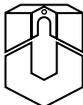

Modellierung des Einflusses von Defekten dünner Schichten auf die Röntgenbeugung

Masterarbeit
vorgelegt von
Susanne Hahne

UNIVERSITÄT  OSNABRÜCK

26. Oktober 2010

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig verfasst, keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet und zuvor noch keine Masterprüfung der Fachrichtung Physik abgelegt habe.

Osnabrück, den 26. Oktober 2010,

(Susanne Hahne)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Theoretische Grundlagen	8
2.1	Theoretische Betrachtung der Röntgenbeugung	8
2.1.1	Streuvektor	9
2.1.2	Kinematische Näherung	9
2.1.3	Streuung am Elektron	9
2.1.4	Streuung am Atom	10
2.1.5	Streuung an einer Einheitszelle	10
2.1.6	Streuung am Einkristall	10
2.1.7	Streuung an begrenzten Strukturen	12
2.1.8	Bestimmung der Kristallhöhe	15
2.2	Ausleuchtung eines zweidimensionalen Kristallsystems	16
2.3	Das Modell	17
2.3.1	Floating Film Model	17
2.3.2	Fixed Film Model	18
2.4	Gammaverteilung	21
2.4.1	Bestimmung einer Zufallszahl aus einer Verteilung	21
3	BaSOX	23
3.1	Wahl der Programmiersprache	23
3.1.1	Implementation	23
3.1.2	Programmablauf und Laufzeitoptimierung	24
3.2	Das fertige Programm	26
3.2.1	Parameter	27
4	Auswertung	29
4.1	Überprüfung des Modells	30
4.2	Vergleich des Aufwuchsverhaltens	33
4.3	Gitterfehlانpassung	34
4.4	Einfluss breit zufallsverteilter Parameter	38
4.4.1	Einfluss der Höhenverteilung in l -Richtung	38
4.4.2	Einfluss der Breitenverteilung in k -Richtung	43
4.4.3	Einfluss der Höhenverteilung in k -Richtung	45
4.4.4	Einfluss der Breitenverteilung in l -Richtung	47
4.5	Einfluss des Abstands	48

5 Diskussion und Ausblick	50
5.1 Nebeneffekte der breit verteilten Parameter	50
5.1.1 Breit verteilte Kristallithöhe	50
5.1.2 Breit verteilte Kristallitbreite	51
5.2 Überstrukturen in der k -Richtung der Beugungsbilder	52
5.2.1 Sehr scharfe Breitenverteilung	52
5.2.2 Weite Breitenverteilung	53
5.3 Gleichheit der Modelle	54
5.4 Beispielauswertung	57
5.5 Erweiterungsmöglichkeiten	59
6 Zusammenfassung	60
7 Abstract	61
A Konfigurationen	62
A.1 Konfigurationen zum Vergleich der Modelle	63
A.2 Konfigurationen zu Untersuchung der Höhenverteilung	63
A.3 Konfigurationen zu Untersuchung der Breitenverteilung	67
A.4 Konfigurationen zu Untersuchung des Substratabstandes	69
A.5 Konfigurationen zu Untersuchung der Gitterfehlpassung	72
A.6 Konfigurationen zur Beispielauswertung	77
A.7 Sonstige Konfigurationen	78
Literaturverzeichnis	80
Abbildungsverzeichnis	81

1 Einleitung

Röntgendiffraktometrie ist seit ihrer Vorstellung durch von Laue [1] 1912 eines der weit verbreitetsten Mittel zur Aufklärung kristalliner Strukturen. Gerade für die Pulverdiffraktometrie und Beugung an idealen Kristallen ist die theoretische Beschreibung dementsprechend weit vorangeschritten und wurde bereits in zahlreiche Lehrbücher, z.B. [2], aufgenommen.

Für dünne Schichten im Bereich einiger Monolagen auf einem Substrat ist diese Beschreibung jedoch noch nicht soweit. Von Interesse sind dabei vor allem die Interferenz von Substrat- und Filmsignal an den üblichen Aufnahmepositionen im reziproken Raum. Diese Interferenz kann zum Beispiel beeinflusst werden von der Gitterfehlpassung [3] und dem Abstand zwischen Substrat und Film [4].

Weiterhin kommt es in einigen Röntgenbeugungsaufnahmen solcher Systeme zu einer Schwächung bis hin zum Verschwinden der typischen Nebenoszillationen des Filmsignals. Als Mögliche Ursache dafür wird die Rauigkeit der Schicht genannt [5]. Bisherige Modelle [6] konnten eine solche Rauigkeit nur gemittelt über eine Normalverteilung darstellen, da sie vor allem die vertikale Struktur des Schichtsystems beschreiben. In horizontaler Richtung gehen sie von einer vollständig geschlossenen Schicht aus, bei der die Rauigkeit lediglich in Form eines Vorfaktors eingerechnet wird.

Ein weiterer Aspekt ist, dass Effekte auf Stangen höherer Ordnung im reziproken Raum durch die fehlende Modellierung der horizontalen Ausdehnung des Schichtsystems bisher nicht untersucht werden konnten.

Deswegen wird in dieser Arbeit ein Modell vorgestellt, welches eine zweidimensionale Kristallitverteilung auf einem halbumendlichen Substrat beschreibt. So können im Gegensatz zu den bisherigen eindimensionalen Modellen, sowohl unvollständig bedeckte als auch raue Schichten dargestellt werden. Diese Rauigkeit wird durch eine Verteilung der Kristallithöhen beschrieben und kann somit detailliert ausgewertet werden.

Außerdem erschließt die zusätzliche Dimension im Modell eine zweite Dimension im reziproken Raum, so dass auch Effekte auf Stangen höherer Ordnung untersucht werden können.

Der Theoretische Teil der Arbeit beginnt in Abschnitt 2.1 mit einer Erläuterung, wie das Röntgenbeugungssignal einer gegebenen Struktur berechnet werden kann. Anschließend wird das neue Modell in Abschnitt 2.3 ausführlich erläutert.

Die Berechnung des Röntgenbeugungssignals wird von einem Programm übernommen, welches auf Basis des neuen Modells entwickelt wurde. Dessen Spezifikationen werden in Abschnitt 3 vorgestellt.

In Abschnitt 4 folgt zunächst eine Überprüfung des neuen Modells. Anschließend wird der Einfluss eines jeden Parameters auf das Beugungsbild detailliert untersucht. Die Fragestellungen die durch die Auswertung aufkommen, werden in Abschnitt 5 diskutiert.

Den Abschluss der Arbeit bildet die Zusammenfassung in Abschnitt 6.

2 Theoretische Grundlagen

Im Rahmen dieser Arbeit soll die Röntgenbeugung einer zweidimensionalen Kristallitverteilung auf einem halb-unendlichen Substrat berechnet werden.

Für ein besseres Verständnis soll daher zunächst eine kurze, theoretische Betrachtung der Röntgenbeugung gegeben werden. So kann die Beugungsintensität eines realen Systems in sehr guter Näherung berechnet werden.

Anschließend wird das neu entwickelte Modell vorgestellt, welches der Berechnung zu Grunde liegt.

2.1 Theoretische Betrachtung der Röntgenbeugung

Die erste Arbeit zur Röntgendiffraktometrie wurde von M. von Laue im Jahre 1912 vorgestellt und anschließend von W. Friedrich und P. Knipping bestätigt [1]. Seitdem hat sich die Röntgenbeugung, im Folgenden auch kurz XRD genannt, zu einem weit verbreiteten Mittel der Strukturuntersuchung an Kristallen weiterentwickelt.

Die besondere Eignung von Röntgenstrahlung für diese Zwecke kann über das BRAGG'sche Beugungsgesetz erklärt werden [7]. Wie in Abbildung 2.1 zu erkennen wird der einfallende Strahl

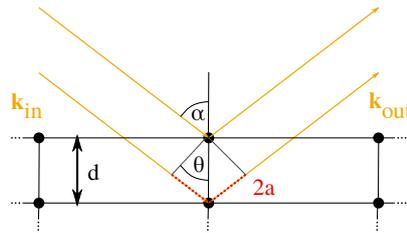


Abbildung 2.1: Skizze zum BRAGG'schen Beugungsgesetz. Die einfallenden Strahlen k_{in} werden an den verschiedenen Netzebenen gestreut, so dass ein Gangunterschied abhängig von Einfallswinkel α und Netzebenenabstand d entsteht (hier rot markiert). Dieser Gangunterschied entscheidet, ob sich die ausfallenden Strahlen k_{out} anschließend auslöschen oder verstärken.

an den Netzebenen des Kristalls gestreut. Dadurch kommt es zu einem Gangunterschied zwischen an verschiedenen Ebenen gestreuten Strahlen. Ist dieser Gangunterschied $2a$ gerade ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ , verstärken sich diese Strahlen konstruktiv. Für ein Intensitätsmaximum muss also folgende Bedingung erfüllt sein

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin(180^\circ - \alpha) = 2 \cdot d \cdot \sin(\theta). \quad (2.1)$$

Der Gangunterschied ist dabei nach oben sowie nach unten beschränkt. Bei senkrechtem Einfall erreicht er sein Maximum von $2d$. Beim nahezu waagerechten Einfall nähert er sich 0.

Damit dieser Gangunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge werden kann, muss diese also in der Größenordnung des Netzebenenabstands liegen. Bei typischen Kristallen sind dies einige Angström, weshalb Röntgenstrahlung mit einer Wellenlänge in diesem Bereich bestens geeignet ist.

Die Berechnung der gebeugten Intensität bedarf jedoch einer genaueren mathematischen Beschreibung. Daher wird in den folgenden Abschnitten, ausgehend vom einzelnen Elektron bis hin zur Einheitszelle, erarbeitet, wie sich das gebeugte Signal zusammensetzt.

2.1.1 Streuvektor

Für die theoretische Beschreibung von Streuprozessen hat sich die Bezeichnung des Streuvektors \mathbf{q} durchgesetzt. Er ist definiert als Differenz zwischen den Wellenvektoren des aus- und einfallenden Strahls, wie in Abbildung 2.2 dargestellt,

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_{out} - \mathbf{k}_{in}. \quad (2.2)$$

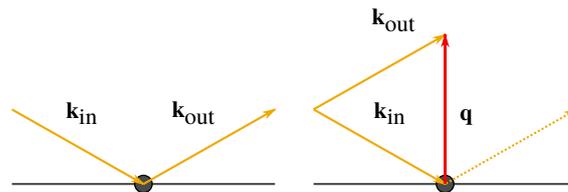


Abbildung 2.2: Der Streuvektor \mathbf{q} bezeichnet die Differenz zwischen dem Wellenvektor des einfallenden Strahls \mathbf{k}_{in} und dem des ausfallenden Strahls \mathbf{k}_{out} .

2.1.2 Kinematische Näherung

Die Herleitung des Ausdrucks für die gebeugte Amplitude erfolgt im Rahmen der kinematischen Näherung. Unter diesem Begriff werden mehrere Annahmen zusammengefasst, die im Einzelnen lauten:

- Jedes Röntgenphoton möge nur einmal mit einem Streuzentrum wechselwirken. Mehrfachstreuung sei demnach ausgeschlossen.
- Es gebe keine Wechselwirkung zwischen einfallendem und ausfallendem Strahl.
- Brechungseffekte seien vernachlässigbar klein.

2.1.3 Streuung am Elektron

Die Streuung von Röntgenstrahlung am Elektron erfolgt nach der THOMSON -Formel. Dabei wird das Elektron vom einfallenden Photon zu einer Schwingung angeregt und strahlt somit selbst wieder Röntgenlicht ab. Die Amplitude des ausfallenden Strahls beträgt

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot \frac{e^2}{m_e \cdot c^2 \cdot R_0} \cdot P^{\frac{1}{2}} \cdot e^{i \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_e}. \quad (2.3)$$

Es fließen ein die einfallende Amplitude A_0 , die Elementarladung e , die Elektronenmasse m_e , die Lichtgeschwindigkeit c und der Abstand vom Elektron zum Detektor R_0 . Außerdem wird durch den Polarisationsfaktor P bestimmt, wie die Amplitude des ausfallenden Strahls von der Polarisation der einfallenden abhängt.

R_0 ist stets sehr groß gegen die Abstände der Elektronen untereinander, so dass sein Wert für alle Elektronen als konstant angenommen werden kann. So lassen sich die auftretenden Konstanten zusammenfassen zu C und es entsteht ein kompakter Ausdruck für die Streuamplitude

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot C \cdot e^{i \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_e}. \quad (2.4)$$

2.1.4 Streuung am Atom

Die einzelnen Elektronen befinden sich in der Elektronenhülle eines Atoms und werden alle ange-
regt. Der Atomkern selbst kann auf Grund seiner großen Masse als ruhend angesehen werden und
trägt nicht zu Streuung bei.

Beim Aufaddieren der Einzelelektronenamplituden müssen jedoch ihre Phasenbeziehungen berück-
sichtigt werden. Dazu wird die Elektronendichteverteilung ρ_e genutzt, da die genauen Elektronen-
positionen nicht bekannt sein können. So ergibt sich die Gesamtamplitude zu

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot C \cdot \int d^3r \rho_e(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_A + \mathbf{r})} \quad (2.5)$$

mit der Atomposition \mathbf{r}_A .

Auch dieser Ausdruck kann gekürzt werden, indem der Atomformfaktor definiert wird

$$f(\mathbf{q}) = \int d^3r \rho_e(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.6)$$

Er beschreibt die Interferenz der von den einzelnen Elektronen gestreuten Strahlen. Da die Elektro-
nendichteverteilung für jedes Element anders ist, handelt es sich dabei um eine Materialeigenschaft,
die z.B. in [8] nachgeschlagen werden kann.

Für die Streuamplitude eines Atoms ergibt sich somit

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot C \cdot f(\mathbf{q}) \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_A}. \quad (2.7)$$

2.1.5 Streuung an einer Einheitszelle

Die einzelnen Atome sind wiederum in Einheitszellen angeordnet, so dass auch hier bei der Sum-
mation auf die Phasenbeziehungen geachtet werden muss.

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot C \cdot \sum_{j=1}^N f_j(\mathbf{q}) \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_j)} \quad (2.8)$$

Von Bedeutung sind dabei die Position der Einheitszelle \mathbf{r}_n und die Position des j-ten Atoms
 $\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_j$.

Dieser Ausdruck lässt sich ebenfalls vereinfachen, indem man den vom Aufbau der Einheitszelle
abhängigen Strukturfaktor

$$F(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N f_j(\mathbf{q}) \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (2.9)$$

einführt. Er beschreibt die Interferenz der an den einzelnen Atomen in der Einheitszelle gestreuten
Strahlen. Die Amplitude einer an einer Einheitszelle gestreuten Welle beträgt somit

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot C \cdot F(\mathbf{q}) \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n}. \quad (2.10)$$

2.1.6 Streuung am Einkristall

Um die Gesamtamplitude eines Einkristalls zu erhalten wird über alle Einheitszellen summiert.

$$A(\mathbf{q}) = A_0 \cdot C \cdot F(\mathbf{q}) \cdot \sum_n e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n} \quad (2.11)$$

Eine genauere Betrachtung des Terms verrät, dass die konstanten Vorfaktoren $X = A_0 \cdot C$ den Betrag der Amplitude erhöhen, bzw. verringern, jedoch nicht die Lage der Maxima und die Halbwertsbreiten eventueller Oszillationen ändern.

Der letzte Ausdruck

$$G(\mathbf{q}) = \sum_n e^{i \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n} \quad (2.12)$$

repräsentiert den sogenannten Gitterfaktor. Er beschreibt die Beugungseffekte, die auf Grund der Gitterstruktur eines Kristalls auftreten.

Der Strukturfaktor $F(\mathbf{q})$ enthält Informationen über das untersuchte Material. Er beschreibt die Interferenz der Elektronenstreuung innerhalb der Einheitszelle. Da in dieser Arbeit jedoch die elementaren Beugungseigenschaften untersucht werden sollen, ist ein konkretes Material nicht gegeben.

Daher ist für diese Arbeit von der Gesamtamplitude, bzw. Intensität

$$A(\mathbf{q}) = X \cdot F(\mathbf{q}) \cdot G(\mathbf{q}) \quad (2.13)$$

$$I(\mathbf{q}) = |X|^2 \cdot |F(\mathbf{q})|^2 \cdot |G(\mathbf{q})|^2 \quad (2.14)$$

nur das Betragsquadrat des Gitterfaktors von Interesse. Im Vergleich zur Intensität ist $|G(\mathbf{q})|^2$ skaliert und es fehlt die Modulation mit der langreichweitigen Schwingung des Strukturfaktors. Dass die Skalierung hinfällig ist, wurde bereits erläutert. Die Modulation durch den Strukturfaktor, dargestellt in Abbildung 2.3, ist nur dann maßgeblich, wenn große Bereiche des reziproken Raums gleichzeitig betrachtet und weit auseinander liegende Bereiche miteinander verglichen werden sollen. Beides kommt in dieser Arbeit nicht vor, so dass die grundlegenden Beugungseffekte allein an Hand des Gitterfaktors untersucht werden.

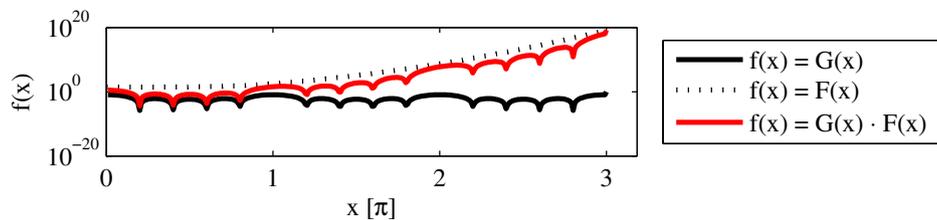


Abbildung 2.3: Qualitative Darstellung des Gitterfaktors $G(x)$ und des Strukturfaktors $F(x)$. Der Gitterfaktor oszilliert stark, während es sich bei dem Strukturfaktor um eine langreichweitige Modulation handelt.

2.1.7 Streuung an begrenzten Strukturen

In dieser Arbeit soll kein perfekter, unendlich ausgedehnter Einkristall, sondern eine Kristallitverteilung auf einem halb-unendlichen Substrat untersucht werden. Dazu wird der Ausdruck in 2.12 zunächst weiter umgeformt.

Der Vektor \mathbf{r}_n wird in seine Komponenten relativ zur Oberfläche des Substrats zerlegt

$$G(\mathbf{q}) = \sum_{n_{\parallel,1}=0}^{N_{\parallel,1}-1} e^{i \cdot n_{\parallel,1} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\parallel,1}} \sum_{n_{\perp}=0}^{N_{\perp}} e^{i \cdot n_{\perp} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\perp}} \sum_{n_{\parallel,2}=0}^{N_{\parallel,2}} e^{i \cdot n_{\parallel,2} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\parallel,2}} \quad (2.15)$$

Da es sich um eine zweidimensionale Struktur handelt, ist gibt es keine Ausdehnung in Richtung von $\mathbf{a}_{\parallel,1}$. Dieser Term entfällt also und der Ausdruck für den Gitterfaktor verkürzt sich zu

$$G(\mathbf{q}) = \sum_{n_{\perp}=0}^{N_{\perp}} e^{i \cdot n_{\perp} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\perp}} \sum_{n_{\parallel}=0}^{N_{\parallel}} e^{i \cdot n_{\parallel} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\parallel}}. \quad (2.16)$$

Im Folgenden werden nun die Gitterfaktoren für zwei spezielle Strukturen hergeleitet:

Zweidimensionaler, halb-unendlicher Kristall

Das Substrat sei in seiner Breite auf N begrenzt, da, wie in Abschnitt 2.2 erklärt wird, immer nur ein bestimmter Bereich der Probe unter Beugungsbedingungen ausgeleuchtet werden kann. Die Ausdehnung in vertikaler Richtung beginnt bei der als Ursprung definierten Oberfläche und reicht bis ins negative unendliche. Diese Betrachtungsweise hat sich durchgesetzt, da die vertikale Ausdehnung der Kristallite als sehr klein gegen die des Substrats angesehen werden kann.

$$G(\mathbf{q}) = \sum_{n_{\perp}=0}^{-\infty} e^{i \cdot n_{\perp} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\perp}} \sum_{n_{\parallel}=0}^{N_{\parallel}} e^{i \cdot n_{\parallel} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_{\parallel}} \quad (2.17)$$

Die Summen in diesem Ausdruck können mit Hilfe einer Reihenentwicklung eliminiert werden:

$$\begin{aligned} \sum_{n=a}^b p^n &= p^a + p^{a+1} + \dots + p^{b-1} + p^b \\ p \cdot \sum_{n=a}^b p^n &= p^{a+1} + p^{a+2} + \dots + p^b + p^{b+1} \\ (1-p) \cdot \sum_{n=a}^b p^n &= p^a - p^{b+1} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Beim Substrat muss außerdem beachtet werden, dass die Röntgenstrahlung nur bis zu einem bestimmten Grad in die Probe eindringen kann. Diese Abschwächung wird durch die Parameter ϵ_x berücksichtigt. Der Gitterfaktor des Substrats beträgt also

$$G_S(\mathbf{q}) = \frac{1}{1 - e^{-(i \cdot \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp} + \epsilon_{\perp})}} \cdot \frac{1 - e^{(i \cdot \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{a}_{\parallel} - \epsilon_{\parallel}) \cdot N}}{1 - e^{(i \cdot \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{a}_{\parallel} - \epsilon_{\parallel})}} \quad (2.19)$$

Zweidimensionaler, begrenzter Kristall

Die Kristallite sind sowohl in ihrer Breite B als auch in ihrer Höhe H begrenzt. Auf Grund dieser endlichen Ausdehnung kann die Abschwächung der Röntgenstrahlung an dieser Stelle vernachlässigt werden. Zu beachten ist jedoch, dass die Einheitszelle der Kristalliten um die Gitterfehlanpassung $\beta_{||}, \beta_{\perp}$ gegenüber dem Substrat skaliert ist.

Werden diese Randbedingungen berücksichtigt, ergibt sich der Gitterfaktor eines Kristalliten, ausgehend von Gleichung 2.12 und wiederum mit Hilfe der Reihenentwicklung in 2.18, zu

$$G_{Kr,i}(\mathbf{q}) = \frac{1 - e^{i \cdot \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{b}_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{i \cdot \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{b}_{\perp}}} \cdot \frac{e^{-i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{b}_{||} \cdot B_{l,i}} - e^{i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{b}_{||} \cdot (B_{r,i} + 1)}}{1 - e^{i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{b}_{||}}} \quad (2.20)$$

$$= \frac{1 - e^{i \cdot \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp} \cdot \beta_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{i \cdot \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp} \cdot \beta_{\perp}}} \cdot \frac{e^{-i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{a}_{||} \cdot \beta_{||} \cdot B_{l,i}} - e^{i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{a}_{||} \cdot \beta_{||} \cdot (B_{r,i} + 1)}}{1 - e^{i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{a}_{||} \cdot \beta_{||}}} \quad (2.21)$$

Um den Gitterfaktor der gesamten Anordnung zu bestimmen, müssen Substrat- und Kristallitanteil phasenrichtig aufaddiert werden. Dazu wird von jedem Kristalliten die Position seines Aufpunkts benötigt. Dieser ist definiert durch den horizontalen Abstand vom Substratsprung R_i , sowie den vertikalen Abstand von der Substratoberfläche D_i .

$$|G|^2 = \left| G_S + \sum_i G_{Kr,i} \cdot e^{i \cdot \mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{a}_{||} \cdot R_i} \cdot e^{i \cdot \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp} \cdot D_i} \right|^2 \quad (2.22)$$

Das Betragsquadrat gewährleistet, dass nur reelle Ergebniswerte entstehen. Außerdem erleichtert es die Analogie zu echten XRD-Messungen, die lediglich die gebeugte Intensität, also das Betragsquadrat der Amplitude, detektieren können.

Die Ausdrücke der Gitterfaktoren folgen alle dem Schema

$$\left| \frac{1 - e^{i \cdot x \cdot N}}{1 - e^{i \cdot x}} \right|^2 = \frac{\sin^2(x \cdot N)}{\sin^2(x)} = f_{N\text{-Spalt}}(x, N). \quad (2.23)$$

Es entstehen also sogenannte N-Spalt-Funktionen, wie in Abbildung 2.4 skizziert. Für kleine N entstehen Oszillationen mit $N - 2$ zusätzlichen Nebenmaxima zwischen zwei Hauptmaxima.

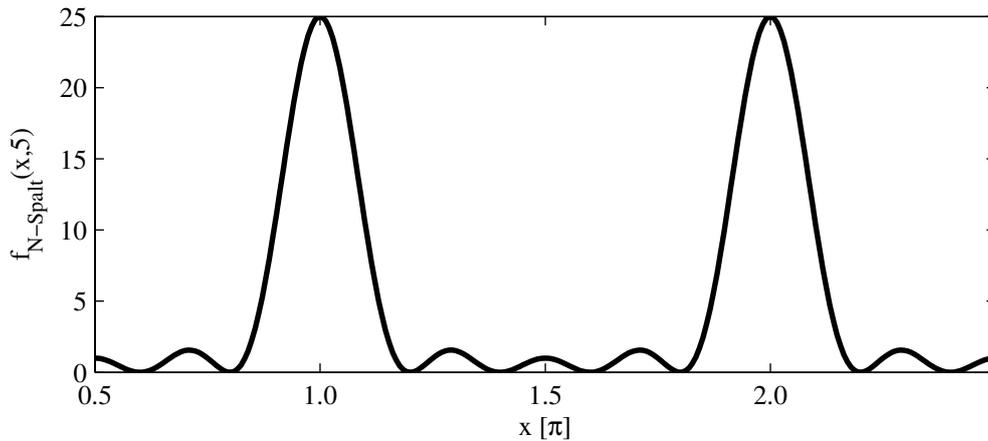


Abbildung 2.4: N-Spalt Funktion für $N = 5$. Die Hauptmaxima liegen bei ganzzahligen Vielfachen von π . Zwischen diesen Hauptmaxima treten weitere Oszillationen auf.

Für sehr große N geht die Funktion in δ -Peaks über, wenn das Argument die LAUE -Gleichungen

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi \cdot k \qquad \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_\perp = 2\pi \cdot l \qquad (2.24)$$

mit $k, l \in \mathbb{N}$ erfüllt. k und l, sowie h, wenn die dritte Raumrichtung auch berücksichtigt würde, wurden bewusst in Anlehnung an die Miller'schen Indizes benannt, sollten aber nicht mit ihnen verwechselt werden.

Die Lage der Maxima befindet sich genau auf den Kreuzungspunkten des reziproken Gitters, welches durch die Basisvektoren

$$\mathbf{a}'_1 = \frac{2\pi}{V_{EZ}} \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \qquad \mathbf{a}'_2 = \frac{2\pi}{V_{EZ}} \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \qquad \mathbf{a}'_3 = \frac{2\pi}{V_{EZ}} \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \qquad (2.25)$$

aufgespannt wird. Bei \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 und \mathbf{a}_3 handelt es sich um die Vektoren, die die Einheitszelle im Realraum definieren und V_{EZ} ist das Realraumvolumen der Einheitszelle. Bei idealen unendlich ausgedehnten Kristallen stellt das Beugungsbild also eine reziproke Abbildung des realen Kristalls dar - siehe Abbildung 2.5. Gleichzeitig bedeutet eine Begrenzung der Struktur im Realraum

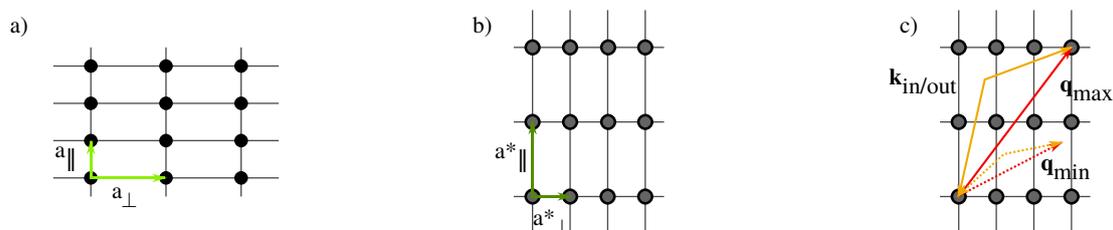


Abbildung 2.5: Abbild einer Kristallstruktur im reziproken Raum. a) Kristallstruktur im Realraum. Die Einheitszelle mit den Streuzentren wird aufgespannt von a_{\parallel} und a_{\perp} . b) Lage der Intensitätsmaxima im reziproken Raum. Sie sind entsprechend a^*_{\parallel} und a^*_{\perp} angeordnet. Die Längenverhältnisse kehren sich um. c) Anordnung der ein- und ausfallenden Strahlen sowie des Streuvektors im Fall der Verstärkung (durchgezogene Linien) und im Fall der Auslöschung (gestrichelte Linien).

jedoch auch eine Verbreiterung der entsprechenden Struktur im reziproken Raum. Wie sich also das Beugungsbild für bestimmte (un-)begrenzte Strukturen darstellt, ist in Abbildung 2.6 skizziert.

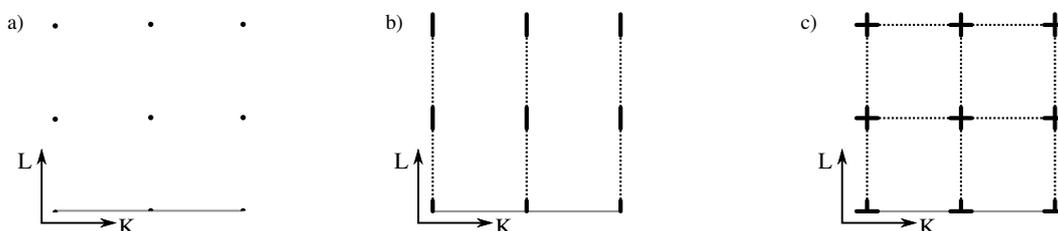


Abbildung 2.6: Skizzen verschiedener zweidimensionaler Beugungsbilder. In grau ist die Probenoberfläche angedeutet. a) Punktförmige Intensitätsmaxima des idealen in beide Richtungen unendlichen Einkristalls. b) Intensitätsverteilung eines dünnen, aber unendlich breiten Films in l-Richtung. c) Intensitätsverteilung in k- und l-Richtung eines in beide Richtungen begrenzten Kristalliten. Diese Verteilung der Intensität kann bis zur Ausbildung von durchgehenden Linien in der entsprechenden reziproken Raumrichtung führen.

Anhand des Zusammenhangs zwischen Streuvektor, Gittervektor und reziproker Raumkoordinate aus den LAUE -Gleichungen 2.24, lassen sich die Ausdrücke für die Gitterfaktoren erneut umformulieren und in die für diese Arbeit genutzte Form bringen.

Substratgitterfaktor:

$$G_S(K, L) = \frac{1}{1 - e^{-(2\pi i \cdot L + \epsilon_{\perp})}} \cdot \frac{1 - e^{(2\pi i \cdot K - \epsilon_{\parallel}) \cdot N}}{1 - e^{2\pi i \cdot K - \epsilon_{\parallel}}} \quad (2.26)$$

Kristallitgittervektor:

$$G_{K_{r,i}}(K, L) = \frac{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp}}} \cdot \frac{e^{-2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel} \cdot B_{l,i}} - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel} \cdot (B_{r,i} + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel}}} \quad (2.27)$$

Betragsquadrat des Gesamtgitterfaktors:

$$|G(K, L)|^2 = \left| G_S(K, L) + \sum_i G_{K_{r,i}}(K, L) \cdot e^{2\pi i \cdot R_i \cdot K} \cdot e^{2\pi i \cdot D_i \cdot L} \right|^2 \quad (2.28)$$

2.1.8 Bestimmung der Kristallithöhe

Da bei einer realen Messung vorher nicht bekannt ist, welche Höhe die Kristallitverteilung hat, gibt es zwei Möglichkeiten. Zunächst kann an Hand der Nebenmaxima zwischen zwei Hauptmaxima im Beugungsbild und den Kenntnissen aus der N-Lagenformel, die Anzahl der Einheitszellen in vertikaler Richtung bestimmt werden.

$$N_{Nebenmaxima} \hat{=} N_{Einheitszellen} - 1 \quad (2.29)$$

Das eine Einheitszelle wieder abgezogen werden muss, ergibt sich aus der Reihenentwicklung in 2.18.

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der Kristallithöhe ist die Scherrer-Gleichung

$$\text{HWB} = \frac{\lambda}{\cos(\theta)} \cdot \frac{1}{H} \quad (2.30)$$

Sie stellt einen Zusammenhang her zwischen der Verbreiterung der Halbwertsbreite des Hauptmaximums ΔHWB , der Wellenlänge λ , dem Beugungswinkel θ und der Dicke des Films H . Zusätzlich ergibt sich ein Proportionalitätsfaktor K , der auch Scherrer-Formfaktor genannt wird. Er beträgt ungefähr 1 [9].

Auch wenn die Scherrer-Gleichung auf Grund der Abhängigkeit von der Wellenlänge und Einfallswinkel für die vorliegende theoretische Auswertung kaum von Nutzen ist, ergibt sich eine Faustregel

$$\Delta \text{HWB} \propto \frac{1}{\Delta H} \quad (2.31)$$

Dies bedeutet, dass die Veränderung der Halbwertsbreite proportional zur Änderung der Lagendicke des Kristallitfilms ist. Insbesondere aber ist die Halbwertsbreite konstant, solange die Kristallithöhe erhalten bleibt.

2.2 Ausleuchtung eines zweidimensionalen Kristallsystems

Wie alle Untersuchungsmethoden die mit Interferenzeffekten arbeiten, wird auch für die Röntgenbeugung kohärente Strahlung benötigt. Dafür bietet sich Synchrotronstrahlung an, doch haben auch diese Strahlungsquellen eine begrenzte Kohärenzlänge. Sie liegt üblicherweise in der Größenordnung einiger Mikrometer [10]. Die Größe der Einheitszellen liegt im Angström Bereich, so dass man davon ausgehen kann, dass maximal 10^4 Einheitszellen kohärent beleuchtet werden können. Für die Untersuchung einer Probe bedeutet dies, dass mehrere kleine Bereiche der Probe kohärent beleuchtet werden können und die so gebeugten Amplituden inkohärent überlagert werden.

In die Berechnung des Gitterfaktors wird dieser Effekt übernommen, indem das Substrat horizontal begrenzt wird und die Kristallitverteilung ebenfalls auf diesen Bereich beschränkt ist. Es werden dann mehrere solcher Konfigurationen berechnet und ihre Gitterfaktoren inkohärent aufaddiert.

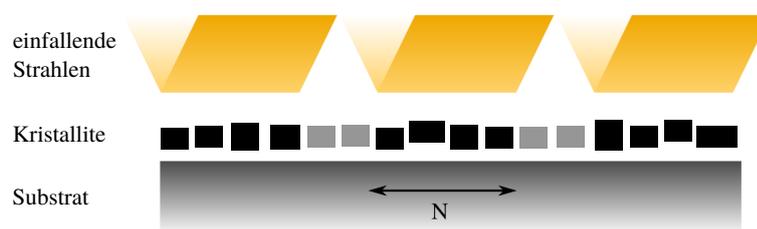


Abbildung 2.7: Ausleuchtung einer Probe. Gelb markiert sind die Bereiche des Strahls, die als kohärent angenommen werden können. Sie beleuchten immer nur einen Bereich von N Einheitszellen des Substrats und damit auch nur einige der Kristallite. Im Gegensatz zu dieser qualitativen Darstellung können sich die kohärent beleuchteten Bereiche durchaus überlagern. Die gebeugte Intensität ergibt sich aus einer inkohärenten Addition dieser Teilintensitäten.

2.3 Das Modell

In [6] wurde ein eindimensionales, vertikales Modell für ein Schichtsystem vorgestellt. Es geht jedoch von einer idealen, unendlichen, perfekten Ausdehnung in horizontaler Richtung aus. Auf diese Art und Weise können Unregelmäßigkeiten in dieser Raumrichtung nicht nachgebildet werden. Außerdem können H- und K-Scans nicht beschrieben werden

Ausgehend davon wurde daher im Rahmen dieser Arbeit ein neues zweidimensionales Modell entwickelt, welches eine Kristallitverteilung auf einem halb-unendlichen Substrat beschreibt. Unterschieden wird außerdem, ob die Kristallite einen festen Aufpunkt auf dem Substrat haben (Fixed Film Model) oder ob es keine Verbindung zwischen Substrat und Kristalliten gibt (Floating Film Model).

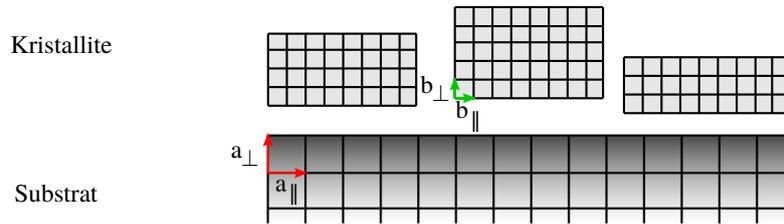


Abbildung 2.8: Allgemeine Darstellung des Modells. Es handelt sich um Kristallite zufälligen Ausmaßes und zufälliger Position auf einem halbundendlichen Substrat. Dem Modell liegt eine rechteckige Struktur zu Grunde, die durch $(a_{\parallel}; a_{\perp})$ bzw. $(b_{\parallel}; b_{\perp})$ aufgespannt wird.

Die Struktur des Modells baut auf einer rechteckigen Einheitszelle auf, so dass die Einheitszelle des Substrats durch den Vektor $\mathbf{a} = (a_{\parallel}; a_{\perp})$ aufgespannt wird. So können auch eventuelle Gitterverzerrungen berücksichtigt werden. Seine Ausdehnung in horizontaler Richtung ist auf N Einheitszellen beschränkt. Die Erklärung dafür wurde in Abschnitt 2.2 gegeben.

Die Kristallit-Einheitszelle wird durch $\mathbf{v} = (b_{\parallel}; b_{\perp}) = (\beta_{\parallel} \cdot a_{\parallel}; \beta_{\perp} \cdot a_{\perp})$ aufgespannt und stellt somit ein skaliertes Abbild der Substrat-Einheitszelle dar. Der Kristallit hat außerdem ausgehend von seinem Aufpunkt eine Höhe von H und eine Ausdehnung B_l links und B_r rechts vom Aufpunkt. Der Aufpunkt des Kristalliten ist vom Ursprung des Substrats aus definiert. Er befindet sich R_i rechts davon und D_i über der Substratoberfläche.

Des Weiteren sollen einige Parameter der Kristallite, wie Höhe, Breite, Position, Abstand zur Oberfläche und Abstand untereinander, zufallsverteilt sein. Je nach Aufwuchsverhalten ergibt sich einer dieser Parameter rechnerisch, wie in den folgenden Abschnitten erklärt wird.

2.3.1 Floating Film Model

Dieses Aufwuchsverhalten wird von nun an mit “Floating Film Model” bezeichnet, da die Aufpunkte der Kristallite keinen festen Bezug zum Substrat haben. So wäre es zum Beispiel beim Ausbilden einer amorphen Interfaceschicht der Fall. Die Erzeugung der Kristallitverteilung erfolgt, indem der erste Kristallit im Abstand D_1 über den Substratursprung gesetzt wird. Dann wird ihm entsprechend der Zufallsverteilung (siehe auch Abschnitt 2.4) eine Breite zugewiesen.

Der nächste Kristallit wird in einem zufälligen, zwischen ein und zwei Kristallit-Einheitszellen betragenden Abstand vom ersten Kristalliten gesetzt. Sein Aufpunkt beträgt somit

$$(B_1 + \text{rand}(0, 1) + 1; D_1).$$

Die Beschränkung auf diesen Abstand ergibt sich, da eine deckende Kristallitschicht erstellt werden soll (Vgl. auch Abbildung 2.11).

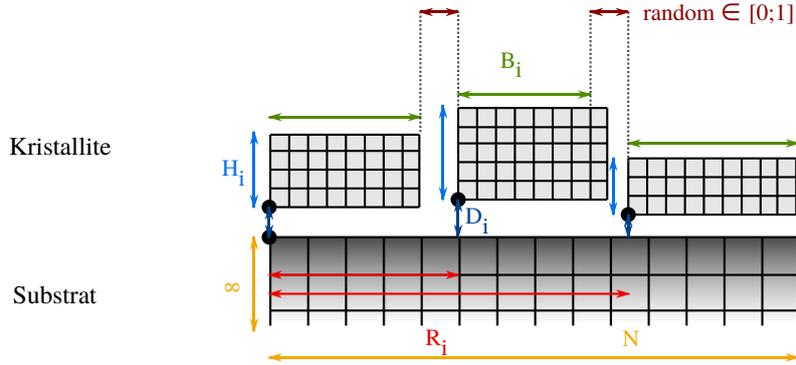


Abbildung 2.9: Floating-Film-Modell. Die Aufpunkte der Kristallite haben keinen festen Bezug zum Substrat, so dass die Kristallite in rein zufälliger Abfolge (dunkelrot markiert) aufwachsen. Außerdem sind die entscheidenden Größen des Systems eingezeichnet: Substratbreite und -höhe (gelb), Kristallitbreite (B_i , grün) und -höhe (H_i , blau), sowie die Position des Aufpunkts als Abstand vom Ursprung (R_i , rot) und vom Substrat (D_i , dunkelblau). Die Aufpunkte von Substrat und Kristalliten sind mit schwarzen Punkten markiert.

Die einzelnen Parameter zur Beschreibung des Modells werden also nach folgendem Schlüssel gebildet:

Parameter	zufallsverteilt	ganzzahlig	Bemerkung
R_i			$R_i = R_{i-1} + B_{i-1} + rand(0, 1) + 1$
D_i	✓		
$B_{l,i}$		✓	Immer 0
$B_{r,i}$	✓	✓	
H_i	✓	✓	

Die Gitterfaktoren für dieses Modell lauten analog zu den Gleichungen 2.26 und 2.27

$$G_S(K, L) = \frac{1}{1 - e^{-(2\pi i \cdot L + \epsilon_{\perp})}} \cdot \frac{1 - e^{(2\pi i \cdot K - \epsilon_{\parallel}) \cdot N}}{1 - e^{2\pi i \cdot K - \epsilon_{\parallel}}} \quad (2.32)$$

$$G_{Kr,i}(K, L) = \frac{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp}}} \cdot \frac{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel} \cdot (B_{r,i} + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel}}} \quad (2.33)$$

Dieses Aufwuchsverhalten setzt voraus, dass es keinerlei Verbindung zwischen Substrat und der Kristallitverteilung gibt. Dies wäre zum Beispiel beim Ausbilden einer amorphen Zwischenschicht der Fall. Da es sich um eine ungeordnete Struktur handelt, muss sie nicht extra modelliert werden, sondern geht lediglich über einen größeren Kristallit-Substrat-Abstand in das Modell ein.

An dieser Stelle sollte jedoch ein Modell entstehen, welches ein direktes Aufwachsen, ohne Zwischenschicht, wiedergibt.

2.3.2 Fixed Film Model

Ausgehend vom Floating Film Model wurde ein Aufwuchsverhalten modelliert, welches das direkte Aufwachsen auf dem Substrat wieder geben kann. Daher wurde die Bezeichnung "Fixed Film Model" gewählt, wie dieses Wachstum von nun an genannt wird.

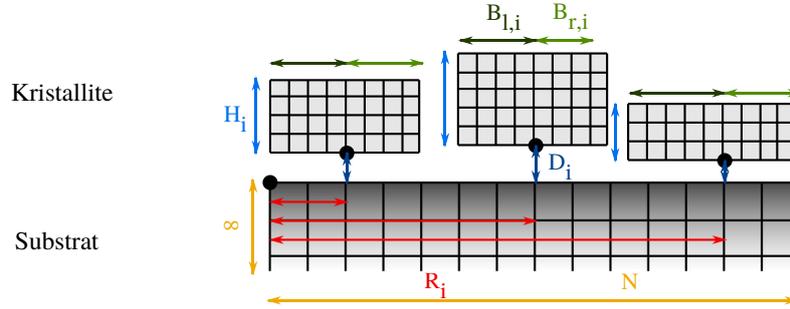


Abbildung 2.10: Fixed-Film-Modell. Die Kristallite wachsen ausgehend von festen Aufpunkten, hier durch schwarze Punkte markiert. Auch hier sind die entscheidenden Größen des Systems eingezeichnet: Substratbreite und -höhe (gelb), Kristallitbreite ($B_{x,i}$, grün) und -höhe (H_i , blau), sowie die Position des Aufpunkts als Abstand vom Ursprung (R_i , rot) und vom Substrat (D_i , dunkelblau). Der Substrataufpunkt ist ebenfalls durch einen schwarzen Punkt gekennzeichnet.

Da die Kristallite bei diesem Aufwachsen einen festen Aufpunkt auf dem Substrat haben, werden zunächst entsprechend einer Zufallsverteilung (Abschnitt 2.4) die horizontalen Aufpunktpositionen R_i der Kristallite bestimmt. Anschließend “wachsen” die Kristallite gleichmäßig aufeinander zu, wie in Abbildung 2.10 skizziert.

Wiederum ergibt sich ein Schlüssel zur Parameterbestimmung:

Parameter	zufallsverteilt	ganzzahlig	Bemerkung
R_i	✓	✓	
D_i	✓		
$B_{l,i}$		✓	$B_{l,i} = \lfloor \frac{R_i - R_{i-1}}{2\beta_{ }} - \frac{1}{2} \rfloor$
$B_{r,i}$		✓	$B_{r,i} = \lfloor \frac{R_{i+1} - R_i}{2\beta_{ }} - \frac{1}{2} \rfloor$
H_i	✓	✓	

Die Gitterfaktoren ergeben sich ebenfalls aus den Gleichungen 2.26 und 2.27 zu

$$G_S(K, L) = \frac{1}{1 - e^{-(2\pi i \cdot L + \epsilon_{\perp})}} \cdot \frac{1 - e^{(2\pi i \cdot K) \cdot N}}{1 - e^{(2\pi i \cdot K)}} \quad (2.34)$$

$$G_{Kr,i}(K, L) = \frac{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp}}} \cdot \frac{e^{-2\pi i \cdot K \cdot \beta_{||} \cdot B_{l,i}} - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{||} \cdot (B_{r,i} + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{||}}} \quad (2.35)$$

Dieses Aufwachsenverhalten ist dem Wachstum, wie es von [11] beschrieben wird, sehr ähnlich. Dort wird davon ausgegangen, dass ein adsorbiertes Atom über die Oberfläche diffundiert, bis es auf ein anderes Adsorbatatom oder eine Fehlstelle trifft. An diese Nukleationskeime lagern sich dann weitere Adsorbatatome an und es entsteht ein Kristallit.

Das Fixed Film Model entspricht daher in guter Näherung dem Wachstumsverhalten realer Schichten.

Bei beiden Aufwuchsverhalten wird davon ausgegangen, dass die Kristallite das Substrat vollständig bedecken. Das heißt der Abstand zwischen zwei Kristalliten ist zwar vom Modell abhängig, beträgt jedoch stets maximal 2 Kristallit-Einheitenzellen. Für das Floating Film Model ergibt sich dies aus dem zufälligen Abstand und für das Fixed-Film-Model ist es eine logische Schlussfolgerung, wie in Abbildung 2.11 gezeigt.

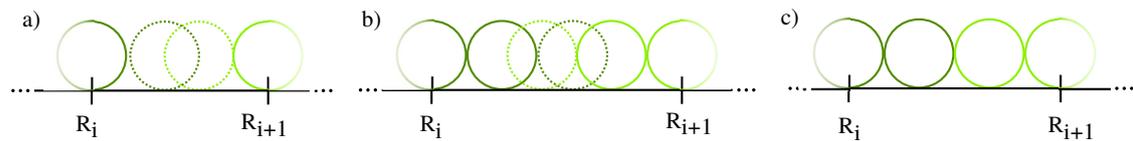


Abbildung 2.11: Kristallitwachstum entsprechend dem Fixed Film Model. a) und b) sind die Fälle, in denen ein Abstand zwischen den Kristalliten entsteht, da eine weitere Einheitszelle nicht passen würde. c) Für diesen Fall wachsen die Kristallite lückenlos aneinander, so dass eine echt geschlossene Schicht entsteht.

2.4 Gammaverteilung

Einige Parameter des Modells sind zufallsverteilt. Die Wahl der Verteilungsfunktion bedarf jedoch einer genaueren Betrachtung, da sie die physikalischen Eigenschaften des Modells repräsentieren soll.

Folgende Ansprüche werden an die Zufallsverteilung gestellt:

- Es soll nur positive Zufallswerte geben, da es sich um die Abmessungen eines Kristalliten handelt.
- Es soll eine scharfe Grenze hin zu kleinen Zufallszahlen geben, weil es immer eine kritische Grenze für die Nukleation gibt, ab der es zur Kristallitbildung kommt.
- Gleichzeitig soll die Verteilung aber zu größeren Werten auslaufen, um auch größere Kristallite zu ermöglichen.
- Die Verteilung soll normiert sein.
- Die Verteilung soll stetig sein. Diese zuletzt genannten Eigenschaften werden für den Algorithmus benötigt, mit dem die eigentliche Zufallszahl bestimmt wird.

Auf Grund dieser Eigenschaften wurde die Gammaverteilung ausgewählt. Ihre Dichteverteilungsfunktion lautet:

$$f(x) = \frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\alpha)} \cdot x^{\alpha-1} \cdot e^{-\lambda \cdot x} \quad (2.36)$$

mit $x > 0$. Sie ist im positiven definiert, ist asymmetrisch mit einem steilen Abfall hin zu kleinen Werten und ist sowohl normiert als auch stetig. Außerdem geht sie für $\alpha = 1$ in die Exponentialfunktion über. Diese ist wiederum ein gängiges Modell für die Verteilung von Nukleationskeimen auf Oberflächen.

Wichtige Größen der Verteilung sind ihr Erwartungswert

$$\bar{x} = \frac{\alpha}{\lambda} \quad (2.37)$$

sowie die Varianz, bzw. das Quadrat der Standardabweichung.

$$\sigma^2 = \frac{\alpha}{\lambda^2} \quad (2.38)$$

2.4.1 Bestimmung einer Zufallszahl aus einer Verteilung

Um aus einer gegebenen Dichteverteilungsfunktion $f(j)$ (ganzzahlige) Zufallszahlen herauszuziehen, bietet sich folgende Vorgehensweise an:

Durch die Normierung kann die Fläche unter der Dichteverteilungsfunktion auf ein Intervall von $I = [0; 1]$ abgebildet werden. Dieses Intervall wird dann weiter in i Teilintervalle unterteilt, so dass gilt

$$i \rightarrow \left[\int_{j=1}^{i-1} f(j) dj; \int_{j=0}^i f(j) dj \right]. \quad (2.39)$$

Wird dann eine Zufallszahl aus I gewählt, muss geprüft werden, in welchem Teilintervall sie liegt. Dessen fortlaufende Nummer i ist dann die gesuchte Zahl.

Dieses Verfahren funktioniert sowohl mit ganzen Zahlen, als auch mit Gleitkommazahlen. Für Gleitkommazahlen muss jedoch vorher festgelegt werden, wie fein die Teilintervalle seien sollen. Außerdem muss eine Obergrenze für die Anzahl der Teilintervalle gesetzt werden, da die Gamma-verteilung bis ins positive Unendliche definiert ist und der Algorithmus sonst nicht terminieren könnte. Als angemessene Obergrenze hat sich dabei ein Wert für i herausgestellt, bei dem die

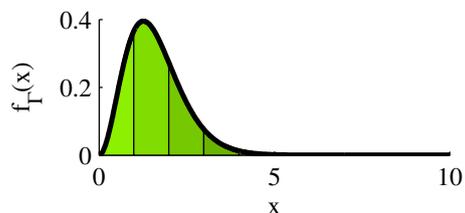


Abbildung 2.12: Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f_{Γ} mit den Parametern $\alpha = 2$ und $\lambda = 1$. Zur Ableitung einer Zufallszahl wird ihr Integral aufgeteilt, wie durch die farbigen Flächen angedeutet. Diese Flächen dienen der Einteilung eines Intervalls, wie in Abbildung 2.13.

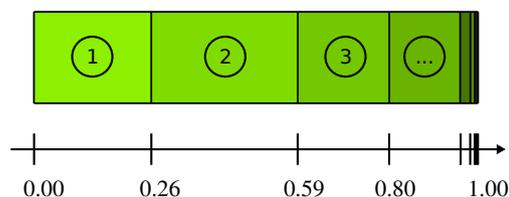


Abbildung 2.13: Das zu Abbildung 2.12 gehörige Intervall. Wird nun eine Zahl zwischen 0 und 1 gewürfelt, gibt der Index des Intervalls, in dem sich diese Zahl befindet, die gesuchte Zufallszahl an.

Wahrscheinlichkeitsdichte erstmals unter ein Promille sinkt. Aus Effizienzgründen sollte außerdem erst bei dem Doppelten des Erwartungswerts der Verteilung mit der Suche nach einer Obergrenze begonnen werden und mit einer relativ großen Schrittweite gearbeitet werden. Mit der selben Begründung wird i_{max} auch mindestens auf 100 gesetzt.

Um die Normierung zu prüfen, wurde das Integral der so begrenzten Dichteverteilungsfunktion für verschiedene Verteilungen bestimmt und auf die vierte Nachkommastelle gerundet. Eine Auswahl ist hier aufgeführt.

α	λ	i_{max}	$\int_0^{i_{max}} f(x) dx$
1.0E+0	1.0E-1	100	1.0000
1.0E-1	1.0E+0	100	1.0000
1.0E+3	1.0E+1	200	1.0000
5.0E+2	2.0E+0	500	1.0000

Die Ergebnisse zeigen, dass der Fehler durch diese Obergrenze durchweg weit unter einem Promille liegt.

Wie genau die Histogramme der so ausgewählten Zahlen der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion folgen, ist noch einmal in Abbildung 2.14 aufgezeigt.

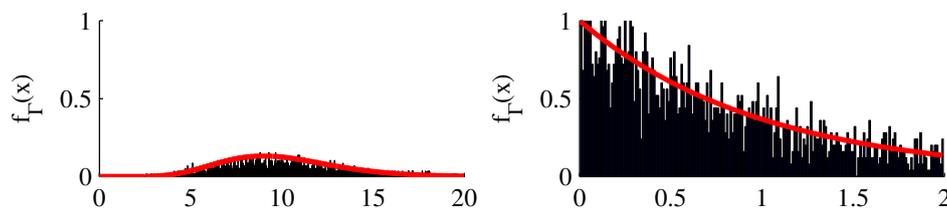


Abbildung 2.14: Normierte Histogramme der mit dem Algorithmus aus Abschnitt 2.4.1 bestimmten Zufallszahlen. Die rote Linie zeigt die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion an. Ihre Parameter lauten $\alpha = 10$, $\lambda = 1$ für das linke Bild und $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ für das rechte Bild.

3 BaSOX

BaSOX steht für Basic Simulation Of XRD und ist der Name des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programms.

Es wurden die in Abschnitt 2.3 vorgestellten Modelle eingebaut, so dass das Betragsquadrat des Gitterfaktors $|G(K, L)|^2$, das in Abschnitt 2.1 eingeführt wurde, für einen zweidimensionalen Ausschnitt des reziproken Raums berechnet werden kann.

Im Folgenden soll nun näher auf den Aufbau und die Implementation des Programms eingegangen werden.

3.1 Wahl der Programmiersprache

In die Wahl der Programmiersprache sind mehrere Überlegungen eingeflossen:

Das Programm soll plattformunabhängig sein, damit es nicht von der Systemarchitektur abhängig und somit portabel ist.

Des Weiteren handelt es sich um eine sehr grundlegende Berechnung der Röntgenbeugung. Daher soll die Möglichkeit offen gehalten werden, diese später erweitern zu können, z.B. indem ein reales Material eingepflegt und der Strukturfaktor, siehe Abschnitt 2.1.6, wieder aufgenommen werden kann. Dazu bietet sich eine modulare Gestaltung im Rahmen der Objektorientierten Programmierung an. Dies erleichtert außerdem die Testphase inklusive Fehlersuche enorm und macht den Code wesentlich übersichtlicher.

Ein weiterer Aspekt ist die Möglichkeit die Ergebnisse graphisch darzustellen. Außerdem gibt es trotz der Einfachheit des Modells einen großen Satz an variablen Parametern, so dass sich eine graphische Benutzeroberfläche anbietet.

Ausgehend von diesen Spezifikationen wurde das Programm in Java [12] mit einer graphischen Oberfläche implementiert. Die programmiertechnischen Konzepte sollen im folgenden Abschnitt genauer erläutert werden. Anschließend wird der Programmablauf skizziert und kurz auf die Maßnahmen zur Laufzeitoptimierung eingegangen.

3.1.1 Implementation

Objektorientierte Programmierung

Das Programm wurde nach den Konzepten der Objektorientierten Programmierung entwickelt. Die Struktur ist im reduzierten UML-Diagramm in Abbildung 3.1 zu sehen, welches die Beziehungen der Klassen untereinander auf standardisierte Weise aufzeigt.

Es wurde also jede Funktionalität des Programms in einer eigenen Klasse abgebildet. Durch diese Modularisierung wird die Kommunikation der Klassen untereinander auf das nötigste beschränkt. Außerdem unterliegen die Datenzugriffe so einer strengen Kontrolle, was dem Ausschluss von Seiteneffekten dient.

Model View Controller

Das Model View Controller Konzept sieht vor, dass Datenhaltung (Model), Benutzeroberfläche (View) und Funktionalität (Controller) des Programms strikt voneinander getrennt werden.

Im Rahmen der Objektorientierung ist dies umzusetzen, indem man die Klassen so konstruiert, dass sie eindeutig einem Bereich zugewiesen werden können, wie auch in Abbildung 3.1 zu sehen. Durch dieses Konzept wird die Kommunikation der Klassen noch weiter eingeschränkt. Im Prinzip ist der Controller die Schaltzentrale. Er wird benachrichtigt, wenn eine Eingabe in der View getätigt wurde. Diese Eingabe wird von ihm bearbeitet und gegebenenfalls an das Model weitergeleitet. Der Controller kann außerdem Daten aus dem Model auslesen, sollte dies nötig sein. Weiterhin regelt er den Ablauf einer Berechnung, so zum Beispiel die Aufteilung auf Threads, wie in Abschnitt 3.1.2 vorgestellt.

Die View liefert lediglich die graphische Darstellung der Benutzeroberfläche und das Model eine geeignete Datenstruktur. Wichtig ist dabei, dass weder Model noch View Funktionalität besitzen, die über `getter`- und `setter`-Methoden hinausgehen.

JMatLink

In Java stehen nur sehr eingeschränkte Bibliotheken zur Ausgabe von Graphen zur Verfügung. Gerade für logarithmische und zweidimensionale Plots findet sich darunter keine zufriedenstellende Lösung.

Deswegen baut das Programm mit Hilfe der Bibliothek JMatLink [13] eine Verbindung zum Programm MatLab[®] auf und übergibt die für einen Plot nötigen Daten. MatLab liefert daraufhin eine Grafik an den JMatLink, die den gewünschten Plot enthält und direkt in die graphische Benutzeroberfläche eingebunden werden kann.

Gammaverteilung

Eine Umsetzung der Gammaverteilung liegt ebenfalls nicht als offizielle JAVA Bibliothek vor. Doch gibt es von anderen Quellen bereits implementierte Klassen, die die gewünschte Funktionalität bieten. In BaSOX ist daher die SSJ-Bibliothek der Universität Montreal eingebunden [14].

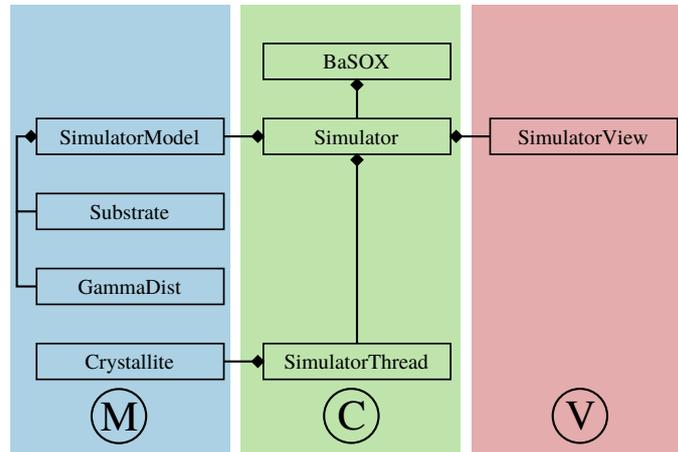


Abbildung 3.1: Reduziertes UML-Klassendiagramm (Unified Markup Language) von BaSOX. Die farbigen Bereiche markieren die Zugehörigkeit zu Model (M), View (V) und Controller (C).

3.1.2 Programmablauf und Laufzeitoptimierung

Der Programmablauf ist größtenteils linear: Es wird eine Konfiguration eingelesen, entweder aus der Benutzeroberfläche oder aus einer Datei. Ausgehend davon wird das Substrat erzeugt. Anschließend wird eine Kristallitverteilung bestimmt und die Intensität für jedes (K, L) -Wertepaar des gewünschten Ausschnitts aus dem reziproken Raum berechnet. Wie in Abschnitt 2.2 erläutert, muss diese Rechnung mehrfach wiederholt werden und die erhaltenen Gitterfaktoren aufsummiert werden. Da das Substrat sich aber nicht ändert, reicht es bei der erneuten Kristallitverteilung in den Programmablauf einzusetzen. Ist die gewünschte Anzahl an Verteilungen berechnet, wird das Ergebnis angezeigt und auf Wunsch gespeichert.

Die Laufzeit des Programms verhält sich proportional zur Auflösung, mit der der gewählte Ausschnitt des reziproken Raums berechnet werden soll. Auch eine Verkleinerung der Kristallite, so dass mehr auf einen Substratausschnitt passen, führt zu einem merklichen Anstieg der Laufzeit. Dennoch gibt es zwei Ansatzpunkte, durch die die Laufzeit enorm gesenkt werden konnte.

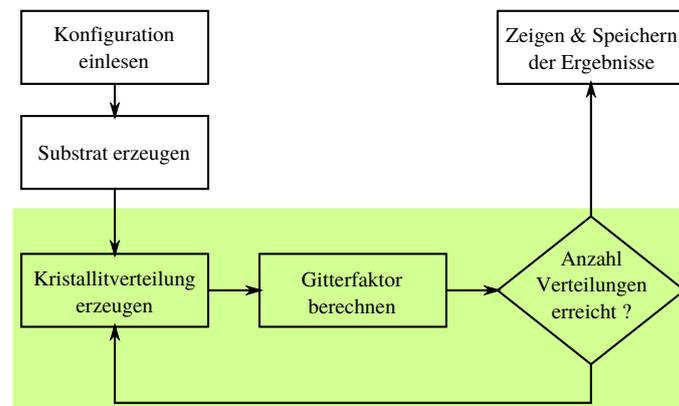


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Programmablaufs. Der grün hinterlegte Abschnitt kann parallelisiert werden.

Matrizenrechnung

Die ganze Rechnung findet auf großen zweidimensionalen Arrays statt, so dass es immer wieder zu doppelten `for`-Schleifen kommt. Es bietet sich also an, so viele wie möglich davon zusammenzufassen. Statt also die Gitterfaktoren von Substrat und Kristallitverteilung in getrennten Schleifen zu berechnen, lohnt es sich das Programm so umzustrukturieren, dass die gesamte Berechnung in einer einzelnen doppelten `for`-Schleife berechnet werden kann.

Mit jeder Schleife kann so ein Berechnungsaufwand proportional zur Auflösung eingespart werden.

Parallelisierung

Die einzelnen Substratausschnitte mitsamt ihrer Kristallitverteilung können völlig unabhängig voneinander ausgewürfelt und berechnet werden. Durch die spätere inkohärente Überlagerung muss nicht einmal die Phaseninformation erhalten bleiben.

Es bietet sich also an, den Programmablauf an dieser Stelle zu parallelisieren. Die einzelnen Berechnungen werden dazu an Threads weitergegeben, so dass mehrere Substratausschnitte gleichzeitig berechnet werden können. Bei einem Dual-Core-Prozessor kann man so die Laufzeit grob halbieren, bei einem Quad-Core sogar vierteln. Aber auch bei einem einfachen Prozessor kann, sofern ein guter Scheduler vorhanden ist, Laufzeit eingespart werden.

3.2 Das fertige Programm

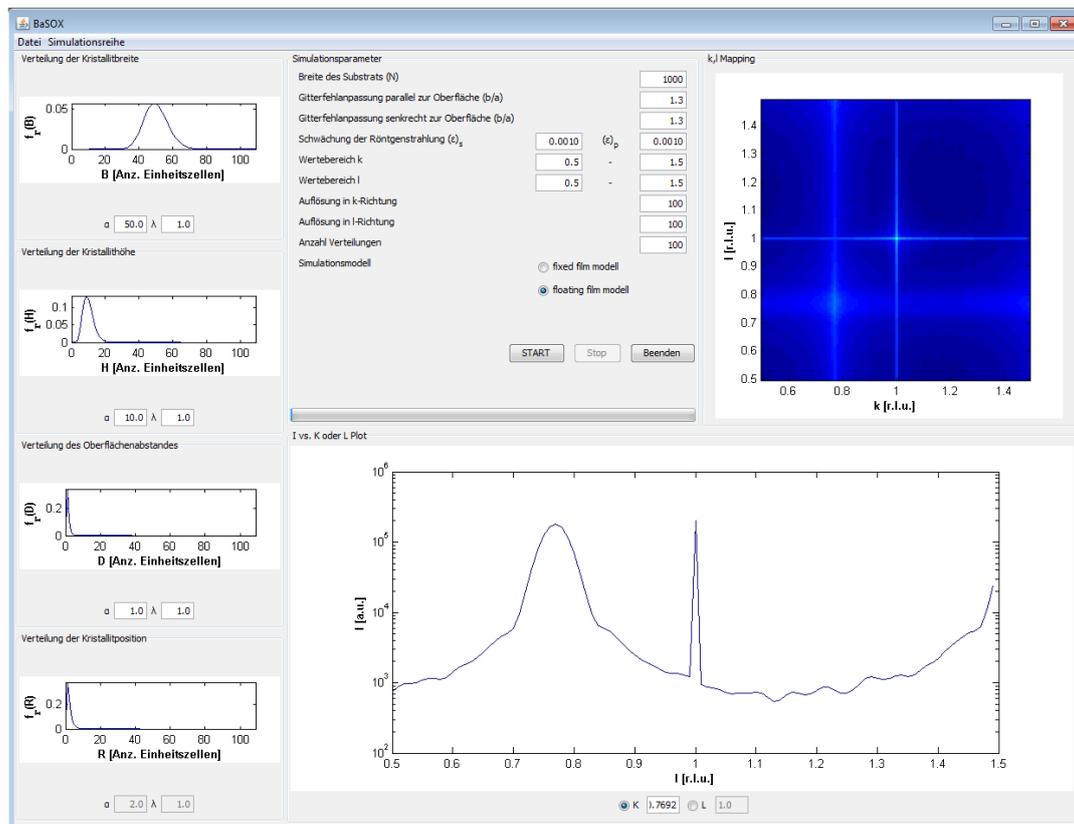


Abbildung 3.3: Screenshot der BaSOX Benutzeroberfläche. Im linken Drittel sind die Gamma-Verteilungen der Zufallsparameter abgebildet. Mittig oben befinden sich die sonstigen Parameter, sowie die Programmsteuerung. Der große untere Bereich dient der Darstellung eines Scans durch den reziproken Raum. Oben rechts befindet sich nach einer erfolgreichen Berechnung das Mapping des zweidimensionalen Ausschnitts aus dem reziproken Raum.

BaSOX ist in der Lage zu einer gegebenen Konfiguration einen zweidimensionalen Ausschnitt aus dem reziproken Raum zu berechnen. Mit Konfiguration ist dabei ein vollständiger Parametersatz, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, gemeint. Der berechnete Ausschnitt liegt in der k, l Ebene bei $h = 0$. Das Programm bietet außerdem die Möglichkeit eindimensionale Scans durch diesen Ausschnitt zu legen, um detailliertere Informationen zu erhalten.

Die Konfiguration kann entweder über die Maske eingegeben werden oder aus einer entsprechend formatierten Textdatei eingelesen werden. Für die zufallsverteilten Parameter wird dabei die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f_{\Gamma}(\alpha, \lambda)$ über α und λ angegeben.

Welche Werte diese Parameter konkret annehmen, wird erst bei der Berechnung entschieden. Um dennoch einen Überblick zu erhalten, wird die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu den gegebenen Parameter zusätzlich graphisch dargestellt.

Nach der Berechnung kann der Benutzer entscheiden, ob er die Konfiguration speichern oder verwerfen möchte. Ein Fortschrittsbalken zeigt während der Berechnung die geschätzte Dauer an, so dass eine bessere Zeiteinteilung möglich ist.

Sollen mehrere Konfigurationen berechnet werden, z.B. über ein Wochenende hinweg, gibt es die Möglichkeit sie in eine Schlange einzureihen. Bei dieser Vorgehensweise wird automatisch am Ende einer Rechnung die Intensitätsinformation gespeichert.

3.2.1 Parameter

Es folgt eine kurze Erklärung der einzelnen Parameter, die für die Berechnung variiert werden können, sowie die Angabe eines geeigneten Wertebereichs.

Zufallsverteilte Parameter

Kristallitbreite

Die gammaverteilten Breiten der einzelnen Kristallite. Dieser Parameter wird für das Fixed-Film-Model deaktiviert, da in diesem Modell die Breite von den festen Aufpunkten abhängt. Die Breite hängt außerdem stark vom vorliegenden Material ab, daher kann kein Wertebereich definiert werden.

Kristallithöhe

Die gammaverteilten Höhen der einzelnen Kristallite. Sie orientiert sich an der Dicke des Kristallitfilms, welcher im Bereich dünner Schichten auf Oberflächen wiederum wohldefiniert ist durch die Menge an aufgedampften Material. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Bereich von 10 - 50 Einheitszellen untersucht. Dies reicht aus um alle nötigen Effekte zu erläutern. Im experimentellen Bereich gibt es für diesen Parameter keine Beschränkung.

Oberflächenabstand

Der gammaverteilte Abstand zwischen Substrat und Kristallitaufpunkt. Wird eine Interface-Schicht, wie im vorliegenden Fall, ausgeschlossen, so liegt dieser Abstand in der Größenordnung von einer Einheitszelle.

Kristallitposition

Die gammaverteilte Position der Kristallitaufpunkte. Dieser Parameter wird für das Floating-Film-Model deaktiviert, da sich dort die Aufpunkte aus den vorherigen Kristallitbreiten und ihren Abständen zueinander ergibt. Auch hier gilt, dass die Breite der Kristallite sehr stark vom vorliegenden Material abhängt und deswegen kein Wertebereich definiert werden kann.

Feste Parameter

Breite des Substrats

Die Breite des Substrats. Wie in Abschnitt 2.2 erläutert, sollte er im Bereich von 10^3 bis 10^5 Einheitszellen liegen.

Gitterfehlpassung parallel/senkrecht zur Substratoberfläche

Die Gitterfehlpassungen $\beta_x = \frac{b_x}{a_x}$. Auch sie sind materialabhängig, so dass kein Wertebereich angegeben werden kann.

Abschwächung der Röntgenstrahlung

Hierbei handelt es sich um die Koeffizienten, um die die Röntgenstrahlung beim Eindringen in das Substrat geschwächt wird (Vgl. Abschnitt 2.1.7). Erfahrungsgemäß liegen sie in der Größenordnung von 10^{-3} , was bedeutet, dass die Intensität des Röntgenstrahls mit jeder Lage des Substrats um ein Promille absinkt.

Wertebereich k/l

Über diese Werte wird der Ausschnitt des reziproken Raums angegeben, der berechnet werden soll.

Auflösung in k/l-Richtung

Diese Parameter geben an, mit welcher Genauigkeit der angegebene Bereich aufgelöst werden soll.

Anzahl Verteilungen

Die Anzahl an Kristallitverteilungen, die für eine Konfiguration berechnet werden sollen (Vgl. Abschnitt 2.2).

Simulationsmodell

Auswahl des Aufwuchsverhaltens. Hier kann zwischen dem Floating und dem Fixed Film Model gewählt werden.

4 Auswertung

BaSOX berechnet, wie bereits beschrieben, einen zweidimensionalen Ausschnitt des Betragsquadrats der Gitterfaktoren aus dem reziproken Raum. Ein solches Mapping ist in Abbildung 4.1 abgebildet.

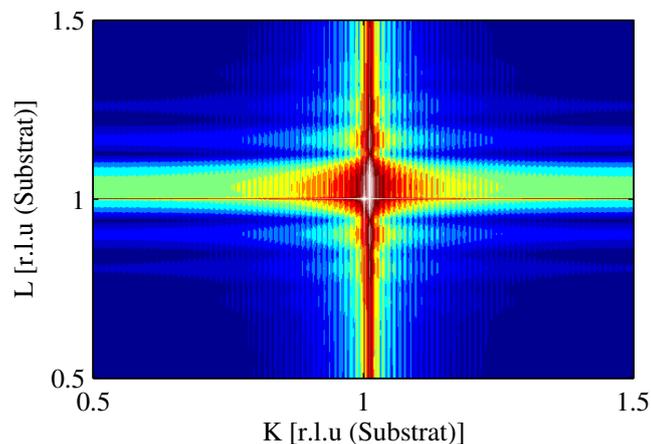


Abbildung 4.1: Ein Mapping zu Konfiguration A.64. Gut zu erkennen sind der scharfe Substratpeak bei (1.00,1.00), sowie der etwas verschmierte Filmpeak bei ca. (1.01,1.03). Weiterhin sind langwellige Oszillationen in l - und kurzwellige Oszillationen in k -Richtung zu erkennen.

Es ist gut geeignet, um den generellen Einfluss eines Parameters darzustellen. Für detailliertere Informationen bietet es sich jedoch an, Querschnitte dieser Mappings zu untersuchen. Dabei kann außerdem ausgenutzt werden, dass Veränderungen parallel zur Substratoberfläche in k -Richtung und solche senkrecht dazu in l -Richtung zu erkennen sind.

Im Rahmen der Auswertung tauchen dabei sechs bestimmte Scans immer wieder auf. Dabei handelt es sich um Scans durch die Hauptmaxima des Substrats bei $k/l = 0$ und 1, sowie durch den ersten vom Substratpeak getrennten Filmpeak. Sie wurde ausgewählt, da es sich um die Scan-Positionen handelt, die typischerweise mit einem Diffraktometer angefahren werden. Die Peaks dienen dabei zur Justage. Außerdem handelt es sich um die Positionen an denen die Halbwertsbreite der Peaks zu weiteren Auswertung bestimmt werden. Die 3 beschriebenen Scans werden sowohl in k - als auch in l -Richtung angelegt. Die Nummerierung kann Abbildung 4.2 entnommen werden.

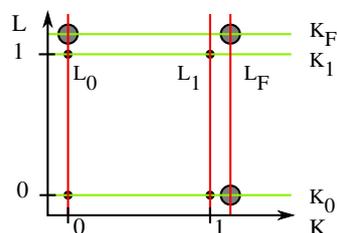


Abbildung 4.2: Skizze der typischen Scan Positionen. Jeweils ein Scan in l -Richtung durch die Haupt-Substratpeaks bei 0 und 1 (L_0 , L_1), sowie durch den ersten vom Substratpeak getrennten Filmpeak (L_F). Das gleiche in k -Richtung bezeichnet mit K_0 , K_1 und K_F .

In den folgenden Abschnitten werden die Einflüsse der einzelnen Parameter auf den Gitterfaktor untersucht. Um Seiteneffekte auszuschließen, wird dabei für eine Serie von Konfigurationen immer nur ein Parameter variiert und alle anderen konstant gehalten.

4.1 Überprüfung des Modells

Die Einführung eines neuen Modells ist immer mit einer gewissen Unsicherheit verbunden, da es noch keine gesicherten Erkenntnisse gibt. Es können aber sehr wohl die Eigenschaften überprüft werden, die aus experimentellen Messungen bekannt sind, um das Modell zu testen.

Einige solcher allgemein bekannten Effekte, die die Röntgenbeugung zeigen sollte, werden im Folgenden untersucht.

Substratpeaks

Das Substrat ist in vertikaler Richtung halbinendlich ausgedehnt, deswegen sollte es zu scharfen Intensitätsmaxima an den entsprechenden Positionen im reziproken Raum kommen. Dieses Verhalten wird korrekt wiedergegeben, wie Abbildung 4.3 zeigt.

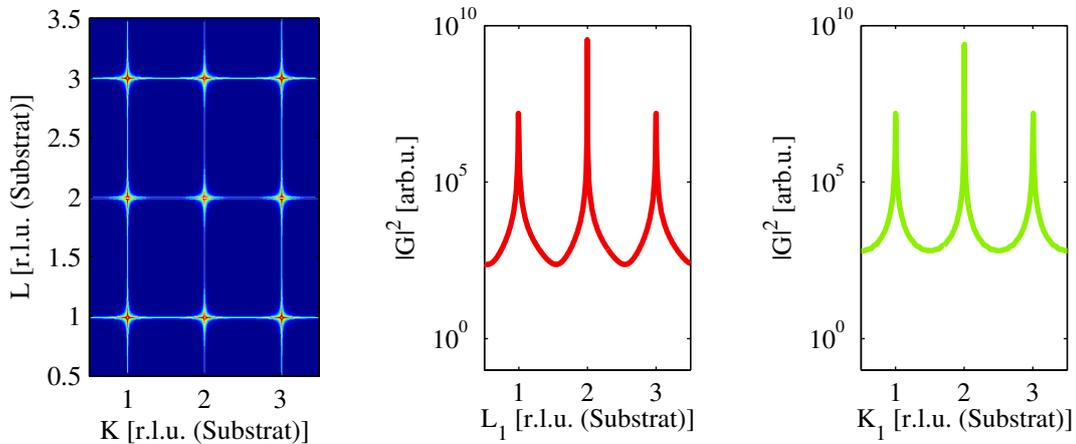


Abbildung 4.3: Die Ausgabe für eine Konfiguration mit reinem Substrat, d.h. ohne Kristallitverteilung. Die scharfen Intensitätsmaxima an den ganzzahligen Positionen sind sowohl im Mapping als auch in den Einzelscans gut zu erkennen.

Die Ausbildung der Linien parallel zur k - und l -Achse sind auf die Dämpfung der Röntgenstrahlung im Substrat zurückzuführen. Sie bedingt, dass die Strahlen nicht mehr ideal verstärkt, bzw. ausgelöscht werden (Vergleiche auch Abbildung 2.6). So wird das Intensitätsmaximum abgeschwächt und verbreitert, wie in den L_1 - und K_1 -Scans gut zu erkennen ist.

Dass sich die Intensitätsmaxima exakt auf den ganzzahligen Positionen befinden, zeigt außerdem die Normierung des Systems auf das Substrat. Denn in die Berechnung der Gitterfaktoren fließen keine absoluten Größenangaben ein, sondern lediglich das Verhältnis der Gitterkonstanten von Substrat und Kristalliten in Form der Gitterfehlpassung β .

Substratfortsetzung

Wählt man für die Kristallitverteilung eine solche Konfiguration, dass sie eine Fortsetzung des Substrats beschreibt, sollte das entstehende Beugungsbild dem eines reinen Substrats entsprechen. Für die Konfiguration A.63 bedeutet dies, dass eine Gitterfehlpassung von $\beta_{||} = \beta_{\perp} = 1$ und ein Abstand von $D = 0$ gewählt wurde.

Dieser Fall kann mit dem Modell nachgestellt werden, wie in Abbildung 4.4 zu erkennen. Der Vergleich mit dem reinen Substrat in Abbildung 4.3 zeigt kaum Unterschiede. Zwar ist im Mapping eine zusätzliche Verbreiterung der Linien in k -Richtung zu erkennen, die L_1 - und K_1 -Scans weisen jedoch nach, dass es sich dabei lediglich um ein leicht erhöhtes Untergrundrauschen handelt.

Dieser Nebeneffekt wird wohl durch die nicht ganz ideale Fortsetzung des Substrats verursacht. Denn auch wenn für die zufallsverteilten Kristallitparameter eine sehr geringe Standardabweichung gewählt wurde, so dass sie die Substratfortsetzung beschreiben, kann es immer zu statistischen Abweichungen vom Erwartungswert kommen.

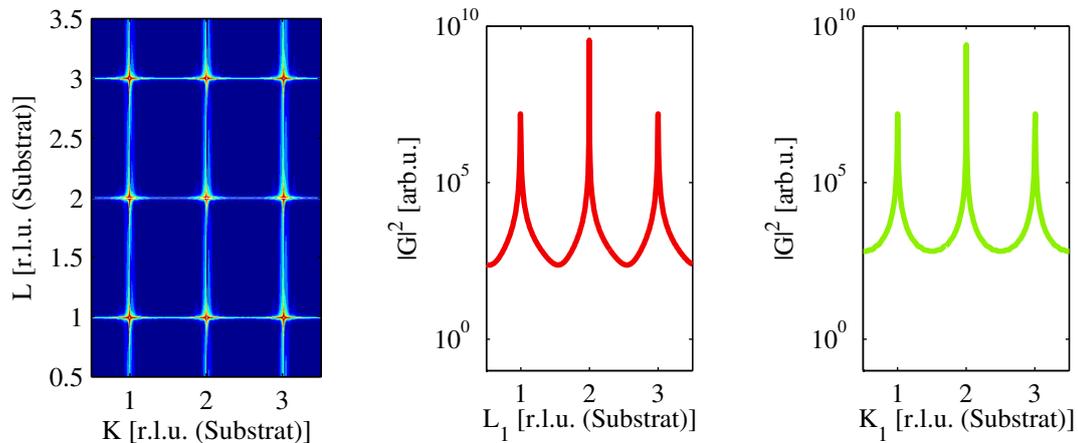


Abbildung 4.4: Die Ausgabe für Konfiguration A.63. Sie unterscheidet sich nur minimal von der Ausgabe des reinen Substrats in Abbildung 4.3.

Oszillationen einer wohlgeordneten Schicht

Beschreibt die Konfiguration eine wohlgeordnete, vom Substrat unterscheidbare Kristallitverteilung, sollten in l und in k -Richtung Oszillationen zu erkennen sein. Und zwar derart, dass die Anzahl Oszillationen zwischen zwei Bragg Peaks einen Rückschluss auf die Breite, bzw. Höhe der Kristallite zulassen. Dies geht direkt aus der N-Spalt Funktion 2.23 hervor.

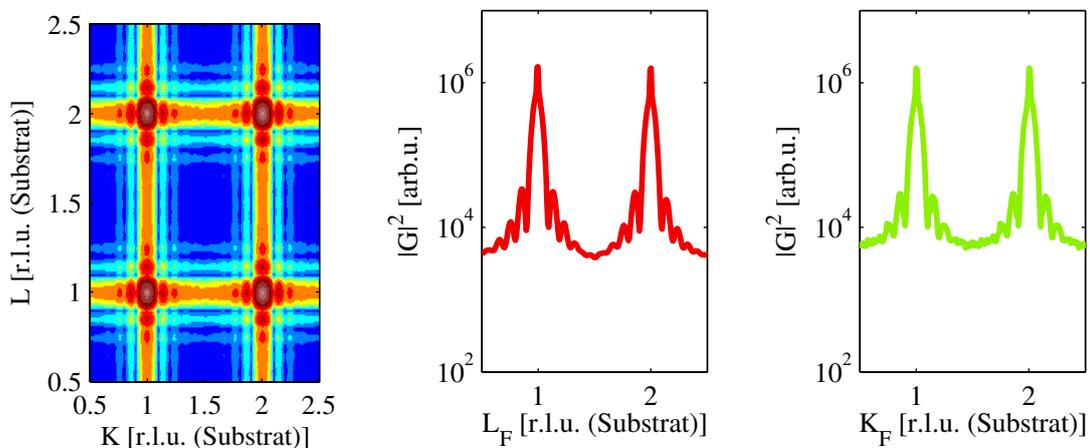


Abbildung 4.5: Die Ausgabe für Konfiguration A.65. Sowohl im Mapping als auch in den Scans sind die Oszillationen gut zu erkennen.

In Abbildung 4.5, welche zu Konfiguration A.65 gehört, ist dieses Verhalten sehr gut zu erkennen. Die Substratpeaks an den ganzzahligen Positionen bleiben bestehen. Die geringe Höhe der Peaks wird durch die geringen Auflösung, mit der diese qualitativen Scans angefertigt wurden, verursacht. Zusätzlich sind nun aber auch die Oszillationen zu erkennen, die durch die endliche Ausdehnung der Kristallite verursacht werden.

Es handelt sich um Kristallite gleicher Höhe und Breite von 10 Einheitszellen. Die Auswertung liefert die, laut Abschnitt 2.1.8 geforderten, 9 Nebenmaxima. Die Anzahl der Oszillationen erlaubt also einen direkten Rückschluss auf die Anzahl Einheitszellen in der jeweiligen Raumrichtung. Natürlich wurde dieser Zusammenhang an mehreren Konfigurationen überprüft. Abbildung 4.6 zeigt z.B. noch einmal das Beugungsbild für Kristallite gleicher Höhe und Breite von 3 Einheitszellen.

Wie bereits in beiden Abbildungen zu erkennen, sind die kleineren Oszillationen teilweise kaum noch vom Rauschen zu unterscheiden. In diesem Fall kann aber über den Peak-to-Peak-Abstand der erkennbaren Maxima die Anzahl der Minima abgeschätzt werden.

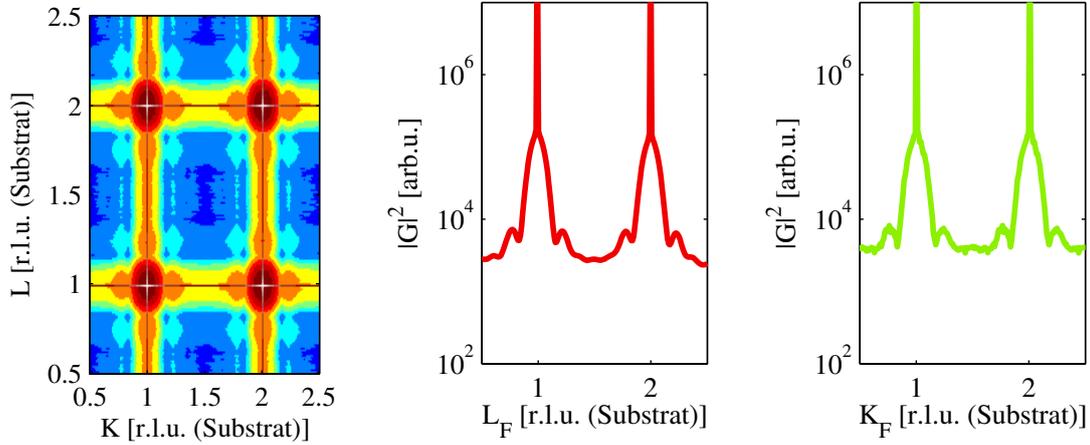


Abbildung 4.6: Die Ausgabe für Konfiguration A.66. Auch hier sind die Oszillationen sowohl im Mapping als auch in den Scans gut zu erkennen. Eine genauere Auswertung zeigt 2 Nebenmaxima zwischen den beiden Hauptmaxima.

Verschiebung der Bragg-Peaks

Wählt man eine von eins verschiedene Gitterfehlpassung, so sollten sich die Bragg-Peaks des Kristallitfilms entsprechend verschieben. Denn aus der Überführung in den reziproken Raum und der damit verbundenen Längenumkehr ergibt sich, dass ihre Position um einen Faktor $1/\beta_x$ relativ zum Substratpeak verschoben wird. In Abbildung 4.1 ist ein Mapping zu sehen, dem eine Gitterfehlpassung von

$$\beta_{||} = 1 - \frac{\pi}{300} \Rightarrow k_{1,max} \approx 1.03 \cdot n$$

$$\beta_{\perp} = 1 - \frac{\pi}{100} \Rightarrow l_{1,max} \approx 1.01 \cdot n$$

zu Grunde liegt. Es ist zu erkennen, dass der Filmpeak genau an der vorhergesagten Position von (1.03,1.01) liegt. Damit ist sichergestellt, dass das Modell auch dieses Verhalten richtig wiedergibt.

Bei all diesen Überprüfungen wurde mit streng geordneten Kristallitverteilungen gearbeitet. Das heißt die zufallsverteilten Parameter wurden mit einer Standardabweichung von 1 gebildet, so dass von nahezu uniformen Kristalliten ausgegangen werden kann.

4.2 Vergleich des Aufwachsverhaltens

Zu Beginn dieser Arbeit wurde zwei Möglichkeiten vorgestellt, wie die Kristallitverteilung umzusetzen sei. Der Hauptunterschied ist dabei, dass die Kristallitaufpunkte im Fixed Film Model direkt über Aufpunkten der Substrateinheit zelle sitzen, während das Floating Film Model keinen Bezug zwischen Substrat und Kristallitpositionen vorsieht (Vgl. Abbildungen 2.9 und 2.10). Ein Vergleich der Ergebnisse, die mit den beiden Vorgehensweisen für verschiedenste Konfigurationen erzielt wurden, zeigt nahezu keinen Unterschied. Er ist in Abbildung 4.7 zu sehen. Zu der Abbildung sei bemerkt, dass die Ergebnisse für eine bessere Übersicht gegeneinander verschoben wurden.

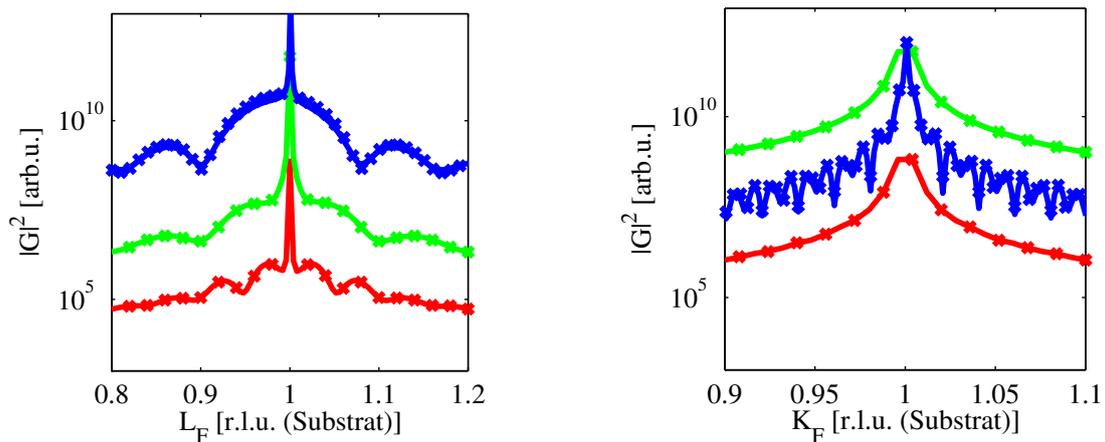


Abbildung 4.7: L_F und K_F -Scans durch die Konfigurationen A.1 (rot), A.2 (grün) und A.39 (blau). Die durchgezogene Linie steht für das Fixed Film Model, die Kreuze für das Floating Film Model. Es sind kaum Unterschiede zwischen den beiden Aufwachsverhalten zu erkennen.

Die Ursachen für die fehlende Unterscheidbarkeit werden in der Diskussion vorgestellt. An dieser Stelle sei nur noch einmal vermerkt, dass für die Konfigurationen, die im Rahmen dieser Arbeit berechnet wurden, kaum ein Unterschied festzustellen ist. So wurden alle weiteren Berechnungen im Fixed-Film-Modell durchgeführt, da diese Art des Aufwachsverhaltens näher am realen Kristallitwachstum ist.

4.3 Gitterfehlanpassung

Die Gitterfehlanpassung zwischen Kristalliten und Substrat äußert sich in einer Verschiebung der Hauptmaxima von Film und Substrat zueinander. Diese Verschiebung beträgt $1/\beta_x$ in die entsprechende Raumrichtung. Der Faktor ergibt sich aus der Transformation in den reziproken Raum. Das das Modell dieses Verhalten richtig wieder gibt, wurde bereits nachgewiesen. Dennoch soll an dieser Stelle die Verschiebung durch die Gitterfehlanpassung, insbesondere die mögliche Überlagerung mit dem Substratpeak genauer untersucht werden.

Zu einer solchen Überlagerung kommt es vor allem bei kleinen Gitterfehlanpassungen. Dieser Bereich ist besonders interessant, da beim Aufwachsen von Schichten, eine möglichst geringe Fehlanpassung das Ziel ist. Gleichzeitig birgt es aber auch Probleme, da durch die Überlagerung möglicherweise die Bestimmung der Halbwertsbreite des Filmpeaks erschwert wird. Diese gibt in l -Richtung die Schichtdicke an, wie aus der SCHERRER -Gleichung 2.30 folgt. Sollten die Nebenmaxima nicht als alternative Informationsquelle zur Verfügung stehen, vgl. Abschnitt 2.1.8, ist diese Information von großer Bedeutung.

Rein horizontale bzw. vertikale Gitterfehlanpassung

Zunächst wurde das Beugungsbild einer nur in einer Komponente von eins verschiedenen Gitterfehlanpassung untersucht. Für diesen Fall sind die L_1 - und L_F -Scans, oder die K_1 - und K_F -Scans deckungsgleich.

Wie in Abbildung 4.8 und 4.9 zu erkennen, werden beide Beugungsbilder vom Substratsignal dominiert. Das Substratsignal ist sogar so stark, dass die Oszillationen des Film in den Scans höchstens als Schulter im Substratpeak zu erkennen sind. Die Mappings in Abbildung 4.10 und 4.11 zeigen, dass die Oszillationen abseits des L_F - bzw. K_F -Scans sehr wohl zu erkennen sind und nur direkt darauf nahezu verschwindet.

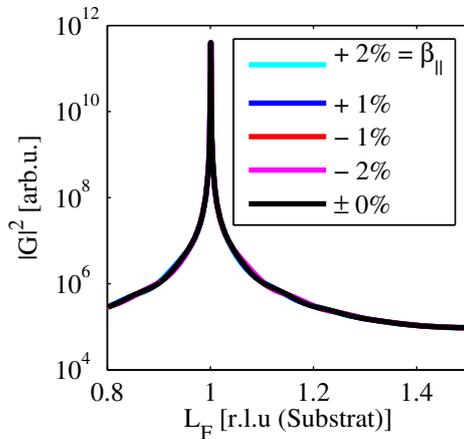


Abbildung 4.8: Deckungsgleiche L_1 -/ L_F -Scans von Konfiguration A.38 - A.42. Hier wird die senkrechte Komponente der Gitterfehlanpassung variiert. Das Beugungsbild wird vom Substratpeak dominiert. Bei $l = 0.95$ bzw. 1.05 sind Schultern zu erkennen, die von den Filmoszillationen stammen. Deren Halbwertsbreite zu bestimmen ist jedoch nicht möglich.

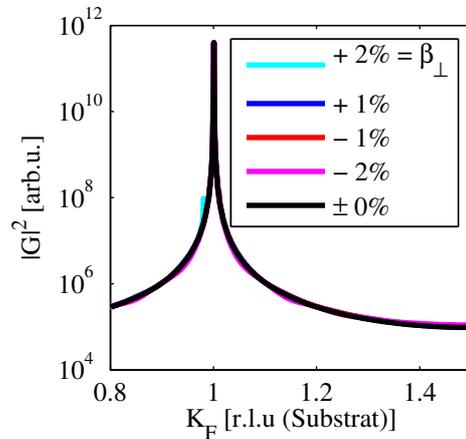


Abbildung 4.9: Deckungsgleiche K_1 -/ K_F -Scans von Konfiguration A.43 - A.47. Variabel ist diesmal die parallele Komponente der Gitterfehlanpassung. Das Beugungsbild wird wieder vom Substratpeak dominiert. Die Schultern auf Grund der Oszillation des Kristallitfilms finden sich ab $k = 0.9$ bzw. 1.1 . Auch hier ist es nicht möglich eine Halbwertsbreite zu bestimmen.

Dieser Effekt würde die Auswertung einer realen Messung sehr erschweren, doch ist es gleichzeitig sehr unwahrscheinlich, dass eine Komponente der Fehlanpassung exakt eins wird. Deshalb sollen im Folgenden Konfigurationen der Art untersucht werden, wo beide Komponenten der Fehlanpassung ungleich eins sind.

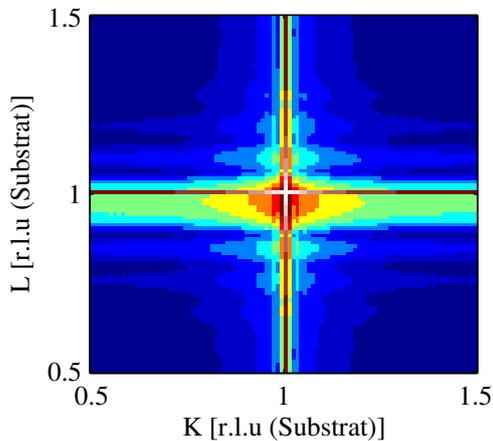


Abbildung 4.10: Mapping der Konfiguration A.38 mit einer vertikalen Gitterfehlanpassung von $\beta_{\perp} \approx 1.03$. Entlang der L_1 -/ L_F -Scans und K_1 -/ K_F -Scans verschwinden die Oszillationen nahezu vollständig, während sie in den Intensitätstälern gut zu erkennen sind.

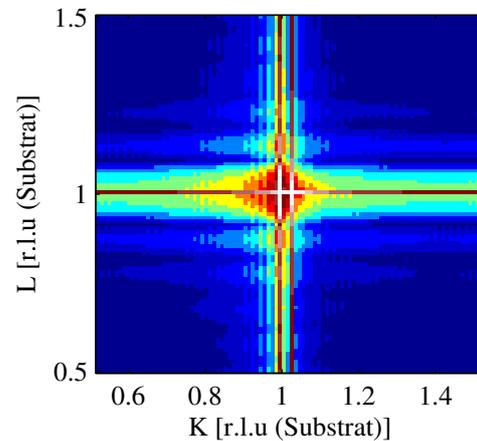


Abbildung 4.11: Mapping zu Konfiguration A.44. Hier wurde die horizontale Gitterfehlanpassung ungleich eins auf $\beta_{\parallel} \approx 1.03$ gesetzt. Wie in Abbildung 4.10 sind die Oszillationen nur im Intensitätstal einwandfrei zu erkennen.

Kombinierte Gitterfehlanpassung

Wie bereits angesprochen ist es sehr unwahrscheinlich, dass eine Komponente der Fehlanpassung exakt eins wird. Deswegen wurde in den folgenden Serien eine Komponente auf eine geringe Fehlanpassung von ca. 1% gesetzt, während die andere von ungefähr 0.98 bis 1.02 läuft. Durch diese Vorgehensweise spalten die L_1 - und L_F -Scans, bzw. die K_1 - und K_F -Scans wieder auf und können miteinander verglichen werden.

Zunächst soll der Fall einer festen parallelen Komponente β_{\parallel} von ca. 1% mit einer variablen senkrechten Komponente β_{\perp} untersucht werden.

Eine Gegenüberstellung von L_1 - und L_F -Scan in Abbildung 4.13 zeigt unmittelbar, dass auch hier die Oszillationen des Films im L_1 -Scan kaum zu erkennen sind. Und das obwohl der aus dem L_F -Scan bestimmten Halbwertsbreite von 0.071 nur eine Verschiebung in k -Richtung von $\Delta k = 0.032$ gegenübersteht. Demnach sollte das Hauptmaximum des Films bis in den L_1 -Scan hineinragen.

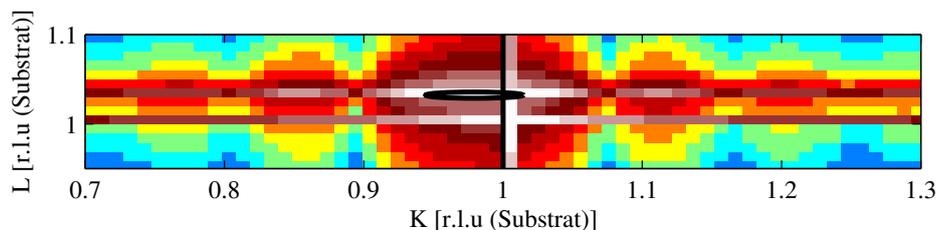


Abbildung 4.12: Ausschnitt des Mappings zu Konfiguration A.53 aus Abbildung 4.13. Die Ausdehnung des Filmpeaks, angedeutet durch den Kreis, ist weit genug um den L_1 -Scan, dargestellt mit der senkrechten schwarzen Linie, zu schneiden.

Das Mapping in Abbildung 4.12 bestätigt dies. Dadurch, dass das Substratsignal jedoch mehrere Größenordnungen stärker ist als das Filmsignal, sind die Oszillationen in seinen Flanken hier wieder kaum auszumachen.

Die Höheninformation über den Film sollte also dem L_F -Scan entnommen werden. Dort ist die Amplitude der Oszillationen ausreichend um Minima und Maxima sicher unterscheiden zu können. Außerdem ist die Überlagerung von Substrat- und Filmpeak so geringfügig, dass ohne weiteres die Halbwertsbreite des Filmpeaks bestimmt werden kann.

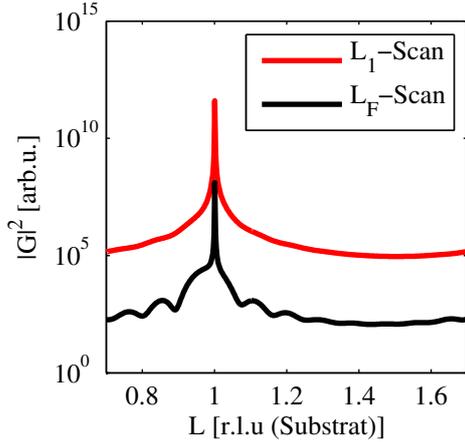


Abbildung 4.13: Gegenüberstellung des L_1 - und L_F -Scans für Konfiguration A.53. Die Fehlanpassung beträgt ca. 3% in vertikaler und 1% in paralleler Richtung. Gut zu erkennen ist, dass sich die Grundintensität um mehrere Größenordnungen unterscheidet.

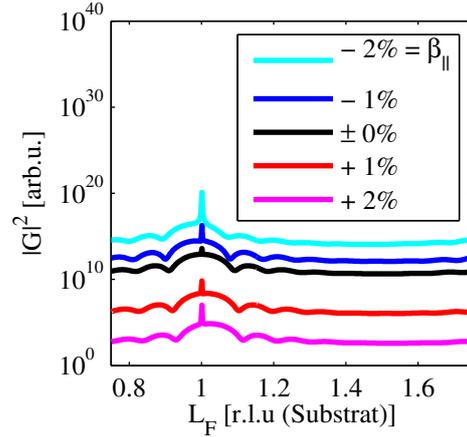


Abbildung 4.14: L_F -Scans für die Konfigurationen A.53 - A.57, bei denen die vertikale Gitterfehlanpassung von 0.98 bis 1.02 läuft. Die horizontale Gitterfehlanpassung beträgt ca. 1%. Der Übersichtlichkeit halber wurden die Beugungsbilder gegeneinander verschoben.

Abbildung 4.14 zeigt wie der Filmpeak bei den unterschiedlichen Gitterfehlanpassungen den Substratpeak durchläuft. Dabei kommt es zu einer Verzerrung: Befindet sich der Filmpeak links vom Substratpeak, wird er immer höher und schmaler. Auf der rechten Seite wird er flacher und breiter. Die Halbwertsbreite bleibt dabei konstant bei 0.071, wie es die Scherrer-Gleichung 2.30 bei gleich bleibender Schichtdicke fordert.

Für den Fall einer festen senkrechten Komponente β_\perp von ca. 1% und einer variablen parallelen Komponente zwischen 0.98 und 1.02, werden die gleichen Beobachtungen gemacht. Abbildung 4.15 bestätigt zunächst, dass das Filmsignal im K_F -Scan viel deutlicher hervortritt, wie auch zu erwarten ist, da es hier maximal wird.

Die Auftragung aller entsprechenden K_F -Scans in Abbildung 4.16 zeigt, wie das Hauptmaximum des Films den Substratpeak durchläuft. Die Halbwertsbreite bleibt, wie schon bei den L-Scans für eine senkrechte Gitterfehlanpassung, erhalten. Aus diesem Grund kommt es auch wieder zum Übergang von hohen schmalen Peaks für kleine hin zu flachen breiten Peaks für große vertikale Gitterfehlanpassungen.

Auf Grund dieser Feststellungen, werden im Folgenden ausschließlich L_F - und K_F -Scans untersucht.

Dem Leser wird nicht entgangen sein, dass in diesem Abschnitt bezüglich der Gitterfehlanpassung von Circa-Werten gesprochen wird. Dies liegt daran, dass folgende Werte aus den irrationalen Zahlen gewählt wurden:

$$\begin{aligned}
 -1\% : 1 - \frac{\pi}{300} &\approx 0.99 & \pm 0\% : 1.00 & & +1\% : 1 + \frac{\pi}{300} &\approx 1.01 \\
 -2\% : 1 - \frac{\pi}{150} &\approx 0.98 & & & +2\% : 1 + \frac{\pi}{150} &\approx 1.02
 \end{aligned}$$

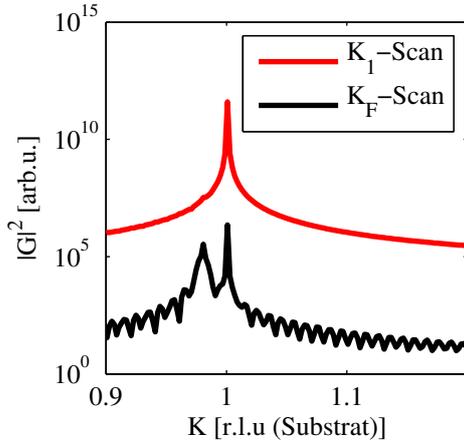


Abbildung 4.15: Gegenüberstellung von K_1 und K_F -Scan der Konfiguration A.48 mit einer Gitterfehlانpassung von $\beta_{||} \approx 1.03\%$. Auch hier sind die Oszillationen des Filmsignals im K_F -Scan wesentlich besser zu erkennen. Auch der unterschied in der Grundintensität wird deutlich.

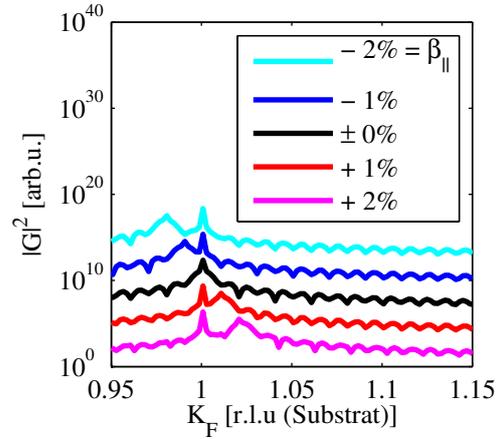


Abbildung 4.16: K_F -Scans für die Konfigurationen A.48 bis A.52, bei denen die horizontale Gitterfehlانpassung von 0.98 bis 1.02 läuft. Die vertikale Gitterfehlانpassung beträgt konstant ca. 1%. Der Übersichtlichkeit halber wurden die Scans gegeneinander verschoben.

Bei rationalen Zahlen hat eine bestimmte Anzahl Kristalliteinheiten stets die gleiche Ausdehnung wie eine Anzahl Substrateinheiten. Die Bedingung

$$n_S \cdot a_{||/\perp} = n_{K_r} \cdot b_{||/\perp} \quad (4.1)$$

wird also oft erfüllt, so dass es zu zusätzlichen Periodizitäten in der Struktur kommt. Diese finden sich dann auch im Beugungsbild wieder und erschweren die Auswertung unnötig. Es können also rationale Zahlen gewählt werden, so dass oben genannte Bedingung nicht allzu oft zutrifft oder besser noch irrationale Zahlen, die die Bedingung vollständig ausschließen.

Trotz dieser Maßnahmen sind in den Abbildungen 4.9, 4.15 und 4.16 Überstrukturen im Beugungsbild zu erkennen. Die Ursachen dieser Effekte stehen in Zusammenhang mit der Verteilung der Parameter. Sie sollen im Rahmen der Diskussion (Abschnitt 5.2) ausführlich erklärt werden.

4.4 Einfluss breit zufallsverteilter Parameter

Einige Parameter der Modelle sind zufallsverteilt entsprechend einer Gammaverteilung. Bisher wurde deren Varianz auf eins festgehalten, um kontrolliert die Einflüsse der einzelnen Parameter zu überprüfen. Doch auch eine Änderung der Varianz eines solchen Parameters wird sich im Beugungsbild widerspiegeln. Dies soll im Folgenden untersucht werden.

4.4.1 Einfluss der Höhenverteilung in l -Richtung

Die durchschnittliche Höhe eines Kristallitfilms lässt sich, analog zu Gleichung 2.29, an Hand der Nebenmaxima in l -Richtung des reziproken Raumes bestimmen. Sollten diese nicht erkennbar sein, kann sie aus der Scherrer Gleichung 2.30 abgeleitet werden.

In diesem Abschnitt soll eine der Ursachen, die zum Verschwinden der Nebenmaxima führen genauer betrachtet werden. Es handelt sich dabei um die Rauigkeit des Kristallitfilms, die durch eine größere Varianz vom Erwartungswert der Höhe H_i modelliert wird.

Dazu wurden drei Serien von Konfigurationen berechnet, die für sonst gleiche Parameter bei drei unterschiedlichen Höhen die Varianz verändern. Die Gitterfehlanspassung wurde so gewählt, dass L_1 - und L_F -Scans, sowie K_1 - und K_F -Scans deutlich getrennt sind. Zu sehen sind diese Serien in den Abbildung 4.17, 4.18 und 4.19.

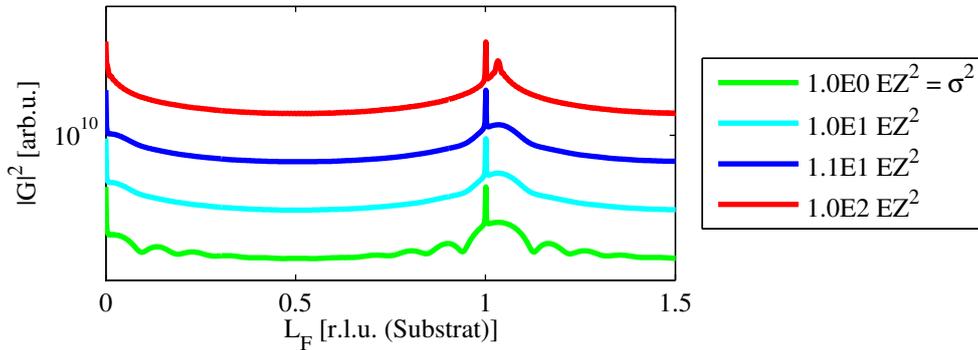


Abbildung 4.17: L_F -Scans der Konfigurationen A.4 - A.7. Bei sonst festen Parametern wird die Varianz der Höhe verändert. Der Erwartungswert der Höhe beträgt stets 10 Einheitszellen. Mit zunehmender Varianz verschwinden die Oszillationen des Films.

Mit zunehmender Varianz werden die Oszillationen immer undeutlicher, bis sie letztendlich ganz verschwinden. Die Ursache für das Verschwinden ist die Interferenz verschiedener Beugungsbeiträge. Jede Kristallithöhe, die in der Verteilung vorkommt, erzeugt ein typisches Beugungsbild. Diese Beugungsbilder sind mehr oder weniger stark ausgeprägt, je nachdem wie oft ein Kristallit der entsprechenden Höhe vorliegt. Da diese Teilintensitäten im Bereich einer Verteilung phasenrichtig aufaddiert werden müssen, kommt es zu Interferenzen.

Eine Möglichkeit diese Interferenzen und damit das Verschwinden zu quantifizieren, ist das Bilden der Peakverhältnisse von benachbarten Minima und Maxima. Eine solche Auftragung der Peak-to-Peak-Verhältnisse zwischen erstem Nebenmaximum und erstem Minimum ist in Abbildung 4.20 zu sehen. Im ersten Abschnitt ist ein linearer Zusammenhang erkennbar. Wird dieser Bereich angefüttet, kann eine Varianz bestimmt werden, für die ein Abgleich - das heißt ein Verhältnis von eins vorliegt.

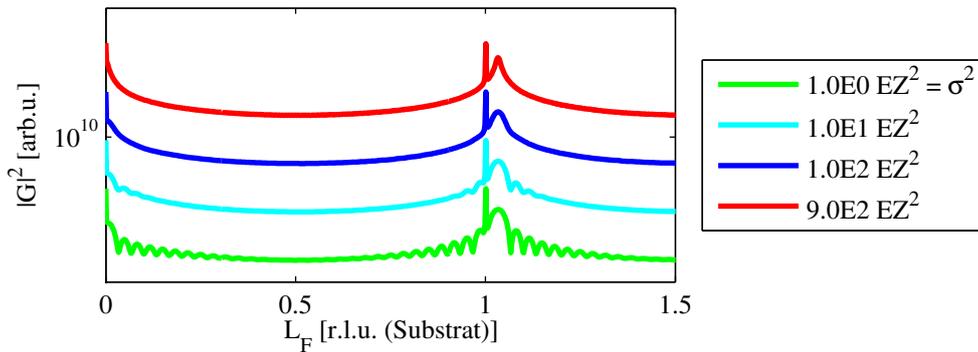


Abbildung 4.18: L_F -Scans der Konfigurationen A.8 - A.11. Auswertung analog zu Abbildung 4.17. Der Erwartungswert der Höhe liegt hier bei 30 Einheitszellen.

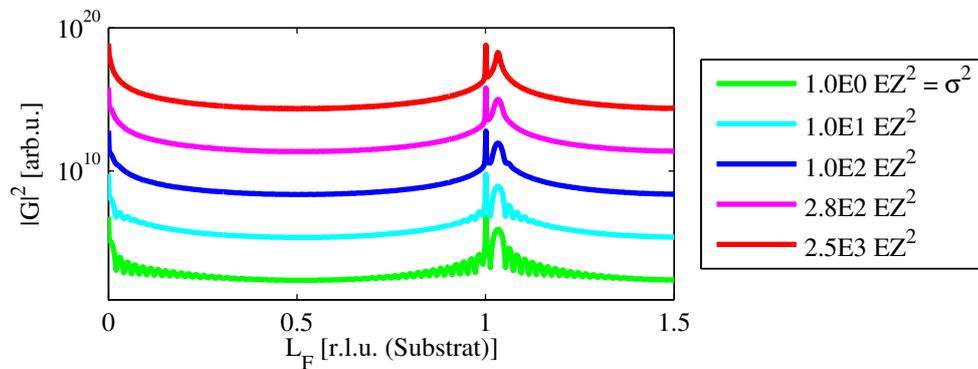


Abbildung 4.19: L_F -Scans der Konfigurationen A.12 - A.16. Auswertung analog zu Abbildung 4.17. Der Erwartungswert der Höhe liegt hier bei 50 Einheitszellen.

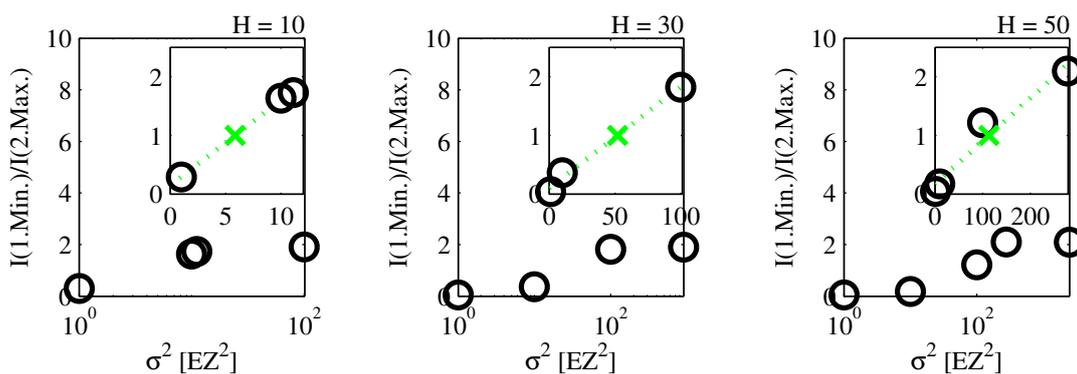


Abbildung 4.20: Auswertung der Peak-to-Peak-Verhältnisse zwischen erstem Nebenmaximum und erstem Minimum. Im ersten Abschnitt zeigt sich jeweils ein linearer Zusammenhang. Eine lineare Regression ergibt die Abgleichpositionen $\sigma_{Abgleich,H10}^2 = 5.9 \text{ EZ}^2$, $\sigma_{Abgleich,H30}^2 = 51.9 \text{ EZ}^2$ und $\sigma_{Abgleich,H50}^2 = 113.3 \text{ EZ}^2$ markiert durch die grünen Kreuze.

Wird diese Varianz, für die der Abgleich vorliegt, wiederum gegen den Erwartungswert der Höhe aufgetragen, deutet sich ein linearer Zusammenhang an, siehe Abbildung 4.21. Bei drei Messwerten wäre es jedoch verfrüht hier von einer Gesetzmäßigkeit zu sprechen. Auf jeden Fall lässt sich jedoch festhalten, dass mit zunehmender Kristallhöhe bzw. Filmstärke eine stärkere Rauigkeit vorliegen muss, damit die Oszillationen im L_F -Scan verschwinden.

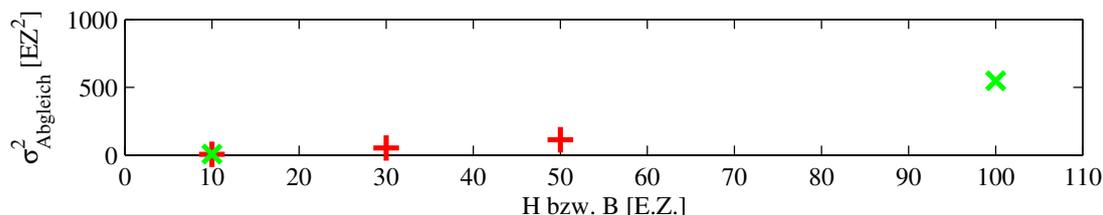


Abbildung 4.21: Varianz, für die ein Abgleich der Intensitäten von erstem Nebenmaximum und erstem Minimum vorliegt aufgetragen gegen den Erwartungswert der jeweiligen Verteilung. Grün steht für die Breitenverteilung, rot für die Höhenverteilung.

Es fällt außerdem auf, dass das Hauptmaximum des Filmsignals mit steigender Varianz seine Form verändert. Für eine Varianz von eins ist er noch gaußförmig. Eine solche Anpassung wird jedoch mit zunehmender Varianz immer schlechter, bis er letztendlich lorentzförmig wird. Diese Entwicklung ist bereits in den Abbildungen 4.17 bis 4.19 zu erkennen. In Abbildung 4.22 bis 4.24 wird sie genauer aufgeschlüsselt. Dazu wurde nur das Hauptmaximum des Film selbst angefitet.

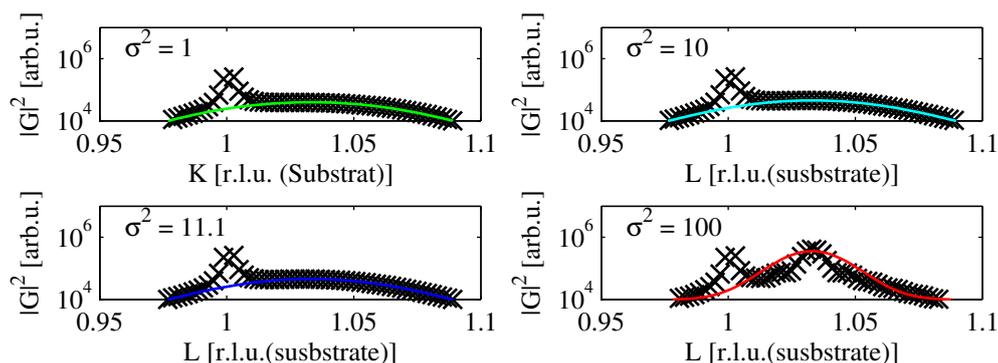


Abbildung 4.22: Form der Filmmaxima für Kristallite einer Höhe von 10 Einheitszellen (Konfigurationen A.4 bis A.7). Es gibt einen Übergang vom rein gaußförmigen Peak bei $\sigma^2 = 1$ hin zu einem lorentzförmigen Peak bei $\sigma^2 = 100$ (Vgl. auch Abbildung 4.25).

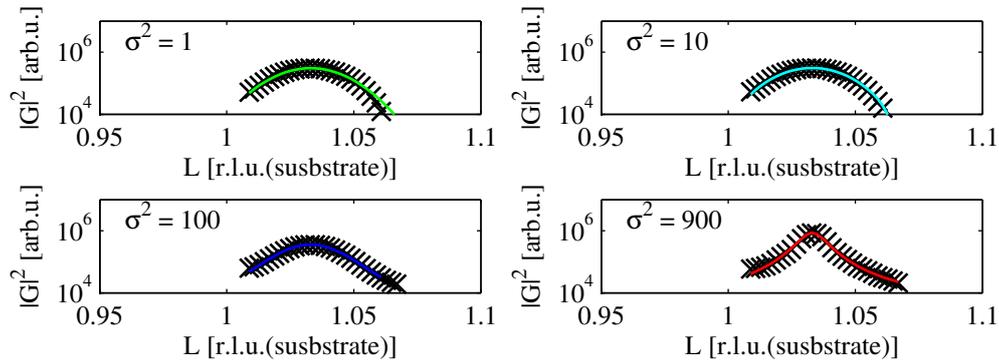


Abbildung 4.23: Form der Filmmaxima für Kristallite einer Höhe von 30 Einheitszellen (Konfigurationen A.8 bis A.11). Auch hier gilt: gaußförmige Anpassung, solange noch Nebenmaxima vorhanden sind, danach lorentzförmig.

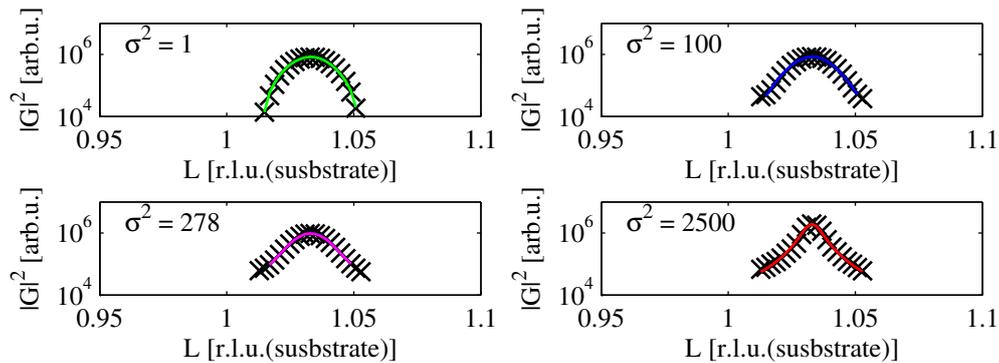


Abbildung 4.24: Form der Filmmaxima für Kristallite einer Höhe von 50 Einheitszellen (Konfigurationen A.12 bis A.16). Hier liegt ebenfalls ein gaußförmiger Filmpeak vor solange noch Nebenmaxima vorhanden sind. Anschließend muss eine lorentzförmige Anpassung gewählt werden.

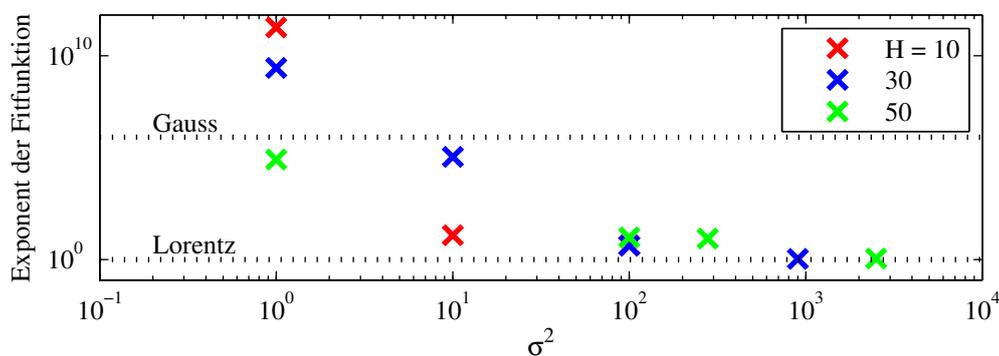


Abbildung 4.25: Auftragung der Exponenten der Fitfunktionen. Die gestrichelten Linien stehen dabei für die reine Lorentz- und die reine Gaußform. Für alle drei Höhenverteilungen ist die Entwicklung der Peakform mit zunehmender Varianz von gaußförmig über die Mischformen, sogenannte Voigt-Funktionen, hin zur reinen Lorentzform zu erkennen.

Diese Veränderung der Peakform wird durch die Überlagerung der einzelnen Kristallitsignale verursacht. Jeder einzelne liefert vereinfacht eine N-Spalt-Funktion. Die Position der Maxima in diesen N-Spalt-Funktionen bleibt auf Grund der konstanten Gitterfehlanspassung erhalten. Jedoch oszillieren die Signale auf Grund der verteilten Höhe unterschiedlich stark. So kommt es, dass das Hauptmaximum des Gesamtsignals enorm verstärkt wird, während die sich die Oszillationen auslöschen. Dadurch entstehen letztendlich die lorentzförmigen Peaks, die sich durch ein scharfes Maximum und flache Flanken auszeichnen. Dieser Übergang ist in Abbildung 4.26 skizziert.

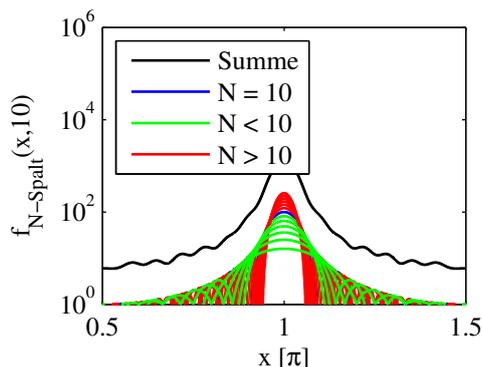


Abbildung 4.26: Entwicklung der Peakform durch Überlagerung vieler Einzelsignale. Hier dargestellt für eine N-Spalt-Funktion mit $\bar{N} = 10$ und einer kleinen Verteilung von $N \pm 6$. Diese geringe Verteilung reicht bereits aus, um das Maximum zu verstärken und die Oszillationen deutlich abzuschwächen. Die Überlagerung wurde inkohärent berechnet.

Das Verschwinden der Nebenmaxima und der Übergang des Hauptmaximums in die Lorentzform, stellt ein Problem für die Auswertung dar. Denn die SCHERRER -Gleichung verliert für sie ihre Gültigkeit. Sie sagt für eine konstante Höhe eine konstante Halbwertsbreite voraus. Wie Abbildung 4.27 zu entnehmen ist, ist die Halbwertsbreite aber nur solange konstant, wie die Peaks in guter Näherung als gaußförmig oder voigtförmig beschrieben werden können.

Da die Nebenmaxima als alternative Informationsquelle nicht zur Verfügung stehen, fehlt also eine Möglichkeit aus der Halbwertsbreite der lorentzförmigen Peaks die Kristallithöhe und deren Varianz zu bestimmen.

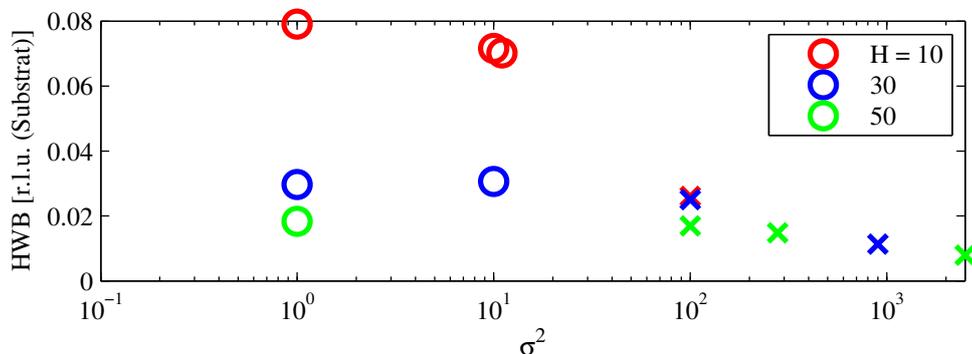


Abbildung 4.27: Halbwertsbreiten der Hauptmaxima des Kristallitfilms aufgetragen gegen die Varianz. Für gauß- oder voigtförmige Peaks ist sie nahezu konstant (Kreise). Geht der Filmpeak in die Lorentzform über, ist ein deutlicher Abfall der Halbwertsbreite zu bemerken (Kreuze).

Eine überlappende Auftragung aller Filmmaxima, die lorentzförmige Peaks aufweisen, in Abbildung 4.28 offenbart allerdings zwei interessante Aspekte. Zum Einen scheint die Halbwertsbreite dieser lorentzförmigen Peaks sowohl vom Erwartungswert der verteilten Größe, als auch von deren Varianz abzuhängen. Dies ist daran zu erkennen, dass die Peaks vollkommen verschieden sind. Eine bessere Übersicht ist dazu Abbildung 4.27 dargestellt.

Zweitens hängt die Halbwertsbreite des Peaks davon ab, ob die Höhenverteilung in L_F -Richtung oder die Breitenverteilung in K_F -Richtung betrachtet wird. Deutlich wird dies, da die Kombination aus $\bar{x} = 10$ und $\sigma^2 = 100$ sowohl für die Höhen- als auch für die Breitenverteilung vorkommt, die zugehörigen Peaks jedoch sehr verschieden sind.

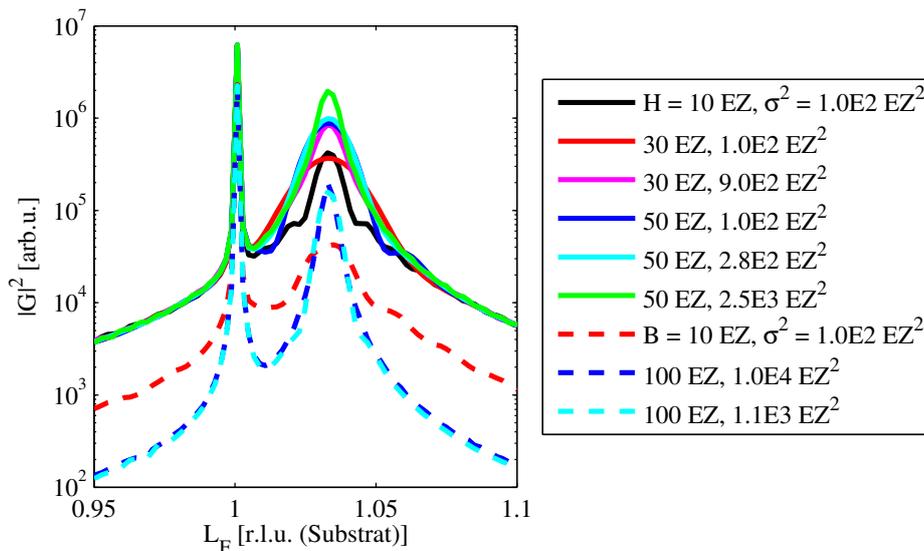


Abbildung 4.28: Gesamtdarstellung aller lorentzförmigen Filmpeaks. Die durchgezogenen Linien gehören zu den Höhenverteilungen aus den Abbildungen 4.22-4.24 im L_F -Scan. Die gestrichelten Linien sind ein Vorgriff auf die Breitenverteilungen in Abschnitt 4.4.2 im K_F -Scan. An dieser Stelle sei noch einmal angemerkt, dass die zu erkennenden Oszillationen als “verschwunden gelten, da ihr Peak-to-Peak-Verhältnis jenseits der Abgleichposition liegt.

Dieser Übergang in den Lorentzpeak ist auch die Ursache dafür, dass das Intensitätsverhältnis in den zuletzt genannten Abbildungen nach Erreichen eines Maximums wieder abnimmt. Die Form des Lorentzpeaks zeichnet sich durch eine schmale Spitze und stark gestauchte Flanken aus. So nähern sich die Intensitäten an den beiden beobachteten Positionen wieder an.

4.4.2 Einfluss der Breitenverteilung in k -Richtung

Der Einfluss der Kristallitbreite auf die k -Richtung des reziproken Raums folgt der gleichen Mechanik, wie der der Höhe auf die l -Richtung. Deshalb wird an dieser Stelle überprüft, inwiefern eine Änderung der Varianz der Breite das Beugungsbild eines K_F -Scans beeinflusst.

Dazu wurden wieder zwei Serien aufgenommen, die für zwei unterschiedliche Kristallitbreiten bei ansonsten gleichen Parametern, die Varianz der Breite ändern. Es zeigt sich ein ähnliches Verhalten, wie für die Höhenverteilung in Abschnitt 4.4.1.

Die Oszillationen verschwinden mit zunehmender Varianz, wie in den Abbildungen 4.29 bis 4.31 dargestellt. Das Intensitätsverhältnis von erstem Nebenmaximum und erstem Minimum steigt jedoch nicht mehr linear an. Deshalb wurde zur Bestimmung der Abgleichposition nur der Abschnitt angefüttet, in dem sie erreicht wird.

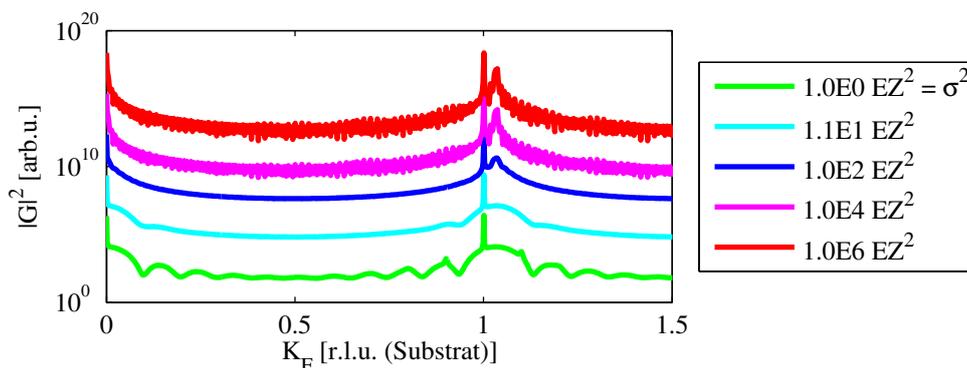


Abbildung 4.29: Auftragung der K_F -Scans bei einem Erwartungswert der Breite von 10 Einheitszellen für verschiedene Varianzen. Die Oszillationen nehmen mit zunehmender Varianz ab, dafür treten für eine Varianz von eins und ab 1000 EZ^2 Überstrukturen auf.

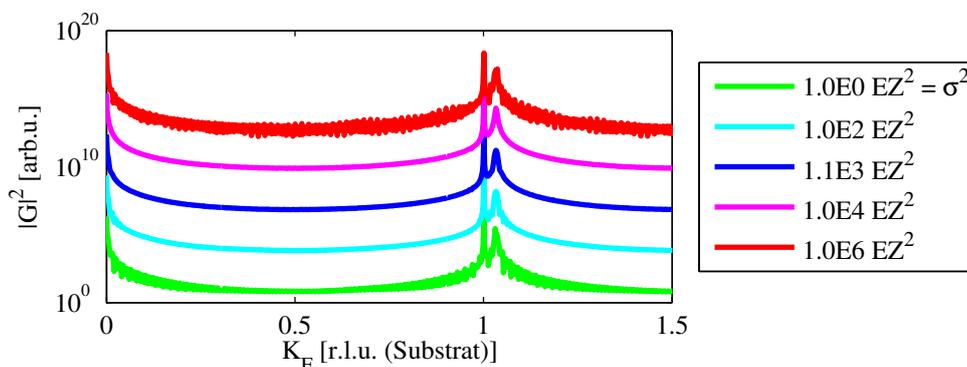


Abbildung 4.30: Auftragung der K_F -Scans bei einem Erwartungswert der Breite von 100 Einheitszellen für verschiedene Varianzen. Auch hier kann das Verschwinden der Oszillationen, die Verformung des Peaks und die Überstrukturen beobachtet werden.

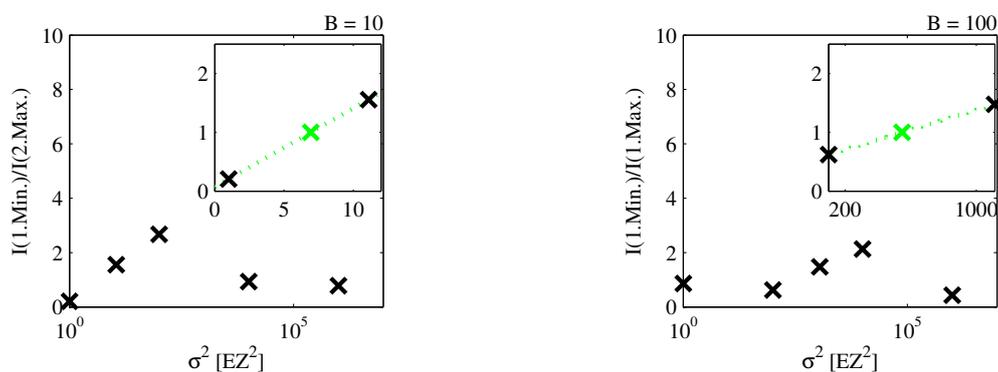


Abbildung 4.31: Auswertung der Peak-to-Peak-Verhältnisse zwischen erstem Nebenmaximum und erstem Minimum. Eine lineare Regression im entscheidenden Bereich ergibt die Abgleichpositionen $\sigma_{Abgleich,B10}^2 = 6.9 \text{ EZ}^2$ und $\sigma_{Abgleich,B100}^2 = 547.2 \text{ EZ}^2$.

Außerdem fällt im direkten Vergleich der Abgleichpositionen von 10 Einheitszellen Kristallhöhe ($\sigma_{\text{Abgleich}, H10} = 5.9 \text{ EZ}^2$) und -breite ($\sigma_{\text{Abgleich}, B10} = 6.9 \text{ EZ}^2$) auf, dass es in der Breitenverteilung einer höheren Varianz bedarf, um die Abgleichposition zu erreichen. Dieses Verhalten lässt sich verallgemeinern, wie bereits in Abbildung 4.28 gezeigt.

Die Änderung der Peakform des Filmmaximums von gauß- zu lorentzförmig kann ebenfalls beobachtet werden. Zur besseren Übersicht wurde auch hier einmal der Exponent der Fitfunktion gegen die Varianz aufgetragen (Abbildung 4.32). Damit verbunden ist wiederum ein Abfall der Halbwertsbreite, wie in Abbildung 4.33 dargestellt.

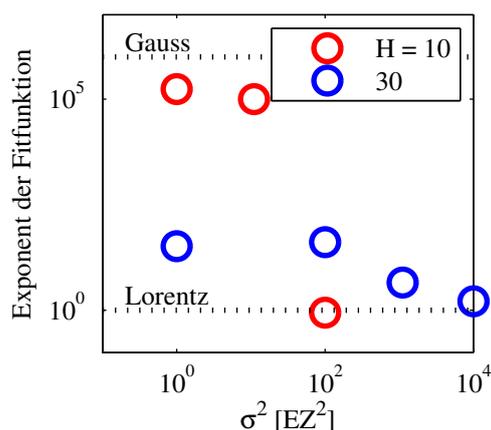


Abbildung 4.32: Auftragung der Exponenten der Fitfunktionen aus den Abbildungen 4.29 und 4.30 gegen die Varianz der Kristallbreiteverteilung. Wieder sind mit gestrichelten Linien die Werte für eine reine Gauß- oder Lorentzform markiert. Die unterschiedlichen Kristallbreiten sind farblich markiert.

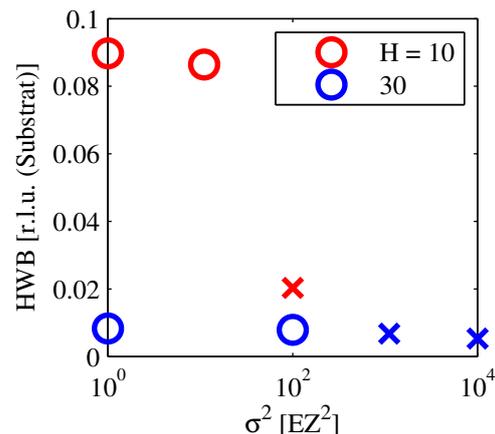


Abbildung 4.33: Auftragung der Halbwertsbreiten gegen die Varianz der Kristallbreiteverteilung. Wieder ist zu erkennen, dass die Halbwertsbreite für gauß- und voigtförmige Peak konstant bleibt (Kreise). Für lorentzförmige Peaks fällt sie dann stark ab (Kreuze).

Was bei den Auftragungen der K_F -Scans auffällt sind die Überstrukturen bei einer Varianz von eins und auch wieder bei sehr großen Varianzen. Die Ursachen dafür werden im Rahmen der Diskussion ausführlich besprochen.

Trägt man auch für die Breitenverteilung die Abgleichs-Varianz gegen den Erwartungswert der Breite auf, ergibt sich wieder ein ansteigendes Verhalten. Da hier allerdings nur zwei Messwerte vorliegen, erübrigt sich jede weitere Vermutung über den Zusammenhang. Was jedoch festzustellen ist, ist das der Anstieg für den Fall der Breitenverteilung wesentlich stärker ist, als für die Höhenverteilung - siehe Abbildung 4.21. Es bedarf also einer größeren Unordnung in der Breite damit die Oszillationen verschwinden, als dies bei der Höhenverteilung der Fall ist.

4.4.3 Einfluss der Höhenverteilung in k -Richtung

Bisher wurde argumentiert, dass Informationen über die Höhe des Kristallfilms in l -Richtung des reziproken Raumes erkennbar sind.

Werden allerdings zu den Serien aus Abschnitt 4.4.1 zusätzlich die K_F Scans betrachtet, fällt auf, dass einige der Überstrukturen verschwinden, bzw. neue entstehen. Da diese Einflüsse nicht besonders ausgeprägt sind, wurde in den Abbildungen 4.34 - 4.36 zum einen ein Scan über den Filmpeak erster Ordnung gezeigt. Zusätzlich wird ein Zoom in einen Bereich vorgestellt, in dem die Veränderungen besonders gut zu erkennen sind.

Die Ursache für dieses Verhalten wird in der Diskussion vorgestellt.

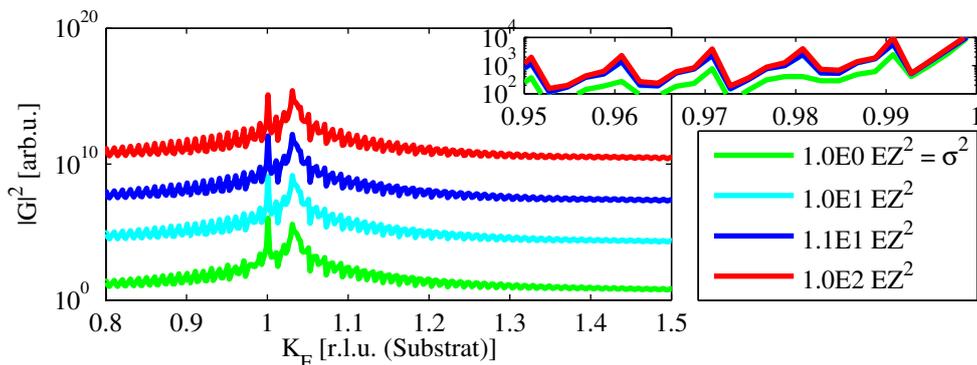


Abbildung 4.34: K_F -Scans für einen Erwartungswert der Höhe von 10 bei verschiedenen Varianzen. Zur besseren Übersicht sind die Beugungsbilder in der großen Auftragung gegeneinander verschoben. Im Zoom oben rechts ist das Auftreten der Überstrukturen zu erkennen.

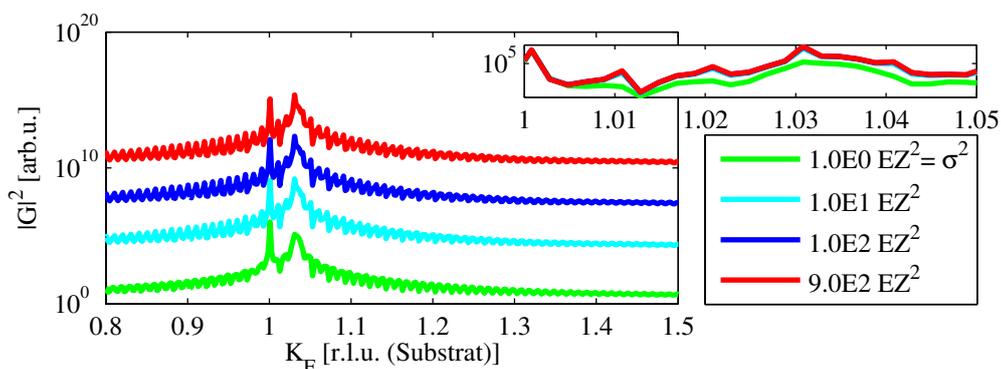


Abbildung 4.35: K_F -Scans für einen Erwartungswert der Höhe von 30 Einheitszellen bei verschiedenen Varianzen. Auch hier dient die Verschiebung der Beugungsbilder in der großen Auftragung der besseren Übersicht. Ebenfalls kann das Auftreten von Überstrukturen im Zoom beobachtet werden.

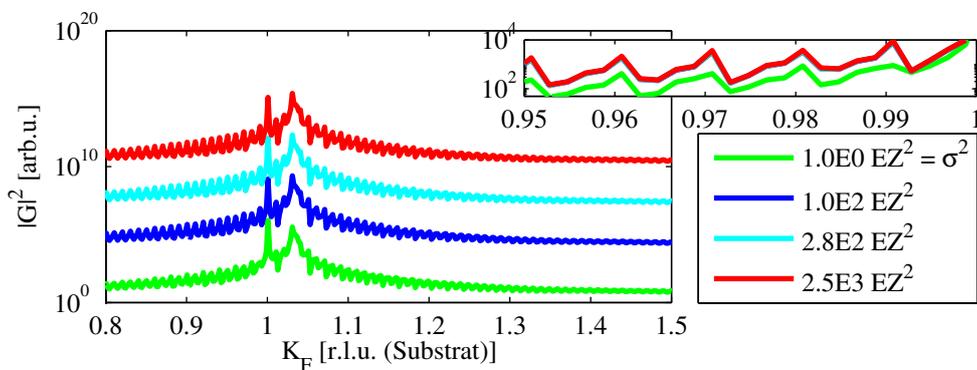


Abbildung 4.36: Die K_F -Scans für einen Erwartungswert der Höhe von 50 Einheitszellen bei verschiedenen Varianzen zeigt die selben Merkmale wie schon die Abbildungen 4.34 und 4.35.

4.4.4 Einfluss der Breitenverteilung in l -Richtung

Wie in Abschnitt 4.4.3 gezeigt wurde, hat die Höhenverteilung durchaus einen Einfluss auf die K-Scans. Deswegen muss überprüft werden, ob es eine solche Wechselwirkung auch für die Breitenverteilung und die L-Scans gibt.

Es wurden also für die Serien aus Abschnitt 4.4.2 zusätzlich die K_F -Scans untersucht. Die Abbildung 4.37 zeigt allerdings eindeutig, dass eine Änderung der Breite keinerlei Einfluss auf die L-Richtung hat.

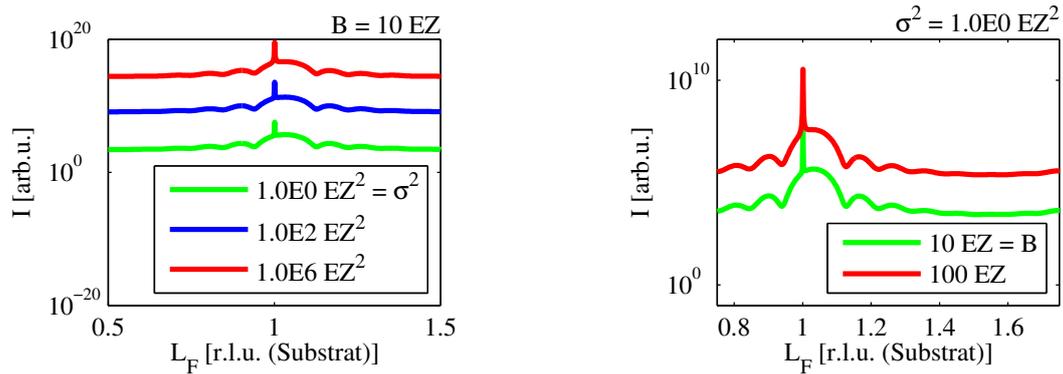


Abbildung 4.37: L_F -Scans für verschiedene Konfigurationen der Breite. Es ist kein Einfluss auf die L-Richtung des reziproken Raums erkennbar.

4.5 Einfluss des Abstands

Zum Schluss soll noch der Einfluss des Abstandes zwischen Substrat und Kristallit auf das Beugungsbild untersucht werden. Es soll bekanntlich keine ausgeprägte Interfaceschicht modelliert werden, sondern vielmehr ein bündiges Aufwachsen der Kristallite auf dem Substrat. Demnach wird standardmäßig ein Abstand von $\bar{D} = 1$ in die Konfiguration eingebracht.

Durch Verspannungen im Material kann es jedoch sehr wohl zu leichten Variationen des Abstandes kommen. Welchen Einfluss dies auf das Beugungsbild hat, soll im Folgenden untersucht werden. Dazu wurde eine Serie von Konfigurationen berechnet, die einen Kristallit-Substrat-Abstand \bar{D} zwischen 0.8 und 1.3 durchläuft. Die Standardabweichung wird wieder auf 1 gesetzt, da es bei einem wohlstrukturierten Substrat und ohne Interfaceschicht zu keiner größeren Verteilung der Abstände kommen dürfte.

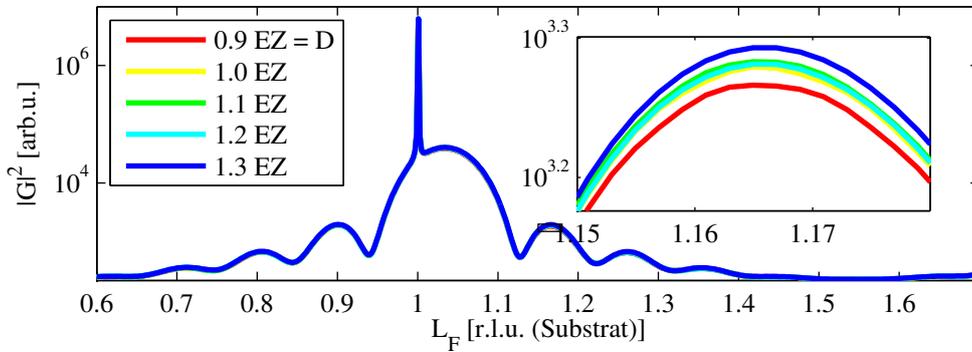


Abbildung 4.38: L_F -Scans durch die Konfigurationen A.27 - A.32 mit ansteigenden Substrat-Kristallit-Abständen zwischen 0.8 und 1.3. In der großen Ansicht erscheinen sie deckungsgleich. Erst im Zoom sind die Verläufe der einzelnen Gitterfaktoren zu erkennen.

Die Auswertung in Abbildung 4.38 zeigt deutlich, dass im Beugungsbild kaum ein Unterschied zu erkennen ist. Erst durch einen Zoom in das Beugungsbild können die verschiedenen Verläufe der Gitterfaktoren ausgemacht werden.

Die Auftragung lässt zunächst vermuten, dass die Intensität tendenziell mit zunehmendem Abstand ansteigt. Die Auswertung zeigt jedoch, dass das Maximum für $\bar{D} = 1.2$ unter dem von $\bar{D} = 1.3$ liegt. Dies legt wiederum nahe, dass es sich um eine Schwankung verursacht durch den Interferenzterm der einzelnen Kristalliten in Gleichung 2.28 handelt. Bestätigt wird dies durch einen Blick auf Gleichung 2.28, die zeigt, dass der Oberflächenabstand ausschließlich in diesem Interferenzterm auftritt.

Wie in Abbildung 4.39 zu erkennen, konnte diese Vermutung auch durch eine weitere Serie bestätigt werden. In dieser wurde der Abstand \bar{D} entgegen den Vorgaben in größeren Dimensionen und zwar zwischen 2 und 10 variiert. Die Standardabweichung beträgt aber auch hier stets 1. Die Verläufe der Gitterfaktoren sind diesmal deutlich zu unterscheiden. Außerdem kommt es zu Unregelmäßigkeiten in den Oszillationen. Diese können bei noch größeren Abständen zu den Schwebungen führen, die schon in [3] beobachtet wurden.

Somit lässt sich mit Sicherheit sagen, dass der Interferenzterm der Kristallite für die Variationen im Beugungsbild verantwortlich ist.

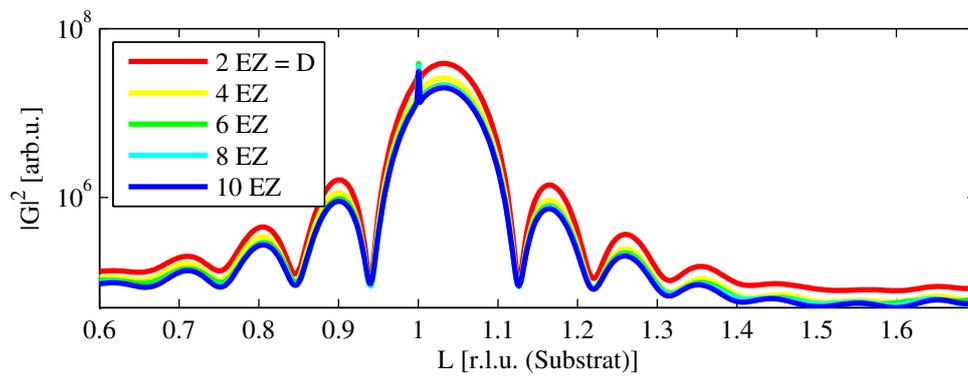


Abbildung 4.39: L_F -Scans durch die Konfigurationen A.33 - A.37. In dieser Serie wurde der Abstand \bar{D} schrittweise von 2 auf 10 erhöht. Diesmal sind die Gitterfaktoren deutlich zu unterscheiden. Es sind außerdem erste Unregelmäßigkeiten in den Oszillationen zu erkennen.

5 Diskussion und Ausblick

Die Auswertung in Kapitel 4 hat einige interessante Aspekte offenbart. Diese sollen im Folgenden eingehend diskutiert werden. Anschließend werden in einem kurzen Ausblick die Erweiterungsmöglichkeiten des Programms aufgezeigt.

5.1 Nebeneffekte der breit verteilten Parameter

Bei der Untersuchung der Kristallitbreiteverteilung in Abschnitt 4.4.3 wurde beobachtet, dass sich eine Änderung der Kristallithöhe nicht nur in l -Richtung des reziproken Raums, sondern auch in k -Richtung zeigt. Weitere Untersuchungen haben aber auch gezeigt, dass die Verteilung der Kristallitbreite keine vergleichbaren Nebeneffekte verursacht.

Die Ursachen für dieses Verhalten sollen hier vorgestellt werden.

5.1.1 Breit verteilte Kristallithöhe

Die Auswirkungen einer Änderung der Kristallithöhe sollte in l -Richtung zu erkennen sein. Dies geht direkt aus dem Term des Gitterfaktors (Gleichungen 2.32 und 2.34) hervor. Das nun auch Änderungen in k -Richtung beobachtet werden, liegt daran, dass die Höhenverteilung eine zusätzliche Breiteninformation liefert. Was damit gemeint ist, geht aus Abbildung 5.1 hervor:

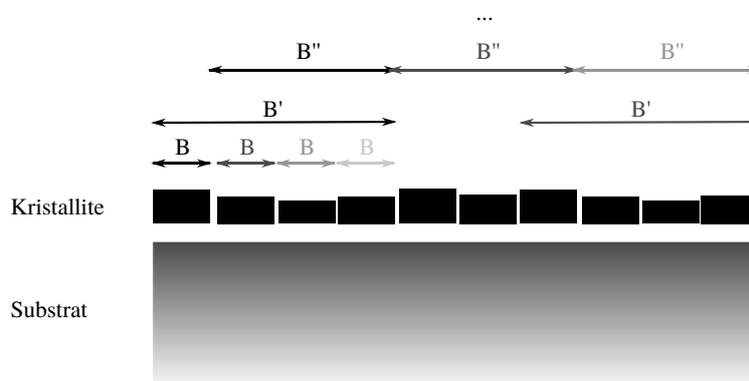


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung einer Kristallitverteilung bei wohldefinierter Breite und breit verteilter Höhe. Durch die unterschiedlichen Höhen entstehen Abschnitte der Verteilung, die wieder zu einer eigenen Struktur, gekennzeichnet durch B' , zusammengefasst werden können.

Durch die unterschiedlichen Höhen der Kristallite, kann die Kristallitverteilung in Abschnitte zerlegt werden. Jeder dieser Abschnitte unterliegt seiner eigenen Periodizität und damit kann jedem Abschnitt ein entsprechendes Beugungsbild zugewiesen werden. Überlagern sich diese Beugungsbilder mit dem des ursprünglichen Beugungsbilds, welches auf den Einzelkristalliten basiert, entstehen die beobachteten Überstrukturen.

5.1.2 Breit verteilte Kristallitbreite

Im Gegensatz zur Kristallithöhe auf die k -Richtung hat die breite Verteilung der Kristallitbreite keine Auswirkungen auf die l -Richtung des reziproken Raums. Eine Skizze der Situation in Abbildung 5.2 zeigt, warum dies offensichtlich nicht der Fall ist.

Die Verteilung der Kristallitbreiten liefert keine zusätzliche Höheninformation. So bleiben die Seiteneffekte in l -Richtung des reziproken Raums aus.



Abbildung 5.2: Skizze einer Kristallitverteilung bei fester Höhe und breit verteilter Breite. Es entsteht keinerlei zusätzliche Höheninformation, weshalb Seiteneffekte in l -Richtung des reziproken Raums ausbleiben.

5.2 Überstrukturen in der k -Richtung der Beugungsbilder

In den Abbildungen 4.29 und 4.30 treten bei einer Varianz der Kristallitbreiteverteilung von eins Überstrukturen in k -Richtung auf. Diese verschwinden für etwas größere Varianzen. Hin zu sehr ungeordneten Verteilungen tauchen sie jedoch wieder auf.

Da die Serien in Abschnitt 4.4.2 für eine feste Höhe mit einer Varianz von eins berechnet wurden, können die Seiteneffekte, die in Abschnitt 5.1.1 erläutert wurden, als Ursache ausgeschlossen werden.

Genauere Untersuchungen zeigen, dass die Überstrukturen bei scharfen und jene bei breiten Verteilungen unterschiedliche Ursachen haben. Diese sollen im Folgenden vorgestellt werden.

5.2.1 Sehr scharfe Breitenverteilung

Die Überstrukturen bei sehr scharfen Verteilungen der Kristallitbreite werden durch das Fixed Film Model verursacht. Durch die scharfe Verteilung sind die Aufpunkte der Kristallite nahezu äquidistant verteilt. Wenn die Kristallite von dort aus aufeinander zuwachsen, wie in Abschnitt 2.3.2, insbesondere Abbildung 2.11 vorgestellt, ist der Abstand zwischen zwei Kristalliten immer gleich groß. So entstehen neue Periodizitäten in der Struktur. Zum einen der Abstand selbst, und zum anderen die Kristallitbreite plus dem Abstand.

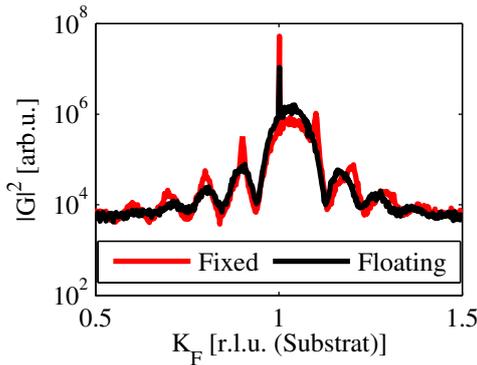


Abbildung 5.3: Vergleich des K_F -Scans von Konfiguration A.17 für das Fixed und das Floating Film Model mit einer scharfen Kristallitbreiteverteilung um 10 Einheitszellen. Die Überstrukturen im Fixed Film Model sind klar zu erkennen. Das Rauschen wird durch die geringe Anzahl Verteilungen verursacht, die für diese qualitative Darstellung berechnet wurden.

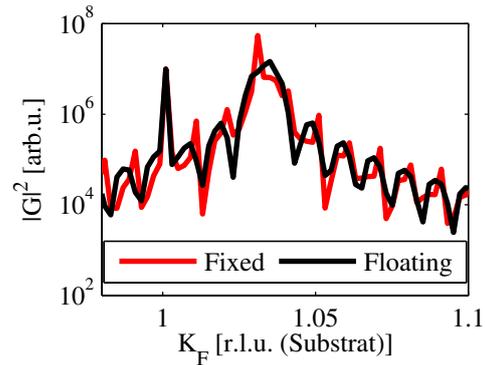


Abbildung 5.4: Vergleich des K_F -Scans von Konfiguration A.22 für das Fixed und das Floating Film Model mit einer scharfen Kristallitbreiteverteilung um 100 Einheitszellen. Auch hier sind die Überstrukturen im Fixed Film Model sind klar zu erkennen.

Bei einer Kristallitbreite von durchschnittlich 10 Einheitszellen hat Letzteres eine Größe von ca. elf Einheitszellen. Damit verursacht diese Struktur nach der N-Lagen-Formel 2.23 eine Nebenzillation mehr als im Signal des reinen Kristallitfilms. Eine Untersuchung der Abstände der Überstrukturpeaks in Abbildung 5.3 zeigt, dass diese einen kleineren Abstand haben, als die Filmoszillationen, und damit eine zusätzliche Oszillation vorliegen muss.

Wie stark die Überstrukturen letztendlich hervortreten, hängt von ihrer Intensität und der Interferenz mit dem Filmsignal ab. Das Signal des reinen Abstands ist beispielsweise nicht stark genug, um im Beugungsbild erkennbar zu sein.

Wie aus dieser Argumentation hervorgeht und an Hand Abbildung 5.3 überprüft werden kann, treten die Überstrukturen beim Floating Film Model nicht auf. Dort sind die Abstände zwischen

den Kristalliten auch bei scharf verteilten Kristallitbreiten zufällig, so dass sich keine zusätzliche Periodizität ausbilden kann.

5.2.2 Weite Breitenverteilung

Hin zu weiten Breitenverteilungen kommt es zu einer Überlagerung von unzähligen Periodizitäten. So dass sich sämtliche Nebenoszillationen auslöschen sollten. Genau dieses Verhalten wurde in Abschnitt 4.4 beobachtet. Dennoch kam es hin zu sehr großen Breitenverteilungen wieder zu Oszillationen.

Konfiguration	B	σ^2	α	λ
A.20	10	1.0E4	1E-2	1E-3
A.21	10	1.0E6	1E-4	1E-5
A.26	100	1.0E6	1E-2	1E-4

Ein Vergleich der Beugungsbilder der in der obigen Tabelle genannten Oszillationen zeigt, dass sie nahezu identisch sind, obwohl sie zu den unterschiedlichsten Konfigurationen gehören. In Abbildung 5.5 sind sie zur besseren Übersicht noch einmal gegenübergestellt. Dieses Verhalten legt ein numerisches Problem nahe.

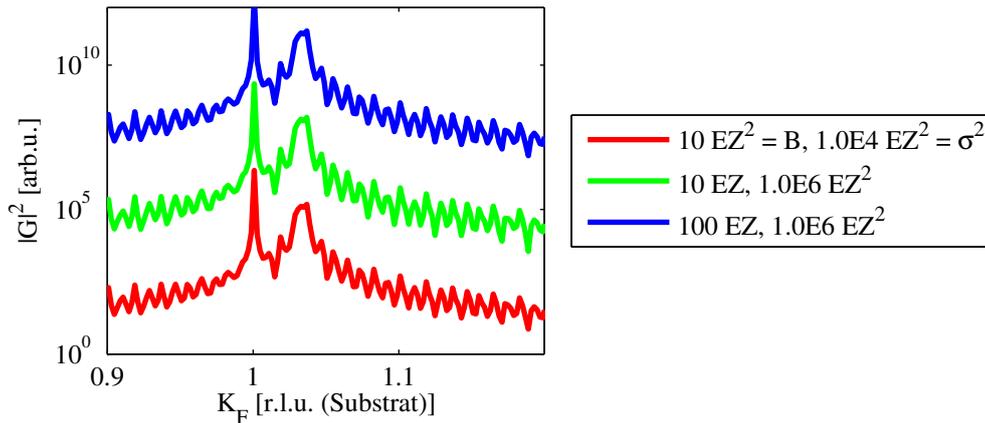


Abbildung 5.5: Gegenüberstellung der K_F -Scans zu den Konfigurationen A.20, A.21 und A.26. Trotz der unterschiedlichen Konfigurationen ergibt sich ein nahezu gleiches Beugungsbild.

Und tatsächlich ergibt die Auswertung der Parameter der einzelnen Gammaverteilungen, die den Breitenverteilungen zu Grunde liegen, eine Gemeinsamkeit. Für die Fälle, in denen es zu Oszillationen kommt, ist der Parameter α klein gegen eins. Bekanntermaßen geht die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Gammaverteilung für $\alpha = 1$ in die Exponentialfunktion über.

Wird α kleiner als eins, wird der Verlauf der Exponentialfunktion sehr steil, insbesondere ist ihr Funktionswert bei 0.1 bereits nahezu null. Da in BaSOX, die für den Algorithmus aus Abschnitt 2.4.1 benötigten Integrale allerdings numerisch mit einer Schrittweite von 0.1 berechnet werden, kann der Algorithmus nicht fehlerfrei arbeiten. So kommt es, dass er stets den zuvor ermittelten Maximalwert liefert. Für die hier betrachteten Verteilungen beträgt er 110 und eine Auswertung der Beugungsbilder liefert genau diesen Wert für die Kristallitbreite. Es ist auch zu erkennen, dass das Beugungsbild die zuvor erklärten Überstrukturen für sehr scharfe Verteilungen aufweist.

Es muss also festgehalten werden, dass BaSOX für Verteilungen mit einem α -Parameter unter eins nicht mehr fehlerfrei arbeitet. Dieses Problem sollte durch eine dynamische Bestimmung der Schrittweite behoben werden.

5.3 Gleichheit der Modelle

In Abschnitt 4.2 wird vermutet, dass die beiden Aufwuchsverhalten für die vorgestellten Konfigurationen sehr ähnliche Beugungsbilder liefern. In Abschnitt 5.2.1 wurde jedoch ein Effekt vorgestellt, der nur beim Fixed Film Model entstehen kann. Dort war die Voraussetzung für die Überstrukturen eine sehr scharfe Verteilung der Kristallitbreiten.

Was diesen Spezialfall von allen anderen Konfigurationen unterscheidet, ist, dass diese Art Kristallitverteilung mit konstantem Abstand zwischen den Kristalliten nur durch das Fixed Film Model entstehen kann. Bei allen anderen Verteilungen kann nach Abschluss des Aufwachsens nicht mehr bestimmt werden, welches Wachstum zu Grunde lag. Abbildung 5.6 zeigt ein Beispiel für eine Kristallitverteilung bei der genau das beschriebene Szenario eintritt: Entweder handelt es sich nach dem Floating Film Model um Kristallite der Breite $B_i = B_{l,i} + B_{r,i}$ mit ihrem Aufpunkten bei R_i . Oder aber es sind Kristallite der Ausdehnung $B_{l,i} + B_{r,i}$ ausgehend vom Aufpunkt $R_i + B_{l,i}$ entsprechend dem Fixed Film Model.

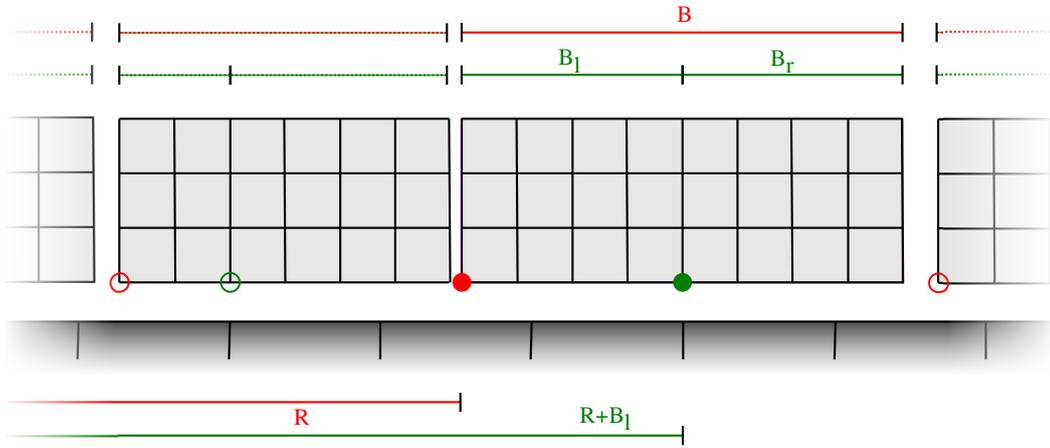


Abbildung 5.6: Darstellung einer allgemeinen Kristallitverteilung, der beide Wachstumsmodelle zu Grunde liegen können. In rot sind Aufpunkte und Breiten im Floating Film Model eingezeichnet. Die grünen Markierungen stehen für das Fixed Film Model.

Damit die Gleichheit der Beugungsbilder in solchen Verteilungen gegeben ist, muss aber auch die Gleichheit der Terme nachgewiesen werden, mit denen die gebeugte Intensität bestimmt wird. Dazu seien zunächst noch einmal die Terme der Gitterfaktoren für die verschiedenen Wachstumstypen in Erinnerung gerufen.

Im Floating Film Model lautete er

$$|G|^2 = \left| A_S + \sum_i \frac{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp}}} \cdot \underbrace{\frac{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel} \cdot (B_i + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel}}} \cdot e^{2\pi i \cdot R_i \cdot K}}_{\text{}} \cdot e^{2\pi i \cdot D_i \cdot L} \right|^2.$$

Im Fixed Film Model hingegen

$$|G|^2 = \left| A_S + \sum_i \frac{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp} \cdot (H_i + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot L \cdot \beta_{\perp}}} \cdot \underbrace{\frac{e^{-2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel} \cdot B_{l,i}} - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel} \cdot (B_{r,i} + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot K \cdot \beta_{\parallel}}}}_{\text{}} \cdot e^{2\pi i \cdot R'_i \cdot K} \cdot e^{2\pi i \cdot D_i \cdot L} \right|^2.$$

Im Folgenden wollen wir nur die Teile betrachten, in denen sich die Terme unterscheiden. Sie sind

in den Gleichungen 5.1 und 5.1 bereits markiert. Es handelt sich dabei zum einen um den Ausdruck der Kristallitbreite, da das Floating Film Wachstum eine Ausdehnung ausschließlich nach rechts annimmt, während das Fixed Film Model eine Ausdehnung nach links und rechts vorgibt. Zum anderen ist es der Interferenzterm, der von der horizontalen Position des Kristallitauflaufpunkts abhängt. Dieser befindet sich entweder links unten am Kristalliten (Floating Film) oder mittig unterm Kristalliten (Fixed Film). Zu diesen Unterschieden sei auch nochmal auf die Abbildungen 2.9 und 2.10 verwiesen.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit, reicht es an dieser Stelle aus sich auf den Term eines Kristalliten zu beschränken. Sollte es nämlich möglich sein die Gleichheit für einen beliebigen Kristalliten nachzuweisen, gilt dies auch für alle anderen. Für das zu untersuchende Szenario, in dem die Art der Verteilung nach Abschluss nicht mehr zu unterscheiden ist, gelten die Zusammenhänge $B_i = B_{l,i} + B_{r,i}$ und $R'_i = R_i + B_{l,i}$. Die zu betrachtenden Terme des Gitterfaktors lauten also:

$$\text{Floating Film Model} : \frac{1 - e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot (B_l + B_r + 1)}}{1 - e^{2\pi i \cdot K}} \cdot e^{2\pi i \cdot K \cdot R} \quad (5.1)$$

$$\text{Fixed Film Model} : \frac{e^{-2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot B_l} - e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot (B_r + 1)}}{-e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K}} \cdot e^{2\pi i \cdot K \cdot (R + B_l)} \quad (5.2)$$

Teilt man nun durch die Ausdrücke $1 - e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K}$ und $e^{2\pi i \cdot K \cdot R}$, bleiben

$$\text{Floating Film Model} : 1 - e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot (B_l + B_r + 1)} \quad (5.3)$$

$$\text{Fixed Film Model} : \left(e^{-2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot B_l} - e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot (B_r + 1)} \right) \cdot e^{2\pi i \cdot K \cdot B_l} \quad (5.4)$$

Umformen des Ausdrucks für das Fixed Film Model liefert

$$\left(e^{2\pi i \cdot (1 - \beta_{11}) \cdot K \cdot B_l} - e^{2\pi i \cdot \beta_{11} \cdot K \cdot (B_l + B_r + 1)} \right). \quad (5.5)$$

Für $\beta_{11} \rightarrow 1$ gehen die Terme also in einander über. Mit anderen Worten formuliert, sind die Modelle im gegebenen Szenario für horizontale Gitterfehlanspassungen nahe eins nicht unterscheidbar. Genau solche Modelle, mit einer Gitterfehlanspassung von maximal 3%, sind im Rahmen dieser Arbeit untersucht worden. Somit ist es legitim die Modelle unter diesen Rahmenbedingungen gleichzusetzen.

Die Testkonfiguration A.3 für eine horizontale Gitterfehlanspassung von 1.24 in Abbildung 5.7 zeigt, wie zu erwarten, einen deutlichen Unterschied zwischen den beiden Wachstumstypen.

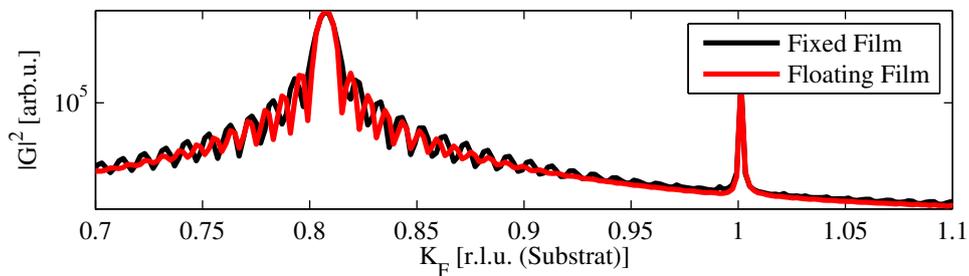


Abbildung 5.7: Gegenüberstellung der Konfiguration A.3 für die beiden Wachstumsmethoden. Für diese große horizontale Gitterfehlanspassung von 1.24 ist ein deutlicher Unterschied zu erkennen.

Anschaulich bedeutet dies, dass für kleine Gitterfehlpassungen auch im Floating Film Model stets irgendein Kristallitpunkt genau über einem Substratpunkt liegt. Wie in Abbildung 5.6 gezeigt könnte dieser dann auch entsprechend des Fixed Film Models gewachsen sein. Für größere Gitterfehlpassungen nimmt die Anzahl dieser zufälligen Übereinstimmungen ab, so auch nach Abschluss der Kristallitverteilung noch bestimmt werden kann, welches Wachstum vorlag.

5.4 Beispielauswertung

Das neu eingeführte Modell dient zum einen der theoretischen Simulation gewisser Kristallitstrukturen und ihrem Einfluss auf das Beugungsbild. Zum anderen soll es aber auch genutzt werden, um Messdaten auszuwerten. Deswegen wird an dieser Stelle eine Probe aus Praseodymoxid auf Silizium beispielhaft ausgewertet. Es sei aber noch einmal darauf verwiesen, dass der Strukturfaktor noch nicht im Modell eingebaut ist. Daher kann die Auswertung nur qualitativ erfolgen.

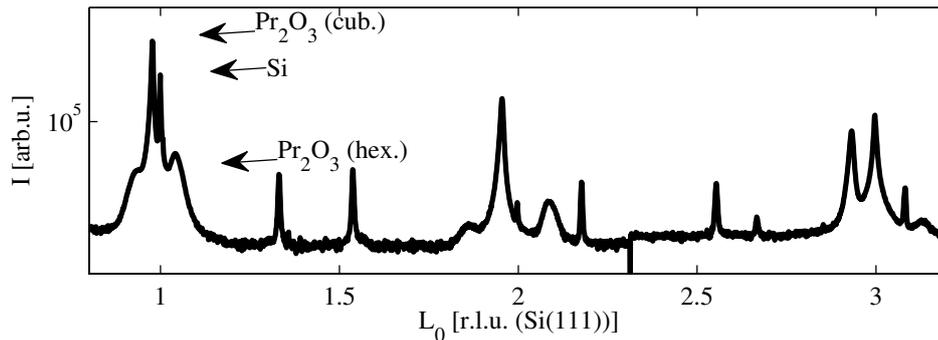


Abbildung 5.8: Röntgenbeugungsaufnahme entlang L_0 der untersuchten Probe. Es zeigen sich charakteristische Peaks für verschiedene Formen des Praseodymoxids.

Die Probe wurde am IHP Microelectronics in Frankfurt-Oder [15] hergestellt und vorcharakterisiert. Die Scanning-Electron-Microscope-Aufnahme in Abbildung 5.9 zeigt eine 206nm dicke Praseodymoxid-Schicht auf dem Silizium Substrat. Im Röntgenbeugungsbild 5.8 konnten außerdem charakteristische Peaks für kubisches und hexagonales Pr_2O_3 nachgewiesen werden [16]. Da dem Modell bisher eine kubische Struktur zu Grunde liegt, soll an dieser Stelle auch nur der Peak des kubischen Pr_2O_3 untersucht werden. Er ist bei $L = 3$ hinreichend vom Substratpeak getrennt, weshalb dieser Bereich ausgewertet wird.

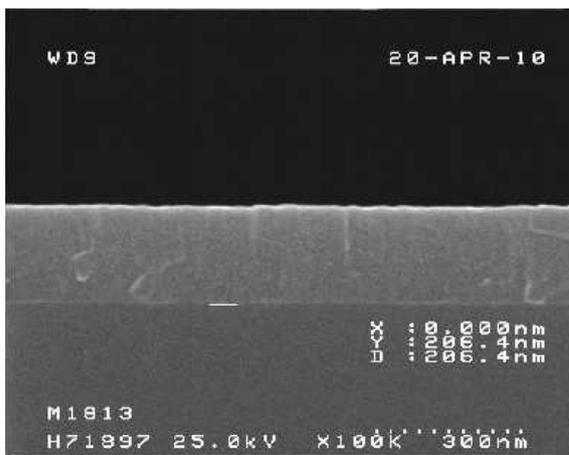


Abbildung 5.9: Scanning-Electron-Microscope-Aufnahme der untersuchten Probe. Sie zeigt eine Schichtdicke von 206nm auf dem Substrat [16].

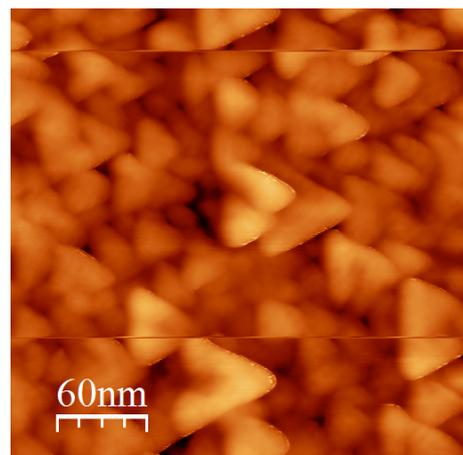


Abbildung 5.10: Non-Contact Atomic-Force-Microscope-Aufnahme der untersuchten Probe. Die Auswertung ergibt einen maximalen Höhenunterschied von 20nm [16].

Die genaue Peakposition beträgt $L = 2.932$, was eine vertikale Gitterfehlانpassung von 1.0232 ergibt. Mit dieser Gitterfehlانpassung und der bekannten Gitterkonstante des Siliziums von $a_{Si(fcc)} = 5.41 \text{ \AA}$ [17] lässt sich die vertikale Gitterkonstante des kubischen Praseodymoxids wie folgt bestimmen

$$\beta_{\perp} = \frac{a_{Pr_2O_3(cub.)}}{a_{Si(fcc)}} \Rightarrow a_{Pr_2O_3(cub.)} = 5.5335 \text{ \AA}.$$

Hier zeigt sich, dass es zu einer leichten Relaxation der Kristallitstruktur gekommen sein muss, da die Gitterkonstante um gut 0.5% vom Literaturwert von 5.5670 \AA abweicht [17]. An dieser Stelle wird jedoch mit der experimentell bestimmten Gitterkonstante weitergearbeitet.

Für diese Gitterkonstante ergibt sich, dass die Schicht ungefähr 372 Einheitszellen des kubischen Praseodymoxids hoch ist. Diese Angaben genügen, um eine Berechnung mit dem neuen Modell zu starten. Es wurde eine Serie von Konfigurationen (A.58 - A.62) berechnet, die die Varianz der Kristallithöhenverteilung variiert, um die Abgleichposition zwischen erstem Nebenmaximum und erstem Minimum zu finden. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 5.11 und 5.12 dargestellt.

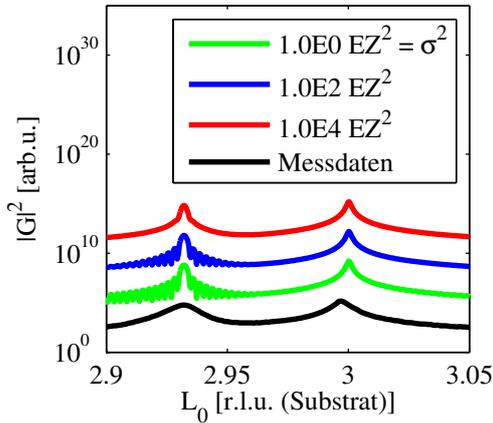


Abbildung 5.11: L_0 -Scans der Konfigurationen A.58 - A.62 im Vergleich zum gemessenen Röntgenbeugungssignal (schwarz). Die abnehmenden Fringes wurden zur Bestimmung der Abgleichposition in Abbildung 5.12 benötigt.

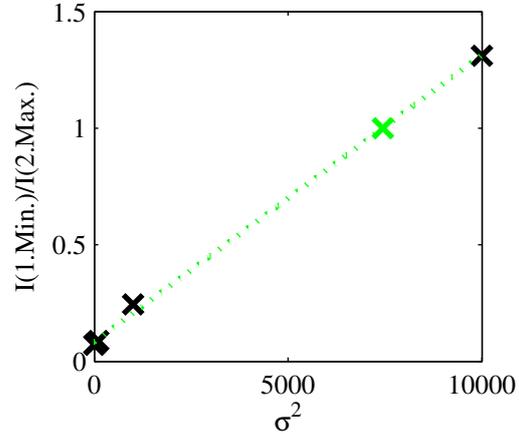


Abbildung 5.12: Bestimmung der Abgleichposition zwischen erstem Nebenmaximum und erstem Minimum aus einer linearen Regression der Auftragung gegen die Varianz der Höhenverteilung. Die Abgleichposition befindet sich bei $\sigma^2 = 7448 \text{ EZ}^2$.

Die Abgleichposition ist zu finden für eine Varianz von $\sigma^2 = 7448 \text{ EZ}^2$ und damit eine Standardabweichung von $\sigma = 86 \text{ EZ}$. Die Atomic-Force-Mikroscope-Aufnahme in Abbildung 5.10 zeigt eine maximale Höhendifferenz von 20nm [16], was ungefähr 36 Einheitszellen des Materials entspricht. Es kann also bereits trotz der Einfachheit der hier vorgestellten Auswertungsmethode näherungsweise die Rauigkeit der Schicht bestimmt werden.

Ähnliche Auswertungen würden sich für K-Scans des reziproken Raums anbieten. Gerade für Proben für die zusätzlich AFM-Aufnahmen existieren, könnte so überprüft werden, ob auch die Breitenverteilung richtig wiedergegeben wird. Leider stehen solche Kombinationen von Messdaten nicht zur Verfügung, weshalb eine Überprüfung an dieser Stelle entfällt.

5.5 Erweiterungsmöglichkeiten

Abschließend sollen einige Erweiterungsmöglichkeiten des Programms diskutiert werden.

Einpfelegen der Materialien

Als nächster und wichtigster Schritt ist sicherlich das einpflegen einiger Materialien in Form des Strukturfaktors anzusehen. So könnte auch dessen langreichweitige Modulation des Beugungsbilds berücksichtigt werden (siehe Abbildung 2.3) und der Vergleich mit Messdaten könnte auch quantitativ und nicht nur qualitativ erfolgen.

Fit-Algorithmen

Sobald das Programm mit bekannten Strukturfaktoren rechnen kann, wäre der nächste Schritt, ein Fit-Algorithmus zu ergänzen. Durch das Anfitzen von Messdaten kann deren Auswertung vereinfacht werden. Außerdem ist eine solche Anpassung meist genauer, als die Auswertung von Hand. Ein Fit-Algorithmus für die L-Richtung des reziproken Raums wäre bereits lauffähig. Da die Höhe der Kristallschicht durch die Menge an aufgedampften Materials wohldefiniert ist, muss lediglich die Varianz der Höhenverteilung bestimmt werden.

In K-Richtung des reziproken Raums ist der Sachverhalt etwas komplizierter. Es ist zuvor nicht bekannt, um welche mittlere Breite die Kristallite verteilt sind, oder ob es sich sogar um eine vollständig geschlossene Schicht handelt. Fehlen dann auch noch die Nebenmaxima als Informationsquelle, ist es bisher nicht möglich die Verteilungsfunktion für die Kristallitbreite aufzustellen. Daher muss zunächst der mögliche Zusammenhang zwischen Peakform, Mittelwert und Varianz der Verteilung, wie in Abschnitt 4.4 vorgestellt, geklärt werden. Erst dann könnte auch für die K-Richtung ein Fit-Algorithmus entwickelt werden.

Erweiterung des Modells

Auch bei dem Modell selbst sind noch nicht alle Möglichkeiten erschöpft. Zum einen fehlt die Möglichkeit gemischte Materialien darzustellen, wie es allein in Abschnitt 5.4 von Vorteil gewesen wäre. Zum anderen können bisher keine Schichtsysteme umgesetzt werden. Außerdem könnte das Modell um die noch fehlende dritte Dimension erweitert werden, so dass der vollständige reziproke Raum berechnet werden kann.

Die zuletzt genannten Optionen sind jedoch mit enormem Aufwand verbunden. Durch die dritte Dimension wird ein neuer Verteilungsalgorithmus benötigt. Dieser muss auch mit Kristalliten, deren Ausmaße in alle drei Raumrichtungen gammaverteilt sind, eine deckende Kristallschicht erzeugen können.

Ein Schichtsystem hingegen würde zum Beispiel voraussetzen, dass eine Schicht nie stärker besetzt sein sollte als die darunter liegende. Dies könnte durch ein, dem Stranski-Krastanov-Wachstum ähnlichen, Wachstum modelliert werden. So würden alle Schichten bis auf die oberste als geschlossen angenommen und nur dort eine Kristallitverteilung durchgeführt.

Gerade der Aufwand eine dritte Dimension einzuführen, steht dabei in keinem Verhältnis zum Zugewinn an Information. Denn meisten Proben sind symmetrisch in H- und K-Richtung, so dass die Information in K-Richtung bereits genügt, um auf den ganzen reziproken Raum schließen zu können.

Falls das Modell also weiter ergänzt werden soll, hätten Mischmaterialien und Schichtsysteme Vorrang.

6 Zusammenfassung

Mit dieser Arbeit wird ein neues Modell zur theoretischen Berechnung von Röntgenbeugungssignalen eingeführt. Es wird eine zweidimensionale Kristallitverteilung auf einem halbbunendlichen Substrat dargestellt. Außerdem sind die Abmessungen und Positionen der einzelnen Kristalliten entsprechend einer Gammaverteilung zufallsverteilt. Zusätzlich kann zwischen zwei verschiedenen Wachstumsprozessen der Kristallite gewählt werden. Das Modell selbst ist sehr abstrakt, da auf den Einfluss von Materialeigenschaften verzichtet wird.

Das neue Modell bietet einige Vorteile gegenüber den bisherigen eindimensionalen Modellen. Da nicht mehr vollständig geschlossene, ideale Adsorbatschichten angenommen werden, ist es möglich Fehlstellen und Unregelmäßigkeiten in horizontaler Richtung zu simulieren. Außerdem wird durch die zusätzliche Dimension im Modell auch im reziproken Raum eine zweite Dimension erschlossen. So ist es nun möglich dort auch K-Scans zu berechnen.

Die Gammaverteilung der Abmessungen und Positionen dient dazu die Güte der Struktur einzustellen. Durch breit verteilte Parameter wird etwa eine sehr unregelmäßige Struktur erzeugt, während scharfe Verteilungen für gute Strukturierung sorgen.

Bei den Wachstumsprozessen der Kristallite kann zwischen direktem Wachstum auf dem Substrat, Fixed Film Model genannt, und dem Floating Film Model gewählt werden. Letzteres entspricht dem Kristallitwachstum auf einer Interfaceschicht.

Die Berechnung des Röntgenbeugungssignals einer so erzeugten Kristallitverteilung geschieht mit Hilfe des im Rahmen dieser Arbeit implementierten Programms BaSOX. Es erlaubt über eine graphische Oberfläche oder entsprechend formatierte Dateien einen Parametersatz einzulesen. An Hand dieses Parametersatzes, auch Konfiguration genannt, wird eine Kristallitverteilung erzeugt und anschließend das gebeugte Signal berechnet.

Dabei wird über mehrere Verteilungen, die alle auf der gleichen Konfiguration basieren, gemittelt. Dies wird nötig, da eine gemessene Intensität simuliert werden soll. Diese ist, wie gezeigt wird, selbst eine Summe aus vielen Einzelsignalen, die durch die begrenzte Kohärenz der Röntgenstrahlung entstehen.

Eine Überprüfung der mit BaSOX berechneten Ergebnisse zeigt, dass alle bekannten Effekte der Röntgenbeugung richtig wiedergegeben werden. Darüber hinaus wird der Einfluss jedes einzelnen Parameters detailliert untersucht.

Für die Höhe und die Breite der Kristallite zeigt sich dabei, dass eine zunehmende Verteilung dieser Parameter dafür sorgt, dass die typischen Nebenoszillationen ausgelöscht werden. Die Varianz des verteilten Parameters, bei dem die Oszillationen vollständig verschwunden sind, ist bei der Höhe im direkten Vergleich wesentlich niedriger als bei der Kristallitbreite.

Weiterhin wird gezeigt, dass die Höhenverteilung eine zusätzliche Breiteninformation liefert und das Beugungsbild entsprechend beeinflusst wird.

Außerdem stellt sich heraus, dass die Signale der beiden Wachstumsprozesse für die in dieser Arbeit untersuchten kleinen Gitterfehlpassungen nicht unterscheidbar sind. Die Entscheidung, ob ein direktes Wachstum auf dem Substrat vorliegt, oder ob sich eine Interfaceschicht gebildet hat, wird also erst bei größeren Gitterfehlpassungen nötig.

Neben der theoretischen Auswertung der Ergebnisse wird versuchsweise die Auswertung der Messwerte zu einer Probe aus Praseodymoxid durchgeführt. Sie zeigt, dass trotz des abstrakten Modells die Rauigkeit dieser Probe näherungsweise bestimmt werden kann. Die Überprüfung wird durch Atomic-Force-Microscope-Aufnahmen der selben Probe möglich.

7 Abstract

This work introduces a new model for theoretical calculation of x-ray diffraction signals. It represents a two-dimensional crystallite distribution on a semi-infinite substrate. The size of the single crystallites as well as their position is determined by a gamma distribution. It also offers the possibility to choose from two processes of crystallite growth. The model itself is very abstract, because there is no material property included.

The new model offers many advantages compared to the previous one dimensional models. It is possible to simulate imperfections and irregularities in horizontal direction, since there are no longer ideal, closed adsorbate layers. Furthermore the additional dimension of the model opens a second dimension in the reciprocal space. This allows to calculate not only L-scans, but K-scans too.

The gamma distribution of crystallite size and position is used to adjust the quality of the structure. Broad distributed parameters produce an irregular structure, while sharp distribution results in good structuring.

Regarding the growth process there is the choice between direct growth on the substrate, called Fixed Film Model, and the Floating Film Model. The latter one represents the growth on an amorphous interface layer.

The program BaSOX is implemented to calculate the x-ray diffraction signal of such a crystallite distribution. Parameters are entered either through a graphical user interface or formatted files. According to these parameters a crystallite distribution is built and its diffraction signal calculated.

In the end the result is averaged over several distributions - all based on the same parameters. This is necessary, because a measured intensity should be simulated. The latter is also the sum of several single intensity, because of the limited coherence of x-rays.

A survey of the results calculated by BaSOX shows that all known effects of x-ray diffraction are correctly reproduced. Furthermore the influence of every single parameter is analysed in detail.

As far as height and width of the crystallites are concerned a wider distribution of these parameters leads to the extinction of the typical minor oscillations. The variance, for which the oscillations are completely vanished, is bigger for the crystallite width than for the height.

It is also shown that the height distribution causes further width-information and influences the diffraction pattern accordingly.

Another result is that the signal of the two processes for crystallite growth cannot be separated for small lattice mismatches. So it is only necessary for big lattice mismatches to choose whether there is an interface layer or direct growth on the substrate.

Besides the theoretical evaluation of the results there is an experimental analysis of measured data from a praseodymium oxide on silicon sample. It shows that despite the abstract model the roughness of the crystallite layer can be approximately deduced. The verification of the result is possible due to atomic force microscope measurements of the same sample.

A Konfigurationen

Im Folgenden sind die Kurzfassungen der berechneten Konfigurationen aufgeführt. Kurzfassungen deswegen, da einige Parameter konstant bleiben:

Absorptionskoeffizienten			
$\epsilon_{ }$	0.001		
ϵ_{\perp}	0.001		
Wertebereich	Start	Ende	Auflösung
k	0.0	2.5	1250
l	0.0	2.5	1250
Substratgröße			
			1000

Die Anzahl der berechneten Verteilungen variiert, je nachdem, ob ein qualitativer Schnappschuss oder eine detaillierte Aufnahme des reziproken Raums benötigt wird. Gleiches gilt für die Auflösung, doch wurde auf eine Auflösung von mindestens $500[r.l.u.(Substrat)]^{-1}$ geachtet, damit alle Überstrukturen dargestellt werden.

Die Konfigurationen sind nicht nach ihrer ersten Erwähnung in der Arbeit sortiert, sondern vielmehr in Abschnitte zu den Effekten, die mit ihnen untersucht werden sollten, gegliedert.

A.1 Konfigurationen zum Vergleich der Modelle

#0008	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	350	8.8E+1	1.4E+3	4.0E+0
D	1	2.0E+0	2.0E+0	1.0E+0
H	5	1.8E+1	7.2E+1	4.0E+0
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.00
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.1: Konfiguration #0008

#0011	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	350	8.8E+1	1.4E+3	4.0E+0
D	11	1.1E+1	1.1E+1	1.0E+0
H	4	2.0E+0	3.6E+1	4.0E+0
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.00
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.2: Konfiguration #0011

#0260	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.25
β_{\perp}				1.25

Tabelle A.3: Konfiguration #0260

A.2 Konfigurationen zu Untersuchung der Höhenverteilung

#0106	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.4: Konfiguration #0106

#0107	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+1	1.0E+1	1.0E+0
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.5: Konfiguration #0107

#0103	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.1E+1	9.0E+0	9.0E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.6: Konfiguration #0103

#0100	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+2	1.0E+0	1.0E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.7: Konfiguration #0100

#0109	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	30	1.0E+0	9.0E+2	3.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.8: Konfiguration #0109

#0110	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	30	1.0E+1	9.0E+1	3.0E+0
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.9: Konfiguration #0110

#0104	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	30	1.0E+2	9.0E+0	3.0E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.10: Konfiguration #0104

#0101	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	30	9.0E+2	1.0E+0	3.3E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.11: Konfiguration #0101

#0112	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	50	1.0E+0	2.5E+3	5.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.12: Konfiguration #0112

#0113	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	50	1.0E+1	2.5E+2	5.0E+0
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.13: Konfiguration #0113

#0114	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	50	1.0E+2	2.5E+1	5.0E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.14: Konfiguration #0114

#0105	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	50	1.0E+2	9.0E+0	1.8E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.15: Konfiguration #0105

#0102	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	50	2.5E+3	1.0E+0	2.0E-2
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.16: Konfiguration #0102

A.3 Konfigurationen zu Untersuchung der Breitenverteilung

#0117	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.17: Konfiguration #0117

#0116	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	10	1.1E+1	9.0E+0	1.0E+0
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.18: Konfiguration #0116

#0115	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	10	1.0E+1	1.0E+0	1.0E-1
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.19: Konfiguration #0115

#0118	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	10	1.0E+1	1.0E-2	1.0E-3
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.20: Konfiguration #0118

#0119	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	10	1.0E+1	1.0E-4	1.0E-5
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.21: Konfiguration #0119

#0122	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.22: Konfiguration #0122

#0123	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+2	1.0E+2	1.0E+0
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.23: Konfiguration #0123

#0121	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+2	9.0E+0	9.0E-2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.24: Konfiguration #0121

#0120	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+2	1.0E+0	1.0E-2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.25: Konfiguration #0120

#0124	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+2	1.0E-2	1.0E-4
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.26: Konfiguration #0124

A.4 Konfigurationen zu Untersuchung des Substratabstandes

#0136	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	6.4E-1	8.0E-1
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.27: Konfiguration #0136

#0137	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	8.1E-1	9.0E-1
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.28: Konfiguration #0137

#0138	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.29: Konfiguration #0138

#0139	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	1.2E+0	1.1E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.30: Konfiguration #0139

#0140	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	1.4E+0	1.2E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.31: Konfiguration #0140

#0141	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	1.7E+1	1.3E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.32: Konfiguration #0141

#0072	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	4.0E+0	2.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.33: Konfiguration #0072

#0074	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	1.6E+1	4.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.34: Konfiguration #0074

#0076	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	3.6E+1	6.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.35: Konfiguration #0076

#0078	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	6.4E+1	8.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.36: Konfiguration #0078

#0080	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	0.8	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.37: Konfiguration #0080

A.5 Konfigurationen zu Untersuchung der Gitterfehlpassung

#0193	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				$1 + \frac{\pi}{150}$

Tabelle A.38: Konfiguration #0193

#0194	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				$1 + \frac{\pi}{300}$

Tabelle A.39: Konfiguration #0194

#0142	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				1

Tabelle A.40: Konfiguration #0142

#0146	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{300}$

Tabelle A.41: Konfiguration #0146

#0195	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.00
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{150}$

Tabelle A.42: Konfiguration #0195

#0199	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 + \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.43: Konfiguration #0199

#0198	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 + \frac{\pi}{150}$
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.44: Konfiguration #0198

#0197	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 + \frac{\pi}{300}$
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.45: Konfiguration #0197

#0143	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{300}$
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.46: Konfiguration #0143

#0205	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{150}$
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.47: Konfiguration #0205

#0213	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 + \frac{\pi}{150}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.48: Konfiguration #0213

#0214	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 + \frac{\pi}{300}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.49: Konfiguration #0214

#0215	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.50: Konfiguration #0215

#0216	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{300}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.51: Konfiguration #0216

#0217	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{150}$
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.52: Konfiguration #0217

#0218	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 + \frac{\pi}{150}$

Tabelle A.53: Konfiguration #0218

#0219	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 + \frac{\pi}{300}$

Tabelle A.54: Konfiguration #0219

#0220	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				1

Tabelle A.55: Konfiguration #0220

#0221	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{300}$

Tabelle A.56: Konfiguration #0221

#0222	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{100}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{150}$

Tabelle A.57: Konfiguration #0222

A.6 Konfigurationen zur Beispielauswertung

#0250	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	372	1.0E+0	1.4E+5	3.7E+2
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.0232
β_{\perp}				1.0232

Tabelle A.58: Konfiguration #0250

#0251	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	372	1.0E+1	1.4E+4	3.7E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.0232
β_{\perp}				1.0232

Tabelle A.59: Konfiguration #0251

#0252	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	372	1.0E+2	1.4E+3	3.7E+0
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.0232
β_{\perp}				1.0232

Tabelle A.60: Konfiguration #0252

#0253	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	372	1.0E+3	1.4E+2	3.7E-1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.0232
β_{\perp}				1.0232

Tabelle A.61: Konfiguration #0253

#0254	Fixed Film Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	372	1.0E+4	1.4E+1	3.7E-2
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1.0232
β_{\perp}				1.0232

Tabelle A.62: Konfiguration #0254

A.7 Sonstige Konfigurationen

#0200	beide Modelle			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	1000	1.0E+0	1.0E+6	1.0E+3
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				1

Tabelle A.63: Konfiguration #0200

#0202	Fixed-Film-Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	100	1.0E+0	1.0E+4	1.0E+2
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlpassung				
$\beta_{ }$				$1 - \frac{\pi}{300}$
β_{\perp}				$1 - \frac{\pi}{100}$

Tabelle A.64: Konfiguration #0202

#0203	Fixed-Film-Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	α	λ	
B/R	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+1
Gitterfehlanpassung				
$\beta_{ }$				1
β_{\perp}				1

Tabelle A.65: Konfiguration #0203

#0204	Fixed-Film-Model			
Verteilte Größen	\bar{x}	σ^2	α	λ
B/R	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+0
D	1	1.0E+0	1.0E+0	1.0E+0
H	10	1.0E+0	1.0E+2	1.0E+0
Gitterfehlanpassung				
$\beta_{ }$				1.00
β_{\perp}				1.00

Tabelle A.66: Konfiguration #0204

Literatur

- [1] M. von Laue, P. Knipping, and W. Friedrich, Sitzungsberichte der mathematisch-physikalischen Klasse der K.B. Akademie der Wissenschaften zu München , 303 (1912).
- [2] J. Als-Nielsen and D. McMarrow, *Elements of Modern X-Ray Physics* (John Wiley & Sons, Ltd, 2001).
- [3] T. Weisemoeller, *X-ray analysis of praseodymia*, Doktorarbeit, Universität Osnabrück, 2009.
- [4] T. Weisemoeller *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 245422 (2009).
- [5] A. Greuling, Röntgenstrukturanalyse von Isolatorschichten, Master's thesis, Universität Osnabrück, 2007.
- [6] C. Deiter, *Röntgenstrukturanalyse von Halbleiter-Isolator-Schichtsystemen*, Doktorarbeit, Universität Bremen, 2005.
- [7] C. Gerthsen and D. Meschede, *Gerthsen Physik*, 23. ed. (Springer, 2006).
- [8] K. Press, editor, *International tables for X-ray crystallography* (, 1952).
- [9] B. Cullity, *Elements of X-ray diffraction*, 3. ed. (Addison-Wesley, 1967).
- [10] I. A. Vartanyants and A. Singer, NEW JOURNAL OF PHYSICS **12** (2010).
- [11] K. Oura, *Surface Science: An Introduction* (Springer, 2003).
- [12] Java (<http://www.java.com/de>).
- [13] S. Müller, Jmatlink: Connect matlab and java (<http://jmatlink.sourceforge.net>).
- [14] P. L'Ecuyer, Ssj: Stochastic simulation in java (<http://www.iro.unmontreal.ca/simardr/ssj/indexe.html>).
- [15] Innovations for high performance microelectronics (<http://www.ihp-microelectronics.com/>).
- [16] C. Brodehl, Hochauflösende charakterisierung von praseodymoxid auf silizium mit uhv-rasterkraftmikroskopie, Master's thesis, Universität Osnabrück, 2010.
- [17] N. Jeutter, *Wachstum von Praseodymoxid auf Silizium (111) und (113)*, Doktorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität zu München, 2005.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Skizze zum BRAGG 'schen Beugungsgesetz.	8
2.2	Skizze der Streuvektor	9
2.3	Qualitative Darstellung des Gitterfaktors $G(x)$ und des Strukturfaktors $F(x)$	11
2.4	N-Spalt Funktion für $N = 5$	13
2.5	Abbild einer Kristallstruktur im reziproken Raum.	14
2.6	Skizzen verschiedener zweidimensionaler Beugungsbilder.	14
2.7	Ausleuchtung einer Probe. Gelb markiert sind die Bereiche des Strahls, die als kohärent angenommen werden können.	16
2.8	Allgemeine Darstellung des Modells.	17
2.9	Floating-Film-Modell.	18
2.10	Fixed-Film-Modell.	19
2.11	Kristallitwachstum entsprechend dem Fixed Film Model.	20
2.12	Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f_{Γ} mit den Parametern $\alpha = 2$ und $\lambda = 1$	22
2.13	Das zu Abbildung 2.12 gehörige Intervall.	22
2.14	Normierte Histogramme der mit dem Algorithmus aus Abschnitt 2.4.1 bestimmten Zufallszahlen.	22
3.1	Reduziertes UML-Klassendiagramm (Unified Markup Language) von BaSOX.	24
3.2	Schematische Darstellung des Programmablaufs.	25
3.3	Screenshot der BaSOX Benutzeroberfläche.	26
4.1	Ein Mapping zu Konfiguration A.64.	29
4.2	Skizze der typischen Scan Positionen.	29
4.3	Die Ausgabe für eine Konfiguration mit reinem Substrat, d.h. ohne Kristallitverteilung.	30
4.4	Die Ausgabe für Konfiguration A.63.	31
4.5	Die Ausgabe für Konfiguration A.65.	31
4.6	Die Ausgabe für Konfiguration A.66.	32
4.7	L_F und K_F -Scans durch die Konfigurationen A.1, A.2 und A.39.	33
4.8	Deckungsgleiche L_1 -/ L_F -Scans von Konfiguration A.38 - A.42.	34
4.9	Deckungsgleiche K_1 -/ K_F -Scans von Konfiguration A.43 - A.47.	34
4.10	Intensitätsprofil der Konfiguration A.38 mit einer vertikalen Gitterfehl-anpassung von $\beta_{\perp} \approx 1.03$	35
4.11	Intensitätsprofil zu Konfiguration A.44.	35
4.12	Mapping zu Konfiguration A.53 aus Abbildung 4.13.	35
4.13	Gegenüberstellung des L_1 - und L_F -Scans für Konfiguration A.53.	36
4.14	L_F -Scans für die Konfigurationen A.53 - A.57, bei denen die vertikale Gitterfehl-anpassung von 0.98 bis 1.02 läuft.	36

4.15	Gegenüberstellung von K_1 und K_F -Scan der Konfiguration A.48 mit einer Gitterfehlanpassung von $\beta_{11} \approx 1.03\%$	37
4.16	K_F -Scans für die Konfigurationen A.48 bis A.52, bei denen die horizontale Gitterfehlanpassung von 0.98 bis 1.02 läuft.	37
4.17	L_F -Scans der Konfigurationen A.4 - A.7.	38
4.18	L_F -Scans der Konfigurationen A.8 - A.11.	39
4.19	L_F -Scans der Konfigurationen A.12 - A.16.	39
4.20	Auswertung der Peak-to-Peak-Verhältnisse.	39
4.21	Varianz, für die ein Abgleich der Intensitäten von erstem Nebenmaximum und erstem Minimum vorliegt.	40
4.22	Form der Filmmaxima für Kristallite einer Höhe von 10 Einheitszellen (Konfigurationen A.4 bis A.7).	40
4.23	Form der Filmmaxima für Kristallite einer Höhe von 30 Einheitszellen (Konfigurationen A.8 bis A.11).	41
4.24	Form der Filmmaxima für Kristallite einer Höhe von 50 Einheitszellen (Konfigurationen A.12 bis A.16).	41
4.25	Auftragung der Exponenten der Fitfunktionen.	41
4.26	Entwicklung der Peakform durch Überlagerung vieler Einzelsignale.	42
4.27	Halbwertsbreiten der Hauptmaxima des Kristallitfilms aufgetragen gegen die Varianz.	42
4.28	Gesamtdarstellung aller lorentzförmiger Filmpeaks.	43
4.29	Auftragung der L_F -Scans bei einem Erwartungswert der Breite von 10 Einheitszellen für verschiedene Varianzen.	44
4.30	Auftragung der L_F -Scans bei einem Erwartungswert der Breite von 100 Einheitszellen für verschiedene Varianzen.	44
4.31	Auswertung der Peak-to-Peak-Verhältnisse zwischen erstem Nebenmaximum und erstem Minimum.	44
4.32	Auftragung der Exponenten der Fitfunktionen aus den Abbildungen 4.29 bis 4.30 gegen die Varianz der Kristallitbreiteverteilung.	45
4.33	Auftragung der Halbwertsbreiten gegen die Varianz der Kristallitbreiteverteilung.	45
4.34	K_F -Scans für einen Erwartungswert der Höhe von 10 bei verschiedenen Varianzen.	46
4.35	K_F -Scans für einen Erwartungswert der Höhe von 30 Einheitszellen bei verschiedenen Varianzen.	46
4.36	Die K_F -Scans für einen Erwartungswert der Höhe von 50 Einheitszellen bei verschiedenen Varianzen zeigt die selben Merkmale wie schon die Abbildungen 4.34 und 4.35.	46
4.37	L_F -Scans für verschiedene Konfigurationen der Breite.	47
4.38	L_F -Scans durch die Konfigurationen A.27 - A.32 mit ansteigenden Substrat-Kristallit-Abständen zwischen 0.8 und 1.3.	48
4.39	L_F -Scans durch die Konfigurationen A.33 - A.37.	49
5.1	Schematische Darstellung einer Kristallitverteilung bei wohldefinierter Breite und breit verteilter Höhe.	50

5.2	Skizze einer Kristallitverteilung bei fester Höhe und breit verteilter Breite	51
5.3	Vergleich des K_F -Scans von Konfiguration A.17 für das Fixed Film Model und das Floating Film Model.	52
5.4	Vergleich des K_F -Scans von Konfiguration A.22 für das Fixed Film Model und das Floating Film Model.	52
5.5	Gegenüberstellung der K_F -Scans zu den Konfigurationen A.20, A.21 und A.26. . .	53
5.6	Darstellung einer allgemeinen Kristallitverteilung, der beide Wachstumsmodelle zu Grunde liegen können.	54
5.7	Gegenüberstellung der Konfiguration A.3 für die beiden Wachstumsmethoden. . .	55
5.8	Röntgenbeugungsaufnahme entlang L_0 der untersuchten Probe.	57
5.9	Scanning-Electron-Microscope-Aufnahme der untersuchten Probe.	57
5.10	Non-Contact Atomic-Force-Microscope-Aufnahme der untersuchten Probe.	57
5.11	L_0 -Scans der Konfigurationen A.58 - A.62 im Vergleich zum gemessenen Röntgenbeugungssignal.	58
5.12	Bestimmung der Abgleichsposition.	58