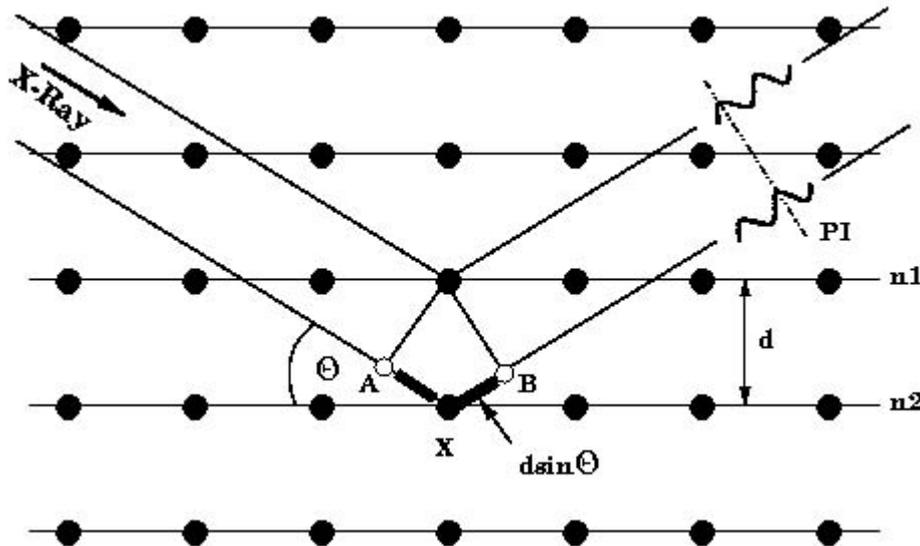


Abb. 2.3: Beugung von Röntgenstrahlung an Netzebenen eines Kristalls
 Θ : Einfallswinkel
 d : Gitterkonstante
 n : Netzebene
PI: Positive Interferenz

(Beugung an nur zwei Netzebenen würde zu kaum messbarer Röntgenstrahlung führen. Hierfür ist die Beugung an einer ganzen Schar von Netzebenen nötig.)

Bragg fasste diese Größen in der **Bragg-Gleichung** zusammen:

$$2d \sin\Theta = n\lambda$$

mit d : Gitterkonstante, Θ : Einfallswinkel, n : Netzebene mit $n=1, 2, 3, \dots$, λ : Wellenlänge

Kommt es zu maximaler Reflexion, spricht man vom **Bragg-Reflex**.

Stellt man nun eine Messprobe auf den Bragg-Reflex (was Aufgabe zu Beginn einer jeden Messung im Rahmen der Justage ist) und dreht sie minimal in die eine oder in die andere Richtung, so entsteht eine typische Kurve für die gebeugte Röntgenstrahl-Intensität, die sogenannte '**Rockingkurve**'. Wichtige physikalische Parameter sind dort der Bragg-Reflex (Pik), die Halbwertsbreite (Breite bei 50% der Maximalintensität) und der Arbeitspunkt. Letzterer ist bspw. als Bezugspunkt für die Topographie (Pkt. 3.1) wichtig.

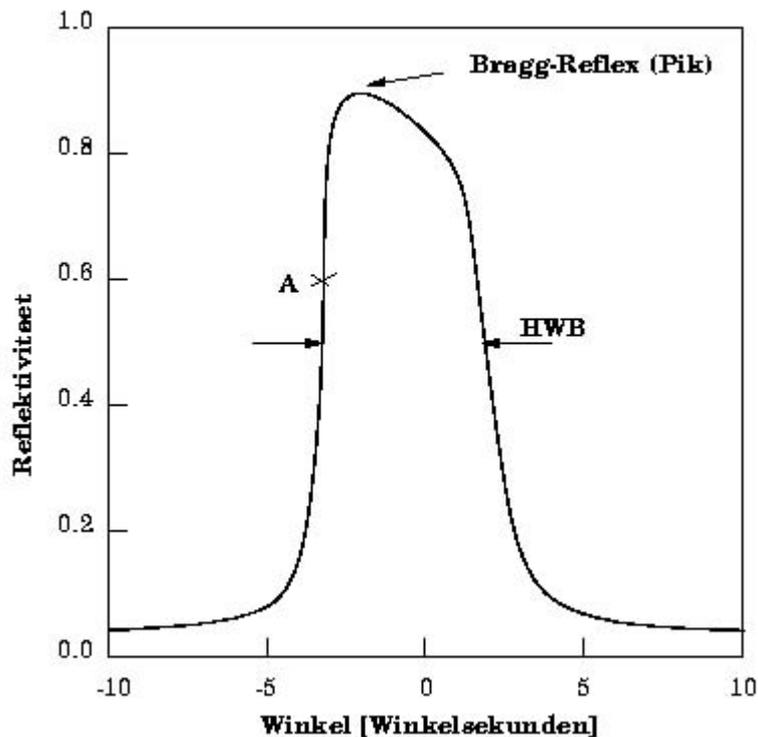


Abb. 2.4: Rockingkurve

HWB: Halbwertsbreite

A: Arbeitspunkt, hier z.B. bei -60%

c) Netzebenen

Netzebenen, wie sie in Abb. 2.3 zu sehen sind, liegen parallel zur Oberfläche des Kristalls. Haben wir jedoch einen Fehlschnitt des Kristalls, liegen diese nicht parallel zur Oberfläche, sondern weichen hiervon ab.

Untersucht werden Netzebenen unterschiedlicher Orientierung, z.B. solche, die bei 17, 30 oder 90 Grad gegenüber der Oberfläche liegen. Denkt man sich nun noch den Kristall dreidimensional, so gibt es eine Vielzahl von Netzebenen, die schließlich als Ausgangspunkt für die Messung ausgewählt werden können.

d) Röntgenquelle

In der Einleitung wurde ausgeführt, warum zur Untersuchung der kristallinen Struktur Röntgenstrahlung verwendet werden muss.

Hinweis: Nachfolgende Ausführungen zur Röntgenquelle sind sehr physikalisch und können als erstes übergangen werden.

In der Röntgenröhre treffen Elektronen e auf die Anode. Verwendet wird Kupfer (Cu) als Anodenmaterial. Im Ergebnis wird Röntgenstrahlung emittiert als:

- Bremsstrahlung: abgebremste e geben Röntgenstrahlung in breitem Spektrum ab -> weiße Strahlung
- Charakteristische Strahlung: Rumpfelektronen e (K-Schale) der Cu-Atome werden aus dem Elektronenverband herausgeschlagen. Das anschließende Auffüllen des Lochs in der K-Schale durch energetisch höherliegende

Elektronen führt zur Emission von Röntgenstrahlung. Da das emittierte Energiespektrum vom Anodenmaterial bestimmt wird, spricht man von charakteristischer Strahlung.

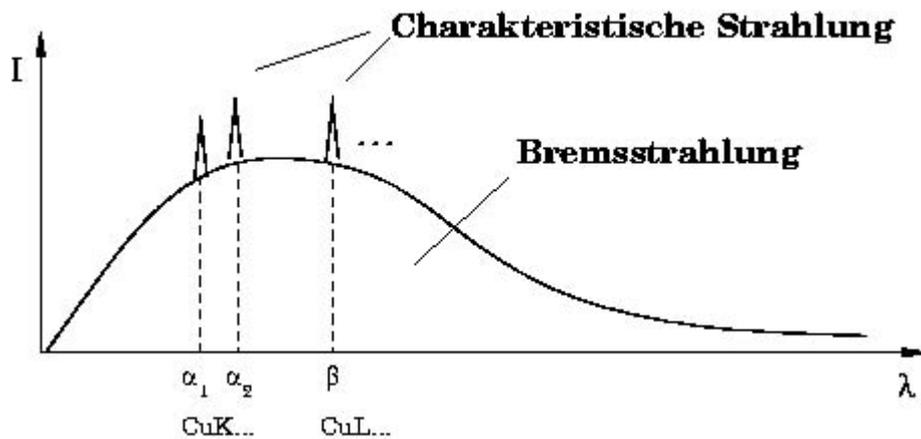


Abb. 2.5: Röntgenstrahlung der Röntgenquelle (Bsp.: Cu-Anode)

Die von der Anode emittierte weiße Strahlung ist für die Diffraktometrie, Reflektometrie und Topographie zunächst nicht geeignet. Sie muss parallel, aufgefächert und monochromatisch sein. Die **Parallelisierung** bewirkt der Kollimator (bzw. eine Kombination von Kollimatoren).

Erreichung der **Monochromatie**: Röntgenlicht unterschiedlicher Wellenlänge wird vom Kollimatkristall in unterschiedliche Richtungen gestreut. Bei genügend großem Abstand zwischen dem Kollimator und der Probe wird dann genau eine Wellenlänge durch einen geeignet schmalen Spalt herausgegriffen. Durch Kollimatkombinationen kann dies auch sofort erreicht werden. Letztere kommen bei der Diffraktometrie/Reflektometrie zum Einsatz.

Wird ein sogenannter asymmetrischer Kollimator (d.h. flacher Eintritt, steiler Ausfall) verwendet, wird zudem eine räumliche Verbreiterung (**Auffächerung**) des Röntgenstrahls (wichtig für die Topographie) erreicht.

Aus der Charakteristischen Strahlung wird die Wellenlänge CuK alpha 1 herausgefiltert (etwa 0,154 nm), die beim Rücksprung eines Elektrons von der L-Schale auf die K-Schale des Cu-Atoms entsteht.

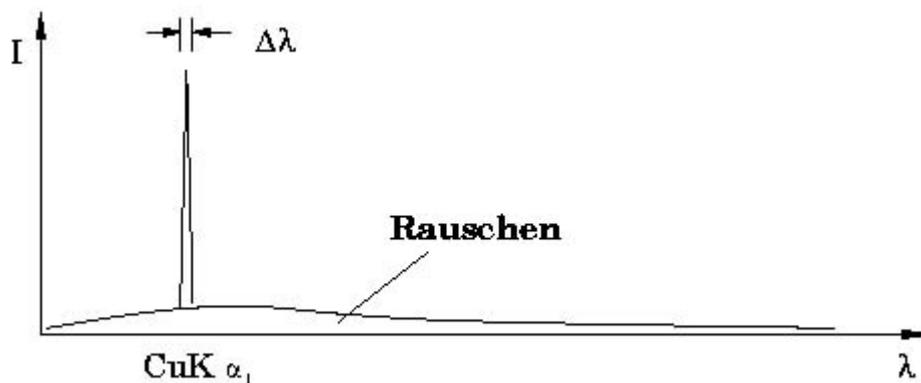


Abb. 2.6: Röntgenstrahlung nach dem Kollimator (Bep.: Cu-Anode)

2.2 Technische Grundlagen

a) Rechner

Nachfolgende Tabelle gibt eine Übersicht über die an den Messplätzen eingesetzten Rechner (Stand: 2001).

PC	Nutzer/Projekt.....	Prozessor.....	Memory	HDisk	Controller	Motor- Karte
x-ray7	PC RTK7 (Mhling)	i 486 DX 33MHz	4MB	152MB	SCSI	?
x-ray8	PC RTK3(Mini2)	i 486 DX 33MHz	8MB	203MB	AT	?
x-ray6	PC RTK4 (Frank)	i Pentium 66MHz	32MB	2100MB	SCSI NCR (on Bord)	?
Grenoble	PC RTK Grenoble	i 486 DX2 66MHz	8MB	406MB	EIDE/VL DC 2000 PromiseTech	?
HRM1		486 DX2	20MB	1000MB		1x C832 1x C812
HRM2		486 DX	8MB	200 MB		1x C832 1x C812
ESRF		486 DX	8MB	??		1x C832 1x C812

Weitere Messplätze:

AFM(Atomkraftmikroskop):

Pentium 100 (kein MMX)

32 MB RAM

1000 MB IDE HD

S3 Grafik on Board

Motorsteuerungskarte 1x C832

XY-Tisch mit Mikedrivantrieben

Betriebssystem IBM PCDOS 7.0 + Windows 3.11

Offline Messplatz (Digitalisierung von Bilddaten):

mit Kugelumlaufspindeln und Antrieb über Faulhaber DC-
Motorgetriebekombination

Motorsteuerungskarte 1x C832

AMD K5 PR100

2GB IDE HD

48MB RAM

PCI-Framegrabber Matrox Pulsar (monochromer Universalframegrabber mit
MGA Grafik)

mit RS422 Digitalinterface

Betriebssystem Win NT4.0SP4 (notwendig wegen 32-bit
Framegrabbersoftware)

b) Detektoren

Um Röntgenstrahlung quantitativ nachweisen zu können, werden verschiedene Detektoren eingesetzt. Es werden drei Klassen unterschieden:

1.) Nulldimensionale Detektoren

Charakteristisches Merkmal dieser Geräteklasse ist der Nachweis von Röntgenquanten (Photonen) auf einer bestimmten Querschnittsfläche (Detektoreintrittsfläche). Ergebnis einer Messung ist ein Wertepaar (Impulse, Zeit), das die Zählrate für die Querschnittsfläche angibt.

Typen dieser Detektorklasse sind bspw. die Zählrohre und die Szintillationszähler. Ein Vertreter für einen Szintillationszähler ist der Radicon SCSCS (Scintillation Counter Single-Channel Spectrometer).

2.) Eindimensional ortsauflösende Detektoren

Diese Detektoren weisen Einzelphotonen ähnlich den 0-dimensionalen Geräten auf einer bestimmten Querschnittsfläche (Detektoreintrittsfläche) nach. Hierbei ist diese Fläche jedoch in einer Richtung in einzelne Abschnitte (Kanäle) unterteilt, die alle für sich die Photonen zählen. Somit ergibt jede Messung so viele Impulswerte, wie Kanäle existieren (1-dimensionales Feld von Impulswerten).

Eine typische Kanalanzahl ist 2000, was eine Breite von jeweils ca. 0.080-0.180 mm ergibt. Ein Vertreter ist der PSD (Position Sensitive Detector) von Braun.

Die prinzipielle Wirkungsweise zeigt Abb. 2.7.

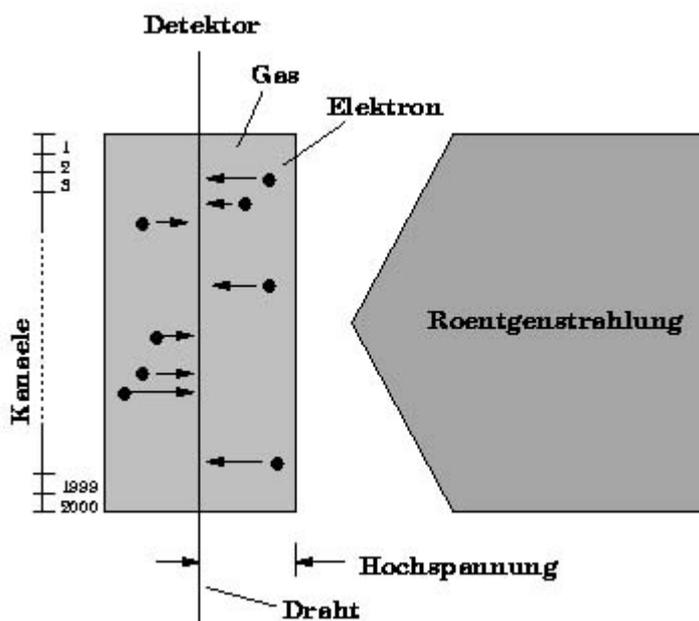


Abb. 2.7: Eindimensional auflösender Detektor mit Kanälen
Im durch die Röntgenstrahlung ionisierten Gas entstehen

Elektronen, die infolge angelegter Hochspannung zum Draht wandern und dort abgeführt werden.
Der Draht hat hier eine Ortsauflösung von 2000 Kanälen (Abschnitten).

3.) Zweidimensional ortsauflösende Detektoren

Zweidimensionale Detektoren erfassen Intensitäten in zwei Raum-Dimensionen. Eine Messung liefert ein 2-dimensionales Feld von Impulswerten.

Die Einbindung war ursprünglich angedacht, wurde jedoch später seitens der Physiker fallen gelassen.

Aus Sicht der PC-Welt sind die Detektoren "externe" Geräte, die über eine geeignete Schnittstellenkarte betrieben werden. Schnittstellenkarten gehören in der Regel zum Lieferumfang der Detektoren.

c) Motoren

Jeder Messplatz verfügt über eine größere Anzahl von Motoren, die u.a. für die Bewegung des Probenhalters, des Kollimators und des Detektors verantwortlich sind. Diese Motoren sind hochpräzise und gestatten geringste Bewegungen. So sind die minimalsten

Drehbewegungen: 1 / 180 000 Grad (bzw. 0,02 Bogensekunden)

Linearbewegungen: 0,0012 mm

Die meisten Motoren sind für die Bewegung des Probenhalters mit der Probe erforderlich. Nachfolgende Abbildungen 2.8 und 2.9 zeigen Probenhalter an Messplätzen für die Topographie (4 Motoren) und die Diffraktometrie/Reflektometrie (6 Motoren). Die Dreh-Freiheitsgrade werden dabei unterschiedlich bezeichnet.

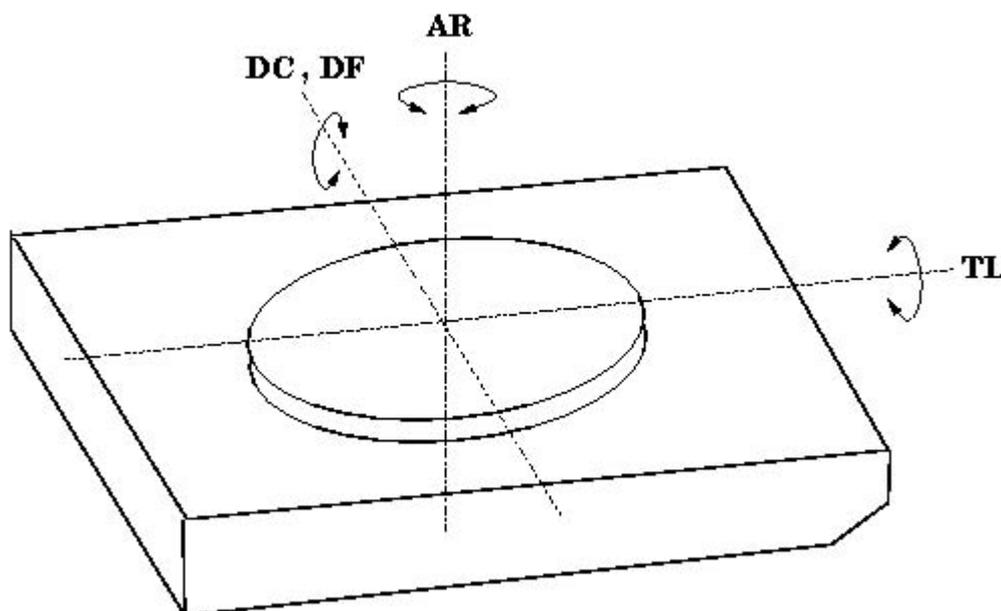


Abb. 2.8: Freiheitsgrade der Probe bei der Topographie (Probe auf dem Probenhalter liegend.)

DC diffraction angle coarse, Beugung grob

DF diffraction angle fine, Beugung fein

AR azimuthal rotation, Azimutale Rotation

TL tilt, Tilt

Bewegungen von DC und DF belassen den Strahl in der Ebene: Kollimator, Probe, Detektor/Photoplatte

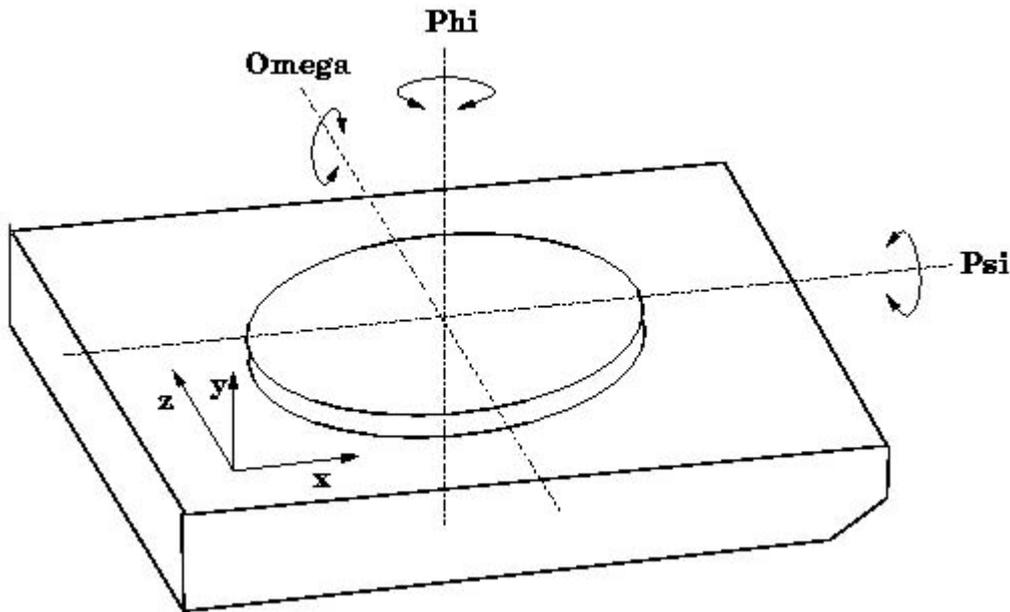


Abb. 2.9: Freiheitsgrade der Probe bei der Diffraktometrie/Reflektometrie (Probe auf dem Probenhalter liegend.)

Omega, Phi, Psi: Dreh-Freiheitsgrade

x, y, z: Translations-Freiheitsgrade

Bewegungen von Omega belassen den Strahl in der Ebene: Kollimator, Probe, Detektor.

(Für Omega wird teilweise auch die Bezeichnung Theta genommen.)

Aus Sicht der PC-Welt sind die Motoren "externe" Geräte, die über eine geeignete Schnittstellenkarte betrieben werden. Schnittstellenkarten gehören in der Regel zum Lieferumfang der Motoren. Unterstützt werden gegenwärtig die Motoren C-812 und C-832. Gewünscht ist zusätzlich die Unterstützung des C-844-Motors.

d) PC und Peripherie

Den prinzipiellen Aufbau eines Messplatzes mit seinem PC und seiner Peripherie zeigt das folgende Blockschaltbild.

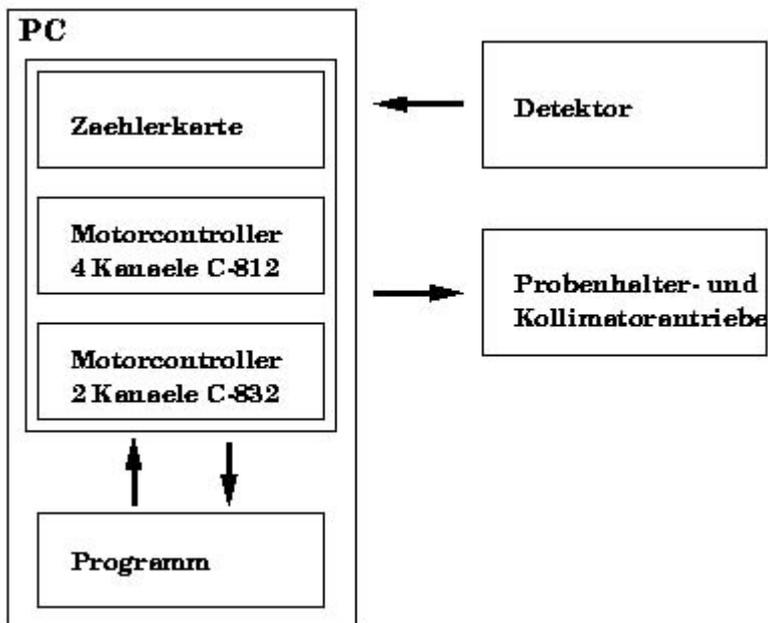


Abb. 2.10: Schema eines Messplatzes mit PC (Hardware und Programm) und Peripherie

3. Messplätze, Messverfahren, Anwendungsfälle und Gesamtvorgänge (Szenarien)

In diesem Kapitel werden etwas ausführlicher die **Messplätze** und **Messverfahren** unter Einbeziehung der Software (XCTL-System) beschrieben.

An Messverfahren gibt es die Topographie, die Diffraktometrie und die Reflektometrie. Sie sind spezielle **Anwendungsfälle** (Use-Cases entsprechend der OO-Philosophie) des XCTL-Systems. Weitere Anwendungsfälle werden in Pkt. 3.3 genannt.

Bei der praktischen Arbeit an einem Messplatz kommen einzelne isolierte Anwendungsfälle (im Sinne von Use-Cases bei der Objektorientierten Entwicklung) kaum zum Einsatz. Sie werden zu **Gesamtvorgängen (Szenarien)** zusammengefügt. Ein solcher Gesamtvorgang setzt sich zusätzlich dann neben einer Auswahl von XCTL-Anwendungsfällen auch noch aus manuellen Aufgaben zusammen. Ein solches Szenario wird in Pkt. 3.4 beschrieben.

Charakterisierung der Messverfahren:

Röntgen-Topographie:

Untersuchung eines größeren Kristallvolumens (ca. 1 cm x 1cm Fläche und bis max. 100000 Kristall-Netzebenen in die Tiefe, was etwa nur 0,05 mm sind). Das Ergebnis ist ein Bild (z.B. Foto), welches Aussagen über Abweichungen dieses Kristallbereiches von der idealen Kristallstruktur gestattet. Die Messprobe wird hierbei über Stunden in unveränderter Orientierung gehalten.

Röntgen-**Diffraktometrie**:

Untersuchung einzelner Netzebenen im Kristall. Das Ergebnis sind durch Detektoren gemessene Diffraktometriekurven (Bild im 'reziproken Raum'), die Aussagen zur Spannungsverteilung innerhalb des Kristalls (Messung atomarer Verschiebungen), sowie der Elektronendichteverteilung ('Strukturfaktor') zulassen.

Röntgen-**Reflektometrie**:

Untersuchung der Ober- und Grenzflächen in einem Kristall-Schichtsystem. Das Ergebnis sind durch Detektoren gemessene Reflektometriekurven, die genaue Aussagen zu Schichtdicken und Ober/Grenzflächenrauheiten **chemisch** unterschiedlicher Schichten zulassen.

Sowohl bei der Diffraktometrie, als auch bei der Reflektometrie, wird die Messprobe um eine definierte Achse gedreht. Der Unterschied zwischen beiden Methoden ergibt sich durch den unterschiedlichen Einfallswinkel der Röntgenstrahlung (Reflektometrie: 0 - 3 Grad und damit spiegelnde **Reflexion** der Röntgenstrahlung an den Grenzflächen und der Oberfläche; Diffraktometrie: > 5 Grad und damit **Beugung** der Röntgenstrahlung an den Netzebenen. Übergangsbereich: 3 - 5 Grad).

3.1 Topographie: Messplatz und -Verfahren

Das Ziel der Topographie besteht in der Erfassung der Kristall-Realstruktur einer Messprobe auf einer Fotoplatte, einem Film oder einem 2D-Detektor. Das erfasste Kristall-Raumsegment hat eine Fläche von etwa 1 cm x 1 cm und eine Tiefe von max. 50 Mikrometern. Diese Tiefe entspricht etwa 10^5 Netzebenen. (Die Eindringtiefe hängt vom Einfallswinkel ab, - je steiler, desto tiefer.)

Messprinzip der Topographie, - hierbei bezugnehmend auf das Messplatzschema aus Abb. 1.1:

Ein Kollimatkristall erzeugt aus dem von der Röntgenröhre ausgehenden schmalen Strahlenbündel durch Braggreflexion ein paralleles und breit aufgefächertes (kollimiertes) und monochromatisches Strahlenbündel. Dieses trifft in einem bestimmten Winkel auf die Messprobe. Von ihr erhält man durch Bragg-Reflexion ein Abbild, wenn lokal für jeden Punkt der Probe die Bragg-Bedingung erfüllt ist. Der Erfassung des Abbildes dient eine Fotoplatte, ein Film oder ein 2D-Detektor, die/der in den gebeugten Strahl gebracht wird. Abweichungen von der Idealstruktur führen zu Abweichungen von der Bragg-Bedingung und damit zu einer kontrastreichen Abbildung, die der Realstruktur der Probe entspricht. Ein Beispiel hierzu zeigt Abb. 3.2.

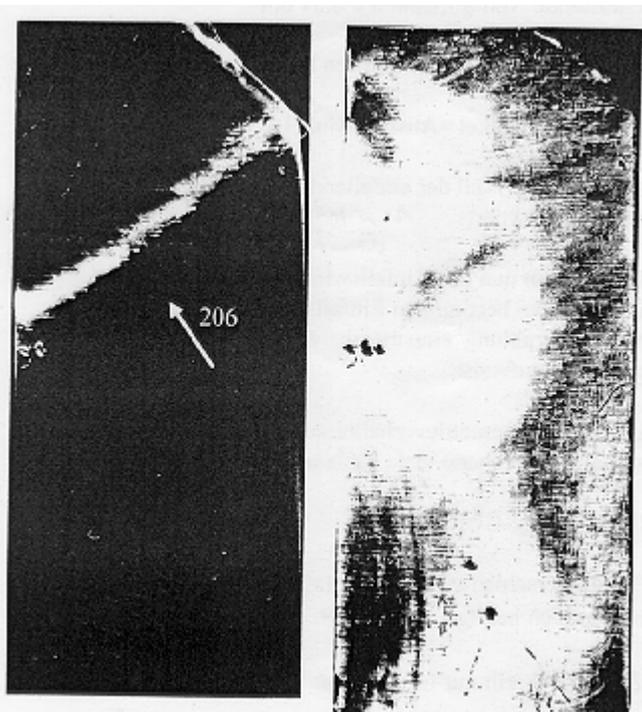


Abb.3.1 und 3.2: Zwei Abbildungen einer Realstruktur einer gekrümmten Probe

links: ebener Kollimator

rechts: Kollimator mit gleicher Krümmung wie die der Probe

Beide in Abb. 3.1 und 3.2 gezeigten Bilder stammen von der gleichen Probe in der gleichen Lage, trotzdem ist das Bild links reduziert auf einen Streifen und rechts weit aufgefächert. Der Grund liegt in einer leichten Krümmung der Probe, und somit der Erfüllung der Bragg-Bedingung in nur einem schmalen Bereich. Dieses Phänomen kann man durch eine Krümmung des Kollimators mit dem gleichen Krümmungsradius, wie dem der Probe, beheben (siehe Abb. 3.3). Ist die Probe jedoch so stark oder auch unregelmässig gekrümmt, dass dies durch eine Kollimatorkrümmung nicht mehr ausgleichbar ist, wird die Probe bei maximaler Kollimatorkrümmung nach der ersten Messung (Belichtung), ein Stück gedreht, hier zum zweiten mal belichtet, u.s.w. (Mehrfachbelichtung).

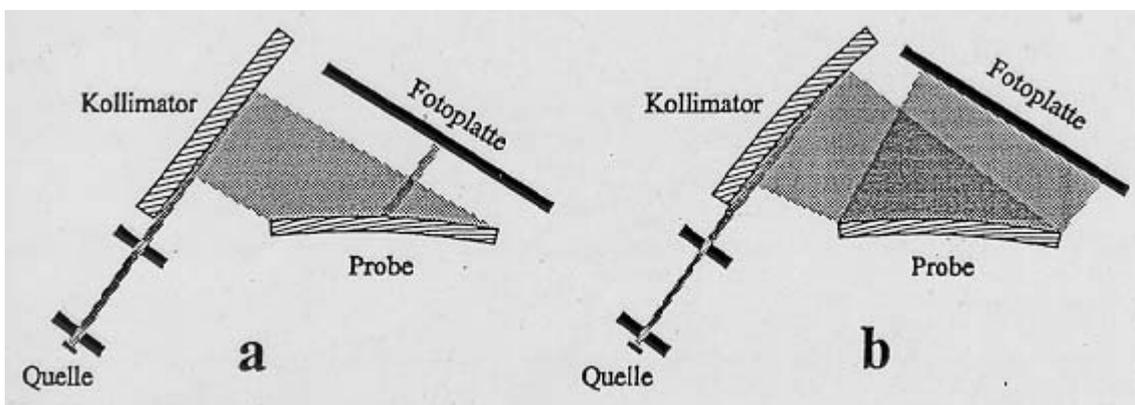


Abb. 3.3: Zweikristall-Topographie

a: übliche Zweikristall-Anordnung mit asymmetrischem Kollimator

b: Zweikristall-Anordnung mit einem gekrümmten, asymmetrischen Kollimator, dessen Krümmung an jene der Probe angepasst ist.

Die Belichtungszeit für eine Probenstellung kann viele Stunden betragen. Bei Mehrfachbelichtung verlängert sie sich entsprechend um die Anzahl der Belichtungen. Während dieser Zeit kann die Messanlage durch thermische Einflüsse geringfügig deformiert werden, was zur Abweichung von der Bragg-Bedingung führt. Aus diesem Grund wird durch einen Kontrolldetektor ständig die von der Probe reflektierte Strahlung gemessen. Bei geringsten Abweichungen wird die Stellung der Probe nachreguliert.

Um diesen Kontroll- und Regelmechanismus empfindlich zu gestalten, aber auch um größte Empfindlichkeit bzgl. lokaler Kristallstörungen zu erreichen (und damit maximalen Kontrast), wird die Probe nicht auf den Bragg-Reflex eingestellt, sondern auf einen Punkt, der sich im steilen Flankenbereich der Rockingkurve befindet. Dieser Punkt heißt Arbeitspunkt (siehe Abb. 2.4). Kleinste Orientierungsabweichungen führen nun zu starker Änderung der Intensität des reflektierten Röntgenlichtes und sind damit sehr sensibel durch den Kontrolldetektor nachweisbar. Dies geht allerdings auf Kosten der Belichtungszeit.

Um eine Topographie ausführen zu können, sind zusätzliche Aufgaben am Messplatz zu erledigen. Das Ganze wird zu einem Gesamtvorgang (Szenario), beschrieben im Punkt 3.4.

Abschließend als Ergänzung zum Schema eines Zwei-Kristall-Topographiemessplatzes (Abb. 1.1) die Abbildung eines solchen Messplatzes. Seine Höhe beträgt etwa 1 m.

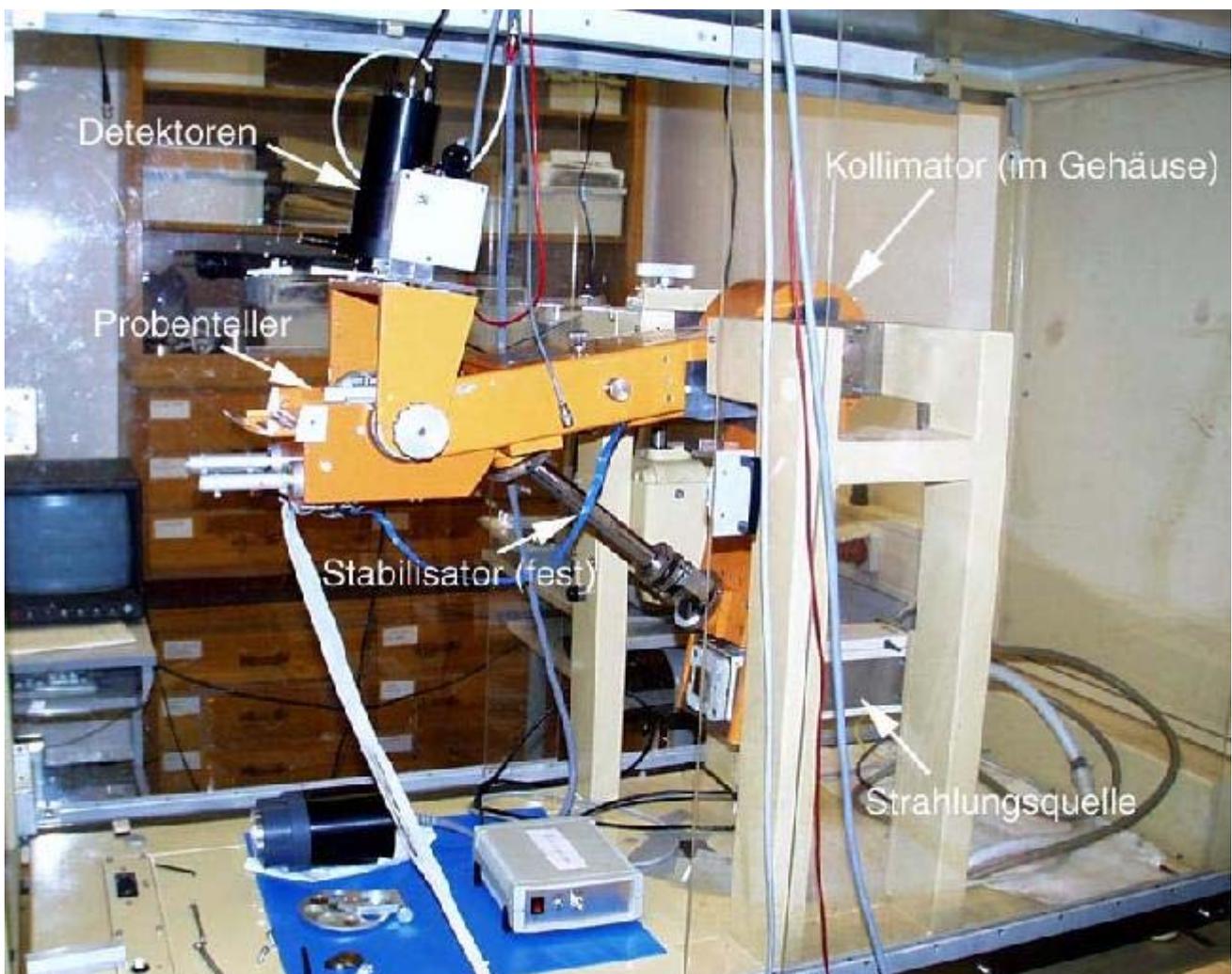


Abb. 3.4: Topographie-Messplatz**3.2 Diffraktometrie und Reflektometrie: Messplatz und -Verfahren**

Gegenstand der Diffraktometrie und der Reflektometrie sind einzelne Atome (genauer: die Elektronendichteverteilung innerhalb eines Atoms), einzelne Netzebenen oder die Grenzflächen von Schichten unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung (geschichtete Halbleiterbauelemente). Im Unterschied zur Topographie, wo die Messanordnung (Position der Probe und des Aufnahmemediums (Film, Detektor, ...)) über die gesamte Messzeit hinweg stabil gehalten wird (Abweichung nur bei Mehrfachbelichtung), wird hier mit einem schmalen gut kollimierten Röntgenstrahl der zu betrachtende Proben-Teil Position für Position gescannt, wobei die an der Probe gebeugte/reflektierte Röntgenstrahlung anschließend durch einen Detektor (0-, 1- oder 2-dimensional) gemessen und die Messwerte graphisch dargestellt werden.

Abb. 3.5 gibt schematisch einen Diffraktometrie-/Reflektometrie-Arbeitsplatz wieder. Die Probe oder die Probe und der Detektor werden zwischen jeder Messung bewegt (gedreht), bezeichnet mit Einachsen- oder Zweiachsen-Scan. Am häufigsten wird beim Zweiachsen-Scan ein Verhältnis von 1:2 gewählt, d.h. , dass eine Drehung der Probe um Theta (identisch mit Omega) eine Drehung des Detektors um $2 * \text{Theta}$ veranlasst. Eine Abbildung der Freiheitsgrade hinsichtlich der räumlichen Orientierung einer Probe ist in Abb. 2.9 zu finden. Die Winkel werden hier anders als bei der Topographie benannt, außerdem ist eine Verschiebung in x-, y-, z-Richtung möglich.

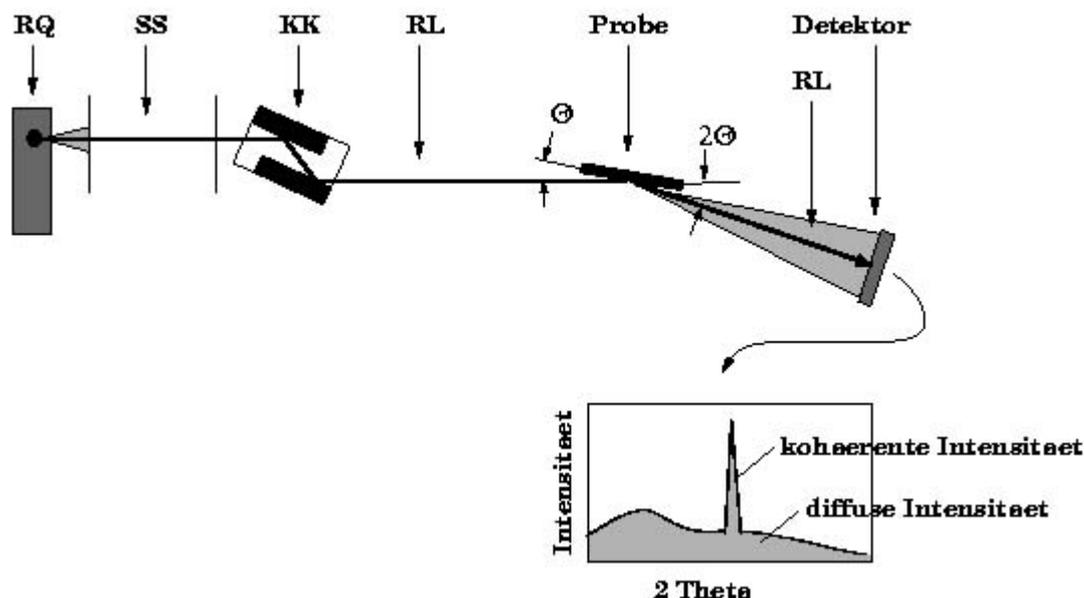


Abb. 3.5: Messplatz für Diffraktometrie/Reflektometrie. Der Braggreflex (man nennt ihn auch kohärenten Pik) liegt bei Einfallswinkel = Ausfallswinkel (Pik in der Kurve).

RQ: Röntgenquelle
 SS: Spaltsystem
 KK: Kollimator-Kombination
 RL: Röntgenlicht

Ein wichtiger messtechnischer Unterschied innerhalb der Diffraktometrie / Reflektometrie ergibt sich durch den verwendeten Detektortyp. Bei einem **0-dimensionalen Detektor** ergibt sich je Probenstellung ein Messwert und während des gesamten Messvorganges (die Probe wird jeweils um Omega (Theta) gedreht) eine Menge von Messwerten. Diese werden schritthaltend als Kurve im Linescan-Fenster dargestellt (siehe Abb. 3.6). Der Messvorgang selber nennt sich **Linescan**.

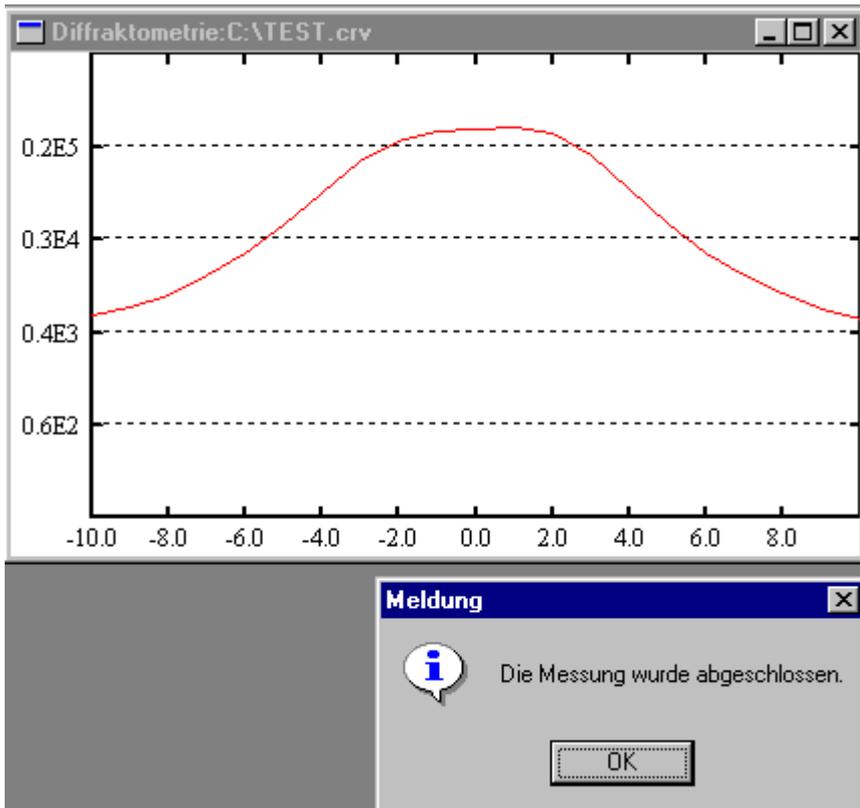


Abb. 3.6: Intensitätsverteilungskurve mit einem 0-dimensionalen Detektor (Linescan-Fenster)
 y-Achse: Intensität, x-Achse: Motorstellung

Bei einem **1-dimensionalen Detektor** ergibt sich je Probenstellung ein Feld von Messwerten (z.B. bei 2000 Kanälen 2000 Messwerte). Hier entsteht also je Probenstellung eine Kurve entsprechend der Abb. 3.6 und während des gesamten Messvorganges eine Kurvenschar. Der Messvorgang selber nennt sich **Areascan**. Die jeweils aktuelle Kurve wird im AreaScan-Fenster angezeigt (hierzu gibt es keine Abbildung).

Generell können die Messwerte je Messvorgang zusätzlich in einer Datei abgespeichert werden. Dabei beinhaltet eine Datei beim LineScan eine Kurve und beim Areascan eine Kurvenschar.

Diese Messwerte können in ein leeres Linescan- bzw. Areascan-Fenster geladen werden. Im AreaScan-Fall, wo ja die Datei eine Kurvenschar enthält, wird die letzte Kurve dargestellt. Zusätzlich sind hier 2D-Transformationen

möglich, die sich auf die gesamte Kurvenschar beziehen. Es entstehen 2-dimensionale farbige Bilder, die noch schneller, als dies bei Kurvenscharen möglich ist, Aussagen über die Kristallstruktur gestatten. Ein Beispiel hierfür zeigt Abb. 3.7.

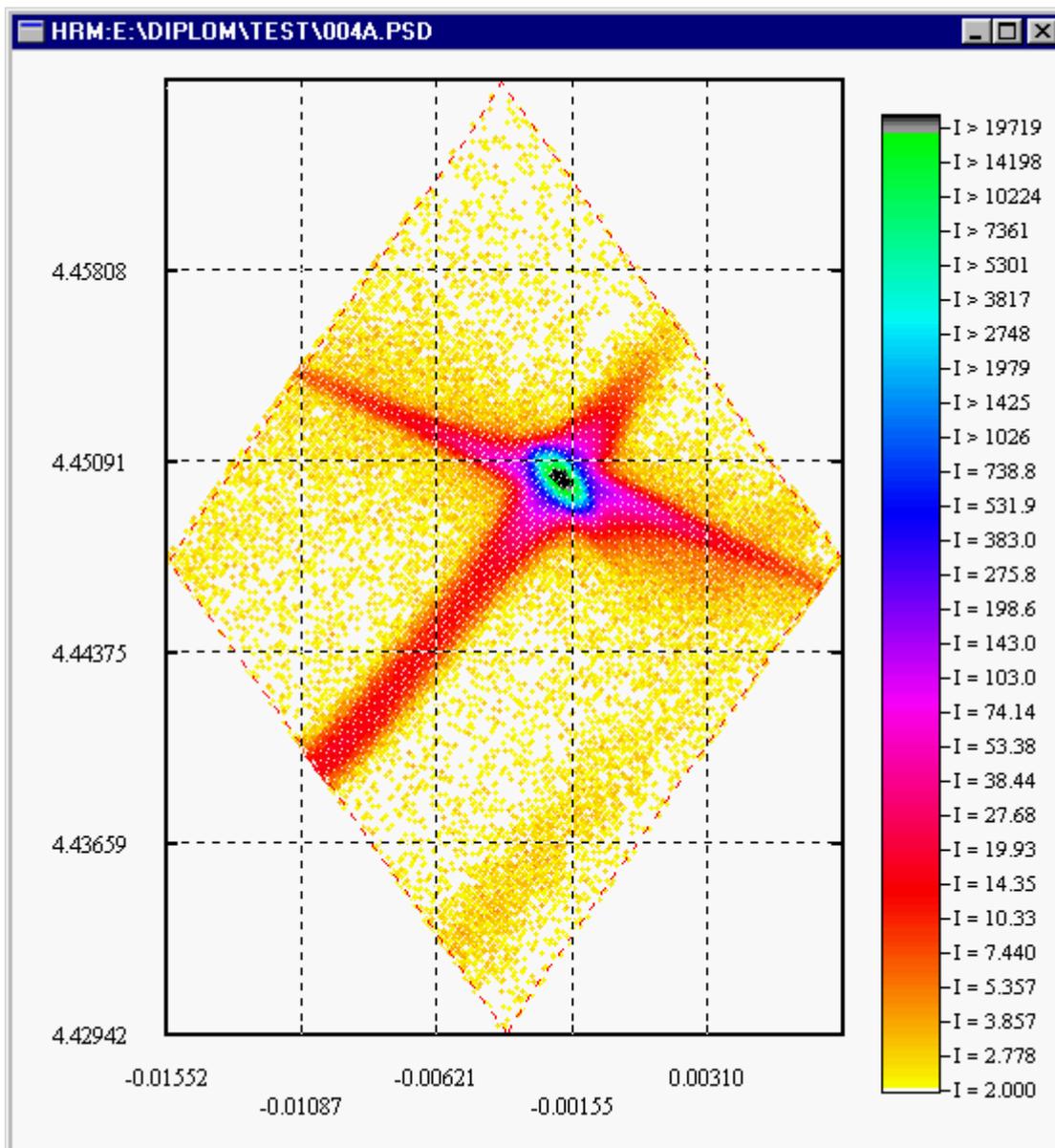


Abb. 3.7: Darstellung einer Messung in reziproken Gittereinheiten. Zu sehen ist ein Atom mit seiner Elektronenwolke.

y-Achse: q_z , x-Achse: q_x , beide sind Koordinaten des Streuvektors q

I: Intensität

3.3 Anwendungsfälle

Neben den Hauptanwendungsfällen, die das Programm zu erfüllen hat, Durchführung der Topographie, der Diffrakto- und der Reflektometrie, gibt es eine Anzahl weiterer Anwendungsfälle. Sie beziehen sich überwiegend auf die **Motoren** und die **Detektoren** und beinhalten unter anderem die Kalibrierung (Einmessen, Eichung) der Motoren und die Vornahme bestimmter Einstellungen.

Weitere Anwendungsfälle bestehen bspw. in der Handhabung von **Makros** (eigentlich eine Scriptsprache, mittels der die Programmabläufe gesteuert werden können) und den im Topographie-Gesamtvorgang (Pkt. 3.4) genannten Anwendungsfällen, wie bspw. dem Abfordern allgemeiner Angaben zum Messvorgang.

Eine größere Gruppe von Anwendungsfällen umfasst die Simulation von Hardware.

3.4 Gesamtvorgänge (Szenarien)

Zur Durchführung der Topographie, Diffraktometrie und Reflektometrie sind am Messplatz eine Reihe von Aufgaben (Arbeitsschritten) zu erledigen, die sowohl durch das XCTL-System unterstützt werden (Anwendungsfälle), als auch von rein manueller Natur sind. Beispielhaft soll hier die Topographie betrachtet werden, wobei Ähnlichkeiten zu den beiden anderen Messmethoden bestehen.

Der größte Teil der Aufgaben erfolgt rechnergestützt, also durch das XCTL-System.

Topographie-Gesamtvorgang:

1. Zu jedem Messvorgang sind allgemeine Angaben zu erfassen. Hierzu gehören bspw. Angaben zur Probe, zur verwendeten Röntgenstrahlung und zur zu untersuchenden Netzebene der Probe. Diese Angaben erfolgen teilweise **handschriftlich** in einem **Protokollbuch**, teilweise werden sie vom **Softwaresystem** abverlangt (Dialogfenster).

2. Eine **manuelle Vorabjustage der Probe** an Hand der mit der Probe gelieferten Daten.

Ergebnis: Grobe Einstellung der Probe, des Einfallwinkels der Röntgenstrahlung und des kontrollierenden Detektors. Damit ist eine Vorabjustierung der Probe bis auf ca. 3 Grad genau (Bezugsmotor ist DF) vorgenommen worden. Ergänzend zur reinen manuellen Handhabung wird hierbei der durch das **Softwaresystem** unterstützte Kontrolldetektor benötigt, dessen Zählrate ständig auf dem Bildschirm angezeigt wird.

3. **Rechnergestützte Überprüfung**, ob die **Probe übermäßig oder unregelmäßig verformt** ist.

Zur Feststellung einer übermäßigen oder unregelmäßigen Verformung der Probe wird von dieser in unterschiedlichen Stellungen (Beugung fein) ein Bild gefertigt. An Hand des Bildes erkennt man den Grad und die Richtung der Krümmung. Im Allgemeinen genügen drei Probenstellungen, um sich ein Gesamtbild von der Probe zu machen. Als Aufnahmemedium wird ein hoch empfindlicher, aber nur gering auflösender Film verwendet. Eine Belichtungszeit von wenigen (3 - 5) Minuten ist ausreichend. In jüngster Zeit wird hierfür aber auch ein zweidimensionaler Detektor verwendet, was den Vorgang vereinfacht.

Ist die Probe übermäßig oder unregelmäßig verformt, so erhält man als Ergebnis die erforderliche Anzahl der Belichtungen bei unterschiedlichen

Probenorientierungen (Beugung fein) während der späteren Topographie-Messung (Mehrfachbelichtung).

4. und 5. **Rechnergestützte Grob- und Feinjustage**

Nachdem im 2. Arbeitsschritt eine Vorabjustage bis auf etwa 3% Genauigkeit erfolgte, wird nun eine Grob- und Feinjustage vorgenommen.

Ziel ist die Justage der Probe und des Kollimators auf eine solche Weise, dass eine maximale Reflexion von Röntgenstrahlung aus dem zu untersuchenden Proben teil erfolgt und damit die Messzeit (mehrere Stunden) minimiert wird. Dies bedeutet:

- Im Falle einer Probenkrümmung eine Anpassung der Kollimatorkrümmung an die Krümmung der Probe

- Einstellen der Probe auf die Stelle des Bragg-Reflexes (Pik der Rockingkurve)

- Anfahren des Arbeitspunktes

Diese Arbeitsschritte dauern ca. 30 Minuten.

Rechnergestützte Grobjustage

In diesem ersten Schritt erfolgt eine Justage der Probe mittels der Motoren DC und AR. Damit hat AR die optimale Stellung erreicht.

Rechnergestützte Feinjustage

Dies ist ein iterativer Prozess, der 20 bis 100 Mal durchlaufen wird. In jedem Durchlauf werden nacheinander die Motorenpaare DF und CC sowie DF und TL gegeneinander optimiert. Zwischenzeitlich wird die Halbwertsbreite der Rockingkurve gemessen, aus der sich die Güte der Justage ableiten lässt (Ziel: minimale Halbwertsbreite). Nachfolgende Einstellung der Probe auf einen Bruchteil der Maximalintensität (**Arbeitspunkt**). Hierzu wählt man oft 60% der reflektierten Maximalintensität auf der linken Flanke der Rockingkurve. Hier verläuft die Kurve besonders steil, und es ist damit relativ leicht, programmtechnisch diesen Punkt über die gesamte Messzeit hinweg konstant zu halten. (60% ist nur ein Richtwert. Darüber hinaus wird vereinzelt auch die rechte Flanke benutzt.)

Dieser Ausgangspunkt ist der **Arbeitspunkt**. Er wird durch den Winkel (Beugung fein) und die Intensität der reflektierten Röntgenstrahlung bestimmt.

Die rechnergestützte Feinjustage kann inzwischen in der Mehrzahl der Messproben vollständig vom XCTL-System übernommen werden (Anwendungsfall: Automatische Justage). Das Programm benötigt hierfür etwa 20 Minuten und ist damit gegenüber der manuellen Justage etwas schneller. Außerdem gewinnt der Physiker hierdurch Zeit für andere Aufgaben.

6. Automatische Topographie

Nachdem in einem weiteren Schritt die topographietypischen Parameter eingegeben werden, wie der Name des Regelmotors bei Abweichungen (DF), der Name des Kontrolldetektors, die Belichtungszeit oder die Anzahl der Mehrfachbelichtungen, wird die Topographie gestartet und durchgeführt.

6.1 Halten der Probe über die gesamte Messzeit hinweg (mehrere Stunden bis zu maximal zwei Tage) in einer Stellung, die trotz thermischer Einflüsse

auf die Gesamtmesseinrichtung, die anfangs am Arbeitspunkt gemessene Röntgenstrahlungs-Intensität hält. Eine evtl. erforderliche Nachregulierung erfolgt über den Motor DF.

6.2 Ein nacheinander erfolgendes segmentweises Erfassen der Probenstruktur (Mehrfachbelichtung) bei übermäßigen oder unregelmäßigen Verformungen der Probe (nicht durch eine einmalige anfängliche Kollimatorkrümmung korrigierbar). Dies ist bei etwa 10% der Proben der Fall.

Ergebnis ist das Bild der Proben-Realstruktur. Es hat eine maximale Größe von 1 cm x 1 cm. Die Größe ist abhängig vom Durchmesser des vom Kollimator reflektierten Röntgenstrahles und vom Einfallswinkel an der Probe. Einbezogen werden bis zu 10 exp. 5 Netzebenen der Probe (Eindringtiefe etwa 50 Mikrometer). Das Bild wird anschließend auf Fotopapier vergrößert - siehe Abb. 3.1, 3.2 und 3.8.

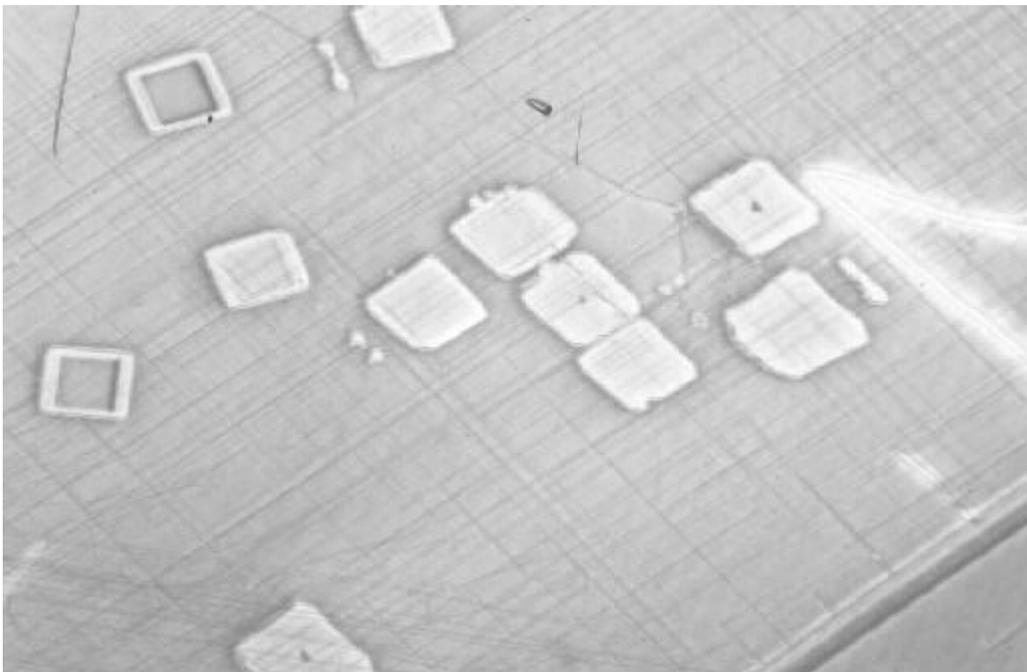


Abb. 3.8: In einem Schichtsystem erzeugte Inseln.