

Charakterisierung niedrigdimensionaler Halbleiterstrukturen mittels nanofokussierter Röntgenstrahlen

kumulative Dissertation

zur Erlangung des
Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
der



Naturwissenschaftlichen Fakultät II
der Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg,

vorgelegt von

Herrn

MARTIN DUBSLAFF

geb. am 29.09.1981 in Jena

Gutachter

1. Prof. Dr. Reinhard Krause-Rehberg
2. PD Dr. Hartmut S. Leipner
3. Prof. Dr. Stefan Kowarik

Eingereicht am: 02.10.2012

Tag der öffentlichen Verteidigung: 09.04.2013

Abstract

In recent years focusing optics for hard x-ray synchrotron radiation have been developed which momentarily provide beam sizes of down to 80 nm and below. A central aim of the present work is the application of such nanofocused hard x-rays to the method of high resolution x-ray diffraction. As a consequence measurements have been performed by using the nanofocus setup at ID13 of the European Synchrotron Radiation Source, Grenoble/France, with x-ray beams that were between 100 nm and 250 nm in size. During the experiments individual parts of a single SiGe/Si(001) island have been illuminated and distinct island ensembles as well as InGaAs/GaAs(001) quantum dot molecules were scanned. In case of shallow InGaAs quantum dot molecules the nanodiffraction experiment has been accompanied by grazing incidence diffraction to analyze the in-plane strain components. The related diffraction patterns were interpreted and simulated using a new approach dedicated to scanning nanodiffraction which combines finite-element method and kinematical scattering with a beam profile. Information about shape, positional correlation and chemical composition of the low-dimensional structures was obtained, which also demonstrates the feasibility of the method of nanofocus high-resolution x-ray diffraction.

This thesis is composed in a cumulative manner, connecting four published (two of them as first author, the others as second author) and one submitted manuscript (first author). All publications are written in English and have been inserted into this work. However, further explanations, a general introduction, the description of the experimental set-up and numerical methods including a derivation of the developed spot simulation equations is given in German.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Experimentelle Grundlagen	3
2.1. Hochauflösende Röntgenbeugung (HRXRD)	3
2.2. Beugung und Streuung bei streifendem Einfall (GID, GISAXS)	9
2.3. Refraktive nanofokussierende Linsen	11
2.4. Verwendete Strahlrohre und Messeinrichtungen am Synchrotron	14
3. Numerische Berechnungsverfahren	21
3.1. Anwendung der Finite-Elemente-Methode (FEM)	21
3.2. Berechnung reziproker Gitterkarten (RSM)	27
3.3. Streurechnungen für Nanofokus-HRXRD	30
4. Veröffentlichungen und Zusammenfassung der Ergebnisse	35
4.1. Individuell angeregte Seitenfacetten von SiGe/Si(001)-Inseln	35
4.2. Positionskorrelation und Zusammensetzung von SiGe-Inselensembles	41
4.3. Laterale Spannungsrelaxation von InGaAs/GaAs(001)-QDM	48
4.4. Positionskorrelation und Zusammensetzung von InGaAs/GaAs(001)-QDM	54
4.5. Streusimulationen für Nanofokus-HRXRD (akzeptiert bei Nanoscale Res. Lett.)	59
Literaturverzeichnis	77
A. Anhang	83
A.1. Modelltransformationen	83
A.2. Programmtechnische Umsetzung der Streurechnungen	86
A.2.1. Berechnung der Streuintensität	86
A.2.2. Beugungsvektorberechnungen	88
A.2.3. Verwendung eines Strahlprofils	90
A.3. Ergänzende Abbildungen	92
B. Danksagungen	95
C. Angaben zum Bildungsweg	97
D. Eidesstattliche Erklärung	99

1. Einleitung

Seit einigen Jahren wird an Synchrotron-Röntgenquellen stark fokussierte und hochbrillante Röntgenstrahlung angeboten. Mittlerweile sind Foki im Submikrometer-Bereich von bis zu 80 nm Strahldurchmesser möglich. Da Röntgenstrahlung nur schwach gebrochen wird und zudem im Material einen Brechungsindex von kleiner als eins aufweist, sind für die Bündelung der Röntgenstrahlen spezielle Techniken nötig. Erreicht wird sie beispielsweise durch elliptisch gekrümmte Kristallspiegel (so genannte Kirkpatrick-Baez-Spiegel), Fresnel-Zonenplatten (FZP) oder durch Stapel aus refraktiven Linsen (Näheres siehe auch Kapitel 2.3). Als Anwendungen der μm - und sub- μm -Röntgenstrahlen sind bisher vor allem Röntgen-Transmissions-Mikroskopie sowie Röntgen-Mikrotomographie zu nennen, welche in den vergangenen Jahren unter Verwendung der so genannten Ptychographie bei kohärenter Strahlung beeindruckende Ergebnisse erzielten [TDM⁺08, DMT⁺10, SBG⁺11]. Ein wesentliches Ziel der vorliegenden Arbeit ist hingegen die methodische Erprobung und Anwendung der nanofokussierten Röntgenstrahlen für Experimente der hochauflösenden Röntgenbeugung (engl. *high resolution x-ray diffraction*, HRXRD).

Die Vorteile von konventioneller HRXRD, als einer seit langem etablierten Methode zur Analyse von Halbleiterstrukturen, liegen auf der Hand: Das Untersuchungsverfahren ist für das Probenmaterial weitgehend zerstörungsfrei, hat verglichen mit Elektronenbeugungsmethoden eine relativ hohe Eindringtiefe von einigen Mikrometern und erzeugt keine Aufladung der Probe. Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung liegt im Bereich der atomaren Abstände. Damit ist die Methode sensitiv auf Gitterparameteränderungen z.B. durch Dehnung aufgrund von Verspannungen der Einheitszellen oder chemische Zusammensetzung. Des Weiteren können mittels Interpretation der diffusen Streuintensitäten Form und Positionskorrelation zwischen einzelnen Substrukturen untersucht werden.

Üblicherweise kommen in der Röntgendiffraktometrie dabei Strahlgrößen im Bereich mehrerer hundert Mikrometer oder einiger Millimeter zum Einsatz. Untersucht man auf diese Weise Halbleiterstrukturen wie Quantenpunkte, Nanodrähte oder komplexere Strukturen wie Quantenpunktmoleküle (siehe unten), erreicht man somit eine Mittelung über hunderttausende bis Millionen dieser Nanostrukturen. Diese integrale Messmethode kann von Vorteil sein, um beispielsweise auf relativ einfache Weise die Strukturen auf mittlere Gitterparameteränderungen, Form, Homogenität oder Fernordnungen zu untersuchen. Sind die Strukturen dabei jedoch z.B. bezüglich ihrer chemischen Zusammensetzung, Größe, Form, oder Orientierung inhomogen, sind quantitative Rückschlüsse nur begrenzt oder überhaupt nicht mehr möglich.

HRXRD unter Verwendung nanofokussierter Röntgenstrahlen, im Folgenden auch „Nano-

fokus-HRHRD“, eröffnet neue Möglichkeiten: Individuelle Nanostrukturen, z.B. einzelne Quantenpunkte, oder einzelne Teile von Mikrostrukturen können getrennt voneinander beleuchtet werden. Die Fokussierung bringt zudem hohe Photonendichten des Röntgenstrahls mit sich und demzufolge auch brauchbare Signal-Rausch-Verhältnisse trotz der extrem kleinen Streuvolumina.

Zunächst wandten wir die Methode an selbstorganisiert gewachsenen Silizium-Germanium-Inseln an (Kapitel 4.1 und 4.2). Diese sind in der Vergangenheit bereits ausgiebig mittels herkömmlicher, integral mittelnder Röntgendiffraktometrie untersucht worden und sie stellen hinsichtlich ihrer nahezu perfekten Form und im Wachstum gut einstellbaren Größe hervorragende Testobjekte für die neue Methode dar [HSK⁺04, HSG⁺04]. Anschließend wurden so genannte Quantenpunktmoleküle (engl. *quantum dot molecules*, QDM) untersucht. Bei den Ladungsträgern in Quantenpunkten kommt es aufgrund der in allen drei Raumrichtungen begrenzten Ausdehnung zur Quantisierung ihrer Energiezustände. Geringe Abstände wiederum zwischen zwei oder mehr Quantenpunkten können durch Tunneln der Ladungsträger zu Quantenkopplungsphänomenen führen. In Analogie zu chemischen Molekülen, die aus Atomen zusammengesetzt sind und deren Ladungsträger-Wellenfunktionen sich überlappen, nennt man Anordnungen von hinreichend nah beieinander liegenden Quantenpunkten „Quantenpunktmoleküle“. Für Quantenpunktmoleküle werden Anwendungen vor allem im Bereich optischer Bauelemente oder auch der Einsatz in Quantencomputern diskutiert.

Kapitel 4.2 zeigt dementsprechend ein Nanofokus-Beugungsexperiment an SiGe¹-Inselsensibles, welche aus einzelnen, lateral um Substratvertiefungen angeordneten SiGe-Inseln zusammengesetzt sind. Danach wurden InGaAs²-Quantenpunktmoleküle mittels Beugung unter streifendem Einfall (engl. *grazing incidence diffraction*, GID) sowie ebenfalls mit Nanofokus-HRHRD untersucht, siehe Kapitel 4.3 und 4.4. Kinematische Streurechnungen für die beschriebenen Experimente unter Einbeziehung des Spotprofils nanofokussierter Röntgenstrahlen werden anschließend in 4.5 vorgestellt.

Dem Kapitel 4 mit Veröffentlichungen inklusive Zusammenfassung der Ergebnisse sind ein experimenteller Grundlagenteil und ein Kapitel über verwendete numerische Methoden vorangestellt. Darin werden das nötige Basiswissen, die Messeinrichtungen und der methodische Fortschritt der Simulationen erläutert. Den Abschluss der Arbeit bildet ein Anhang mit Erläuterung der programmtechnischen Umsetzung der Streurechnungen und ergänzenden Abbildungen.

¹SiGe: Silizium-Germanium

²InGaAs: Indium-Gallium-Arsenid

2. Experimentelle Grundlagen

In den ersten Teilen dieses Kapitels, 2.1 (HRXRD) und 2.2 (GID, GISAXS), werden die verwendeten röntgendiffraktometrischen Messmethoden beschrieben. Der Schwerpunkt liegt dabei auf HRXRD zur Untersuchung kristalliner, niedrigdimensionaler Halbleiterstrukturen, die selbstorganisiert auf Waferoberflächen gewachsen wurden.

Im Anschluss daran werden in den Unterkapiteln 2.3 und 2.4 die zur Nanofokussierung verwendeten Röntgenoptiken sowie die experimentellen Aufbauten an der Synchrotron-Strahlungsquelle beschrieben.

2.1. Hochauflösende Röntgenbeugung (HRXRD)

Unter „hochauflösend“ wird bei HRXRD im Allgemeinen eine hohe Auflösung im reziproken Raum (siehe weiter unten) und somit auch der Beugungsbilder verstanden. Offensichtliche Voraussetzung für Messungen mit in diesem Sinne hoher Auflösung sind zunächst geeignete Apparaturen zur Detektion, die über eine geringe Winkelakzeptanz verfügen. Dies kann mittels Analysatoren und/oder Blenden bzw. im Falle von Flächen- und Liniendetektoren auch durch die geringen Pixelabstände erreicht werden. Bei Punkt- und Liniendetektoren sind reproduzierbar kleine Winkelschrittweiten der Detektorarm-Motoren nötig. Weitere Voraussetzung und wesentliches Charakteristikum einer HRXRD-Messeinrichtung ist auch die Strahlqualität. Wichtig sind insbesondere die Divergenz und Energiebandbreite der Primärstrahlung, um apparative Beugungsreflexverbreiterungen zu minimieren und scharf abgegrenzte Interferenzmaxima zu erhalten.

In dieser Arbeit wird es neben der hohen Auflösung im reziproken Raum aber zudem um eine hohe Ortsauflösung im Realraum gehen, da die zu untersuchenden Strukturen mit stark fokussierten Strahlen abgerastert werden. Die gemessenen Beugungsbilder können dadurch sehr kleinen Bereichen auf der Probenoberfläche zugeordnet werden. Der Strahl trifft unter dem Einfallswinkel α_1 auf die Probenoberfläche, wobei die Beugungsreflexe des Kristallgitters gemäß der Bragg-Gleichung in Abhängigkeit vom Netzebenenabstand d und der Wellenlänge des Röntgenstrahls λ nur bei $\alpha_1 = \Theta_B - \eta$ auftreten können (Θ_B : Bragg-Winkel, η : Neigungswinkel der Netzebenen zur Probenoberfläche):

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin(\Theta_B) \quad , n \in \mathbb{N}: \text{Beugungsordnung} \quad (2.1)$$

Die Projektion des Primärstrahlquerschnittes auf die Probenoberfläche wird als *Spot* bezeichnet, welcher bei Einfallswinkeln $\alpha_1 \neq 90^\circ$ in Strahlrichtung vergrößert ist. Mit einem Pri-

märstrahldurchmesser A beträgt die Spotgröße parallel zur Strahlrichtung A_{\parallel} :

$$A_{\parallel} = \frac{A}{\sin(\alpha_1)} \quad (2.2)$$

Dieser so genannte *footprint*-Effekt ist wegen der in einer Richtung verringerten Ortsauflösung insbesondere bei Nanofokus-Experimenten zu beachten, vgl. Abb. 2.1 am Beispiel eines runden Strahlquerschnittes. Auch bei der Auswahl der im Experiment verwendeten Wellenlänge der Röntgenstrahlung und der Reflexe muss bedacht werden, dass A_{\parallel} dabei mit festgelegt wird. Laut Gl. (2.1) und (2.2) hängen beispielsweise für symmetrische Reflexe in Bragg-Einstellung ($\alpha_1 = \Theta_B$) die Spotvergrößerung und die Wellenlänge indirekt proportional zusammen:

$$A_{\parallel} = \frac{A \cdot 2 \cdot d}{n \cdot \lambda} \quad (2.3)$$

Bei Verdopplung der Photonenenergie ($E \approx \frac{12.4 \text{ \AA}}{\lambda} \text{ keV}$) verdoppelt sich in dem Fall also die Spotgröße in Strahlrichtung. Orthogonal zur Strahlrichtung hingegen bleibt der Spotdurchmesser A_{\perp} und damit die hohe laterale Ortsauflösung vollständig erhalten.

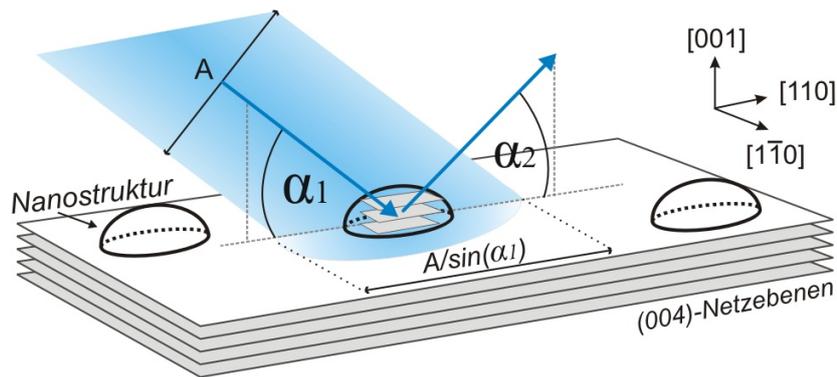


Abbildung 2.1.: Realraumskizze zu HRXRD an einem Quantenpunkt auf einer (001)-Oberfläche in Umgebung des symmetrischen (004)-Reflexes und Veranschaulichung des resultierenden *footprint*-Effektes. Die zugehörige Situation im reziproken Raum ist in Abb. 2.2 dargestellt.

Zur Interpretation der entstehenden Beugungsbilder ist der Übergang in den reziproken Raum hilfreich. Ortsvektoren des reziproken Raumes können dabei mit dem Beugungsvektor \mathbf{q} identifiziert werden. Wichtige Eigenschaft des reziproken Raumes ist, dass jegliche Längen im reziproken Raum indirekt proportional zu den Längen im Realraum sind, während Winkel beim Übergang von einem in den anderen Raum erhalten bleiben. Zur Definition der Millerschen Indizes und des reziproken Raumes inkl. der Ewald-Konstruktion möchte ich auf [Kit06] und [ANM11] verweisen, wo auch nähere Betrachtungen zur Bragg-Bedingung und ihrer vektoriellen Entsprechung zu finden sind. Eine so genannte erweiterte Ewald-Konstruktion ist in Abb. 2.2 dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist hier nur ein zweidimensionaler Schnitt abgebildet. Zu sehen ist die schematische Darstellung des reziproken Raumes in Umgebung des symmetrischen (004)-Reflexes unter Verwendung eines

Flächendetektors (2D-Detektor).

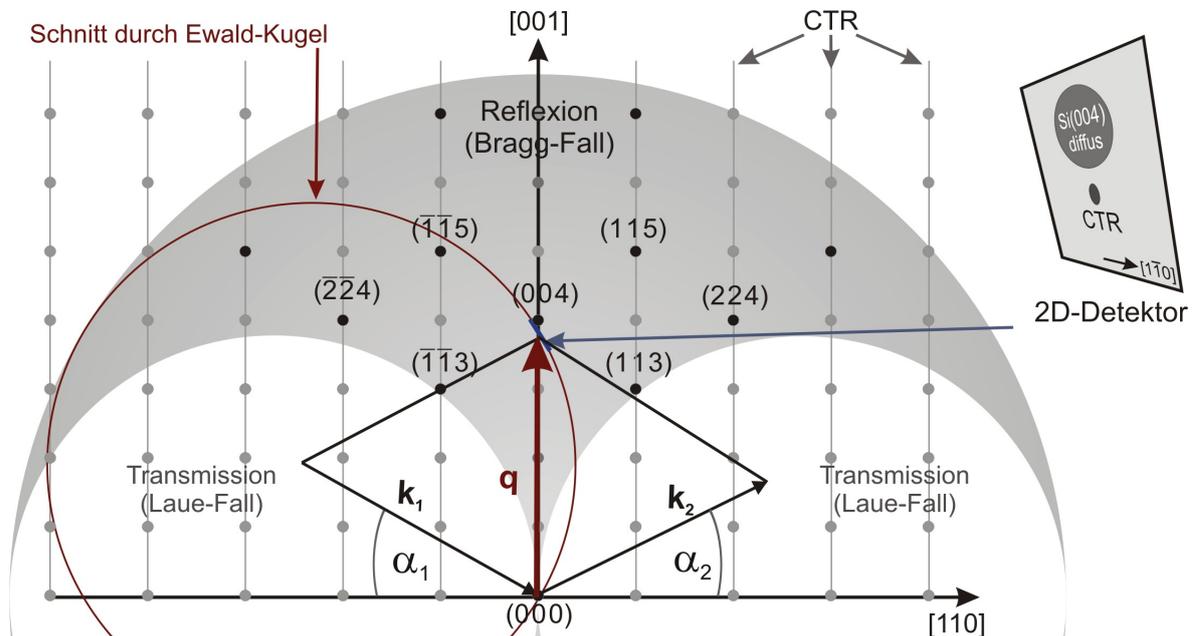


Abbildung 2.2.: Schnitt durch die erweiterte Ewald-Konstruktion bei koplanarer Beugungsgeometrie am Beispiel einer Silizium-(001)-Oberfläche und einer Photonenenergie von 8 keV . In Reflexion bei dieser Energie messbare Bragg-Reflexe der $[110]$ - $[001]$ -Beugungsebene wurden schwarz dargestellt. Eine Skizze (rechts im Bild) illustriert zudem den bei dieser Einstellung zu erwartenden schematischen Aufbau des Beugungsbildes bei Verwendung eines 2D-Detektors, welcher links im Bild senkrecht auf der Papierebene steht.

Bei symmetrischen Reflexen liegen die Netzebenen parallel zur Probenoberfläche, sodass $\alpha_1 = \Theta_B = \alpha_2$ gilt. Dagegen liegen bei asymmetrischen Reflexen die Netzebenen schräg zur Kristalloberfläche und eine entsprechende Messung kann unter steilem Strahleinfall $\alpha_1 > \alpha_2$ oder alternativ flachem Strahleinfall $\alpha_1 < \alpha_2$ erfolgen. Der Beugungsvektor weist demnach bei Messung asymmetrischer Reflexe eine laterale Komponente auf, sodass auch Aussagen über Gitterparameter entlang der jeweiligen lateralen kristallographischen Richtungen gemacht werden können.

Messungen mit HRXRD erfolgten in dieser Arbeit stets in Reflexion bei koplanarer Beugungsgeometrie. Letztere besagt, dass die Beugungsebene, aufgespannt durch die Wellenvektoren \mathbf{k}_1 (einfallende Welle) und \mathbf{k}_2 (austretende Welle), den Normalenvektor der Probenoberfläche enthält. Aus der Vektorsubtraktion der Wellenvektoren \mathbf{k}_2 und \mathbf{k}_1 ergibt sich der Beugungsvektor \mathbf{q} , wobei im Falle elastischer Streuung gilt: $|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_2| = \frac{2\pi}{\lambda}$. Auch kann der Beugungsvektor aufgrund trigonometrischer Überlegungen aus Einfallswinkel α_1 und dessen Azimut β sowie Austrittswinkel α_2 mit Azimut γ des gebeugten Strahls darge-

stellt werden:

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \begin{pmatrix} \cos(\alpha_2) \cos(\gamma) - \cos(\alpha_1) \cos(\beta) \\ \cos(\alpha_2) \sin(\gamma) - \cos(\alpha_1) \sin(\beta) \\ \sin(\alpha_2) + \sin(\alpha_1) \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Durch Variation dieser Winkel ist es demnach möglich, den Endpunkt des Beugungsvektors auf Punkte im reziproken Raum einzustellen und die zugehörige Intensität zu detektieren. Werden die Intensitäten einer Fläche im reziproken Raum aufgenommen, bezeichnet man die dabei entstehende Intensitätsverteilung $I(\mathbf{q})$ als reziproke Gitterkarte (RSM, engl. *reciprocal space map*).

Variiert man den Einfallswinkel α_1 und rotiert die Probe um die Oberflächennormale, überstreicht die Ewald-Kugel Bereiche, welche in Abb. 2.2 grau dargestellt wurden. Dieser eingegraute Bereich ist, dreidimensional betrachtet, eine Halbkugel. Von dieser Halbkugel wurden die so genannten Laue-Kugeln abgezogen (weiß in Abb. 2.2), welche für die untersuchte kristallographische Zonenachse, hier $[110]$, nur in Transmission zugänglich sind³. In diesen Bereich dringt der Endpunkt des Beugungsvektors ausschließlich dann vor, wenn nur α_1 oder nur α_2 negativ wird (dabei seien die Beträge der Winkel je kleiner 180°). Der verbleibende eingegraute Bereich kennzeichnet demnach die bei der verwendeten Wellenlänge in Bragg-Geometrie zugänglichen Orte im reziproken Raum. Eine dreidimensionale Skizze der in Reflexion und Transmission zugänglichen Bereiche ist im folgenden Unterkapitel 2.2, Abb. 2.4, für eine nichtkoplanare Beugungsgeometrie zu sehen. In dieser Arbeit wurden die Messungen ausschließlich in Reflexion durchgeführt.

Trotz Erfüllung der Bragg-Bedingung kann es zu destruktiver Interferenz und somit zur Reflexauslöschung kommen. Dies liegt in der Anordnung der Atome innerhalb der Einheitszelle begründet, wie durch Einsetzen der Atom-Ortsvektoren $\mathbf{r}_i = (r_{1,i}, r_{2,i}, r_{3,i})$ in die Strukturamplitude

$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^N f_i \cdot e^{i \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} = \sum_{i=1}^N f_i \cdot e^{2 \cdot \pi \cdot i \cdot (h \cdot r_{1,i} + k \cdot r_{2,i} + l \cdot r_{3,i})} \quad (2.5)$$

nachvollzogen werden kann (N Anzahl der Streuer, f_i : Atomformfaktor). Die Intensität eines Ortes im reziproken Raum ist in kinematischer Näherung⁴ wiederum proportional zum Betragsquadrat der Strukturamplitude:

$$I(\mathbf{q}) \propto |F_{hkl}(\mathbf{q})|^2. \quad (2.6)$$

Beobachtbar sind demzufolge jeweils nur Reflexe mit $F_{hkl} \neq 0$, welches im Falle einer

³Probenrotation um die Oberflächennormale wird bei der Darstellung der Laue-Kugeln ausgeschlossen.

⁴ Bei hinreichend flachen oder imperfekten zu untersuchenden Kristallstrukturen kann für die Berechnung der Strukturamplitude die erste Bornsche Näherung angenommen werden. Hier werden Mehrfachstreuung, unterschiedliche Wellenausbreitungsgeschwindigkeiten (Brechung) sowie die Absorption und Extinktion (Streuverluste) vernachlässigt.

(idealen) fcc-Einheitszelle mit

$$\mathbf{r}_i = \left\{ (0, 0, 0), \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right), \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right), \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right) \right\}$$

für jene h, k, l gilt, welche sämtlich gerade oder sämtlich ungerade sind. Handelt es sich wie bei Silizium oder Germanium um eine Diamantstruktur, kommen innerhalb der Einheitszelle zusätzlich noch gleichartige Atome an Positionen eines um den Vektor $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ verschobenen fcc-Gitters vor. Dadurch ergibt sich noch häufiger eine destruktive Interferenz, sodass gilt:

$$F_{hkl} \neq 0 \quad \text{für} \quad \begin{cases} h, k, l \text{ geradzahlig und } h + k + l = 4 \cdot n & , n \in \mathbb{N} \\ h, k, l \text{ ungeradzahlig} \end{cases} \quad (2.7)$$

Die durch Auslöschungsregeln verbotenen oder in Reflexion bei der entsprechenden Photonenenergie nicht erreichbaren Reflexe wurden als Beispiel in Abb. 2.2 ausgegraut. Für nähere Betrachtungen zum Strukturfaktor und der Reflexintensität seien einschlägige Literatur wie [Mas11, ANM11, War90] und ausführliche Berechnungsbeispiele für Auslöschungsregeln in [STS⁺09] empfohlen.

Das RSM ermöglicht u.a. Aussagen über die Gitterparameter und damit die Verspannung oder Relaxation der Einheitszellen. So kann aus den Koordinaten eines Reflexes der Gitterparameter direkt berechnet werden, wenn die Struktur der Einheitszelle bekannt ist. Gemäß Definition von \mathbf{q} in Gl. (2.4) und der Bragg-Gleichung (2.1) ergibt sich z.B. für kubische Kristalle bei einer (001)-Oberfläche aus der Vertikalkomponente q_z des Beugungsvektors eines symmetrischen (00 n)-Reflexes der vertikale Gitterparameter a_z zu:

$$a_z = \frac{\lambda \cdot n}{2 \cdot \sin(\Theta_B)} = \frac{2 \cdot \pi \cdot n}{q_z}. \quad (2.8)$$

Je größer der Gitterparameter eines Materials ist, desto kleiner ist demnach die Länge des Beugungsvektors im reziproken Raum bei Erfüllung der Bragg-Bedingung einer Netzebenenschar. Im Falle relaxierter Einheitszellen sind auch Reflexe von Mischkristallen wie $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ stets zwischen den Reflexen ihrer Einzelkomponenten zu finden. Dabei liegt nach der Vegard'schen Regel in erster Näherung bei Kristallen gleichen Strukturtyps ein linearer Zusammenhang vor. Aus einem ermittelten Gitterparameter $a_{1,2}$ eines zweikomponentigen Mischkristalls, dessen Einzelkomponenten die Gitterparameter a_1 und a_2 haben, kann der Gehalt x_2 der Komponente des Materials 2 wie folgt errechnet werden:

$$x_2 = \frac{a_{1,2} - a_1}{a_2 - a_1}. \quad (2.9)$$

Allgemein weisen Bragg-Reflexe in der Praxis stets eine Halbwertsbreite auf, die sowohl apparativen als auch probenseitigen Einflüssen unterliegt. Selbst bei Betrachtung ausschließlich der durch die Probe hervorgerufenen Effekte, sind scharfe Reflexe in Form von Deltafunktionen nur für unendlich ausgedehnte Idealkristalle möglich. Während jedoch lateral das Substratmaterial eine (relativ zum Gitterparameter) große Ausdehnung aufweist, ist an

der Oberfläche die Translationssymmetrie des Kristalls in einer Raumrichtung abrupt unterbrochen. Eine besondere Bedeutung kommt deshalb dem Grenzfall des halbunendlichen Kristalls⁵ zu, welcher im reziproken Raum linienförmige Intensitätsverteilungen parallel zur Oberflächennormalen liefert, siehe auch [Rob86, FM10]. Solche Verbreitungen der Bragg-Reflexe werden Gitterabbruchstäbe (CTR, engl. *crystal truncation rods*) genannt. Da sich das Auftreten des CTR direkt auf die Existenz einer Kristalloberfläche zurückzuführen ist, ist der CTR sehr empfindlich auf die Beschaffenheit der obersten Probenschichten wie Oberflächenrauigkeiten oder Materialinhomogenitäten. Nicht nur die Substratoberfläche sondern auch Oberflächen der Nanostrukturen können CTR im Beugungsbild hervorrufen, wie auch in dieser Arbeit am Beispiel von SiGe-Inselfacetten in Kapitel 4.1 zu sehen ist. Dadurch, dass ein CTR stets parallel zur Normalen der ihn hervorrufenden Fläche verläuft, lässt sich aus dem Neigungswinkel zwischen einem CTR der Substratoberfläche und einem CTR einer Seitenfacette die kristallographische Ebene der Facette ermitteln.

Die Messung der Intensitäten erfolgte in dieser Arbeit vorwiegend mit Flächendetektoren, auf welche auch in Kapitel 2.4 eingegangen wird. Dabei werden nicht wie bei einem Punktdetektor der Einfallswinkel α_1 und der Detektionswinkel α_2 variiert, sondern mit (innerhalb einer Messung) festem Einfallswinkel die Intensitätsverteilung einer Fläche aufgenommen. Dadurch ergibt sich als Beugungsbild ein im Allgemeinen schräger Schnitt im reziproken Raum, der vom CTR der Substratoberfläche in einem Punkt durchstoßen wird, vgl. Abb. 2.2.

Weitere Reflex-Verbreiterungen können auf Abweichungen vom idealen Kristallgitter zurückzuführen sein. Zu nennen wären dabei u.a. Mosaizität, Gradienten in Dehnungsfeldern innerhalb eines Kristalls oder Ausmaße der untersuchten Nanostrukturen. Zudem können Überstrukturen oder Positionskorrelationen geordneter Strukturen Intensitätsoszillationen im RSM bewirken. Als anschauliches Beispiel zu derartigen Streu- und Beugungseffekte befinden sich im Anhang A.3, Abb. A.7, ein RSM eines Beugungsexperimentes an SiGe-Nanodrähten, welche in ihrem Inneren periodische SiGe/Si-Schichtabfolgen aufwiesen.

⁵Die Substratdicke und Strahleindringtiefe seien dabei ebenfalls groß gegenüber den interatomaren Abständen.

2.2. Beugung und Streuung bei streifendem Einfall (GID, GISAXS)

Bei Beugung unter streifendem Einfall (GID) handelt es sich um eine Messmethode in nicht-koplanarer Beugungsgeometrie. Untersucht werden hierbei die Netzebenen senkrecht zur Oberfläche, wie in Abb. 2.3 skizziert ist.

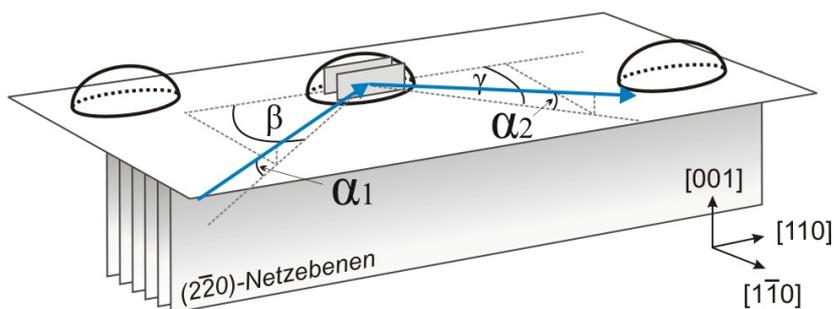


Abbildung 2.3.: Situation im Realraum am Beispiel eines symmetrischen $(2\bar{2}0)$ -Reflexes bei Beugung unter streifendem Einfall an Nanostrukturen auf einer (001) -Oberfläche. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde nur die Beugung an einem Quantenpunkt skizziert, beleuchtet werden jedoch im Allgemeinen aufgrund des extrem großen Spots ($A_{||}$) weite Bereiche der Probe, siehe Gl. (2.2).

Einfalls- und Austrittswinkel werden auf einen Wert nahe dem kritischen Winkel α_c der Totalreflexion eingestellt: $\alpha_1 = \alpha_2 \approx \alpha_c$. Dadurch wird eine hohe Oberflächensensitivität erreicht, da die evaneszente Welle im Material exponentiell abklingt und die Eindringtiefe um ein bis zwei Größenordnungen abnimmt. Erreicht werden bei GID an Halbleitermaterialien, je nach Einfallswinkel, Eindringtiefen im Bereich von ca. 3 nm bis 100 nm .

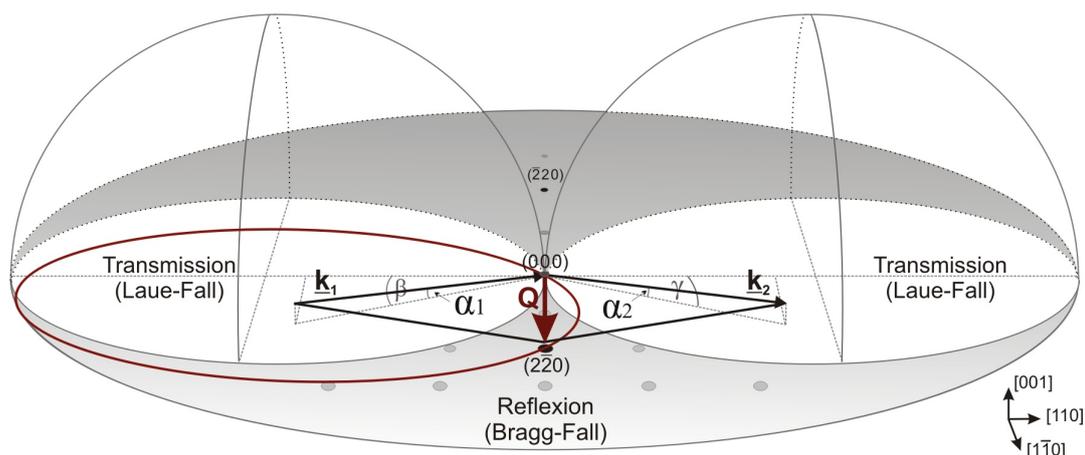


Abbildung 2.4.: Erweiterte Ewald-Konstruktion bei nichtkoplanarer Beugungsgeometrie unter streifendem Einfall. Es ist die Beugungsbedingung für den (220) -Reflex gezeigt. Im Vergleich zu Abb. 2.2 ist die Probe hier also um nahezu 90° um die Zonenachse $[110]$ gekippt.

In GID-Geometrie wird die Messung eines RSM durch Variation der in Gl. (2.4) eingehenden azimutalen Winkel β und γ durchgeführt. Abb. 2.4 zeigt die Situation im reziproken Raum bei Einstellung des $(2\bar{2}0)$ -Bragg-Reflexes. Der (220) -Reflex hingegen ist durch eine 90° -Probendrehung um die Oberflächennormale zugänglich, da die Laue-Kugeln an die Einstrahlrichtung gekoppelt sind und sich somit bei einer Probendrehung mitdrehen (Strahl ortsfest).

Analog zu HRXRD können RSM von GID hinsichtlich der Gitterparameter, Verspannung der Einheitszellen sowie Positionskorrelationen ausgewertet werden, liefern allerdings entsprechende Informationen über die *In-plane*-Richtungen. Zusätzlich spielt bei GID-Messungen der Formfaktor der Nanostrukturen eine starke Rolle, sodass meist bei der Interpretation von Reflexverbreiterungen die Einflüsse dieser Effekte voneinander separiert werden müssen.

Dazu kann eine Untersuchung mittels Kleinwinkelstreuung unter streifendem Einfall (GISAXS, engl. *grazing incidence small angle x-ray scattering*) herangezogen werden. Eine solche Messung ist, wie auch beispielsweise Röntgenreflektometrie, nicht sensitiv auf Gitterparameter oder deren Änderungen, sondern enthält lediglich den Beitrag der Objektform und der Positionskorrelationen. Gemessen wird dabei am Ursprung des reziproken Raumes (000) , vgl. Abb. 2.2 und 2.4.

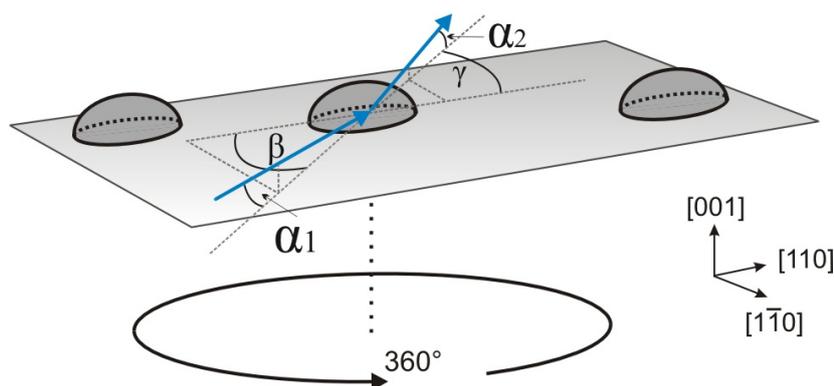


Abbildung 2.5.: Situation im Realraum bei Kleinwinkelstreuung unter streifendem Einfall an Nanostrukturen auf einer (001) -Oberfläche.

Die GISAXS-Messung wird durch Variation des Azimuts γ und sukzessiver Drehung der Probe um 360° durchgeführt⁶.

⁶Aus Symmetriegründen beschränkt man sich in der Praxis oft auf eine Drehung um 180° , um Messzeit zu sparen.

2.3. Refraktive nanofokussierende Linsen

Um Strahlgrößen bis in den Sub- μm -Bereich hinab zu erhalten, gibt es zahlreiche Möglichkeiten. Prinzipiell wäre selbst die Verwendung von Loch- oder Schlitzblenden denkbar, womit sogar die transversale Kohärenz zunehmen würde - nachteilig ist dann jedoch der drastische Intensitätsverlust bei Verringern der Spaltbreite.

Aus diesem Grunde setzt man üblicherweise auf Röntgenoptiken, die den Primärstrahl bündeln und so die hohe Photonenflussdichte erhalten können. Eine grundsätzlich schon seit vielen Jahren bekannte, aber stets weiterentwickelte Methode ist die Verwendung von gekrümmten Mehrschicht-Spiegeln zur Fokussierung, den so genannten Kirkpatrick-Baez-Spiegeln⁷ [KB48, YYM⁺03]. Damit sind derzeit Strahlfoki von 250 nm erreichbar [DHS⁺10]. In den letzten Jahren sind zudem für Nanofokus-Anwendungen im Bereich harter Röntgenstrahlung verstärkt Fresnel-Linsen [DNZ02] und refraktive Linsen [SKP⁺05, SBF⁺08], so genannte *nano-focusing lenses* (NFL), entwickelt worden. Letztere kamen in dieser Arbeit vorwiegend zum Einsatz. Mit NFL können bereits Strahldurchmesser von 50 nm erreicht werden. Vorläufer der NFL, die so genannten *compound refractive lenses* (CRL) wurden in den 90er Jahren von Lengeler et al. in Aachen entwickelt [SKSL96, LST⁺99]. Diese CRL werden aus Aluminium oder Beryllium in einem Press-Verfahren gefertigt und kommen in der Praxis noch bei der Strahl-Vorfokussierung und an Mikrofokus-Strahlrohren zum Einsatz.

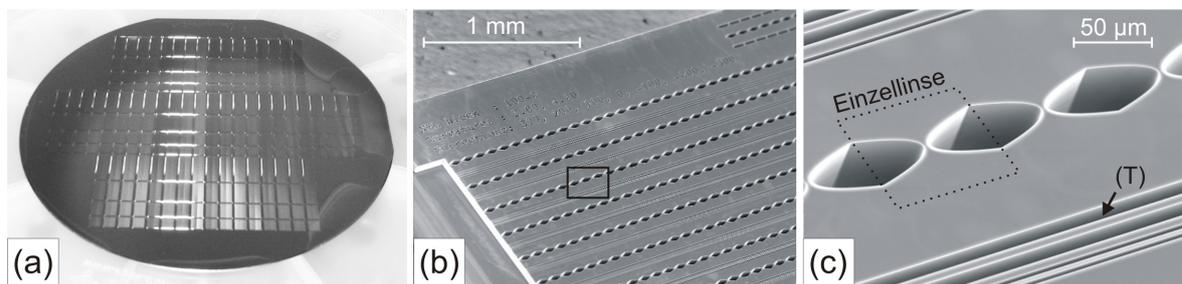


Abbildung 2.6.: Refraktive nanofokussierende Linsen (NFL) zur Fokussierung harter Röntgenstrahlung von Schroer et al. (TU Dresden). (a) zeigt einen Silizium-Wafer mit mehreren hineingeätzten Linsenblöcken, (b) ein rasterelektronenmikroskopisches Bild einiger NFL-Stapel innerhalb eines Blockes und (c) einen hochauflösenden Ausschnitt des in (b) eingezeichneten Rechteckes. Die ebenfalls geätzten Linien (T) ober- und unterhalb der Linsenstapel stellen trinärcodierte Zahlen dar, welche dem Alignment der Linsen dienen. Die Einstrahlrichtung des vorfokussierten Röntgenstrahls ist parallel zu diesen Linien.

Die NFL wurden in Silizium geätzt. Vorteil dieses Materials ist, dass im Bereich harter Röntgenstrahlung die Absorption relativ gering und andererseits der Brechungsindex relativ groß ist. Zudem ist Silizium preiswert und aufgrund des weit verbreiteten Einsatzes dieses Ma-

⁷Im Folgenden auch „KB-Spiegel“.

terials stehen gut bekannte Bearbeitungsmethoden zur Verfügung. Noch besser als Silizium wären hinsichtlich Brechungsindex und Absorption allerdings Bor oder Diamant geeignet. Dabei gestaltet sich jedoch der Ätzprozess schwieriger und die gewünschte Formgenauigkeit, Oberflächenrauigkeit und Äztiefe konnten noch nicht erreicht werden. Da der Realteil des Brechungsindex in jedem dieser Materialien für Röntgenstrahlung nahezu Eins beträgt ($n \approx 0.99995$), reicht zur Fokussierung eine einzelne parabolische Linse nicht aus. Darum werden Stapel mit meist über hundert Einzellinsen verwendet. In Abb. 2.6(b,c) sind elektronenmikroskopische Aufnahmen mit derartigen Linsenstapeln zu sehen. Im Gegensatz zu optischen Linsen des sichtbaren Lichtes müssen zur Fokussierung von Röntgenstrahlung die Einzellinsen konkav sein, siehe (c). Dem liegt zu Grunde, dass der Realteil des Brechungsindex für Röntgenstrahlung kleiner als Eins ist und dadurch Luft oder Vakuum das optisch dichtere Medium darstellt. Während CRL rotationssymmetrisch um die optische Achse sind, kann im Ätzverfahren der NFL jedoch eine parabolische Krümmung nur in einer Ebene erreicht werden. Daher werden zur vertikalen und horizontalen Fokussierung zwei NFL-Reihen in gekreuzter Anordnung benötigt. Die Brennweite dieser NFL beträgt, abhängig von der Anzahl der Einzellinsen, in etwa 13 mm .

Zur Charakterisierung des Strahlfokus der NFL wird von Schroer et al. auf Röntgen-Ptychographie zurückgegriffen [SBF⁺10]. Diese Methode ist seit Ende der 60er Jahre im Bereich der Elektronenbeugung bekannt [Hop69] und wurde für hochaufgelöste Elektronenmikroskopie angewendet [NR98]. Beeindruckende Ergebnisse wurden in den letzten fünf Jahren jedoch auch bei der Anwendung von Ptychographie für röntgenmikroskopische Aufnahmen erzielt [RHC⁺07, TDM⁺08, SBG⁺11]. Hierbei werden räumliche Auflösungen der Probenabbilder erreicht, die höher sind als die Strahlgröße selbst. Die Probe wird dafür mit sehr feiner Schrittweite abgerastert, sodass es zur Überlappung der nacheinander bestrahlten Bereiche auf der Probe kommt. Es wird jeweils die Streuintensität mit Hilfe eines Flächendetektors aufgenommen. Aufgrund der durch die Überlappungen im Datensatz enthaltenen Redundanz, kann in einem Algorithmus anschließend die Transmissionsfunktion der Probe rekonstruiert werden. Es sind dazu mehrere tausend Streubilder für die Rekonstruktion nötig. Diese Vorgehensweise wird z.B. in [RHC⁺07] anschaulich beschrieben. Ist der Strahl allerdings nicht hinreichend kohärent, werden weniger kontrastreiche Interferenzbilder gewonnen und der Berechnungsalgorithmus versagt.

Neben einem mikroskopischen Abbild der Probe ist es gleichzeitig möglich, die Beleuchtungsfunktion des fokussierten Strahls in der Fokalebene und davon ausgehend das gesamte Wellenfeld des Strahls (die so genannte „Kaustik“) zu berechnen. Dies wurde beispielsweise an einem Siemensstern aus Wolfram in [SBF⁺10] und ebenso im Vorfeld eines unserer Experimente mit NFL durchgeführt, siehe Abb. 2.7.

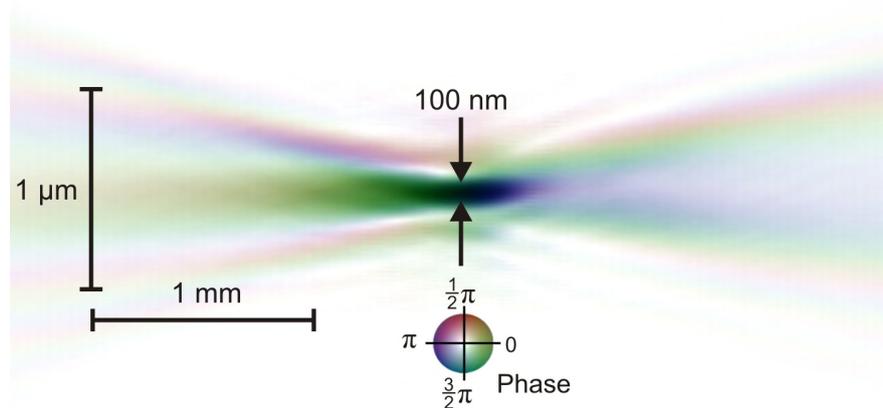


Abbildung 2.7.: Ptychographisch gewonnener Schnitt durch die Strahlkaustik parallel zur Strahlrichtung. Die Farbwerte charakterisieren hierbei die Phase am jeweiligen Ort, während die Helligkeitswerte die Amplitude wiedergeben. Der zugehörige Schnitt in der Fokalebene orthogonal zur Strahlrichtung ist in [DHP⁺12], Kapitel 4.4, dargestellt. Dort sind auch Seitenmaxima erkennbar, welche auf die Aperturen der vertikalen und der horizontalen NFL-Stapel zurückzuführen sind.

Für unsere Nanofokus-HRHRD-Messungen wurde das Zentrum des Fokus mit einer bewegten Schneidekante (engl. *knife edge*) bestimmt. Zudem konnte mit einem optischen Mikroskop dieses Zentrum fokussiert werden und auch das Drehzentrum des Probentisches auf die Strahlmitte justiert werden. Dazu wird beispielsweise anstelle der Schneidekante die Spitze einer Glaskapillare in die Strahlposition gefahren und dort rotiert. Durch Beobachten der bei Rotation aus dem Fokus wandernden Spitze, ist weitgehend die Bestimmung des Drehzentrums möglich. Gelingt es dann während der Untersuchung eines Ortes auf der Probe, diesen Ort im Mikroskopfokus zu halten, befindet sich er sich folglich sowohl im Drehzentrum als auch im Fokus des Röntgenstrahls.

2.4. Verwendete Strahlrohre und Messeinrichtungen am Synchrotron

Insbesondere im Hinblick auf HRXRD unter Verwendung refraktiver nanofokussierender Röntgenlinsen (Unterkapitel 2.3) werden an die Röntgenquelle hohe Anforderungen gestellt. So sind beispielsweise Photonenenergien nötig, bei der die Strahlen im Material der Linsen (Silizium) nicht zu stark absorbiert, andererseits aber hinreichend stark gebrochen werden. Zur Vermeidung chromatischer Aberration ist zudem eine geringe Energiebandbreite von Vorteil und hohe Photonenflüsse sind für praktikable Messdauern unabdingbar. Sollen ptychographische Verfahren zum Einsatz kommen, wird eine kohärente Strahlung vorausgesetzt. Einbringen optischer Elemente zur Monochromatisierung und Kollimation sind jedoch nur auf Kosten der Strahlintensität möglich.

Aus diesen Gründen wurde für sämtliche in dieser Arbeit präsentierten Experimente Synchrotronstrahlung verwendet. Dedizierte Großforschungseinrichtungen zur Erzeugung dieser Strahlung stehen seit Ende der 80er Jahre für Forschungszwecke zu Verfügung. Der schematische Aufbau einer solchen Strahlenquelle ist in Abb. 2.8 am Beispiel der europäischen Synchrotronanlage ESRF (engl. *european synchrotron radiation facility*) in Grenoble/Frankreich dargestellt.

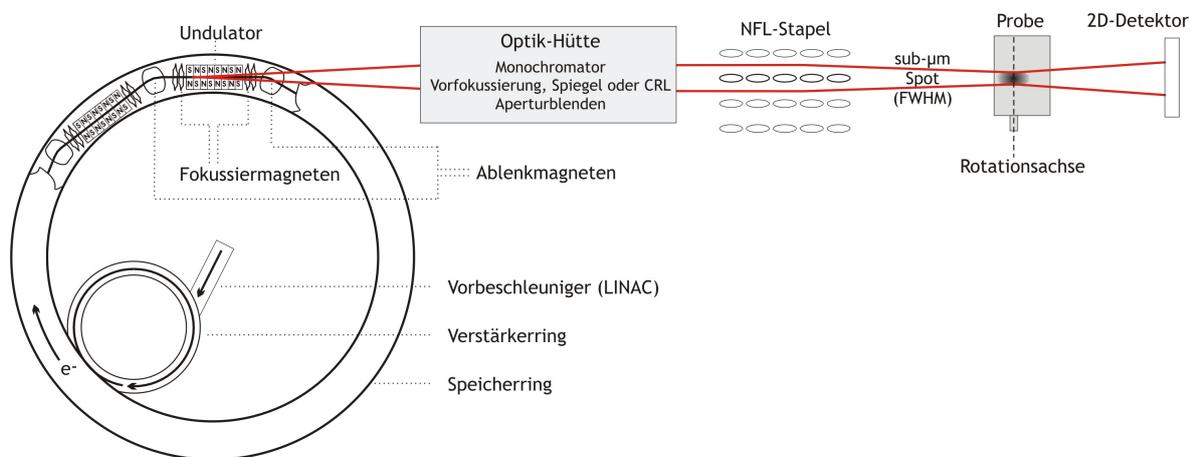


Abbildung 2.8.: Erzeugung von Synchrotronstrahlung und schematischer Strahlengang am Beispiel des Synchrotrons ESRF bei Verwendung eines Undulators sowie Nanofokus-HRXRD an Strahlrohr ID13. Durch Pfeile wurde die Richtung der im Synchrotron beschleunigten Elektronen skizziert, welche bei Passieren des Undulators Photonen abstrahlen. Erläuterung zum Aufbau siehe Text sowie Kapitel 2.3 zur Erklärung der Fokussierung von Röntgenstrahlung.

Die Erzeugung der Synchrotronstrahlung beruht darauf, dass beschleunigte Ladungen Energie abstrahlen - in Form von so genannter „Bremsstrahlung“. Als Ladungsträger werden am ESRF Elektronen verwendet, welche zunächst in einem Linearbeschleuniger (LINAC, engl. *linear accelerator*) und einem Verstärkerring durch Hohlraumresonatoren vorbeschleunigt

werden. Ablenkmagneten halten sie dabei auf der Kreisbahn des Rings⁸. Nach Erreichen der vorgesehenen maximalen kinetischen Energie im Ring (6 GeV im Falle des ESRF), werden die Elektronen in den großen Speicherring injiziert und auf dieser kinetischen Energie gehalten. Die mittlere Dauer bis zu einem Zusammenbruch des Ringstromes (MTBF, engl. *mean time between failures*) betrug dabei am ESRF 108 Stunden.

Der innere Aufbau des Elektronen-Speicherrings ähnelt dem des Verstärkerringes, wobei sich in regelmäßigen Abständen Ablenkmagnete und in modernen Synchrotroneinrichtungen auch Wiggler oder Undulatoren befinden, in denen die Elektronen zur Strahlung ange-regt werden. Während der Ablenkmagnet ein Dipolmagnet ist, welcher zu einer tangentialen Energieabstrahlung führt, verursachen Wiggler und Undulatoren eine oszillierende Bewe-gung der Elektronen. Um diese wechselnde Auslenkung zu bewirken, bestehen Wiggler und Undulatoren aus einer periodischen Anordnung mehrerer Dipolmagnete entlang der Tra-jektorie der Elektronen. Mit der häufigeren Auslenkung der Ladungsträger gehen höhere Photonenflüsse einher, die im Falle des Wigglers proportional zur Anzahl der Dipolmagnete ansteigt. Wiggler⁹ weisen dabei ähnlich den einfachen Ablenkmagneten ein kontinuierliches Strahlungsspektrum auf. In Undulatoren¹⁰ hingegen wird mit geringeren Dipol-Feldstärken und kleineren Perioden eine Überlagerung der ausgesandten Strahlungskegel erreicht, womit Strahlung bestimmter Wellenlängen konstruktiv interferiert. Resultat ist ein Linienspektrum und eine quadratisch mit der Anzahl der Dipolmagnete steigende Intensität. Da den Elektro-nen durch die Abstrahlung kinetische Energie entzogen wird, müssen sie bei jedem Umlauf im Ring stets nachbeschleunigt werden. Fokussiermagnete sorgen zudem für Stabilität des Elektronenstrahls im Ring.

Als Qualitätsmerkmal des abgegebenen Röntgenstrahls wird oft die spektrale Brillanz

$$[B_s] = \frac{ph}{s \cdot \text{mm}^2 \cdot \text{mrad}^2 \cdot 10^{-3} \text{BW}} \quad (2.10)$$

herangezogen, welche für eine festgelegten Energiebandbreite von $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-3}$ die Anzahl der in einen Raumwinkel abgegebenen Photonen pro Sekunde pro Fläche angibt. Im Ver-gleich der drei geschilderten Möglichkeiten der Strahlungsanregung wird mit einem Wiggler eine um zwei bis drei und mit einem Undulator eine um bis zu neun Größenordnungen hö-here Brillanz als mit einem Ablenkmagneten erzielt. Tangential zum Ring befinden sich die Strahlrohre mit weiteren Röntgenoptiken sowie den Messplätzen, an denen die ausgesandte Synchrotronstrahlung für Messungen bereitgestellt wird (siehe Kapitel 2.3).

Zur näheren Beschäftigung mit dem Thema sei auf eine, weitgehend aktuelle, deutschspra-chige Einführung in die Forschung mit Synchrotronstrahlung in [FM10] verwiesen.

⁸Da die Feldstärke der Ablenkmagneten synchron mit zunehmender kinetischer Energie der Elektronen erhöht werden müssen, nennt man einen solchen Ring Synchrotron (griech. *syn-* für „zusammen“, *chronos* „Zeit“, *-tron* „Werkzeug/Gerät“). Davon wiederum leiten sich auch die Bezeichnung der gesamten Einrichtung als „Synchrotron“ und der Begriff Synchrotronstrahlung ab.

⁹von engl. *to wiggle* „wackeln“

¹⁰von lat. *undula* „kleine Welle“

Strahlrohr ID13, ESRF

Sämtliche Nanofokus-Experimente dieser Arbeit wurden an Strahlrohr ID13 des ESRF durchgeführt. Es stehen an ID13 zwei Messhütten für Experimente mit Submikrometer- oder Nanofokus-Optiken zur Verfügung, wobei sich die erste in ca. 40 m und die zweite in knapp 100 m Entfernung vom Undulator befindet. Die Entfernung dient dabei der Erhöhung der transversalen Kohärenz der Strahlung.

Bei Punkt- oder Liniendetektoren sind während der RSM-Aufnahme Detektorarmbewegungen nötig, um Detektionswinkel anzufahren und bei jedem Messschritt den Detektor einige Zeit zu belichten. Zunehmend kommen zur Aufnahme von RSM jedoch Flächendetektoren zum Einsatz, mit dem zeitsparenden Vorteil, dass nach Einstellen der gewünschten Winkelposition Schnitte im reziproken Raum direkt aufgenommen werden können. Durch die Zeitersparnis können auch längere Belichtungsdauern gewählt werden, um besonders schwache Intensitäten zu detektieren. Wird der Einfallswinkel variiert, kann der reziproke Raum dreidimensional aufgenommen werden, wie es beispielsweise in [BDP⁺09] für einen GaAs-Nanodraht demonstriert wurde.

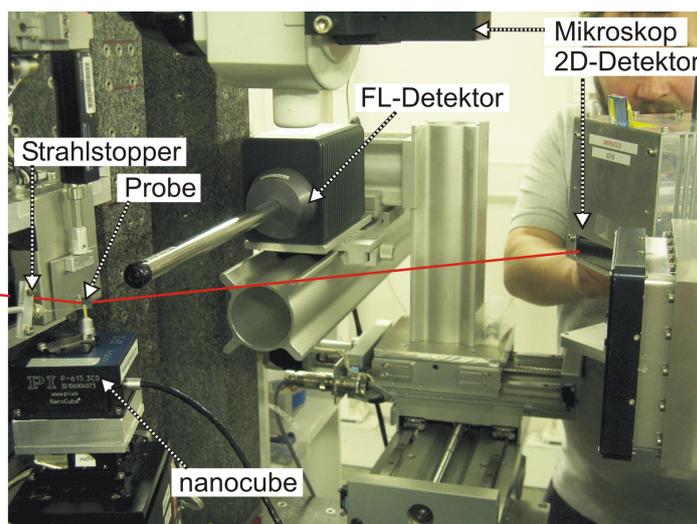


Abbildung 2.9.: Experimenteller Aufbau am dedizierten Nanofokus-Messplatz des Strahlrohrs ID13, ESRF. Der fokussierte Strahl (nicht maßstabsgerecht) ist durch eine Linie gekennzeichnet und trifft von links auf die vertikal installierte Probe. Der Flächendetektor ist auf den jeweiligen Bragg-Winkel eingestellt und wurde in den Experimenten raumfest positioniert. Zur Probenjustage steht außerdem ein optisches Mikroskop und für fluoreszenzmikroskopische Untersuchungen ein Fluoreszenzdetektor zur Verfügung.

Als Detektorsystem setzten wir am Strahlrohr ID13 vorwiegend auf den Halbleiter-Photonenzähler MAXIPIX, welcher auf Medipix2-Chips [LCS⁺01] basiert. Der verwendete Detektor wies ein Feld von 512x512 Pixeln (2x2 Chips) mit einer Pixelgröße von je $55 \times 55 \mu\text{m}^2$ auf. Jedes Pixel verfügte dabei über einen 13 bit-Photonenzähler. Die MAXIPIX-Detektoren sind ausgelegt für Energien von 5 bis 20 keV, wobei zu den niedrigeren Energien hin störende Ab-

sorptionseffekte einsetzen und die beste Effizienz somit nur zwischen 15 und 20 keV erreicht wird (68% bei 15 keV). Der große Vorteil dieser Detektoren gegenüber CCD-Ausführungen liegt darin begründet, dass ein Ausleserauschen völlig entfällt und Pixelintensitäten sogar identisch Null gemessen werden können, selbst direkt neben Pixeln, an denen ein hoher Photonenstrom detektiert wird.

Eine wichtige Voraussetzung für die HRXRD-Experimente mit nanofokussiertem Strahl ist die Stabilität der Spotposition auf der Probe. Es werden dabei reproduzierbare, auf wenige 10 nm genaue Probenbewegungen gefordert. Ein Standard-Diffraktometeraufbau ist unter diesen Voraussetzungen derzeit nicht verfügbar. Aus diesem Grund wurde ein spezieller Proben-Translationstisch *Nanocube* eingesetzt (siehe Abb. 2.9), welcher diese Anforderung zumindest für Translationsbewegungen erfüllt. Die Bewegung in alle drei Raumrichtungen erfolgt dabei mit Hilfe von Piezoelementen. Die Probe wurde mit Bienenwachs an einem Halter befestigt, da sich dieses besonders sicher gegen Drift erwies. Der Probenhalter selbst wurde mit Neodym-Magneten auf den *Nanocube* aufgesetzt. Möglich war auch eine Rotation in der Horizontalebene des Translationstisches, womit bei vertikaler Probeninstallation die Einstellung des Strahleinfallswinkels justiert wurde. Der gesamte Messaufbau ist am Strahlrohr ID13 auf Granitblöcken gelagert, welche vom Fußboden durch Dämpfer entkoppelt sind. Vibrationen und Erschütterungen der Messumgebung werden dadurch vom experimentellen Aufbau ferngehalten. Zusätzlich wird die Messhütte auf einer konstanten Temperatur gehalten ($\Delta T \approx 0.1K$).

Wie in Abb. 2.9 zu sehen, ist direkt im Messaufbau ein optisches Mikroskop integriert. Dies wird auch verwendet, um die mittels bewegter Schneidekante bestimmte Strahlmitte auf das Drehzentrum der Probe zu justieren. Zur weiteren Ausstattung gehört ein motorisierter Strahlstopper an einer Glaskapillare, welcher zum Schutz des Detektors hinter der Probe in den gebeugten Strahl des Substratreflexes oder vor den Primärstrahl gefahren werden kann. Ein ebenfalls verfügbarer Fluoreszenzdetektor (Vortex EM) ermöglicht die energieaufgelöste Aufnahme der im bestrahlten Material angeregten Photonenemissionen. Auf diese Weise sind u.a. zumindest qualitative Rückschlüsse darauf möglich, welche chemischen Elemente der Probe sich an der aktuellen Spotposition befinden (siehe Kapitel 4.1). Der Fluoreszenzdetektor ist raumfest, orthogonal zum Primärstrahl installiert und die Fluoreszenzmessungen werden bei einem Winkel von 45° (zwischen Primärstrahl und Probe sowie Probe und Detektor) durchgeführt.

Nach Abschluss unserer Messungen konnten jüngst an diesem Strahlrohr weitere Verbesserungen des Messaufbaus erzielt werden. So steht seit 2011 eine Probenjustage mittels Hexapod-Probentisch zur Verfügung (siehe auch Abb. A.6(b), Anhang A.3). Dieser Probentisch ermöglicht nun neben der Translation und Drehung um die vertikale Achse die Kippung der Probe. Über Pseudomotoren werden damit drei Winkelfreiheitsgrade ermöglicht. Damit ist z.B. bei der Proben-Justage auch die Oberflächennormale relativ zur Beugungsebene exakt einstellbar und es können die *In-plane*-Richtungen der Beugungsebene justiert werden. Des Weiteren ist ein Detektorarm installiert worden (Abb. A.6(a) im Anhang A.3), mit welchem die Detektorposition in einer horizontalen Beugungsebene einstellbar ist.

Strahlrohr ID10B, ESRF

In dieser Arbeit gezeigte Messungen, die ohne Verwendung der nanofokussierenden Optiken durchgeführt wurden, sind vorwiegend am Strahlrohr ID10B entstanden. Hier kam ebenfalls ein Undulator zum Einsatz, optimiert für eine Energie zwischen 7 und 13 keV. Die Strahlgröße betrug bei unseren Messungen nach Fokussierung durch CRL und begrenzende Blenden 100 μm vertikal und 300 μm horizontal. Bei diesen Strahlgrößen werden hier üblicherweise Primärstrahlintensitäten in Höhe von $I_0 = 10^{11}$ bis 10^{12} cps erreicht.

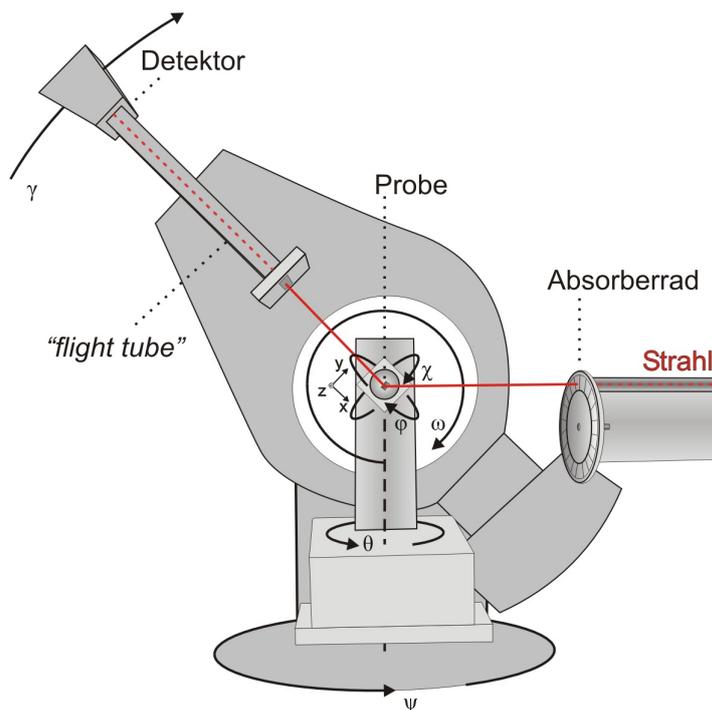


Abbildung 2.10.: Diffraktometer am Strahlrohr ID10B. Die Probe befindet sich in vertikaler Position und hat drei Translationsfreiheitsgrade x, y, z sowie vier Rotationsfreiheitsgrade $\omega, \theta, \phi, \chi$, während der Detektorarm Rotationen um die Winkel γ und Ψ zulässt.

Um Streuung an Luft zwischen Probe und Detektor zu vermindern, befand sich vor dem Detektor eine evakuierte Röhre (engl. *flight tube*), siehe Abb. 2.10. Als Detektor kam hier ein Halbleiter-Liniendetektor (VÅNTEC) zum Einsatz, vor welchem zur Erhöhung der angularen Auflösung ein Ge(111)-Analysatorkristall installiert werden konnte. Mit Hilfe eines Absorberrades, das Aluminiumfilter unterschiedlicher Dicke enthält, kann bei Sättigung des Detektors automatisch die Strahlintensität reduziert werden. Die gemessenen Intensitätswerte werden anschließend mit den Absorberfaktoren multipliziert und eine Normierung auf die Primärstrahlintensität¹¹ des Strahls durchgeführt.

¹¹Vor dem Absorberrad (strahlabwärts gesehen) wird ein Monitor signal erfasst, sodass Intensitätsschwankungen aufgrund von Elektronenstrahl-Instabilitäten oder insbesondere des stetig abfallenden Ringstroms nachträglich kompensiert werden können.

Zur Vermeidung von Strahlenschäden an der Probenoberfläche wurde die Probe meist nur im Vakuum (ca. 10^{-3} bar) dem Strahl ausgesetzt. Dazu wurde ein Beryllium-Dom auf dem Probenhalter installiert und evakuiert. Auswirkung einer Bestrahlung ohne diese Vorsichtsmaßnahme ist im Anhang A.3 in Abb. A.5 zu sehen.

3. Numerische Berechnungsverfahren

Im ersten Unterkapitel 3.1 wird auf die Berechnung von Deformationsfeldern innerhalb der untersuchten Strukturen eingegangen. Die dafür angefertigten dreidimensionalen Modelle der Strukturen und deren berechnete Gitterdeformationen fließen in die darauffolgend im Unterkapitel 3.2 beschriebenen Streurechnungen ein. Diese Streurechnungen wurden speziell für die Nanofokus-Anwendungen weiterentwickelt, wie in 3.3 näher beschrieben wird. Es sei darauf hingewiesen, dass im Anhang ergänzende Erläuterungen zur Herleitung der angegebenen Formeln (Kapitel A.1) sowie den Quelltexten der Streurechnungsprogramme dieser Arbeit (Kapitel A.2) zu finden sind.

3.1. Anwendung der Finite-Elemente-Methode (FEM)

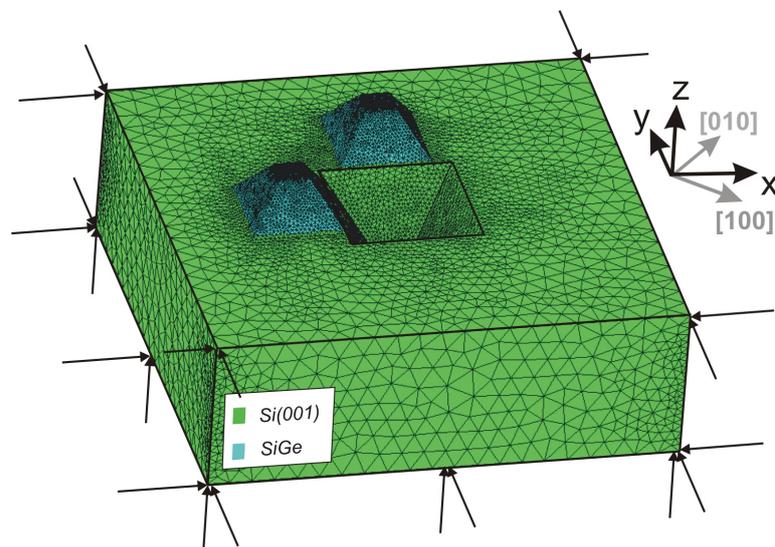


Abbildung 3.1.: FEM-Modell eines SiGe-Inselensembles auf einer Si(001)-Oberfläche. Die mechanischen Randbedingungen der Substratfixierung wurden durch Pfeile verdeutlicht. Experimente an derartigen Strukturen von SiGe-Inseln, welche sich um eine Substratvertiefung anordnen, werden in Kapitel 4.2 beschrieben.

Zur Berechnung der Deformation innerhalb der untersuchten heteroepitaktisch gewachsenen

Strukturen kam die Methode der Finiten Elemente zum Einsatz. Wesentliches Merkmal dieser Methode zur Lösung von Differentialgleichungen ist die Diskretisierung des jeweiligen Problems in endlich große Teilbereiche (Elemente). Für diese Elemente werden auf numerischem Wege iterativ Lösungen ermittelt. Wie auch in Abb. 3.1 am Beispiel einer Formation von SiGe-Inseln zu sehen ist, wird dabei zur Optimierung des Rechenaufwandes lediglich an Substratkanten und der Nanostruktur selbst eine feine Unterteilung des Modells vorgenommen. Eine vollständig feine Unterteilung des Modells vor der FEM-Rechnung scheitert bereits am hohen Rechenaufwand zur Erstellung der dreidimensionalen Elemente¹². Als dreidimensionaler Elementtyp wurden in dieser Arbeit stets Tetraeder gewählt. Durchgeführt wurden die Berechnungen unter Verwendung der kommerziellen FEM-Software MSC.Marc 2008r1 mit der zugehörigen graphischen Benutzeroberfläche MSC.Mentat. Letztere erlaubt die Erstellung des geometrischen Modells, dessen Unterteilung in Elemente sowie Festlegung der Randbedingungen und Materialkonstanten. Die Berechnung der Deformation wird dann vom FEM-solver MSC.Marc durchgeführt, wobei in unserer Arbeitsgruppe ein Mehrprozessorsystem¹³ zum Einsatz kam. Zur Einführung in die Methode der Finiten Elemente und das verwendete FEM-Softwarepaket möchte ich auf [MSC03] und [MSC08] verweisen.

Untersucht werden soll mittels FEM die Dehnung (Deformation) des Materials, welche aus den Spannungen resultiert, die durch das heteroepitaktische Aufwachsen eines Materials auf ein Substrat anderen Gitterparameters hervorgerufen werden. Dabei werden kleine Deformationen im Sinne der linearen Elastizitätstheorie angenommen. Bei elastischer Deformation gilt nach dem verallgemeinerten Hookeschen Gesetz ein linearer Zusammenhang zwischen Spannungstensor $\tilde{\sigma}$ und Dehnungstensor $\tilde{\epsilon}$:

$$\tilde{\sigma} = \tilde{C} \cdot \tilde{\epsilon}. \quad (3.1)$$

Die Materie wird hierbei nicht auf atomarer Basis betrachtet, sondern als ein Kontinuum angesehen. Dies ist für kleine Verschiebungen zulässig [PKW⁺98]. Der Tensor \tilde{C} (Hookescher Tensor) enthält die elastischen Konstanten und es kann aus Symmetriegründen in der Voigtschen Notation geschrieben werden:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2 \cdot \epsilon_{yz} \\ 2 \cdot \epsilon_{zx} \\ 2 \cdot \epsilon_{xy} \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

Dabei bezeichnen $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ Spannungen in Richtung der Standardbasis-Vektoren und $\tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{xy}$ die Scherspannungen. Es handelt sich bei \tilde{C} um einen symmetrischen Tensor, sodass gilt:

$$c_{ij} = c_{ji} \quad \text{für } \forall i \neq j$$

¹²Eine CPU mit 2.2 GHz (AMD Opteron) benötigt in unserem System bereits bei dem verwendeten FEM-Modell 24 Stunden.

¹³siehe [CR]

Bei kubischen Kristallsystemen kommt vereinfachend hinzu, dass die ersten und letzten drei Diagonalkomponenten jeweils gleich sind:

$$c_{11} = c_{22} = c_{33}$$

$$c_{44} = c_{55} = c_{66}$$

und es gilt:

$$c_{12} = c_{13} = c_{23}$$

Die restlichen Komponenten sind bei Annahme eines kubischen Kristallsystems identisch Null:

$$c_{ij} = 0 \text{ für } \forall i, j \geq 4, i \neq j$$

Es gibt demnach für die Berechnung der Deformation an den in dieser Arbeit untersuchten Materialsystemen drei unabhängige Komponenten c_{11} , c_{12} und c_{44} . Für die Materialien Si, Ge, GaAs, InAs seien diese hier genannt:

c_{ij} -Komponente	Si	Ge	GaAs	InAs
c_{11}/GPa	165.7	128.9	119.2	83.29
c_{12}/GPa	63.9	48.3	59.9	45.26
c_{44}/GPa	79.6	67.1	53.8	39.59

Tabelle 3.1.: Unabhängige Komponenten c_{ij} des Hookeschen Tensors der linearen Elastizitätstheorie einiger kubischer Kristallsysteme. Die Werte für Si, Ge und GaAs entstammen [Ame72], während die für InAs aus [Mad04] entnommen wurden.

Wie in Abb. 3.1 dargestellt, müssen die Richtungen der Standardbasis des Modells und des Kristallsystems nicht übereinstimmen, sondern können gegeneinander verdreht sein (die Kanten der SiGe-Inseln verlaufen entlang $\langle 110 \rangle$ -Richtungen). Dies ist insbesondere in Bezug auf den Hookeschen Tensor zu beachten, deren Komponenten für die Standardbasis tabelliert sind. Eine Rotationsmatrix kann dabei entsprechend der kristallographischen Richtungen direkt in MSC.Mentat berechnet und auf das dreidimensionale Modell angewendet werden.

Bei Mischkristallen wurden die jeweiligen Konstanten linear aus den tabellierten Werten der Einzelkomponenten berechnet. Bemerkenswerterweise wirkt sich jedoch in der Praxis eine Anpassung der elastischen Konstanten an das jeweilige Materialsystem nur geringfügig auf das Endergebnis der FEM-Berechnung aus. Viel entscheidender ist der Einfluss der Fehlpassung

$$f = \frac{a_2 - a_1}{a_2} \quad (3.3)$$

der untersuchten aufeinander gewachsenen Kristalle mit den Gitterparametern a_1 (Substratmaterial) und a_2 (Schichtmaterial). Diese Fehlpassung geht in die FEM-Berechnung ein, indem die zu lösende Aufgabe auf das Problem einer Wärmeausdehnung zusammenhängender

Körper mit unterschiedlichen Ausdehnungskoeffizienten zurückgeführt wird. Dem thermische Ausdehnungskoeffizient des Substratmaterials wird dabei der Wert Null zugewiesen, während der Koeffizient des heteroepitaktisch aufgewachsenen Materials den Wert der Fehlpassung erhält. Eine Temperaturerhöhung erzeugt die Spannungen $\sigma(\mathbf{r})$, welche, abhängig von mechanischen Randbedingungen (siehe Abb. 3.1) und Materialkonstanten \tilde{C} , eine Dehnung bewirken können. Die FEM-Knoten des Ortes \mathbf{r} werden dadurch um den Vektor \mathbf{u} verschoben. Resultat ist ein Deformationsfeld

$$\mathbf{r}'(\mathbf{r}) = \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}) \quad (3.4)$$

oder, als Verschiebungsfeld formuliert:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}'(\mathbf{r}) - \mathbf{r}. \quad (3.5)$$

Passend zur in Kapitel 4.1, [HDS⁺08], untersuchten Probe wird in Abb. 3.2 ein auf diese Weise berechnetes Verschiebungsfeld am Beispiel einer einzelnen SiGe-Insell gezeigt.

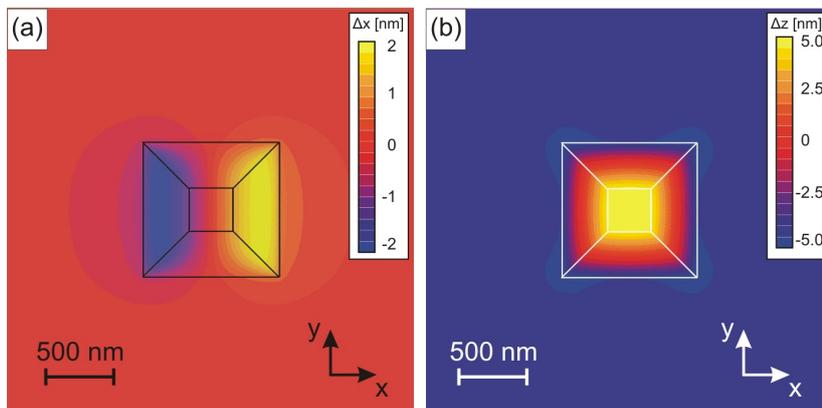


Abbildung 3.2.: Durch Spannungsrelaxation nach heteroepitaktischem Aufwachsen von SiGe auf Si(001) hervorgerufenenes Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ innerhalb einer SiGe-Einzelinsell mit einem Germanium-Gehalt von 15%. (a) laterale Verschiebung Δx (für Δy ergäbe sich eine identische, um 90° gedrehte Darstellung), (b) vertikale Verschiebung Δz . Abgebildet sind die jeweiligen Werte an der Materialoberfläche. Das hier gezeigte Verschiebungsfeld ging in die im Kapitel 4.5, [DHP⁺12], dargestellten Streurechnungen ein.

Das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ sowie die \mathbf{r} fließen in die im nachfolgenden Kapitel 3.2 erläuterten Streusimulationen ein, siehe Gl. (3.6) sowie [HDB⁺95, ZHS⁺99, WSH⁺00]. Zunächst besteht der Modelldatensatz jedoch aus irregulär angeordneten FEM-Knoten, den Eckpunkten eines jeden FEM-Elementes (vgl. Abb. 3.3). Für Streurechnungen muss dieser Satz an irregulären Knoten erst in reguläres Gitter mit physikalisch plausiblen Gitterparametern a überführt werden. Da die jeweilig betrachteten Beugungsreflexe auch für Vielfache der Netzebenenabstände auftreten, wird üblicherweise eine entsprechend größere Schrittweite $n \cdot a$, $n \in \mathbb{N}$ gewählt. Eine obere Grenze für n stellen die Feinstrukturen des Modells und die zu erwartenden Abstände im reziproken Raum dar. Zu beachten ist die Orientierung

des Kristalls, sodass ggf. für die jeweilige kristallographische Richtung umgerechnete Gitterparameter a' einzusetzen sind. Insbesondere Strukturen, deren Form gekrümmte Kurven enthalten, erfordern dabei sehr feine Schrittweiten. Hat andererseits auch die Gesamtstruktur eine relativ zur Schrittweite große Ausdehnung, wie z.B. Quantenpunktmoleküle (Kapitel 4.4), entstehen dabei äußerst speicherintensive Datensätze mehrerer Millionen Gitterpunkte. Sowohl die Gitterverfeinerung als auch die späteren Streusimulationen an diesen Daten sind in dieser Arbeit deshalb ebenfalls auf dem Mehrprozessorsystem (siehe [CR]) durchgeführt worden. Nach Erstellung eines regulären Gitters werden die Werte des Verschiebungsfeldes aller hinzugekommenen Gitterpunkte interpoliert. In dieser Arbeit geschah dies mittels der MATLAB-Prozedur `griddata3()`, welche auf einer Delaunay-Triangulation basiert.

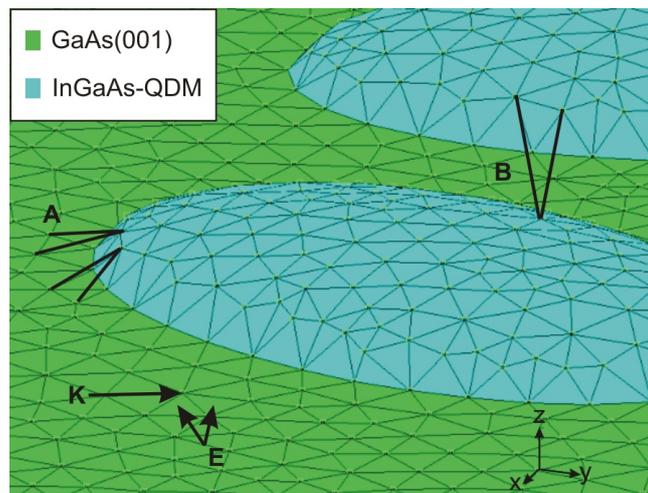


Abbildung 3.3.: FEM-Modell-Ausschnitt von InGaAs-Quantenpunkten. (E) Beispiel für einzelne Elemente, (K) Knoten der Elemente, (A,B) mögliche alternative Knotenverbindungen bei der Ermittlung der Materialoberfläche (siehe Text).

Bei der Gitterverfeinerung nach der oben beschriebenen Vorgehensweise geht die Modellform verloren, da das reguläre Gitter als ein die gesamte Struktur umgebender Block angelegt wird. Es müssen also Punkte des regulären Gitters verworfen werden, die nicht in den Bereich der ursprünglichen Geometrie des Modells fallen. Dafür muss bekannt sein, wie die Materialoberflächen verlaufen und wo das Innere und wo das Äußere des Materials ist. Aufgrund der irregulären Schrittweiten der FEM-Knoten wird klar, dass dies nicht automatisiert allein durch Analyse des unverfeinerten Datensatzes untersucht werden kann¹⁴. In Abb. 3.3 sind beispielsweise mit (A) und (B) zwei mögliche Fehlentscheidungen dargestellt, die bei der Untersuchung des unverfeinerten Gitters zur Ermittlung der Oberfläche getroffen werden könnten. Letztlich wurden für die untersuchten Probensysteme unterschiedliche Ansätze zur Lösung dieses Problems gewählt, welche an dieser Stelle beschrieben werden sollen, ohne auf die programmtechnische Umsetzung einzugehen:

Die Proben des SiGe-Systems (Kapitel 4.1 und 4.2) weisen pyramidenstumpfförmige SiGe-

¹⁴Mit gewissen Einschränkungen auf z.B. lediglich konvexe Strukturen auf der Oberfläche und gleichzeitiger Beschränkung auf Maximalabstände der an der Oberfläche liegenden Knoten wäre eine solche Oberflächen-Ermittlung denkbar. Dies wurde jedoch als eine zu spezielle und aufwändige Lösung angesehen.

Inseln quadratischer Grundfläche und SiGe-Inselensembles mit ebenso pyramidenstumpfförmigen Substratvertiefungen auf, siehe Abb. 3.1. Da die Lage und Größe eines solchen Pyramidenstumpfes im dreidimensionalen Raum durch vier Eckpunkte eindeutig festgelegt werden kann, wurde eine Routine eingesetzt, die für das Verwerfen von Gitterpunkten außerhalb der Struktur die entsprechenden vier Koordinatenangaben pro Pyramidenstumpf erfragt¹⁵. Die vier Eckpunkte sind im ersten geometrischen Modell (einem Zwischenschritt bei der Erstellung des FEM-Modells) leicht ablesbar.

Für das zuletzt untersuchte Probensystem der InGaAs-Quantenpunktmoleküle in Kapitel 4.3 und 4.4 wurde ein etwas komfortablerer Weg gewählt: Hier wurden bei der Erstellung des geometrischen Modells in MSC.Mentat die geometrischen Körper im ACIS-Format exportiert. Dieses Format ermöglicht die Speicherung der Art der dreidimensionalen Körper, Translationen der Körpermittelpunkte und enthält Angaben zur Rekonstruktion der Deformations- bzw. Rotationsmatrizen, die während der Modellierung zum Einsatz kamen. Es wurde eine Software erstellt, die diese ACIS-Daten der geometrischen Körper¹⁶ auszulesen vermag und so in der Lage ist, Gitterpunkte außerhalb der Körper zu verwerfen.

Das resultierende Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ und die Ortsvektoren der Streuer \mathbf{r} im regulären Gitter gehen direkt in die Intensitätsberechnung für die Streusimulationen ein, welche Thema des nachfolgenden Kapitels 3.2 sind.

¹⁵Das quaderförmige Substrat gilt dabei als Spezialfall eines Pyramidenstumpfes mit gleicher Deck- und Grundfacette. Zur Realisierung von pyramidenstumpfförmige Substratvertiefungen konnte jeweils festgelegt werden, ob das Pyramideninnere verworfen werden oder erhalten bleiben soll.

¹⁶Zunächst wurde das Programm nur für Ellipsoide und Flächen realisiert.

3.2. Berechnung reziproker Gitterkarten (RSM)

Nach 2.5 und 2.6 sind Intensitätswerte $I(\mathbf{q})$ proportional zum Betragsquadrat der Strukturamplitude:

$$I(\mathbf{q}) \propto \left| \sum_{n=1}^N f_n \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_n + \mathbf{u}(\mathbf{r}_n))} \right|^2 \quad (3.6)$$

Der Atomformfaktor f_n wird dabei als konstant angenommen und Eins gesetzt, da unsere experimentellen Untersuchungen bei Energien fern der Absorptionskanten der verwendeten Materialien durchgeführt wurden. Durch Variation des Beugungsvektors \mathbf{q} lassen sich Intensitäten beliebiger Flächen oder Volumina im reziproken Raum berechnen (siehe auch Kapitel 2.1, Abb. 2.2). Eine sehr einfache Realisierung eines RSM erhält man z.B. durch Variation nur zweier Komponenten des Beugungsvektors, sodass sich ein ebener Schnitt im reziproken Raum in koplanarer Beugungsgeometrie ergibt¹⁷. Ein Beispiel dafür findet sich in Abb. 3.5(a,b) für eine Streurechnung an einer SiGe/Si(001)-Insel.

Soll in Beugungsexperimenten die Aufnahme eines Flächendetektors als RSM interpretiert werden, bietet es sich jedoch an, die Intensitätsverteilung auf einem Teil der Ewald-Kugeloberfläche zu berechnen. Dies kann mit der Berechnung des Beugungsvektors aus den Einfallswinkel- und Austrittswinkeln α_1, α_2 und ihren zugehörigen Azimuten β, γ verwirklicht werden, siehe Gl. (2.4).

Das RSM ergibt sich dann beispielsweise aus Variation der Detektionswinkel α_2, γ . Diese Herangehensweise ähnelt der Arbeitsweise eines Punktdetektors im Experiment. Möglich ist auch die Berechnung von Pixelintensitäten eines Flächendetektors, indem die Detektionswinkel in Gl. (2.4) über die Pixelposition im dreidimensionalen Raum berechnet werden. Dazu werden für α_2 und γ nun $\alpha'_2(d_y)$ und $\gamma'(d_x)$ eingeführt (siehe Abb. 3.4), die über die Detektorentfernung D , Pixelgröße b und die Pixelkoordinaten (d_x, d_y) berechnet werden:

$$\begin{aligned} \alpha'_2 &= \alpha_2 + \arctan\left(\frac{b}{D}d_y\right) \\ \gamma' &= \gamma + \arctan\left(\frac{b}{D}d_x\right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Der Mittelpunkt des Detektors liege bei $d_x = d_y = 0$ und entspreche der festen Winkelposition (α_2, γ) , an welcher der Strahl orthogonal auf die Detektorfläche auftreffe.

¹⁷In einem derart einfachen Fall beschränkt man sich auf zwei mögliche Einstrahlrichtungen entlang der *In-plane*-Basisvektoren des Modell-Koordinatensystems.

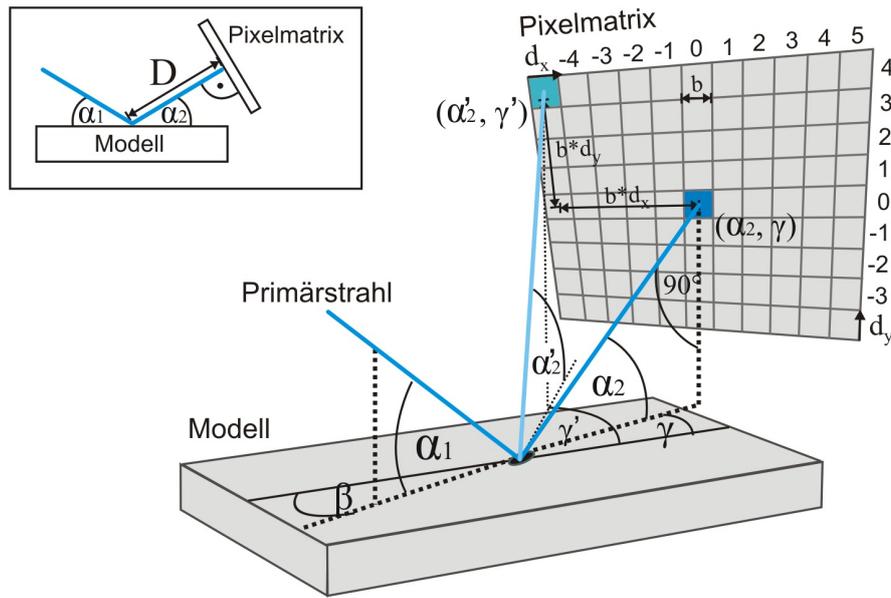


Abbildung 3.4.: Skizze der Streugeometrie mit Primärstrahl und gebeugtem spekularem Strahl (dunkelblau) sowie einem Strahl diffuser Streuintensität (hellblau). Der spekulare Strahl mit dem Austrittswinkel α_2 und dem Azimut γ trifft orthogonal im Punkt $(d_x = 0, d_y = 0)$ auf die Detektorfläche. Der nichtspekulare Strahl hat einen Austrittswinkel α_2' und dem Azimut γ' .

Eingesetzt in Gl. (2.4) ergibt sich:

$$\mathbf{q} = \frac{2\pi}{\lambda} \begin{pmatrix} \cos(\alpha_2 + \arctan(\frac{b}{D}d_y)) \cdot \cos(\gamma + \arctan(\frac{b}{D}d_x)) - \cos(\alpha_1) \cdot \cos(\beta) \\ \cos(\alpha_2 + \arctan(\frac{b}{D}d_y)) \cdot \sin(\gamma + \arctan(\frac{b}{D}d_x)) - \cos(\alpha_1) \cdot \sin(\beta) \\ \sin(\alpha_2 + \arctan(\frac{b}{D}d_y)) + \sin(\alpha_1) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Die Abweichung der ebenen Detektorfläche von der gekrümmten Ewald-Kugeloberfläche wird in Gl. (3.7) bzw. (3.8) durch den Term $\arctan(\frac{b}{D}d_{x,y})$ mit korrigiert. Diese Abweichung ist jedoch bei $D \gg b$ für die gewöhnlich kleinen Detektorausschnitte um das Zentrum des spekularen Strahls herum vernachlässigbar. So fallen auch im Vergleich der Simulationsergebnisse in Abb. 3.5 die Unterschiede zwischen (b) und (c) nur äußerst gering aus. Allerdings vereinfacht die Berechnung der Pixelintensitäten den nachträglichen Vergleich mit den Messdaten und erspart die ohnehin nötige Berechnung der reziproken Koordinaten für Pixel des schief im reziproken Raum liegenden RSM eines experimentellen Detektorbildes. In der praktischen Durchführung der Streurechnungen ist auch die optimale Wahl von Schrittweite oder Grenzen der Simulation von vornherein klar.

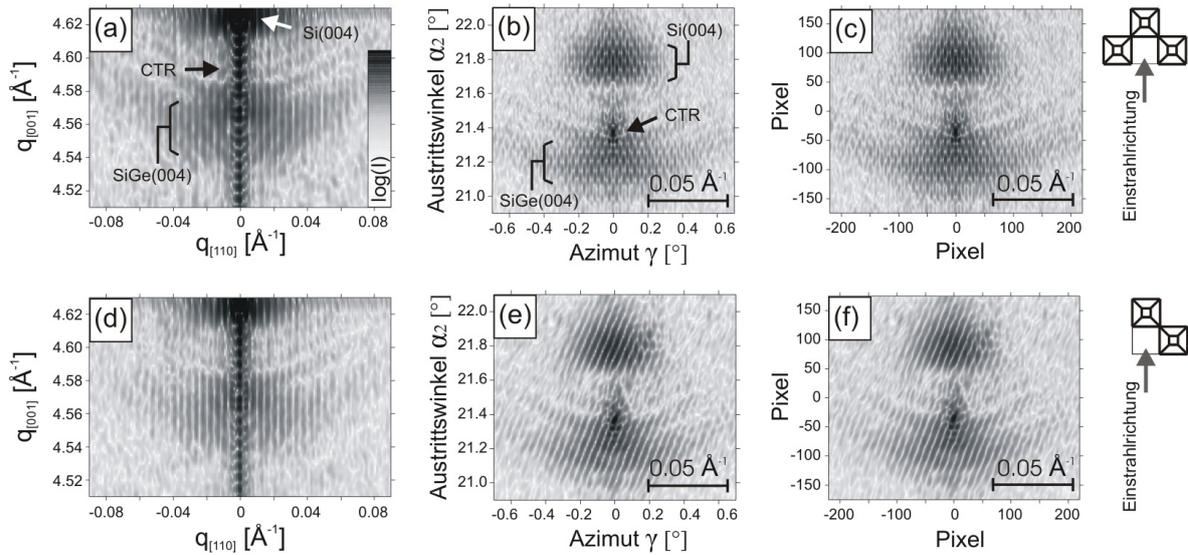


Abbildung 3.5.: RSM-Simulationen an SiGe/Si(001)-Inselensembles (siehe auch Kapitel 4.2) in Umgebung des (004)-Reflexes mit (a,d) Intensitätsverteilung berechnet in der [110]-[001]-Ebene, (b,e) Simulation mit Winkelvariation nach Gl. (2.4) und (c,f) Berechnung von Pixelintensitäten eines Flächendetektors nach Gl. (3.8). Skizzen des jeweilig verwendeten Modells mit Ensembles aus drei Inseln (für a-c) bzw. zwei Inseln (d-f) sind rechts abgebildet.

Bei großen Detektoren, z.B. einem Feld aus 5 aneinandergereihten Medipix-Chips wie u.a. am Strahlrohr ID10B/ESRF für Experimente zur Verfügung steht, haben Korrekturen aus Gl. (3.7) auch direkte Auswirkungen auf das RSM: Mit einer Detektorentfernung von 90 cm und Pixelgröße von $55\ \mu\text{m}$ ergibt sich über den gesamten Messbereich eine systematische Messabweichung von ca. 4 Pixeln, falls der spekulare Strahl orthogonal auf den Detektor fällt. Wie in Kapitel 4.2 diskutiert, kann eine derartige Abweichung für die Berechnung von chemischen Kompositionen bereits relevant sein.

Die Berücksichtigung der Lage des Flächendetektors im Raum ermöglicht erst die Interpretation für die in Kapitel 4.2 beschriebenen Messungen an SiGe-Inselensembles, wie am Beispiel von Abb. 3.5 nachvollzogen werden kann. Die Schnittbilder (a) und (d) zeigen beide den SiGe(004)- und Si(004)-Reflex in koplanarer Beugungsgeometrie, einmal berechnet an einem Ensemble aus drei SiGe-Inseln (a) und einmal an zwei Inseln (d). Diese beiden RSM sind nahezu identisch, jedoch zeigt die Berechnung der Beugungsvektoren nach Gl. (2.4) bzw. (3.8) in (b,c) und (e,f) einen deutlichen Unterschied in den RSM der beiden Ensembles. Für eine Interpretation der Beugungsbilder siehe Kapitel 4.1 und 4.2.

3.3. Streurechnungen für Nanofokus-HRHRD

Da bei den Experimenten mit Nanofokus einzelne Teile der zu untersuchenden Strukturen beleuchtet werden konnten, sollten nun auch Streurechnungen durchgeführt werden, welche ausschließlich diejenigen Streuer des Materials berücksichtigen, die durch den fokussierten Strahl beleuchtet werden.

Gegeben sei dazu ein Röntgenstrahl, der unter einem Einfallswinkel α_1 und zugehörigem azimutalen Winkel β auf eine Probe treffe und so ein dreidimensionales Streuvolumen innerhalb der Probe beleuchte, das durch den Strahlverlauf im Materialinneren bestimmt wird. In das wellenoptischen Modell übertragen, charakterisiert der Strahl die Richtung von Wellenfronten, welche vom Material gestreut werden können. Jede Welle habe dabei eine Amplitude A und eine Phase Φ , die durch ein zweidimensionales Strahlprofil in der Fokalebene bekannt seien. Das Strahlprofil bestehe aus einem Pixelfeld mit den Pixelkoordinaten (p_x, p_y) , wobei die Pixelhelligkeiten die Amplitude $A(p_x, p_y)$ und der Farbtonwert die Phase $\Phi(p_x, p_y)$ wiedergeben. Die zu analysierende Probe befinde sich ebenfalls im Strahlfokus und bei angenommener kinematischer Näherung hat die vom beleuchteten Streuer ausgesandte und am Detektor eintreffende Welle dieselbe Amplitude $A(p_x, p_y)$. Die Phase $\phi_n \mapsto \phi(p_x, p_y)$ am Streuer n hängt, neben den Phasenwerten des Strahlprofils $\Phi(p_x, p_y)$, von der bis zum Streuer zurückgelegten Wegstrecke ab.

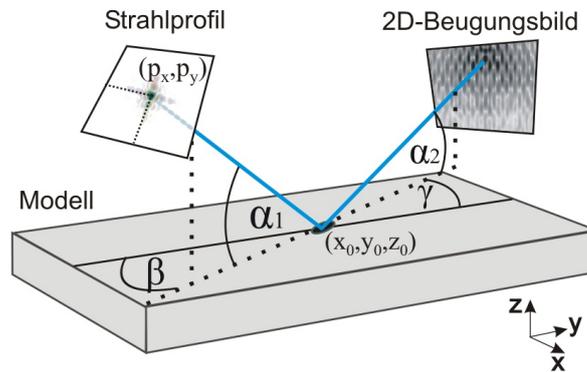


Abbildung 3.6.: Skizze der grundsätzlichen Streugeometrie.

Um jedem der N Streuer einen entsprechenden Amplituden- und Phasenwert zuzuweisen, ist entlang der Strahlrichtung eine Projektion der Streuer des 3D-Modells auf die Ebene des 2D Strahlprofils nötig. Es ist also eine Gleichung gesucht, welche die Koordinaten der Streuer

$$\mathbf{r}_n = \begin{pmatrix} r_{1,n} \\ r_{2,n} \\ r_{3,n} \end{pmatrix} \quad n \in \mathbb{N} : [1..N], \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$$

mit den Pixelkoordinaten (p_x, p_y) des schräg im Raum liegenden Strahlprofils verknüpft.

Nach geometrischen Überlegungen (Anhang A.1) ergibt sich:

$$\begin{aligned} p_x &= s \cdot [(r_{2,n} - y_0) \cdot \cos \beta - (r_{1,n} - x_0) \cdot \sin \beta] + \frac{L}{2} \\ p_y &= s \cdot [(r_{1,n} - x_0) \cdot \sin \alpha_1 \cdot \cos \beta + (r_{2,n} - y_0) \cdot \sin \alpha_1 \cdot \sin \beta \\ &\quad + (r_{3,n} - z_0) \cdot \cos \alpha_1] + \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Jedem Streuer n an Position \mathbf{r}_n kann mit Gl. (3.9) somit ein Pixel im Strahlprofil zugeordnet werden. Kodiert durch RGB-Werte enthalten die Pixel des Strahlprofils wiederum Informationen über die Amplitude und Phase am jeweiligen Ort in der Fokalebene.¹⁸ Für jeden Streuer n wird nun ein Wichtungsfaktor w_n eingeführt, welcher festlegt, wie stark ein Streuer zur Streuintensität der späteren Streusimulation beiträgt. Für nicht beleuchtete Streuer wird dabei $w_n = 0$ gesetzt, während im Strahl liegende Streuer, je nach Amplitude der anregenden Welle, ein Wert $0 < w_n \leq 1$ zugeordnet wird. Zur Berechnung der Wichtungsfaktoren w_n wird die Gesamthelligkeit des durch Gl. (3.9) zugeordneten Pixels im Strahlprofil herangezogen, welche sich aus der Summe der RGB-Farbwerte des jeweiligen Pixels ergibt: $A(p_x, p_y) = R + G + B$. Bei einem Minimal- und Maximalhelligkeitswert des Strahlprofils A_{max} und A_{min} errechnen sich demnach die Wichtungsfaktoren zu:

$$w_n = \frac{A(p_x, p_y)}{(A_{max} - A_{min})} \quad (3.10)$$

Analog zu Abb. A.3 kann nun ein Schnitt durch das Modell gezeichnet werden, welches die den Streuern zugeordneten Wichtungsfaktoren darstellt. Es entsteht so ein Abbild des simulierten Streuvolumens entlang des Strahls:

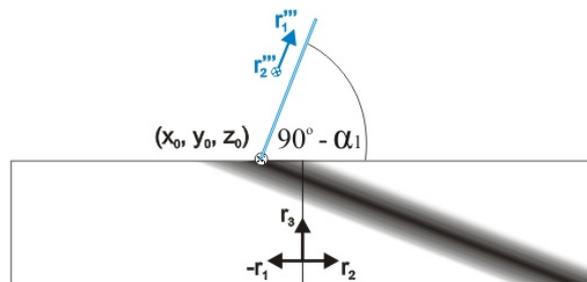


Abbildung 3.7.: Skizze der den Streuern im Modell zugewiesenen Wichtungsfaktoren. Die Darstellung der Wichtungsfaktoren veranschaulicht so den simulierten Strahlverlauf.

Phasenberechnung und Intensitätsgleichung

Im Strahlprofil ist die Phase durch die Farbton-Winkel $\Phi_n = \Phi(p_x, p_y)$ gegeben (vgl. Skala

¹⁸RGB steht für Rot, Grün, Blau: Zugrunde gelegt wird eine Pixel-Farbkodierung mittels Helligkeitswerten dieser drei Grundfarben $R, G, B \in N : [0..255]$. Gilt stets $R = G = B$, handelt es sich um ein Graustufen-Bild und ein entsprechendes Strahlprofil enthält dann keine Phasenvariation.

in Abb. 2.7), welche wie folgt aus den RGB-Werten berechnet werden können:

$$\Phi_n = \begin{cases} 0 & \text{für } R = B = G \\ 2 \cdot \arctan\left(\sqrt{3} \cdot \frac{G - B}{2 - G - B}\right) & \text{für } R \geq B, R > G \\ 2 \cdot \arctan\left(\sqrt{3} \cdot \frac{B - R}{2 - B - R}\right) + \frac{2}{3}\pi & \text{für } G \geq R, G > B \\ 2 \cdot \arctan\left(\sqrt{3} \cdot \frac{R - G}{2 - R - G}\right) + \frac{4}{3}\pi & \text{für } B \geq G, B > R \end{cases} \quad (3.11)$$

Die Phase ϕ_n am Streuer n wird durch Multiplikation des Farbtonwinkels Φ_n mit der Anzahl der Perioden berechnet, wobei sich letztere aus der Wellenlänge λ und der Entfernung von einer festen, orthogonal zu Strahl liegenden Ebene¹⁹ bis zum Streuer n ergibt:

$$\phi_n = \frac{\Phi_n}{\lambda} \cdot [\cos(\alpha_1) \cdot (r_{1,n} \cdot \cos(\beta) + r_{2,n} \cdot \sin(\beta)) + r_{3,n} \cdot \sin(\alpha_1)] \quad (3.12)$$

Abschließend werden die Phase ϕ_n und der Wichtungsfaktor w_n in die kohärente Summe der Streuintensität einbezogen.

$$I \propto \left| \sum_{n=1}^N w_n \cdot e^{i\phi_n} \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_n + \mathbf{u}(\mathbf{r}_n))} \right|^2 \quad (3.13)$$

Zur Anwendung der Nanospot-Simulation in Streurechnungen siehe Kapitel 4.5.

¹⁹Da nur die relativen Phasenwerte zwischen den Streuern relevant sind, ist jede beliebige orthogonal im Strahl liegende Ebene als Referenz für die Entfernungsmessung wählbar.

4. Veröffentlichungen und Zusammenfassung der Ergebnisse

Die folgenden Veröffentlichungen bauen sukzessive aufeinander auf und führen von ersten Nanofokus-HRHRD-Experimenten an Seitenfacetten einzelner, mikrometerbreiter SiGe-Inseln bis hin zu Quantenpunktmolekülen aus wesentlich kleineren InGaAs-Quantenpunkten. Parallel zu den Messungen wurde in dieser Arbeit das Verfahren zur Simulation der Streuintensitäten stetig weiterentwickelt. Dies ist Schwerpunkt des letzten Unterkapitels (4.5), in welchem auch die vorhergehenden Experimente der Unterkapitel 4.1 bis 4.4 nochmals aufgegriffen werden. Jeder Veröffentlichung ist eine Zusammenfassung in deutscher Sprache vorangestellt, welche ergänzende Erläuterungen enthält und mit den weiteren Zusammenfassungen eine kohärente Einheit bildet.

4.1. Individuell angeregte Seitenfacetten von SiGe/Si(001)-Inseln

Ein Abbruch der räumlichen Ausdehnung eines Kristalls in einer Richtung führt in der Beugung zu Gitterabbruchstäben (CTR, siehe Kapitel 2.1). Dies gilt sowohl für die Substratoberfläche einer Probe als auch für weitere Probenoberflächen wie Facetten an Nanostrukturen. Liegen die Flächennormalen der Facetten und der Oberfläche beide innerhalb der Beugungsebene, entspricht der eingeschlossene Winkel im Beugungsbild zwischen einem Facetten-CTR und einem CTR der Substratoberfläche dem Winkel zwischen Facettenebene und Substratoberfläche. Im Beugungsbild gemessene Winkelwerte können dabei direkt mit Winkeln im Realraum verglichen werden, da eine Transformation vom reziproken Raum in den Realraum winkelerhaltend ist.

Abb. 4.1 zeigt die diffuse Intensitätsverteilung um den SiGe(004)-Reflex einer Messung an SiGe/Si(001)-Inseln mit hochauflösender Röntgendiffraktometrie am Synchrotron (ESRF, Strahlrohr ID11). Hierbei wurde die Probe mit einem millimetergroßen Strahl beleuchtet, mit der Folge, dass bei der Messung über mehrere Inseln integriert wurde. Die Form des symmetrischen SiGe-Reflexes im Beugungsbild lässt zwei flügelartige, in $\langle 111 \rangle$ -Richtungen verlaufende CTR erkennen, welche auf $\{111\}$ -Facetten der Insel-Strukturen zurückzuführen sind (55° Inklination zur Probenoberfläche). $\{111\}$ -Seitenfacetten sind typisch für das letz-

te Wachstumsstadium der mit Flüssigphasenepitaxie gezüchteten SiGe-Inseln, wohingegen sich vor Erreichen des ersten Drittels der finalen Inselhöhe flachere Facettenflächen bis hin zu $\{115\}$ -Facetten beobachten lassen [HSG⁺04].

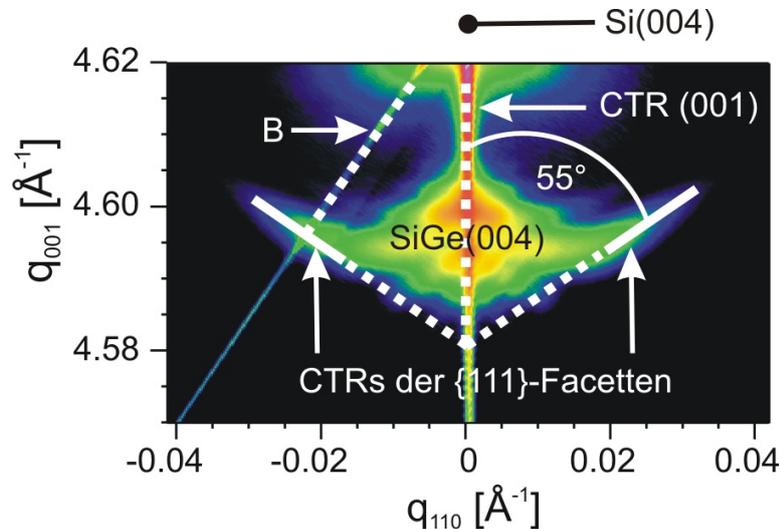


Abbildung 4.1.: Reziproke Gitterkarte der diffusen Intensitäten um den SiGe(004)-Reflex, gemessen mit integral über viele SiGe-Inseln mittelnder Röntgenbeugung. Durch den SiGe(004)-Reflex verlaufen Gitterabbruchstäbe der $\{111\}$ -Seitenfacetten sowie der (001)-Substratoberfläche. (B) Artefakt durch hohe Streuintensitäten in Bragg-Bedingung. (Nähere Beschreibung siehe Text.)

Der Substratreflex Si(004) befindet sich aufgrund des kleineren Gitterparameters von Silizium oberhalb des SiGe(004)-Reflexes, wurde jedoch in Abb. 4.1 seiner hohen Intensität wegen nicht mitgemessen. In der Umgebung des linken Facetten-CTR ist in Abb. 4.1 eine vom Si(004)-Reflex ausgehende linienförmige Intensität zu erkennen (B). Dieses Artefakt wird durch starke Streustrahlung bei exakt erfüllter Bragg-Bedingung des Substratreflexes hervorgerufen und kreuzt stets im Bragg-Winkel den CTR der Substratoberfläche.

In Veröffentlichung [HDS⁺08] (siehe folgende Seiten) sind vergleichbare SiGe-Inseln mit $1.2 \mu\text{m}$ Inselbasislänge mittels Nanofokus-HRHRD untersucht worden. Verwendung fanden dabei refraktive nanofokussierende Linsen aus Silizium (NFLs, siehe Kapitel 2.3) bei einer Energie von 15.25 keV ($\Delta E/E = 10^{-4}$). Durchgeführt wurde dieses Experiment am Messplatz 1 des Strahlrohrs ID13, ESRF in Grenoble (Beschreibung siehe Kapitel 2.4). Der Röntgenstrahldurchmesser betrug 200 nm Halbwertsbreite, was in etwa der Deckfacettengröße einer SiGe-Insel entsprach. Mit im Nanometerbereich reproduzierbar arbeitenden Piezoelementen für die Translationen der Probenoberfläche relativ zum Strahl war es möglich, einzelne SiGe-Inseln getrennt voneinander abzurastern. Mit Hilfe eines Flächendetektors (CCD FReLoN) konnten gleichzeitig Beugungsbilder einzelner Teile der Inselstruktur aufgenommen werden. Alternativ war es auch möglich, mittels Fluoreszenzdetektor das Germanium-Fluoreszenzsignal ($E_{\text{Ge},K\alpha} = 9.9 \text{ keV}$) zu detektieren. Trägt man dieses Fluoreszenzsignal in Abhängigkeit von der Spot-Position auf, entsteht eine Übersichtskarte der Germaniumverteilung auf der Probenoberfläche, welche die Positionen der SiGe-Inseln widerspiegelt.

Im Experiment konnte auf diese Weise ein Bereich auf der Probe mit der Aufnahme eines optischen Mikroskopes korreliert werden (siehe Fig. 1 der folgenden Veröffentlichung). Die Methode der Mikrofluoreszenz ermöglicht es demnach, mit dem fokussierten Strahl einzelne Objekte auf der Probenoberfläche selektiv zu beleuchten, um sie dann beispielsweise röntgendiffraktometrisch zu untersuchen.

Die experimentelle Anordnung mit im festen Winkel zum Primärstrahl installiertem Fluoreszenzdetektor (siehe Kapitel 2.4) erforderte in unserem Fall allerdings, dass Mikrofluoreszenz- und Beugungsbildaufnahme bei deutlich unterschiedlichen Strahleinfallswinkeln zu messen waren. Um bei der Einstellung des Bragg-Winkels die zuvor ausgewählte Insel über einen großen Drehwinkelbereich im Strahl zu behalten, muss die Rotationsachse der Probe exakt durch ebendiese Insel verlaufen. Dies konnte bei dieser Messung jedoch nicht gewährleistet werden. Für GaAs-Nanodrähte gelang dies später u.a. J. Gulden et al. am selben Strahlrohr [GMM⁺11].

Im Beugungsexperiment wurde die Probenoberfläche mit einer Schrittweite von 600 nm abgerastert, während aufeinanderfolgend zweidimensionale Beugungsbilder für jede Spot-Position aufgenommen wurden. Zum Schutz des Detektors und um den vollen Dynamikbereich nutzen zu können, wurde die sehr intensive diffuse Intensität des Si(004)-Reflexes mit einem raumfest installierten Absorber abgeschattet. Ein Rasterfeld der Spot-Positionen in Umgebung einer SiGe-Insel (a) und die Anordnung der gemessenen Beugungsbilder (b) für die entsprechenden Spot-Positionen sind in Fig. 2 der nachfolgend eingefügten Veröffentlichung abgebildet. Jedes Beugungsbild stellt hierbei, wie in Abb. 4.1, einen zweidimensionalen Schnitt im reziproken Raum dar, wobei dieser nun jedoch aus geometrischen Gründen nicht exakt parallel zur Normalen der Probenoberfläche verläuft. Dies hat zur Folge, dass der CTR der (001)-Inseldeckfacette das Beugungsbild in nur einem Punkt durchstößt und nicht wie in Abb. 4.1 als vertikale Linie zu erkennen ist. Im Vergleich mit der integral über viele Inseln mittelnden Röntgenbeugung (Abb. 4.1) zeigen die Messungen hier nun separat angeregte {111}-CTR bei der Beleuchtung einzelner Insel-Facetten (Beugungsbild Nr. 12 und 14 in Fig. 2(b)). In Beugungsbild Nr. 13 hingegen ist der CTR der (001)-Deckfacette dieser SiGe-Insel zu sehen. Schon an dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass auch spätere Nanofokus-Streurechnungen für das beschriebene experimentelle Szenario diese Interpretation der Beugungsbilder eindrucksvoll bestätigen (Kapitel 4.5).

APPLIED PHYSICS LETTERS 92, 193109 (2008)

Scanning x-ray diffraction with 200 nm spatial resolution

M. Hanke,^{1,a)} M. Dubsloff,¹ M. Schmidbauer,² T. Boeck,² S. Schöder,³
M. Burghammer,³ C. Riekel,³ J. Patommel,⁴ and C. G. Schroer⁴

¹*Institut für Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Hoher Weg 8, D-06120 Halle/Saale, Germany*

²*Institut für Kristallzüchtung, Max-Born-Straße 2, D-12489 Berlin, Germany*

³*European Synchrotron Radiation Facility, BP 220, F-38043 Grenoble Cedex, France*

⁴*Institut für Strukturphysik, Technische Universität Dresden, Zellescher Weg 16, D-01069 Dresden, Germany*

(Received 10 April 2008; accepted 23 April 2008; published online 15 May 2008)

We report a scanning technique, which combines high resolution x-ray diffraction (in reciprocal space) along with a submicrometer spatial resolution (in real space). SiGe/Si(001) Stranski–Krastanow islands served here as a well investigated model system to check the limits of the developed method. A set of refractive silicon x-ray lenses focused the x-ray beam size down to a diameter of 200 nm (full width at half maximum), which enables scanning of *individual* micrometer-sized and even smaller islands. By illuminating diverse {111} island side facets, crystal truncation rods of different orientations were independently excited and thus became distinguishable in the scattering patterns. The reassembling of these locally resolved diffraction patterns coincides with both an integral measurement and a corresponding scattering simulation. © 2008 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.2929374]

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.2929374>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.2929374>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.2929374>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

4.2. Positionskorrelation und Zusammensetzung von SiGe-Inselensembles

Neben den auf einer Probenoberfläche vereinzelt liegenden SiGe-Inseln, können auch Ensembles aus mehreren geordneten Inseln gezüchtet werden. In dieser Arbeit wurden mit Nanofokus-HRHRD einzelne SiGe-Inselensembles bestehend aus bis zu vier Inseln untersucht, welche sich in der Flüssigphasenepitaxie um pyramidenförmige Substratvertiefungen angeordnet hatten. Eine elektronenmikroskopische Aufnahme derartiger Ensembles findet sich in der nachfolgend eingefügten Veröffentlichung [DHS⁺10], Fig. 1. Diese Inseln waren jeweils mit einer mittleren Inselbasislänge von 120 nm um eine Größenordnung kleiner als die Einzelinseln des vorherigen Kapitels 4.1.

Die Probenoberfläche wurde analog zum Experiment an der Einzelinsel abgerastert, während Beugungsbilder mit einem MAXIPIX-Flächendetektor aufgenommen wurden. Als fokussierende Optik kamen KB-Spiegel am Strahlrohr ID13 der ESRF zum Einsatz (siehe Kapitel 2.3) und der Strahlfokus betrug 250 nm (Halbwertsbreite) bei einer Photonenenergie von 12.4 keV . Der im Experiment beleuchtete Bereich der Probe war somit etwas kleiner als die räumliche Ausdehnung der Inselensembles selbst.

Die aufgenommenen RSM zeigten in der Umgebung des Si(004)-Reflexes linien- und wabenförmige Interferenzmuster, die mit Hilfe kinematischer Streurechnungen der Positionskorrelationsfunktion der Inseln in den Inselensembles zugeordnet werden konnten. Für nähere Informationen zu den dafür nötigen methodischen Fortschritten der Streusimulationen siehe Kapitel 3.2. So stellte sich heraus, dass das Beugungsbild von Inselformationen, die aus zwei Inseln bestehen, Oszillationen aufwies. Aus den Perioden ließen sich die Abstände der Inseln im Realraum errechnen, wohingegen der Neigungswinkel der Oszillationen auf die Orientierung der beleuchteten Inselpaare schließen ließ (vgl. Fig. 5(a,b) der Veröffentlichung). Wabenförmige Muster, siehe Fig. 5(c,d), wiesen auf Ensembles mit drei oder vier Inseln hin. So wie sich innerhalb einer Dreifach- oder Vierfach-Formation stets Inselpaare unterschiedlicher Orientierung finden lassen, kann die Wabenform dabei auch als eine Superposition zweier linienartiger Beugungsmuster betrachtet werden, die von Inselpaaren unterschiedlicher Orientierung herrühren.

Bei Formationen mit nur drei Inseln können die vertikale und horizontale Orientierung anhand von Halbwertsbreiten der Interferenzmaxima des Wabenmusters voneinander unterschieden werden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die laterale Verbreiterung einer Realraumstruktur sich im Beugungsbild durch eine laterale Verschmälerung der Beugungsmuster bemerkbar macht, vgl. Fig. 5(c) und (d). Eine Unterscheidung zwischen Ensembles mit einerseits drei und andererseits vier Inseln anhand eines Interferenzmusters nur eines einzelnen RSM ist hingegen nicht möglich. Dies ist nicht verwunderlich, da die Wabenmuster der Dreifach-Ensembles von einer Superposition mehrerer Wabenmuster unterschiedlich orientierter Dreifach-Ensembles praktisch nicht unterscheidbar sind. In der Bildsequenz in Fig. 4 konnte allerdings dennoch von einem Ensemble mit vier Inseln ausgegangen werden, da das Inselensemble mit dem fokussierten Röntgenstrahl abgerastert und sukzessive immer nur

ein gewisser Teil der Formation beleuchtet wurde: Im Falle von drei Inseln hätten so in zumindest einem Messschritt nur zwei Inseln beleuchtet werden und im Beugungsbild dabei Linienmuster erscheinen müssen²⁰.

Für die Auswertung der Positionskorrelation wurde lediglich der Si(004)-Reflex betrachtet. Dass dieser Reflex überhaupt die entsprechenden Interferenzmuster aufwies, ist auf Dehnungsfelder direkt unterhalb der SiGe/Si(001)-Inseln zurückzuführen. Diese prägen auch dem Substrat Informationen über die Position der einzelnen Inseln auf, wodurch die indirekte Bestimmung der Positionskorrelationsfunktion der Inseln möglich wurde. Auf den Einfluss von Dehnungsfeldern innerhalb des Substrates wird in Kapitel 4.4 und insbesondere 4.5 noch näher eingegangen. Ein SiGe-Reflex war im Verlauf dieses Experimentes und zunächst auch während der Auswertung der gemessenen Beugungsmuster nicht sichtbar. Erst aufwändige Mittelung über eine größere Anzahl an Messdaten zeigte später, dass auch extrem schwache Intensitäten des SiGe-Reflexes aufgenommen werden konnten. Dazu wurde über 38 Detektor-Bilder gemittelt, welche in der Umgebung des Si(004)-Reflex Wabenmuster aufwiesen, da diese Muster, wie zuvor dargelegt, auf Beleuchtung von SiGe-Inseln hindeuteten. Intensitäten in der Umgebung der $q_{(001)}$ -Achse des so entstandenen gemittelten Bildes wurden extrahiert und auf die $q_{(001)}$ -Achse projiziert, wobei nochmals über 40 Pixel-Reihen integriert wurde. Diese Prozedur wurde zum Vergleich analog für 38 Detektor-Bilder durchgeführt, die keine Interferenzmuster in der Umgebung des Si(004)-Reflexes zeigten. Ein Vergleich der so gewonnenen $q_{(001)}$ -Projektionen lässt in Abb. 4.2(a) ein lokales Intensitätsmaximum erkennen, das nur in der Kurve aus der Mittelung über Bilder mit strukturiertem Si(004)-Reflex zu verzeichnen ist.

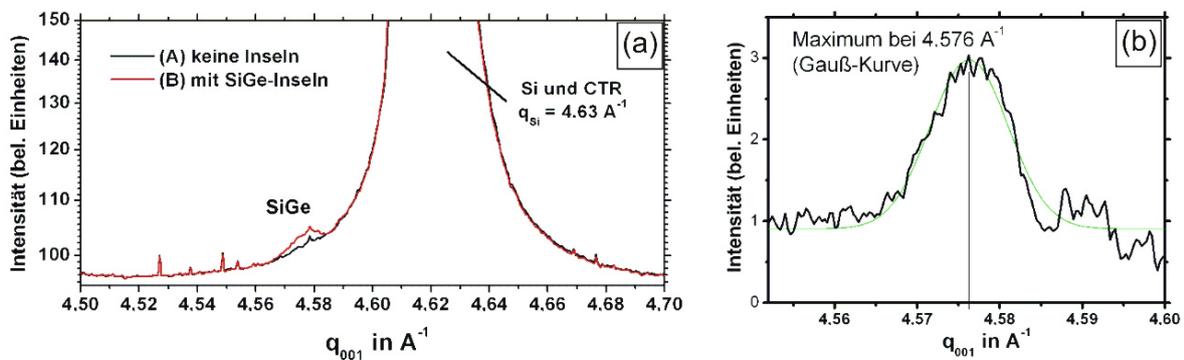


Abbildung 4.2.: (a) Extrahierte Intensitätskurven in der Umgebung des Si(004)-Reflexes bei Beleuchtung von SiGe-Inseln (A) und Substrat (B), gemittelt über jeweils 38 RSM unterschiedlicher Spotposition. (b) Differenzkurve der Kurven in (a) im Bereich des SiGe(004)-Reflexes.

Eine Differenzkurve, Abb. 4.2(b), liefert über eine Gauß-Anpassung einen Abszissenwert von 4.5763\AA^{-1} . Die Achsenwerte in reziproken Einheiten ergeben sich dabei aus den geometrischen Berechnungen der Lage des Flächendetektors im Raum und zwar unter densel-

²⁰Dieses Beispiel des Spot-Wanderns über ein Dreifach-Inselensemble konnte später in [DHP⁺12] Fig. 4, Kapitel 4.5, durch Streurechnungen bestätigt werden.

ben Bedingungen und Annahmen, die der Simulation zugrundeliegen. Normiert wurde auf die Lage des Si-Substratreflexes. Nach Gleichungen (2.8) und (2.9) kann über die ermittelte Lage des SiGe-Reflexes auf der $q_{(001)}$ -Achse auch der mittlere Germaniumgehalt errechnet werden. Mit den Gitterparametern des reinen Germaniums und Siliziums $a_{Ge} = 5.658 \text{ \AA}$ und $a_{Si} = 5.431 \text{ \AA}$ ergibt sich dabei ein Germaniumgehalt von $(26.8 \pm 2.0)\%$.

Diese Methode ist sehr sensibel auf kleinste Gitterparameterunterschiede, geht hier jedoch auch mit einer hohen Messunsicherheit einher, da die geometrische Lage des Flächendetektors im Experiment nicht exakt definiert ist²¹. Bereits eine Abweichung des Reflexmaximums von 2 Pixeln im detektierten Beugungsbild verändert den errechneten Germanium-Gehalt um gut einen halben Prozentpunkt²².

Um für die Intensitätskurven in Abb. 4.2 eine optimale Statistik zu erreichen, wurden auch Messdaten ausgewertet, die von unterschiedlichen Probenpositionen stammen. Abb. 4.3 hingegen zeigt Differenzkurven von einer Messung an einem einzelnen Inselensemble. Dazu wurde die in Fig. 4 der Veröffentlichung abgebildete Sequenz des Abrasterns eines SiGe-Inselensembles verwendet. Dabei konnte deutlich das Auftauchen und Verschwinden des SiGe-Intensitätsmaximums beobachtet werden.

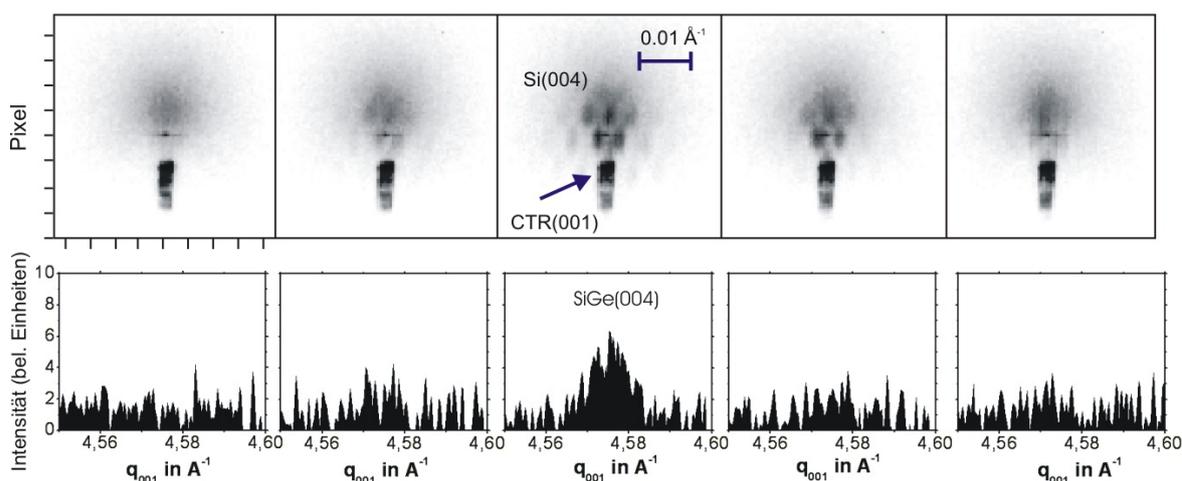


Abbildung 4.3.: Scan über ein SiGe-Inselensemble mit (a) Sequenz von RSM in der Umgebung des Si(004)-Reflexes und (b) zugehörige Intensität des SiGe(004)-Reflexes nach Integration über 40 Pixel-Reihen innerhalb eines einzelnen RSM und Untergrundabzug. Vgl. auch [DHS⁺10], Fig. 4.

Die Umgebung des SiGe(004)-Reflexes konnte mit sehr kontrastreicher Intensitätsskala aus dem Datensatz eines Bragg-Winkel-Scans sichtbar gemacht werden, Abb. 4.4(a).

²¹Zum damaligen Zeitpunkt existierte für den benötigten Nanofokus-Messaufbau noch kein Detektor-Arm, der eine exakte Justage des Flächendetektors auf den Beugungswinkel hätte gewährleisten können, sodass der Detektor manuell im Raum platziert werden musste.

²²Auch die Genauigkeit der Parameter für die reinen Kristalle a_{Ge} und a_{Si} hat einen großen Einfluss auf die Rechnung. Werden z.B. Werte $a_{Si} = 5.43 \text{ \AA}$ und $a_{Ge} = 5.65 \text{ \AA}$ verwendet, ergibt sich ein Germaniumgehalt von 28.2%, eine Rechnung mit auf hundertstel Ångström gerundetem Zwischenwert der Mischkristall-Gitterkonstante $a_{Si,Ge} = 5.49 \text{ \AA}$ liefert 26.0%.

Auch 0.2° vom (004)-Bragg-Winkel des Substrates entfernt dominiert dabei, neben dem CTR, die diffuse Streuung um den Si(004)-Substratreflex das Beugungsbild. Deutlich erkennbar ist jedoch auch das wabenartige Interferenzmuster, welches sowohl um den SiGe-Reflex in (a) als auch um den Si-Reflex (b) messbar ist. Der SiGe-Reflex erscheint dabei aufgrund der Insel-Seitenfacetten lateral verbreitert (siehe auch Kapitel 4.2).

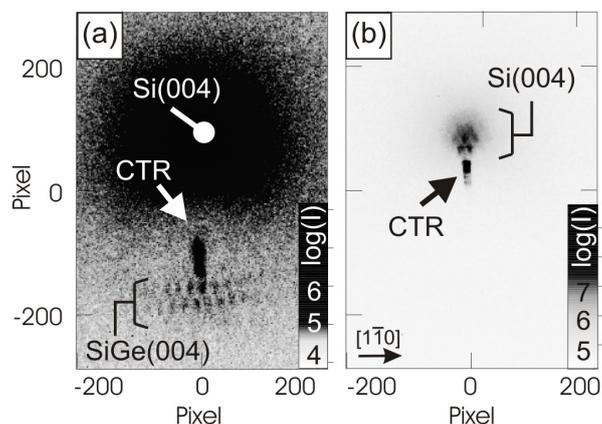


Abbildung 4.4.: Beugungsbilder desselben SiGe-Inselensembles bei Variation des Röntgenstrahl-Einfallswinkels. (a) RSM der Umgebung des SiGe(004)-Reflexes bei einem Einfallswinkel von 21.40° , (b) Umgebung des Si(004)-Reflexes bei 21.55° Einfallswinkel. Zu beachten ist in (a), dass zur Verbesserung der Erkennbarkeit der obere Bereich der Intensitätsskala um ca. drei Größenordnungen reduziert wurde.

APPLIED PHYSICS LETTERS 96, 133107 (2010)

X-ray nanodiffraction at individual SiGe/Si(001) dot molecules and its numerical description based on kinematical scattering theory

M. Dubslaff,¹ M. Hanke,^{1,a)} S. Schöder,² M. Burghammer,² T. Boeck,³ and J. Patommel⁴

¹Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, D-10117 Berlin, Germany

²European Synchrotron Radiation Facility, BP 220, F-38043 Grenoble Cedex, France

³Leibniz-Institut für Kristallzüchtung, Max-Born-Straße 2, D-12489 Berlin, Germany

⁴Institut für Strukturphysik, Technische Universität Dresden, Zellescher Weg 16, D-01069 Dresden, Germany

(Received 17 February 2010; accepted 4 March 2010; published online 30 March 2010)

Individual self-assembled SiGe/Si(001) dot molecules were investigated by scanning x-ray nanodiffraction with a beam size of 250 nm in diameter (full width at half maximum). The samples contain dot molecules with either one, two, three, or four dots. Different azimuthal configurations were measured and compared with simulated diffraction patterns. We have combined finite element calculations, kinematic scattering simulations, and experimental measurements to obtain information about lateral positional correlation as well as strain and germanium content within individual dot molecules. © 2010 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3373916]

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3373916>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3373916>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3373916>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

4.3. Laterale Spannungsrelaxation von InGaAs/GaAs(001)-QDM

Im Gegensatz zu „Punktmolekülen“, wie den zuvor untersuchten Ensembles aus Silizium-Germanium, kann es bei Quantenpunktmolekülen (engl. *quantum dot molecules*, QDM) zu Quanteneffekten kommen. In einem Quantenpunkt (engl. *quantum dot*, QD) führt die in alle drei Raumrichtungen begrenzte Ausdehnung zu diskreten Energiezuständen der Ladungsträger. Liegen in den QDM einzelne QD so nah beieinander, ist zusätzlich ein Tunneln der Ladungsträger von einem QD zum nächsten möglich. Untersucht wurden im Folgenden InGaAs-QDM, welche sich aus einem zentralen GaAs QD und bis zu sechs ihn umgebenden QD zusammensetzen. Die Anzahl und Anordnung der InGaAs QD hängt dabei vom Wachstumsstadium ab, vgl. Fig.1(a), 2(a), 3(a) der folgenden Veröffentlichung [HDS⁺09]. Die räumliche Ausdehnung der äußeren QD variierte, je nach Wachstumsstadium, von lateral $10 \times 10 \text{ nm}^2$ bis $40 \times 60 \text{ nm}^2$ bei einer Höhe von 10 bis 12 nm . Gezüchtet wurden die InGaAs/GaAs-QDM in einer Kombination aus Tröpfchenepitaxie und Stranski-Krastanov-Wachstum [LWS⁺06]. Homoepitaktisch bildeten sich dabei auf der Substratoberfläche zunächst GaAs-QD, welche anschließend als Nukleationspunkte für die äußeren InGaAs-QD dienten.

Auffällig ist bereits in der AFM²³-Abbildung die in $[\bar{1}10]$ - und $[110]$ -Richtung unterschiedliche Ausdehnung des QDM; des Weiteren ließen hochauflösende AFM-Aufnahmen in Kombination mit statistischen Auswertungen die Vermutung auf Seitenfacetten der einzelnen QD zu. Ziel der röntgendiffraktometrischen Untersuchungen war es nun, einerseits Informationen über Existenz und Art der Seitenfacetten zu gewinnen und andererseits ein Modell für das dreidimensionale Dehnungsfeld innerhalb der QDM zu entwickeln.

Laterale Dehnungsfelder können idealerweise mit Beugung bei streifendem Einfall (GID, siehe Kapitel 2.2) untersucht werden, da der Beugungsvektor in dieser Geometrie annähernd parallel zur Probenoberfläche verläuft. Ein weiterer Vorteil ist die hohe Oberflächensensitivität dieser Methode, die sich aus dem exponentiellen Abklingen des Wellenfeldes innerhalb der Probe ergibt.

Gemessen wurden für verschiedene QDM-Wachstumsstadien die symmetrischen Reflexe GaAs($\bar{2}20$) und GaAs(220) der *In-plane*-Richtungen $[\bar{1}10]$ und $[110]$. Die Messungen wurden am Strahlrohr ID10B der ESRF, Kapitel 2.4, bei einer Photonenenergie von 8 keV und Strahlgröße von $100 \mu\text{m}$ durchgeführt. Ein Vergleich der Beugungsbilder beider *In-plane*-Richtungen zeigte für jede Probe in der Umgebung des ($\bar{2}20$)-Reflexes eine radial verlängerte und um den (220)-Reflex eine angular verbreiterte Intensitätsverteilung, siehe Fig. 1(c,d), 2(c,d) und 3(d,e). Dies ist zunächst nicht verwunderlich, da das Beugungsbild stets die Fourier-transformierte Formfunktion eines beleuchteten Objektes im Realraum enthält. Denn damit führen lateral verkürzte (bzw. verlängerte) Objekte im Beugungsbild lateral zu einer größeren (bzw. kleineren) Intensitätsverteilung. Analoges gilt für vertikale Ausdehnungen. Eindrücklich wird dieser Zusammenhang auch in Fig. 3 der Veröffentlichung durch die

²³Rasterkraftmikroskop, engl. *atomic force microscope*

Fouriertransformation (b) des AFM-Bildes (a) gezeigt. Anhand der Messung eines Kleinwinkelstreubildes in der Nähe des Ursprungs des reziproken Raumes (GISAXS, siehe Kapitel 2.2) konnte jedoch gezeigt werden, dass Dehnungsfelder und nicht die Formasymmetrie der QDM für die verbreiterte Intensitätsverteilungen verantwortlich sind, Fig. 3(c). GISAXS ist sensitiv auf die Objektform, im Gegensatz zu GID aber nicht sensitiv auf Dehnung innerhalb der Objekte, wodurch ein Vergleich beider Messungen den Einfluss der Dehnungsfelder offenlegt. Diffuse Intensitäten bei kleineren q_{radial} -Werten im GID-Bild weisen auf größere Gitterparameter hin und sind als eine Relaxation der Verspannung zu interpretieren, die durch die Fehlpassung des InGaAs auf GaAs hervorgerufen wird.

Bei den gemessenen Proben ließ sich somit schlussfolgern, dass die pseudomorph verspannten InGaAs QDM entlang [110] (Querachse) stärker relaxiert sind als entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung (Längsrichtung des QDM). Dieser Befund dürfte darauf zurückzuführen sein, dass sich entlang der Querachse weniger Material im QDM befindet, das, wie im Falle der Längsachse, einer Relaxation entgegenstehen könnte. Der Ursprung der länglichen Form des initialen mittleren GaAs-QD ist in unterschiedlichen *In-plane*-Diffusionslängen zu suchen, die für das Wachstum von einzelnen InAs QD auf GaAs bekannt sind [SWM⁺07]. Auf diese Weise bestimmen Form und chemische Komposition ein komplexes Dehnungsfeld, wie es in Ergebnissen von FEM-Rechnungen an der Probe mit Sechsfach-InGaAs-QDM ersichtlich wird, Fig. 4. Im Einfluss der sich überlappenden Dehnungsfelder der InGaAs-QD erfährt auch der zentrale, homoepitaktisch und damit praktisch spannungsfrei gewachsene, GaAs-QD eine gewisse Verspannung, vgl. markierte negative und positive Verschiebungen Δy in Fig. 4(d) der Veröffentlichung.

Beugungssimulationen wurden am vorliegenden Modell erst im Zuge einer FEM-Modellverfeinerung durchgeführt, siehe auch [DHB⁺11] Fig. 3(b) im Kapitel 4.4. Ergänzend sei bereits an dieser Stelle in Abb. 4.5 das Ergebnis der Streusimulationen für GID-Streurechnungen des GaAs(220)- und GaAs($\bar{2}20$)-Reflexes sowie GISAXS eingefügt. In guter Übereinstimmung zur Messung kann auch hier noch einmal der Einfluss des Verschiebungsfeldes im Vergleich der GISAXS- und GID-Ergebnisse beider *In-plane*-Richtungen, Abb. 4.5(a) und (b) bzw. (c) und (d), nachvollzogen werden.

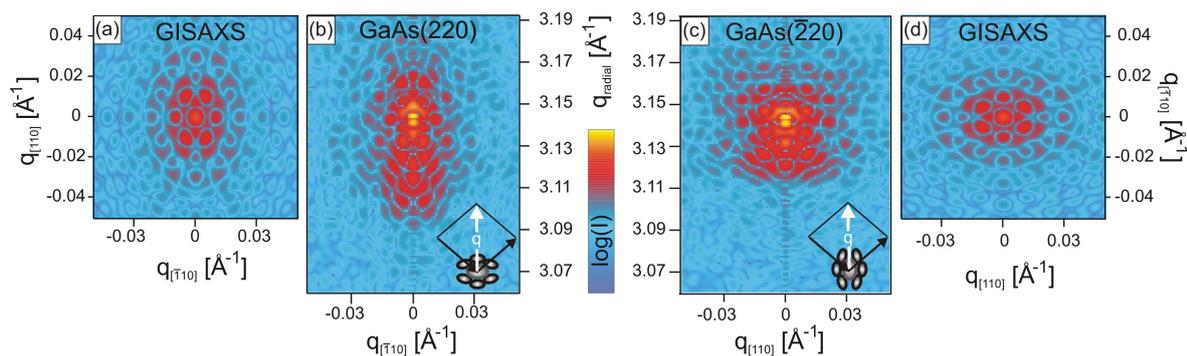


Abbildung 4.5.: (a) GISAXS-Simulation an sechsfach InGaAs-QDM, (b) GID-Simulation der Umgebung des GaAs(220)-Reflexes, (c) GID-Simulation der Umgebung des GaAs($\bar{2}20$)-Reflexes, (d) GISAXS erneut zum Vergleich für (c) mit $q_{[110]}$ in der Abszisse. Verwendet wurde für die Simulationsrechnungen das mit FEM ermittelte Verschiebungsfeld des Modells aus [DHB⁺11], Kapitel 4.4

Am selben Strahlrohr wurden auch HRXRD-Messungen an einer Probe mit sechs InGaAs-QDM durchgeführt, um vertikale Relaxation und vermutete Seitenfacetten zu untersuchen. Dabei konnten in der Umgebung des GaAs(004)-Reflexes jedoch keine Beugungsmuster oder diffuse Intensitätsverteilungen festgestellt werden, welche auf die InGaAs-QDM zurückzuführen wären. Als Grund kann das besonders geringe quantitative Verhältnis von Struktur- zu Substratmaterial und die geringe vertikale Relaxation der äußerst flachen QD angenommen werden. Eine Möglichkeit, dem ungünstigen Verhältnis der beleuchteten Materialien entgegenzuwirken und ein Hintergrund-RSM der Substratoberfläche zu erhalten, stellt die Messung mit nanofokussiertem Strahl dar. Der Spot entspricht dann auf der Probenoberfläche in etwa der Größe einzelner QDM. Die integrale HRXRD-Messung kann somit als ein Vorexperiment zum folgenden Nanofokus-Experiment in Kapitel 4.4 gesehen werden.

APPLIED PHYSICS LETTERS 95, 023103 (2009)

On the complex behavior of strain relaxation in (In,Ga)As/GaAs(001) quantum dot molecules

M. Hanke,^{1,a)} M. Dubsclaff,¹ M. Schmidbauer,² Zh. M. Wang,³ Yu. I. Mazur,³ P. M. Lytvyn,^{3,b)} J. H. Lee,⁴ and G. J. Salamo³

¹Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, D-10117 Berlin, Germany

²Leibniz-Institut für Kristallzüchtung, Max-Born-Straße 2, D-12489 Berlin, Germany

³Department of Physics, University of Arkansas, Fayetteville, Arkansas 72701, USA

⁴Department of Electrical Engineering, Kwangwoon University, Seoul 139-701, Republic of Korea

(Received 14 May 2009; accepted 20 June 2009; published online 13 July 2009)

A detailed growth scenario of surface quantum dot molecules (QDM) in the system (In,Ga)As/GaAs(001) has been investigated in terms of shape and elastic strain evolution. QDMs are grown by a combined approach using droplet epitaxy for initial homoepitaxial GaAs mounds, which subsequently serve as nucleation spots for surrounding (In,Ga)As surface quantum dots. Atomic force micrographs trace a detailed pathway toward the final QDM containing up to six quantum dots with perfect inherent symmetry. Synchrotron-based grazing incidence diffraction together with grazing incidence small angle x-ray scattering reveal a relaxation behavior, which for all growth stages comprises a strained lattice along $[\bar{1}10]$ and partial elastic relaxation along $[110]$. Numerical finite element calculations on the three-dimensional strain profile support the experimental findings. © 2009 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.3176409]

Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3176409>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3176409>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3176409>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

4.4. Positionskorrelation und Zusammensetzung von InGaAs/GaAs(001)-QDM

Die Untersuchung von InGaAs/GaAs(001)-Quantenpunktmolekülen mit Nanofokus-HRHRD stellte aufgrund ihrer äußerst geringen Ausdehnung auf der Probenoberfläche und der sehr geringen Streuvolumina methodisch eine besondere Herausforderung dar. Zum einen war ein stärker fokussierter Strahl nötig, zum anderen ist ein Auffinden oder Selektieren derartiger Strukturen auf der Probenoberfläche mit Röntgen-Fluoreszenz-Mikroskopie (Kapitel 4.1) oder optischen Methoden ausgeschlossen. In dem im Folgenden diskutierten Experiment wurde aus diesem Grund, wie in Kapitel 4.2, auf Abrastern der Probe bei eingestellter Bragg-Bedingung des Substrates zurückgegriffen.

Untersucht wurde eine Probe mit QDM aus sechs InGaAs-Quantenpunkten am Strahlrohr ID13 der ESRF bei einer Photonenenergie von 15.25 keV . Der Strahlfokus betrug lateral und vertikal 100 nm Halbwertsbreite²⁴. Das in Kapitel 4.3 dargestellte FEM-Modell zu diesen Strukturen wurde hinsichtlich seiner geometrischen Eigenschaften und chemischen Komposition (Indium-Gehalt) iterativ verfeinert, vgl. Fig. 2 der folgenden Veröffentlichung [DHB⁺11]. Dafür wurden zunächst GID-Streusimulationen von GaAs(220) sowie GaAs($2\bar{2}0$) angefertigt und mit Messungen einer früheren Strahlzeit verglichen. Ein Indiumgehalt von $(30 \pm 5)\%$ erbrachte hierbei die beste Übereinstimmung von Messung und Simulation der diffusen Intensität, Fig. 3(a,b). Nach Weiterentwicklung der Streurechnungen speziell für Nanofokus-HRHRD ließ sich das Beugungsbild eines von einem Nanospot beleuchteten QDM simulieren, siehe Fig. 4(b,c). Für die Simulation des nanofokussierten Spots wurde eine ptychographische Aufnahme²⁵ des Strahlprofils dieser Strahlzeit verwendet. Auf das Simulationsverfahren wird ausführlicher im folgenden Kapitel 4.5 eingegangen.

In der Simulation und der Messung an den InGaAs-QDM zeigten sich Interferenzmuster in der Umgebung des GaAs(004)-Reflexes, die anhand der Nanofokus-Streurechnungen den QDM zugeordnet werden konnten. Werden die RSM, entsprechend der zugehörigen Spot-Positionen der Messung, in einem Feld angeordnet, erhält man ein indirektes Abbild der Probenoberfläche. Fig. 4(a) der Veröffentlichung zeigt einen Ausschnitt einer solchen Darstellung. Die Auszählung der vermutlich getroffenen QDM in dem so gewonnenen Abbild der Probe ergab eine mittlere QDM-Dichte auf der Probenoberfläche von $2.5/\mu\text{m}^2$. Dass die QDM tatsächlich die Ursache der auftretenden Interferenzmuster darstellen, wird auch bekräftigt durch einen Vergleich mit der aus AFM-Aufnahmen ermittelten QDM-Dichte von ebenfalls $2.5/\mu\text{m}^2$. Bemerkenswert ist, dass trotz des sehr hohen Photonenflusses im $100 \times 350 \text{ nm}^2$ Spot von 10^8 Photonen pro Sekunde die detektierte Intensität der Interferenzmuster mit weniger als 20 cps außerordentlich gering ausfällt. Dies verdeutlicht auch die Notwendigkeit hoher Primärstrahlintensitäten und hocheffektiver, sensitiver Detektoren²⁶ für die Experimente mit Nanofokus-HRHRD, da Messdauern an einer Spot-Position auf der

²⁴Der Spot auf der Probenoberfläche ist durch den „footprint“-Effekt in [110]-Richtung um den Faktor 3.5 vergrößert, siehe Kapitel 2.1, Abb. 2.1.

²⁵siehe Kapitel 2.3.

²⁶Zum Einsatz kam als Flächendetektor ein Einzelphotonenzähler, MAXIPIX, siehe Kapitel 2.4.

Probenoberfläche aus Stabilitätsgründen nur begrenzt verlängerbar sind. Das Beugungsbild (b) stammt von einem einzigen QDM, das in (a) durch eine rechteckige Markierung hervorgehoben wurde. Zur Verbesserung der Messstatistik wurde in (b) über Einzelbilder mit insgesamt einer Messdauer von 9.2 Minuten gemittelt. Zudem wurde ein ebenso gemittelt Beugungsbild ohne Interferenzmuster als Untergrund abgezogen (dies erklärt in (b) auch den negativen Intensitätswert an Position des CTR)²⁷.

Aus den Abständen $y_1 = 0.108 \text{ nm}^{-1}$ und $y_2 = 0.055 \text{ nm}^{-1}$ der Interferenzmuster in der gemessenen reziproken Gitterkarte, Fig. 4(b), lassen sich mit $\Delta y = \frac{2\pi}{\Delta q}$ Realraum-Abstände $y'_1 = 58 \text{ nm}$ und $y'_2 = 114 \text{ nm}$ berechnen und den Distanzen zwischen den einzelnen InGaAs-Quantenpunkten in $[1\bar{1}0]$ -Richtung zuordnen, vgl. theoretische Werte in Fig. 2(a). Der Abstand $xz = 0.06 \text{ nm}^{-1}$ (im Realraum $xz' = 105 \text{ nm}$) in Fig. 4(b) ist sowohl durch die Positionskorrelation in $[110]$ -Richtung als auch in $[001]$ -Richtung bestimmt. Hier zeigte die Simulation einen deutlich abweichenden Wert von $xz = 0.15 \text{ nm}^{-1}$ ($xz' = 42 \text{ nm}$), sodass davon ausgegangen werden kann, dass das Modell der QDM noch weiter zu verfeinern ist.

²⁷Die Intensität des CTR ist im Beugungsbild des flachen Substrates größer als bei Beleuchtung der aufgewachsenen QDM-Nanostruktur. Als Nullintensität wurde ein Grauwert gewählt, siehe Skala Fig. 4(b).

In(Ga)As/GaAs(001) quantum dot molecules probed by nanofocus high resolution x-ray diffraction with 100 nm resolution

M. Dubslaff,¹ M. Hanke,^{1,a)} M. Burghammer,² S. Schöder,² R. Hoppe,³ C. G. Schroer,³ Yu. I. Mazur,⁴ Zh. M. Wang,⁴ J. H. Lee,^{4,5} and G. J. Salamo⁴

¹Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, D-10117 Berlin, Germany

²European Synchrotron Radiation Facility, BP 220, F-38043 Grenoble Cedex, France

³Institut für Strukturphysik, Technische Universität Dresden, Zellescher Weg 16, D-01069 Dresden, Germany

⁴Department of Physics, University of Arkansas, Fayetteville, Arkansas 72701, USA

⁵School of Electronics and Information, Kwangwoon University, Nowon-gu, Seoul 139-701, South Korea

(Received 8 March 2011; accepted 4 May 2011; published online 24 May 2011)

In(Ga)As quantum dots, which laterally self-assemble into quantum dot molecules, have been studied by scanning x-ray nanodiffraction, finite element calculations and subsequent kinematical diffraction simulations. X-ray beam sizes of 100 nm enable small scattering volumes comparable to the object size at extremely high local flux densities ($\approx 10^4$ photons nm⁻² s⁻¹). By that bulk contributions to the scattering are effectively reduced. Area maps of various individual quantum dot molecules have been measured, whereas the diffraction patterns therein reveal spatially resolved information about the inter quantum dot position correlation function. © 2011 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3593960]

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3593960>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3593960>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

**Die vollständige Publikation ist abrufbar unter
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3593960>. Aus rechtlichen Gründen ist eine
erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung der Publikation an
dieser Stelle verzichtet wurde.**

4.5. Streusimulationen für Nanofokus-HRXRD (akzeptiert bei Nanoscale Res. Lett.)

Es wurde eine Methode entwickelt, den fokussierten Strahlspot in den Streurechnungen zu simulieren. Diese Herangehensweise ermöglicht insbesondere die Separation der einzelnen Einflüsse wie Form, Positionskorrelation und Dehnungsfelder auf die Beugungsbilder. Die Simulation des Strahlspots wurde mit der Einführung eines Wichtungsfaktors $0 \leq w_n \leq 1$ für jeden Streuer n realisiert, wobei für nicht beleuchtete Streuer $w_n = 0$ gesetzt wird und für beleuchtete Streuer w_n Werte größer null annimmt. Das Intensitätsmaximum des Spots liegt bei $w_n = 1$. In den Streurechnungen können auf diese Weise all jene Streuer des Modells selektiert werden, die vom fokussierten Strahl beleuchtet werden und nur diese gehen in die Rechnung ein. Physikalisch gesehen entsprechen die w_n den Amplituden der gestreuten Welle.

Für die Simulation kann eine beliebige künstlich erzeugte Spotform oder ein experimentell gewonnenes Strahlprofil der tatsächlichen Messung verwendet werden. Letzteres zu bestimmen, ist mittels Ptychographie (Kapitel 2.3) möglich, wenn die verwendete Strahlung hinreichend kohärent ist. In Fig. 1(a) des nachfolgend eingefügten Manuskriptes²⁸ [DHP⁺ 12] ist ein solches zweidimensionales Schnittbild durch die Strahlkaustik in der Fokalebene dargestellt. Darin geben die Pixel-Helligkeitswerte jeweils die Strahlamplitude am jeweiligen Punkt wieder, während die Phase in den Farbtonwerten der Pixel kodiert ist.

Unter Beachtung des Strahl-Einfallswinkels, des zugehörigen Azimuts und der Spotgröße wird das dreidimensionale Modell der Probe auf die Ebene des zweidimensionalen Strahlprofils projiziert und jedem Streuer darin der entsprechende Wichtungsfaktor w_n zugewiesen. Eine Skizze der geometrischen Bedingungen sowie eine ausführliche Herleitung der für die Simulation verwendeten Gleichungen befinden sich in den Kapiteln 3.3 und A.1. Ein Abschnitt zur programmtechnischen Implementierung wurde im Anhang A.2 eingefügt.

Das Simulationsverfahren wurde zunächst auf die in Kapitel 4.1 diskutierten $1.2 \mu\text{m}$ großen SiGe-Einzelinseln angewendet. Analog zum Experiment konnte dabei das Abrastern des 200-nm-Spots auf der Probenoberfläche nachvollzogen werden. Die berechneten Beugungsbilder zeigen in Fig. 3(c) des Manuskriptes, in Übereinstimmung mit dem experimentellen Ergebnis, die Schnitte von Gitterabbruchstäben der $\{111\}$ -Seitenfacetten sowie der (001)-Deckfacette einer SiGe-Insel. Die Spotposition wird in Fig. 3(a) und (b) durch Abbildung der Wichtungsfaktoren w_n der Streuer an der Modell-Probenoberfläche verdeutlicht.

Auch die experimentellen Ergebnisse der in Kapitel 4.2 präsentierten Messungen an SiGe-Inselensembles konnten mit diesem Simulationsverfahren bestätigt werden. Es wurde das in Kapitel 4.2 erläuterte Szenario eines Scans über ein Dreifach-Ensemble simuliert, siehe Fig. 4 des Manuskriptes. Hier zeigte sich, dass das Auftreffen des 250 nm großen Spots auf

²⁸Anmerkung zu dieser veröffentlichten Dissertationsschrift: In der Endversion des hier beschriebenen Artikels (DOI:10.1186/1556-276X-7-553) musste die Nummerierung von Fig. 1 und Fig. 2 aus formalen Gründen getauscht werden Fig. 1 entspricht nun also Fig. 2 und umgekehrt.

zunächst nur zwei Inseln zu diagonalen Oszillationen, anschließend bei Auftreffen auf alle drei Inseln Wabenmuster und schließlich wieder linienartige Oszillationen aufweist, siehe Fig. 4(c) in allen drei Spalten. Die entsprechende Spotposition wird in Fig. 4(a) und (b), analog zu Fig. 3, durch Abbildung der Wichtungsfaktoren w_n an der Modell-Probenoberfläche dargestellt.

Der Verlauf des Strahls im Substrat und der Nanostruktur wird in Fig. 5 des Manuskriptes veranschaulicht. Es handelt sich um einen vertikalen Schnitt durch das Verschiebungsfeld innerhalb eines SiGe-Inselensembles (a) und einen Schnitt durch den Datensatz der Wichtungsfaktoren w_n (b). Der Strahlverlauf wird neben der Spotposition vor allem durch den Einfallswinkel und den Strahldurchmesser bestimmt. Erst im Falle deutlich größerer Strukturen gewinnt auch die Eindringtiefe des Röntgenstrahls an Bedeutung. Sie beträgt senkrecht zur Oberfläche beispielsweise bei einem Einfallswinkel von 20° und einer Photonenenergie von 12 keV in Silizium $80\ \mu\text{m}$. Da das Verschiebungsfeld in den SiGe-Inseln sich auch innerhalb des Substratmaterials fortsetzt, wird dem Substrat die Information über die Positionen der Inseln aufgeprägt. Dies kann anhand der Streusimulationen eines Scans über ein Dreifach-Inselensemble in Abb. 4.6(a) nachvollzogen werden: Dort trifft ein 250 nm Strahl auf nur zwei Inseln des Ensembles, beleuchtet jedoch im Substrat das Verschiebungsfeld unterhalb aller drei Inseln. Das Beugungsbild weist infolgedessen im Substratreflex ein Interferenzmuster der Positionskorrelation von drei Inseln auf, während der SiGe-Reflex die Positionskorrelation von nur zwei Inseln sichtbar werden lässt. Zum Vergleich zeigt Abb. 4.6(b) die Situation mit Beleuchtung aller drei Inseln, wo dann beide Substratreflexe das Wabenmuster zeigen. In (c) trifft der Strahl gerade noch alle drei Inseln, verfehlt aber im Substrat die erste Insel, sodass nur der Substratreflex Linienmuster aufweist.

Der Einfluss der Seitenmaxima des Strahlprofiles, Fig. 1 des Manuskriptes²⁸, auf die RSM wurde anhand Streusimulationen an ausgewählten Strahlpositionen demonstriert. Hierfür wurden die unter Verwendung des ptychographischen Strahlprofiles durchgeführten Simulationen in Abb. 4.6(d-f) mit Abb. 4.6(a-c) verglichen, deren Simulationen ein kreisrundes Profil²⁹ ohne Seitenmaxima zugrunde lag. Ein Bild des verwendeten Strahlprofiles ist jeweils rechts oben in jedem RSM eingefügt. Während in der Umgebung des SiGe(004)-Reflexes in (a) und (c) noch deutlich Oszillationen erkennbar sind, tritt an dieser Stelle in (d) und (f) nun verstärkt eine wabenförmige Struktur hervor. Dies weist bei vorhandenen Seitenmaxima auf die Beleuchtung von stets allen drei Inseln hin.

²⁹Aus Gründen der Vergleichbarkeit wurde das kreisrunde Strahlprofil dem Zentrum des ptychographisch gemessenen Profilbildes entnommen.

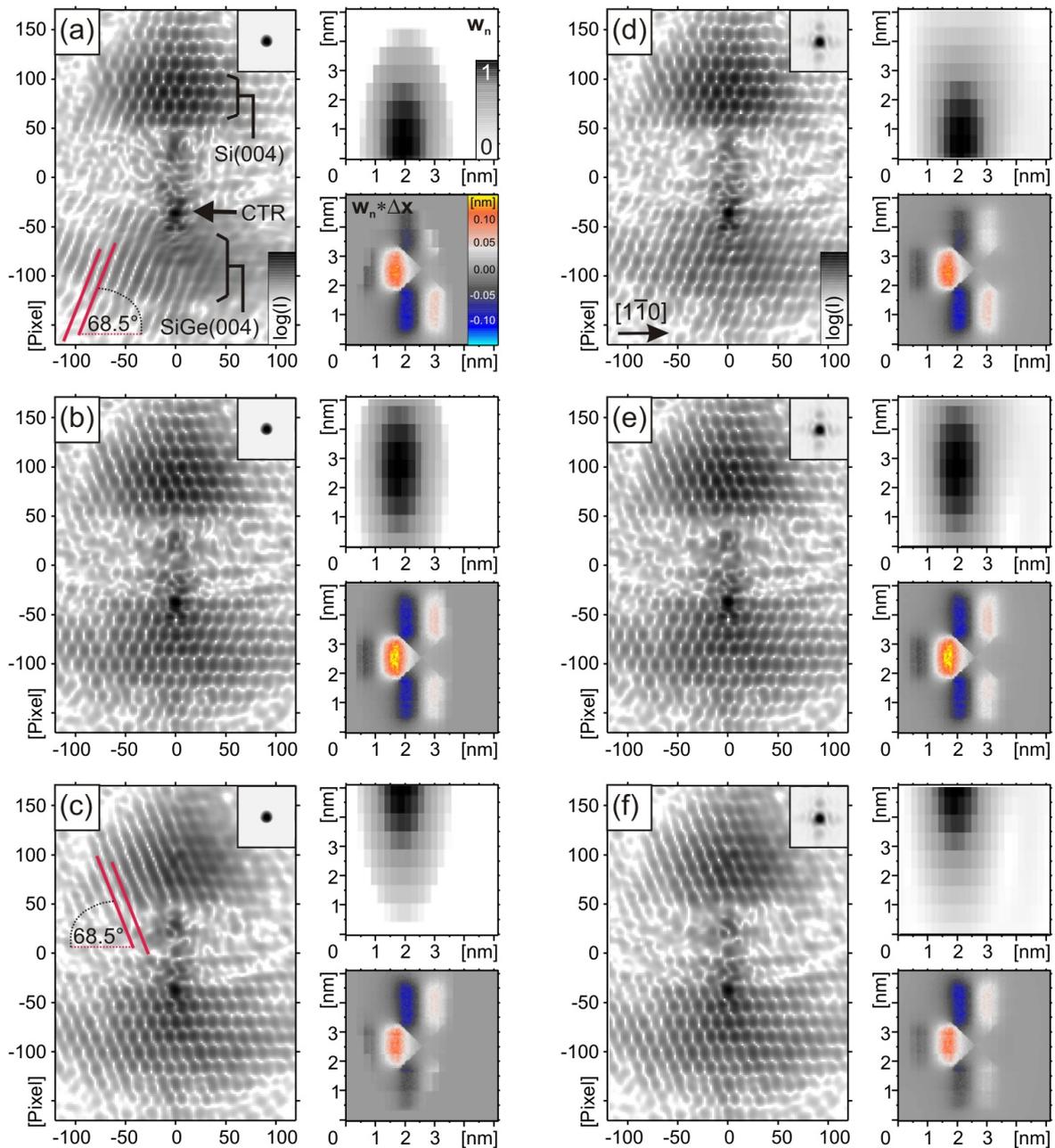


Abbildung 4.6.: Simulationen der Umgebung des Si(004) und SiGe(004)-Reflexes an einem Inselensemble bestehend aus drei SiGe/Si(001)-Inseln. (a) Ein kreisrunder Strahl trifft zwei der drei Inseln, beleuchtet im Substrat jedoch das Verschiebungsfeld aller drei Inseln, (b) der Strahl beleuchtet das gesamte Inselensemble einschließlich des Verschiebungsfeldes aller drei Inseln, (c) der Strahl beleuchtet das gesamte Inselensemble, trifft aber lediglich das Verschiebungsfeld von zwei Inseln. (d-f) analog (a-c) jedoch mit einem Strahlprofil inkl. Seitenmaxima. Neben jedem RSM verdeutlichen Abbildungen der Wichtungsfaktoren die jeweiligen Spotpositionen (nähere Erklärung siehe Text).

Dass sich bei vollständiger Beleuchtung einer Nanostruktur die Interferenzmuster eines Substrat-Reflexes und eines Reflexes des Strukturmaterials gleichen, wurde am Beispiel von Streusimulationen an InGaAs/Ga(001) QDM untersucht. Dazu wurden nach Durchführung der FEM-Rechnungen die Modelldaten oberhalb der Substratoberfläche entfernt. Streurechnungen an dem verbleibenden Substratteil zeigten eine Abschwächung der Intensität des InGaAs(004)-Reflexes, wiesen aber das gleiche Muster der Positionskorrelation auf wie das RSM des kompletten Modells inklusive der Nanostruktur. Die Untersuchung der Positionskorrelation zwischen den QD kann also direkt durch Messen der Bragg-Reflexe des QDM-Materials oder indirekt durch Messung der Reflexe des von den QDM beeinflussten Substratmaterials durchgeführt werden. Dass die Intensität zwischen dem InGaAs(004)- und dem GaAs(004)-Reflex nach Entfernen der QDM nicht vollständig verschwindet, kann mit dem stetigen Verschiebungsfeld erklärt werden, das zu vergrößerten Gitterparametern im Substrat und an der Grenzfläche zwischen Substrat und QDM führt. Diese Resultate ergeben sich ebenso für Rechnungen an Modellen der SiGe/Si(001)-Inselensembles mit abgeschnittenen SiGe-Inseln. Im Gegensatz zu dem Probensystem der SiGe-Inselensembles, welches pyramidenförmige Vertiefungen im Substrat aufweist, erhält man hier jedoch nach Abschneiden der Quantenpunkte im Modell einen Datensatz, der nicht durch Formvariationen wie beispielsweise Vertiefungen gestört wird.

Scanning x-ray nanodiffraction: from the experimental approach towards spatially resolved scattering simulations

Martin Dubsloff*¹ Michael Hanke¹ Jens Patommel² Robert Hoppe² Christian G. Schroer², Sebastian Schöder³ and Manfred Burghammer³

¹Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, D-10117 Berlin, Germany

²Technische Universität Dresden, Institut für Strukturphysik, Zellescher Weg 16, D-01069 Dresden, Germany

³European Synchrotron Radiation Facility, BP 220, F-38043 Grenoble Cedex, France

Email: Martin Dubsloff* - dubsloff@pdi-berlin.de; Michael Hanke - hanke@pdi-berlin.de; Jens Patommel - patommel@physik.tu-dresden.de; Robert Hoppe - Robert.Hoppe@mailbox.tu-dresden.de; Christian G. Schroer - christian.schroer@tu-dresden.de; Sebastian Schöder - schoeder@synchrotron-soleil.fr; Manfred Burghammer - burgham@esrf.fr;

*Corresponding author

Abstract

An enhancement on the method of x-ray diffraction simulations for applications using nanofocused hard x-ray beams is presented. We combine finite element method, kinematical scattering calculations, and a spot profile of the x-ray beam to simulate the diffraction of definite parts of semiconductor nanostructures. The spot profile could be acquired experimentally by x-ray ptychography. Simulation results are discussed and compared with corresponding x-ray nanodiffraction experiments on single SiGe dots and dot molecules.

68.65.Hb, 61.05.C-

Keywords: quantum dots; quantum dot molecules; x-ray nanodiffraction; x-ray scattering simulation

Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter <http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553> (DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser Stelle verzichtet wurde.

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

**Das mittlerweile erschienene Manuskript ist in seiner Endversion abrufbar unter
<http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/553>
(DOI:10.1186/1556-276X-7-553). Aus rechtlichen Gründen ist eine erneute
Veröffentlichung nicht zulässig, sodass auf die Einbindung des Manuskriptes an dieser
Stelle verzichtet wurde.**

Literaturverzeichnis

- [Ame72] American Institute of Physics. *American Institute of Physics Handbook*. McGraw-Hill, Inc., 1972.
- [ANM11] J. Als-Nielsen and D. McMorrow. *Elements of Modern X-ray Physics*. John Wiley & Sons, Ltd, 2011.
- [BDP⁺09] A. Biermanns, A. Davydok, H. Paetzelt, A. Diaz, V. Gottschalch, T. H. Metzger, and U. Pietsch. Individual GaAs nanorods imaged by coherent x-ray diffraction. *Jour. Synch. Rad.*, 16(6):796–802, 2009.
- [CR] Cluster-Rechner. 4x AMD Opteron Quadcore 2.2 GHz, 128 GB Arbeitsspeicher, Linuxsystem SLES 9.
- [DHB⁺11] M. Dubslaff, M. Hanke, M. Burghammer, S. Schöder, R. Hoppe, C. G. Schroer, Yu. I. Mazur, Zh. M. Wang, J. H. Lee, and G. J. Salamo. In(Ga)As/GaAs(001) quantum dot molecules probed by nanofocus high resolution x-ray diffraction with 100 nm resolution. *Appl. Phys. Lett.*, 98:213105, 2011.
- [DHP⁺12] M. Dubslaff, M. Hanke, J. Patommel, R. Hoppe, C. G. Schroer, S. Schöder, and M. Burghammer. The scanning x-ray nanospot in diffraction simulation and experiment. *akzeptiert bei Nanoscale Res. Lett.*, 2012.
- [DHS⁺10] M. Dubslaff, M. Hanke, S. Schöder, M. Burghammer, T. Boeck, and J. Patommel. X-ray nanodiffraction at individual SiGe/Si(001) dot molecules numerical description based on kinematical scattering theory. *Appl. Phys. Lett.*, 96:133107, 2010.
- [DMT⁺10] M. Dierolf, A. Menzel, P. Thibault, Ph. Schneider, C. M. Kewish, R. Wepf, O. Bunk, and F. Pfeiffer. Ptychographic X-ray computed tomography at the nanoscale. *Nature*, 467:436–439, 2010.
- [DNZ02] C. David, B. Nöhammer, and E. Ziegler. Wet etching of linear fresnel zone plates for hard x-rays. *Microelectron. Eng.*, 61:987, 2002.
- [FM10] J. Falta and Th. Möller. *Forschung mit Synchrotronstrahlung*. Vieweg+Teubner Verlag, 2010.
- [GMM⁺11] J. Gulden, S. O. Mariager, A. P. Mancuso, O. M. Yefanov, J. Baltser, P. Krogsrup, J. Patommel, M. Burghammer, R. Feidenhans'l, and I. A. Vartanyants. Coherent X-ray nanodiffraction on single GaAs nanowires. *Phys. Stat. Sol. a*,

- 208(11):2495–2498, 2011.
- [HDB⁺95] V. Holý, A. A. Darhuber, G. Bauer, P. D. Wang, Y. P. Song, C. M. Sotomayor Torres, and M. C. Holland. Elastic strains in GaAs/AlAs quantum dots studied by high resolution x-ray diffraction. *Phys. Rev. B*, 52:8348, 1995.
- [HDS⁺08] M. Hanke, M. Dubsloff, M. Schmidbauer, T. Boeck, S. Schöder, M. Burghammer, C. Riekkel, J. Patommel, and C. G. Schroer. Scanning x-ray diffraction with sub- μm spatial resolution. *Appl. Phys. Lett.*, 92:193109, 2008.
- [HDS⁺09] M. Hanke, M. Dubsloff, M. Schmidbauer, Zh. M. Wang, Yu. I. Mazur, P. M. Lytvyn, J. H. Lee, and G. J. Salamo. On the complex behavior of strain relaxation in (In,Ga)As/GaAs(001) quantum dot molecules. *Appl. Phys. Lett.*, 95:023103, 2009.
- [Hop69] W. Hoppe. Beugung im inhomogenen primärstrahlwellenfeld. iii. amplituden- und phasenbestimmung bei unperiodischen objekten. *Acta Cryst.*, 25:508, 1969.
- [HSG⁺04] M. Hanke, M. Schmidbauer, D. Grigoriev, H. Raidt, P. Schäfer, R. Köhler, A.-K. Gerlitzke, and H. Wawra. SiGe/Si(001) Stranski-Krastanow islands by liquid-phase epitaxy: Diffuse x-ray scattering versus growth observations. *Phys. Rev. B*, 69:075317, 2004.
- [HSK⁺04] M. Hanke, M. Schmidbauer, R. Köhler, F. Syrowatka, A.-K. Gerlitzke, D. Grigoriev, and T. Boeck. Aspect ratio of liquid phase epitaxial SiGe/Si(001) islands as probed by high resolution x-ray diffraction. *Appl. Phys. Lett.*, 84:5228, 2004.
- [KB48] P. Kirkpatrick and V. Baez. A study in diffraction microscopy with special reference to x-rays. *J. Opt. Soc. Am.*, 38:766, 1948.
- [Kit06] Ch. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*, Seiten 13–15, 34ff. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2006.
- [LCS⁺01] X. Llopart, M. Campbell, D. San Segundo, E. Pernigotti, and R. Dinapoli. Medipix2, a 64k pixel read out chip with 55 μm square elements working in single photon counting mode. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2001 IEEE*, volume 3, Seiten 1484 – 1488 vol.3, 2001.
- [LST⁺99] B. Lengeler, C. G. Schroer, J. Tümmeler, B. Benner, M. Richwin, A. Snigirev, I. Snigireva, and M. Drakopoulos. Imaging by parabolic refractive lenses in the hard x-ray range. *Jour. Synchr. Rad.*, 6:1153, 1999.
- [LWS⁺06] J. H. Lee, Zh. M. Wang, N. W. Strom, Yu. I. Mazur, and G. J. Salamo. In-GaAs quantum dot molecules around self-assembled GaAs nanomound templates. *Appl. Phys. Lett.*, 89:202101, 2006.
- [Mad04] O. Madelung. *Semiconductors: Data Handbook, 3rd edition*. SpringerVerlag, 2004.

- [Mas11] W. Massa. *Kristallstrukturbestimmung*, Seite 89. Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [MSC03] MSC Software Corporation. *MSC.Marc Introductory Course*. http://www.rrzn.uni-hannover.de/fileadmin/aws_dok/msc/docs/marc/mar101/mar101.pdf, 2003.
- [MSC08] MSC Software Corporation. *MSC.Marc and Mentat User's Guide 2008r1*, 2008.
- [NR98] P. D. Nellist and J. M. Rodenburg. Electron ptychography. i. experimental demonstration beyond the conventional resolution limits. *Acta Cryst.*, 54:49–60, 1998.
- [PKW⁺98] C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, and A. Zunger. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. *J. Appl. Phys.*, 83(5):2548–2554, 1998.
- [RHC⁺07] J. M. Rodenburg, A. C. Hurst, A. G. Cullis, B. R. Dobson, F. Pfeiffer, O. Bunk, C. David, K. Jefimovs, and I. Johnson. Hard-x-ray lensless imaging of extended objects. *Phys. Rev. Lett.*, 98:034801, 2007.
- [Rob86] I. K. Robinson. Crystal truncation rods and surface roughness. *Phys. Rev. B*, 33:3830, 1986.
- [SBF⁺08] C. G. Schroer, P. Boye, J. M. Feldkamp, J. Patommel, A. Schropp, A. Schwab, S. Stephan, M. Burghammer, S. Schöder, and C. Riekkel. Coherent x-ray diffraction imaging with nanofocused illumination. *Phys. Rev. Lett.*, 101:090801, 2008.
- [SBF⁺10] A. Schropp, P. Boye, J. M. Feldkamp, R. Hoppe, J. Patommel, D. Samberg, S. Stephan, K. Giewekemeyer, R. N. Wilke, T. Salditt, J. Gulden, A. P. Mancuso, I. A. Vartanyants, E. Weckert, S. Schöder, M. Burghammer, and C. G. Schroer. Hard x-ray nanobeam characterization by coherent diffraction microscopy. *Appl. Phys. Lett.*, 96:091102, 2010.
- [SBG⁺11] A. Schropp, P. Boye, A. Goldschmidt, S. Hönig, R. Hoppe, J. Patommel, C. Rake, D. Samberg, S. Stephan, S. Schöder, M. Burghammer, and C. G. Schroer. Non-destructive and quantitative imaging of a nano-structured microchip by ptychographic hard x-ray scanning microscopy. *J. Microscopy*, 241:9–12, 2011.
- [SKP⁺05] C. G. Schroer, O. Kurapova, J. Patommel, P. Boye, J. M. Feldkamp, B. Lengeler, M. Burghammer, C. Riekkel, L. Vincze, A. van der Hart, and M. Kücheler. Hard x-ray nanoprobe based on refractive x-ray lenses. *Appl. Phys. Lett.*, 87:124103, 2005.
- [SKSL96] A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, and B. Lengeler. A compound refractive lens

- for focusing high-energy x-rays. *Nature*, 384:49–51, 1996.
- [STS⁺09] L. Spieß, G. Teichert, R. Schwarzer, H. Behnken, and Ch. Genzel. *Moderne Röntgenbeugung*, Seiten 81–89. Vieweg+Teubner Verlag, 2009.
- [SWM⁺07] M. Schmidbauer, Zh. M. Wang, Yu. I. Mazur, P. M. Lytvyn, G. J. Salamo, D. Girgoriev, P. Schäfer, R. Köhler, and M. Hanke. Initial stages of chain formation in a single layer of (In,Ga)As quantum dots grown on GaAs (100). *J. Appl. Phys.*, 91:093110, 2007.
- [TDM⁺08] P. Thibault, M. Dierolf, A. Menzel, O. Bunk, C. David, and F. Pfeiffer. High-resolution scanning x-ray diffraction microscopy. *Science*, 321(5887):379–382, 2008.
- [War90] B. E. Warren. *X-ray diffraction*, Seiten 31–38. Dover Publications Inc., 1990.
- [WSH⁺00] Th. Wiebach, M. Schmidbauer, M. Hanke, H. Raidt, R. Köhler, and H. Wawra. Strain and composition in SiGe nanoscale islands studied by x-ray scattering. *Phys. Rev. B*, 61(8):5571, 2000.
- [YYM⁺03] K. Yamamura, K. Yamauchi, H. Mimura, Y. Sano, A. Saito, K. Endo, A. Souvorov, M. Yabashi, K. Tamasaku, T. Ishikawa, and Y. Mori. Fabrication of elliptical mirror at nanometer-level accuracy for hard x-ray focusing by numerically controlled plasma chemical vaporization machining. *Rev. Sci. Instrum.*, 74:4549, 2003.
- [ZHS⁺99] Y. Zhuang, V. Holy, J. Stangl, A.A. Darhuber, P. Mikulik, S. Zerlauth, F. Schaffler, G. Bauer, N. Darowski, D. Lubbert, and U. Pietsch. Strain relaxation in periodic arrays of Si SiGe quantum wires determined by coplanar high-resolution x-ray diffraction and grazing incidence diffraction. *JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS*, 32(10A, SI):A224–A229, 1999. 4th Biennial Conference on High Resolution X-ray Diffraction and Topography (XTOP 98), UNIV DURHAM, DURHAM, ENGLAND, SEP 09-11, 1998.

A. Anhang

A.1. Modelltransformationen

Es wurden Transformationen durchgeführt, wobei aufgrund der Nichtkommutativität einiger Rechenschritte auf die korrekte Reihenfolge zu achten ist:

1. Modelltranslation

In das Koordinatensystem des 3D-Modells werden das Strahlprofil und die Projektionsebene eingefügt. Die Ursprünge der Systeme liegen dabei aufeinander, siehe Abb. A.1.

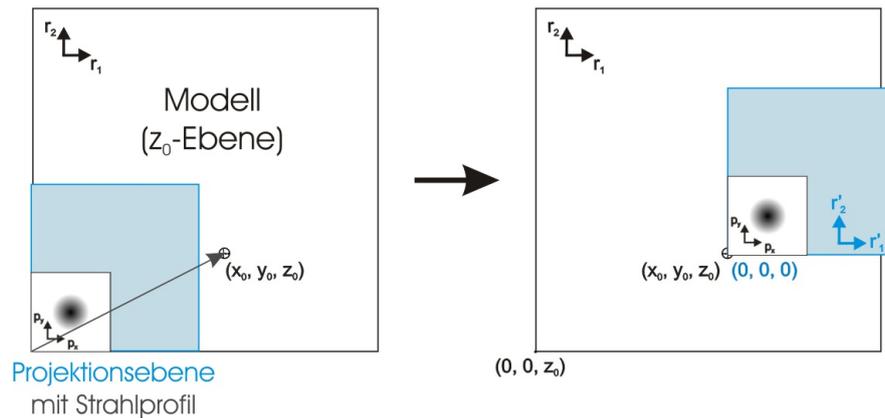


Abbildung A.1.: Skizze der Draufsicht auf ein Modell sowie die spätere Projektionsebene, die das Strahlprofil-Bild enthält. Die hier eingezeichnete Projektionsebene veranschaulicht die Ebene des transformierten Koordinatensystems, in welches später das dreidimensionale Modell projiziert wird.

Es wird zunächst eine Translation der Projektionsebene zum Zentrum des Spots auf der Probe $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ durchgeführt:

$$\mathbf{r}'_n = \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_0 = \begin{pmatrix} r_{1,n} - x_0 \\ r_{2,n} - y_0 \\ r_{3,n} - z_0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

2. Azimutale Rotation

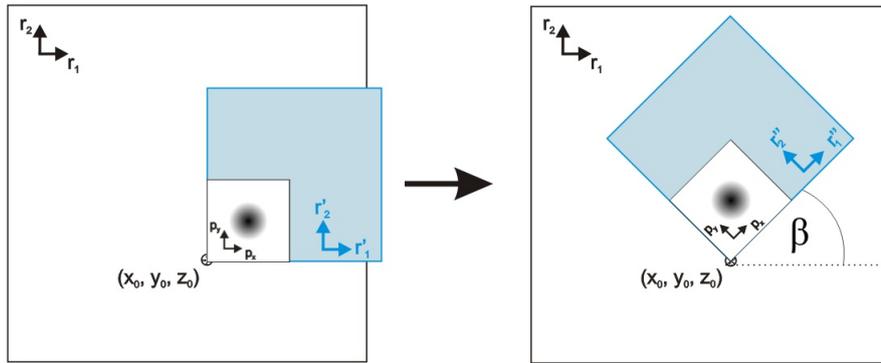


Abbildung A.2.: Skizze der Drehung um die $r'_{3,n}$ -Achse um den Winkel β .

Die Rotation um den Azimut β ergibt sich aus dem Produkt der entsprechenden Rotationsmatrix mit den Ortsvektoren \mathbf{r}'_n :

$$\mathbf{r}''_n = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) & 0 \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{r}'_n = \begin{pmatrix} r'_{1,n} \cdot \cos(\beta) - r'_{2,n} \cdot \sin(\beta) \\ r'_{2,n} \cdot \cos(\beta) + r'_{1,n} \cdot \sin(\beta) \\ r'_{3,n} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

3. Projektion 3D \rightarrow 2D

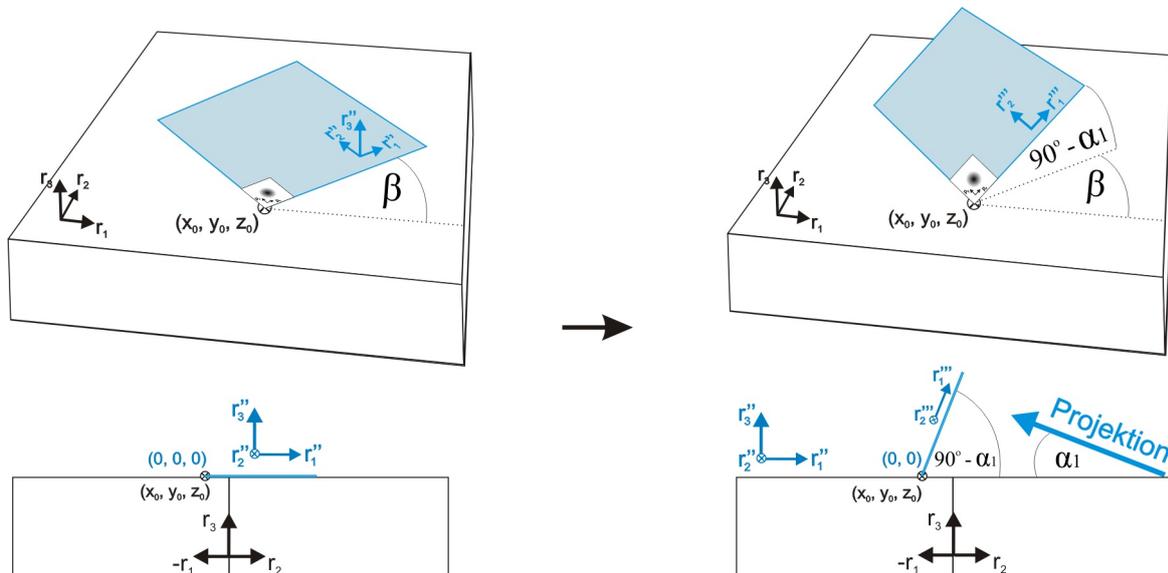


Abbildung A.3.: Kippung des transformierten Koordinatensystems aus der horizontalen Ebene heraus sowie seitliche Sicht zur Verdeutlichung der Projektionsrichtung.

Die Projektion des Modells auf die Ebene des Strahlprofils unter dem Winkel $(90^\circ - \alpha_1)$

ergibt:

$$\mathbf{r}_n''' = \begin{pmatrix} r_{1,n}'' \cdot \sin(\alpha_1) + r_{3,n}'' \cdot \cos(\alpha_1) \\ r_{2,n}'' \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Die Betrachtung der Sonderfälle $\alpha_1 = 0^\circ$ und $\alpha_1 = 90^\circ$ liefern plausible Ergebnisse: Ist $\alpha_1 = 0^\circ$, steht die Projektionsebene senkrecht auf der Modelloberfläche und die Komponente $r_{1,n}'''$ ist in Gl. (A.3) stets identisch mit $r_{3,n}''$. Im Falle $\alpha_1 = 90^\circ$, ist die Projektionsebene parallel zur Oberfläche und es gilt trivialerweise $r_{1,n}''' = r_{1,n}''$ sowie $r_{2,n}''' = r_{2,n}''$.

4. Skalierung und Profilzentrierung

Die Längeneinheiten des Strahlprofil-Bildes und des Modells werden über einen Skalierungsfaktor s miteinander korreliert und das Zentrum des Profilbildes auf den Ursprung der Projektionsebene verschoben.

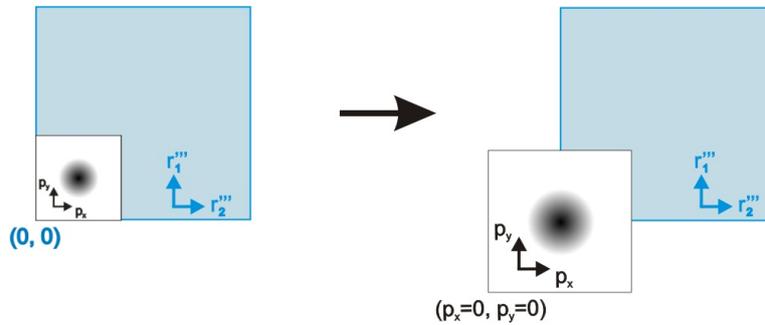


Abbildung A.4.: Skizze zur Skalierung und Translation des Strahlprofil-Bildes innerhalb der Projektionsebene. Der Ursprung der Projektionsebene fällt gemäß der ersten Transformation im Koordinatensystem des Modells mit dem Punkt (x_0, y_0, z_0) zusammen, auf welchen nun der Mittelpunkt des Strahlprofil-Bildes verschoben wird.

Nach dem Runden der Ergebnisse erhält man die ganzzahligen Koordinaten des Pixels (p_x, p_y) innerhalb des Strahlprofils, dessen Amplituden- und Phasenwert dem Streuer \mathbf{r}_n zugeordnet werden sollen:

$$\begin{aligned} p_x &= s \cdot r_{2,n}''' + \frac{L}{2} \\ p_y &= s \cdot r_{1,n}''' + \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Hierbei wird das Strahlzentrum im Mittelpunkt eines quadratischen Profilbildes angenommen. L sei die Kantenlänge des Profilbildes in Pixeln. Der Skalierungsfaktor s ergibt sich aus der Längeneinheit im Modell multipliziert mit dem Quotienten der Strahlbreite innerhalb des Profils (in Pixeln) und dessen Breite im Realraum. Es werden $r_{1,n}'''$ und $r_{2,n}'''$ in Gl. (A.4) eingesetzt und man erhält die Gl. (3.9) aus Kapitel 3.3:

$$\begin{aligned} p_x &= s \cdot [(r_{2,n} - y_0) \cdot \cos \beta - (r_{1,n} - x_0) \cdot \sin \beta] + \frac{L}{2} \\ p_y &= s \cdot [(r_{1,n} - x_0) \cdot \sin \alpha_1 \cdot \cos \beta + (r_{2,n} - y_0) \cdot \sin \alpha_1 \cdot \sin \beta \\ &\quad + (r_{3,n} - z_0) \cdot \cos \alpha_1] + \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

A.2. Programmtechnische Umsetzung der Streurechnungen

Im Folgenden werden die Quelltexte der zentralen Routinen der Streurechnungsprogramme dargestellt. Compiliert wurden diese mit FORTRAN (64 Bit, gfortran v4.3), da sich FORTRAN für den Umgang mit sehr großen Datenfeldern auf dem Linux-64-Bit-System besonders eignet. Auf Routinen und Programme zur sonstigen Datenbearbeitung, -auslesung oder -konvertierung soll hier aufgrund deren Umfangs und des geringen physikalischen Inhaltes nicht näher eingegangen werden.

Zunächst seien hier die wichtigsten Variablen und Datentypen der folgenden Quelltexte angegeben:

```

1  REAL, PARAMETER :: PI = 3.1415926
2  CHARACTER(255) :: inputfile , outputfile , spot_filename !file names
3  INTEGER :: i , k , rowcount , columns , spot_headrowcount,& !counters
4             RGB_posB , min_pixx , min_pixy , max_pixx , max_pixy,&
5             step_pixx , step_pixy , prc , pr , sdivisor ,&
6             totalrange , spot_maxx , spot_maxy
7  REAL :: dfactor , alpha1 , alpha2 , beta , gamma , lambda , distance ,&
8             pixelsize , spot_xlength , spot_x0 , spot_y0 , spot_z0

```

Die auszulesenden Datensätze werden zunächst analysiert (hier nicht dargestellt), was insbesondere zur Dimensionierung der nötigen Datenfelder nötig ist. Anschließend werden in einer Subroutine, welche die eigentlichen Simulationen durchführt, folgende Variablen deklariert:

```

1  INTEGER :: columns , rowcount , i , pixx , pixy , a , b , c,& !counters
2             spot_x , spot_y , spot_maxx , spot_maxy , spot_maxi,&
3             Spot(3*spot_maxxmaxy),& !spot profile pixel field
4             spot_headrowcount , spot_maxxmaxy , R , G , B
5  REAL :: Dat(columns , rowcount) , Weighting(rowcount) , Phase(rowcount),&
6             pixx_fine , pixy_fine , pix_alpha2 , pix_gamma,&
7             c_real , c_imag , kr , kdr , qx , qy , qz , squareabs,&
8             node_x , node_y , node_z , hue_angle , qxA , qyA , qzA

```

A.2.1. Berechnung der Streuintensität

Unter Verwendung der eulerschen Formel

$$e^{i \cdot x} = \cos x + i \cdot \sin x \quad (\text{A.6})$$

und der Betragsquadratberechnung komplexer Zahlen

$$|z|^2 = |x + i \cdot y|^2 = \left(\sqrt{x^2 + y^2} \right)^2 = x^2 + y^2 \quad (\text{A.7})$$

$$(z \in \mathbb{C} , x, y \in \mathbb{R})$$

kann Gl. (3.13) mit $p := \phi_n + \underline{q} \cdot (\underline{r}_n + \underline{u}(\underline{r}_n))$ umgeschrieben werden in:

$$\begin{aligned}
 I &\propto \left| \sum_{n=1}^N w_n \cdot (\cos p + i \cdot \sin p) \right|^2 \\
 &= \left(\sum_{n=1}^N w_n \cdot \cos p \right)^2 + \left(\sum_{n=1}^N w_n \cdot \sin p \right)^2
 \end{aligned}
 \tag{A.8}$$

Mit Ausmultiplizieren der in p enthaltenen Vektorprodukte

$$\begin{aligned}
 \underline{q} \cdot \underline{r}_n &= q_1 \cdot r_{1,n} + q_2 \cdot r_{2,n} + q_3 \cdot r_{3,n} \\
 \underline{q} \cdot \underline{u}(\underline{r}_n) &= q_1 \cdot u_{1,n} + q_2 \cdot u_{2,n} + q_3 \cdot u_{3,n}
 \end{aligned}
 \tag{A.9}$$

wurde Gleichung (3.13) dann wie folgt implementiert, wobei die Positionen der Streuer \underline{r}_n im REAL-Typ-Datenfeld $Dat(1..3, n)$ bzw. die Verschiebungen $\underline{u}(\underline{r}_n)$ in $Dat(4..6, n)$ gespeichert waren:

```

1  c_real = 0.
2  c_imag = 0.
3
4  DO n = 1, rowcount !rowcount is equal to the number of scatterers
5     kr = Phase(n) + 1000*(qx*Dat(1,n) + qy*Dat(2,n) + qz*Dat(3,n))
6         != phase + qx*x + qy*y + qz*z (q in units of [1/A])
7         !with factor 1000 because of model units 1u = 100nm
8     kdr = 1000*(qx*Dat(4,n)+qy*Dat(5,n)+qz*Dat(6,n))*dfactor
9         != qx*dx + qy*dy + qz*dz
10        !multiplied by a factor (normally 1) to vary the
11        strain
12     IF (Dat(3,n) >= 0) THEN ! z >= 0 (above the substrate)
13         c_real = c_real + COS(kr+kdr)*Weighting(n)
14         c_imag = c_imag + SIN(kr+kdr)*Weighting(n)
15     ELSE ! z < 0 (within the substrate)
16         c_real = c_real + (COS(kr+kdr) - COS(kr))*Weighting(n)
17         c_imag = c_imag + (SIN(kr+kdr) - SIN(kr))*Weighting(n)
18     ENDIF
19 ENDDO
20 squareabs = c_real*c_real + c_imag*c_imag != intensity

```

c_real und c_imag sind dabei der Realteil und der Imaginärteil der komplexen Strukturamplitude, während $Phase(n)$ und $Weighting(n)$ die in Gl. (A.8) enthaltenen Phasenwerte ϕ_n bzw. Wichtungsfaktoren w_n am Streuer n darstellen. Im Falle der Berechnung ohne nanofokussiertem Strahl, sind sämtliche $Phase(n) = 0$ und $Weighting(n) = 1$. In der hier im Quelltext eingefügten Programmvariante wird der Streubeitrag des Idealgitters im Substrat ($z < 0$) zur Verminderung von Artefakten phasenrichtig subtrahiert.

A.2.2. Beugungsvektorberechnungen

In Kapitel 3.2 wurden drei verschiedene Beispiele der Berechnung von RSM erläutert, siehe auch Abb. 3.5. Dafür wurden die Beugungsvektoren q in den Streurechnungen auf drei unterschiedliche Weisen berechnet:

1. Linearkombination aus zwei Standard-Basisvektoren

Dies ist der unkomplizierteste Fall der RSM-Berechnung in Abb. 3.5(a), wobei zwei von drei Komponenten des Beugungsvektors direkt als Laufindex einer Schleife eingesetzt werden:

```

1 DO qx = minqx, maxqx, stepqx !stepqx: stepsize (standard is 1)
2 DO qy = minqy, maxqy, stepqy
3 DO qz = minqz, maxqz, stepqz
4   c_real = 0.
5   c_imag = 0.
6
7   [...] !intensity calculation I(qx, qy, qz) = squareabs
8
9   qxA = qx/1000. !qx,qy,qz are in units of 1000*A since
10  qyA = qy/1000. !in loops only integer numbers are allowed
11  qzA = qz/1000.
12
13  WRITE(8, of) qxA, ", ", qyA, ", ", qzA, ", ", LOG10(squareabs+1)
14
15  ENDDO
16 ENDDO
17 ENDDO

```

Die Streuintensität wird dabei gemäß vorherigem Unterkapitel A.2.1 berechnet. Für die Schleife sind lediglich Laufvariablen mit Datentypen möglich, die nur ganzzahlige Werte annehmen können. Um dennoch eine ausreichende Auflösung im RSM zu erhalten, wurden dabei die Beugungsvektorkomponenten qx , qy , qz in Einheiten von 1000 eingeführt und zur Speicherung in umgerechnet. Es wurden zwei dieser Komponenten in einem Bereich variiert, wie beispielsweise qx im Bereich $[minqx, maxqx]$ mit einer Schrittweite $stepqx$ sowie qz im Bereich $[minqz, maxqz]$ mit einer Schrittweite $stepqz$. Die dritte Variable wurde konstant gehalten, indem die Minimum- und Maximum-Grenzen gleichgesetzt wurden; z.B. $qy = minqy = maxqy = 0$. Gespeichert wurden die logarithmierten Intensitäten und die Komponenten des jeweiligen Beugungsvektors.

2. Winkelabhängige Intensitätsberechnung

Im zweiten Fall (Kapitel 3.2, Abb. 3.5(b)) wurden die Beugungsvektoren durch Variation der Strahleinfalls- und Strahlaustrittswinkel sowie deren Azimuten gemäß Gl. (2.4) berechnet. Der Strahleinfallswinkel $\alpha_1 = \theta$ wird im folgenden Quelltext dabei konstant gehalten,

während zwei der restlichen Winkel, d.h. Strahlaustrittswinkel (Detektionswinkel) $\alpha_2 = a$, Azimute $\beta = b$ und $\gamma = c$ als Laufvariable veränderlich blieben. Diese Berechnungsmethode wurde beispielsweise für die GID-Simulation in Kapitel 4.4, Fig. 3, verwendet, für welche - analog zum Experiment - bei festem Einfallswinkel $\theta = 0.3$ und azimuthalem Winkel $b = 0$ der Detektionswinkel a im Bereich $[min_a, max_a]$ sowie der Azimut des Detektionswinkels c im Bereich $[min_c, max_c]$ variiert wurden.

```

1 DO a = min_a*sdivisor , max_a*sdivisor , step_a ! exit angle
2 DO b = min_b*sdivisor , max_b*sdivisor , step_b ! azimuth of the
   incidence angle
3 DO c = min_c*sdivisor , max_c*sdivisor , step_c ! azimuth of the exit
   angle
4 ! sdivisor is introduced to use smaller (non-integer) stepsizes
5
6 a_fine = a*PI/(100*sdivisor*180.)
7 b_fine = b*PI/(100*sdivisor*180.)
8 c_fine = c*PI/(100*sdivisor*180.)
9 ! constant angle of incidence (theta)
10
11 qx = 2.*PI/lambda*(COS(a_fine)*COS(c_fine) - COS(theta)*COS(b_fine))
12 qy = 2.*PI/lambda*(COS(a_fine)*SIN(c_fine) - COS(theta)*SIN(b_fine))
13 qz = 2.*PI/lambda*(SIN(a_fine) + SIN(theta))
14
15 [...] !intensity calculation I(a, b, c) = squareabs
16
17 WRITE(8, of) a_fine*180./PI, ", ", b_fine*180./PI, ", ", c_fine*180./PI, ",
   ", qx, ", ", qy, ", ", qz, ", ", LOG10(squareabs+1)
18 ENDDO
19 ENDDO
20 ENDDO

```

3. Pixelintensitätsberechnung

Die RSM in Kapitel 3.2, Abb. 3.5(c,f), sind nach nach Gl. (3.8) berechnet worden. Die Beugungsvektorberechnung wurde wie folgt implementiert:

```

1 DO pixx = min_pixx*sdivisor , max_pixx*sdivisor , step_pixx
2 DO pixy = min_pixy*sdivisor , max_pixy*sdivisor , step_pixy
3 !pixx , pixy: detector pixel coordinates
4
5 pix_alpha2 = alpha2 + ATAN(pixy/(1.*sdivisor)*pixelsize/distance
   /1000000.)
6 pix_gamma = gamma + ATAN(pixx/(1.*sdivisor)*pixelsize/distance
   /1000000.)
7 ! factor 1000000 since detector distance is given in meters ,
8 ! pixel size is given in micromers
9
10 qx = 2.*PI/lambda*(COS(pix_alpha2)*COS(pix_gamma) - COS(alpha1)*COS(
   beta))

```

```

11  qy = 2.*PI/lambda*(COS(pix_alpha2)*SIN(pix_gamma) - COS(alpha1)*SIN(
      beta))
12  qz = 2.*PI/lambda*(SIN(pix_alpha2) + SIN(alpha1))
13
14  [...] !intensity calculation I(pixx , pixy) = squareabs
15
16  WRITE(8, of) pixx , " , " , pixy , " , " , qx , " , " , qy , " , " , qz , " , " , LOG10(squareabs+1)
17
18  ENDDO
19  ENDDO

```

Ausgegeben wird hier ein RSM eines Flächendetektors mit den jeweils zu den Pixelkoordinaten berechneten Beugungsvektoren $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z) = (q_1, q_2, q_3)$.

A.2.3. Verwendung eines Strahlprofils

Berechnung der Wichtungsfaktoren und Phasenwerte in Umsetzung der Gl. (3.9), (3.10) und (3.12):

```

1  DO i = 1, rowcount  ! = number of nodes
2
3  ! translation to origin (spot center on the surface)
4  node_x = (Dat(1,i) - spot_x0)
5  node_y = (Dat(2,i) - spot_y0)
6  node_z = (Dat(3,i) - spot_z0)
7
8  ! projection
9  spot_x = INT( (node_y*COS(beta) - node_x*SIN(beta)) &
10             * spot_maxx/(1.*spot_xlength) + spot_maxx/2. )
11  spot_y = INT( ((node_x*COS(beta) + node_y*SIN(beta)) &
12             * SIN(alpha1) + COS(alpha1)*node_z ) &
13             * spot_maxx/(1.*spot_xlength) + spot_maxy/2. )
14
15  IF ((spot_x < 0).OR.(spot_x > spot_maxx).OR.&
16     (spot_y < 0).OR.(spot_y > spot_maxy)) THEN
17
18     ! beyond the beam profile the beam amplitude is set to 0
19     Weighting(i) = 0
20
21  ELSE
22
23     ! Determination of the RGB value of one spot profile pixel:
24     ! 3*(spot_x + spot_y*spot_maxx) gives the index of the
25     ! blue value within the profile image pixel field.
26     ! R,G,B is saved sequentially within the pixel field
27     R = Spot(3*(spot_x+spot_y*spot_maxx) - 2) !red
28     G = Spot(3*(spot_x+spot_y*spot_maxx) - 1) !green
29     B = Spot(3*(spot_x+spot_y*spot_maxx))      !blue
30
31     ! Weighting (brightness of RGB pixel in the spot profile)

```

```

32 Weighting(i) = ( R + G + B )/(3.*spot_maxi)
33
34 ! Hue value calculation (phase is encoded in the hue value)
35 IF ((R == G).AND.(R == B)) THEN
36     hue_angle = 0
37 ELSEIF ((R > G).AND.(R >= B)) THEN
38     hue_angle = 2*ATAN(SQRT(3.)*(G-B)/(2.*R-G-B))
39     ! red part of hue scale (R is maximum), angles:[-60..60)
40 ELSEIF ((G >= R).AND.(G > B)) THEN
41     hue_angle = 2*ATAN(SQRT(3.)*(B-R)/(2.*G-B-R)) + 2/3.*PI
42     ! green part of hue scale (G is maximum), angles:[60..180)
43 ELSEIF ((B >= G).AND.(B > R)) THEN
44     hue_angle = 2*ATAN(SQRT(3.)*(R-G)/(2.*B-R-G)) + 4/3.*PI
45     ! blue part of hue scale (B is maximum), angles:[180..300)
46 ENDIF
47
48 ! Calculate the phase of the beam at scatterer (node) i
49 Phase(i) = ( (node_x*COS(beta) + node_y*SIN(beta))*COS(alpha1) &
50             + SIN(alpha1)*node_z )/(1.*lambda) * hue_angle
51 ENDIF

```

A.3. Ergänzende Abbildungen

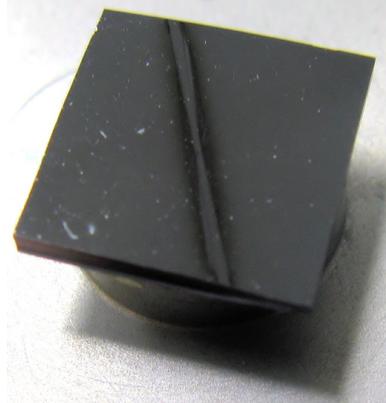


Abbildung A.5.: Kohlenstoffablagerung infolge der Synchrotronstrahlexposition bei Messung ohne Verwendung der Vakuum-Umgebung. Der Strahldurchmesser betrug $100\ \mu\text{m}$ bei einer Intensität von $10^{10}\ \text{cps}$ und einer Energie von $8\ \text{keV}$ am Strahlrohr ID10B/ESRF. Probengröße: $5 \times 5\ \text{mm}^2$

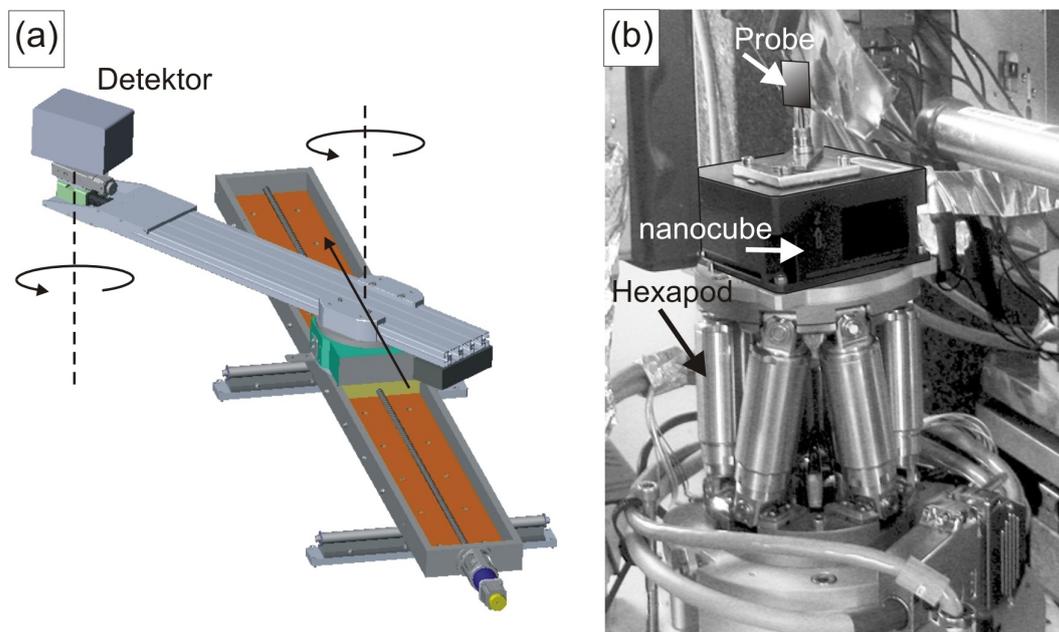


Abbildung A.6.: Weiterentwicklungen am Nanofokus-Messplatz des Strahlrohrs ID13 (ESRF, Grenoble) seit Abschluss der Messungen. (a) Detektorarm zur motorisierten Platzierung des Detektors in einer horizontalen Ebene. (b) Proben-tisch mit Hexapod-Einheit.

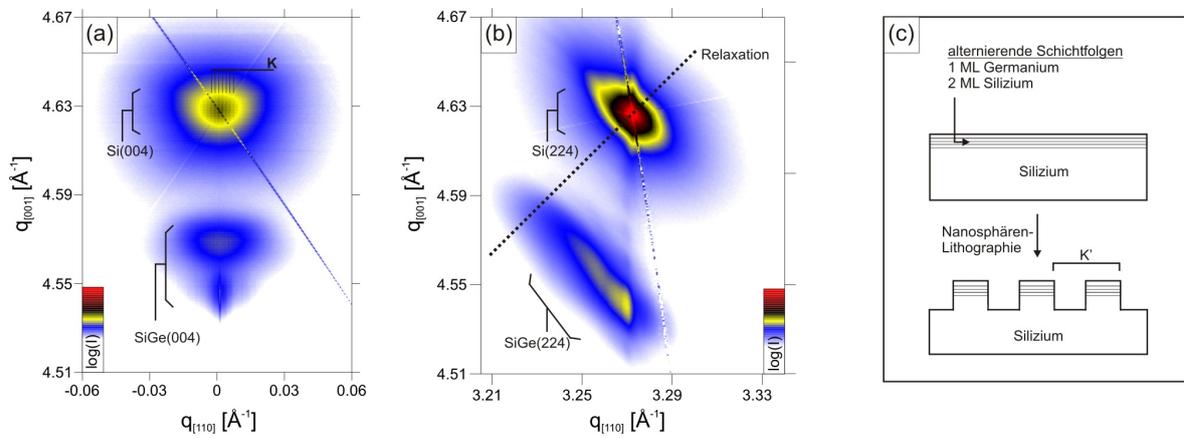


Abbildung A.7.: HRXRD-Untersuchung geordneter SiGe/Si(001)-Nanodrähte, welche am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik (Halle) aus einem Multischicht-System herausgeätzt wurden (c). Die Messungen wurden am Strahlrohr P08, PETRA III / Hamburg durchgeführt. (a) zeigt die RSM der symmetrischen (004)-Reflexe von Si und SiGe sowie Positionskorrelationslinien K. Aus der Periode der Oszillationen von K lässt sich der mittlere Abstand der Nanodrähte K' berechnen. (b) RSM der asymmetrischen (224)-Reflexe von Si und SiGe mit Teilrelaxation des SiGe-Materials. (Publikation in Vorbereitung)

B. Danksagungen

Mein besonderer Dank gilt Michael Hanke für das spannende Projektthema, viele sehr interessante Strahlzeiten und die dabei vermittelten Fachkenntnisse. Des Weiteren danke ich ihm für die motivierende, angenehme Zusammenarbeit und das von Beginn an sukzessive Abgeben der Verantwortung bei der Strahlzeiteinwerbung, Strahlzeitplanung und -durchführung, Experimentauswertung und Publikationstätigkeit.

Den Kollegen der Technischen Universität Dresden, insbesondere Jens Patommel und Robert Hoppe, danke ich für die gute und erfolgreiche Zusammenarbeit bei den Nanofokus-Strahlzeiten sowie Christian Schroer für die stets zeitnahe Hilfe bei Fragen zu den bereitgestellten Röntgenlinsen. Großer Dank gilt in dem Zusammenhang auch Manfred Burghammer und Sebastian Schöder vom ESRF für die unermüdliche technische und wissenschaftliche Unterstützung während der Strahlzeiten am Strahlrohr ID13.

Meinen Kollegen am Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik in Berlin verdanke ich die freundliche Aufnahme im Institut und die gute interdisziplinäre Zusammenarbeit, wobei ich, auch für die gemeinsame Zeit am ESRF, besonders Peter, Alessandro, André und Karthik danken möchte. Ebenso danke ich meinem Bürokollegen Abbes für die freundschaftlichen, fachübergreifenden und interkulturellen Gespräche.

In der ersten Phase meiner Promotionszeit in der FG Festkörperanalytik am Institut für Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg möchte ich Christian Eisenschmidt und Steffi Deiter für die kollegiale Arbeitsatmosphäre sowie Herrn Prof. em. Höche und danach Herrn Prof. Krause-Rehberg für die Übernahme der Hochschulbetreuung meiner Arbeit danken.

Für die Bereitstellung der in dieser Arbeit untersuchten Proben danke ich Torsten Boeck vom Leibniz-Institut für Kristallzüchtung Berlin sowie Iury Mazur vom Department of Physics / University of Arkansas. Auch möchte ich mich bei Alexander Tonkikh und Nadine Geyer vom MPI Halle für die jeweilige Messzeit mit ihnen und die bereitgestellten Proben der SiGe-Mehrfachschicht-Systeme bedanken, deren Auswertungen noch nicht abgeschlossen sind.

Ich danke darüber hinaus Daniel, André und Detlev für das kritische Lesen dieser Arbeit.

C. Angaben zum Bildungsweg

Persönliche Daten

Name:	Martin Dubslaff
Akademischer Grad:	Dipl.-Phys.
Geburtsdatum/-ort:	29.09.1981, Jena
Geschlecht:	männlich
Staatsangehörigkeit:	Deutsch

Bildungsweg

09/1988 - 08/1991	Polytechnische Oberschule „Erich Weinert“, Jena
09/1991 - 06/2001	Jenaplan-Schule Jena mit gymnasialer Oberstufe
	07/1999 Realschulabschluss
	06/2001 Abitur
10/2002 - 03/2008	Physikstudium, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
	11/2004 Vordiplom
	03/2008 Diplom, Titel: „ <i>Untersuchungen an SiGe/Si(001)-Inseln mit hochauflösender Röntgendiffraktometrie unter Verwendung eines positionsempfindlichen Detektors</i> “
seit 04/2008	Promotionsstudium Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
	bis 03/2009 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
	seit 04/2009 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik (Leibniz-Institut), Berlin

D. Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne Benutzung unerlaubter Hilfsmittel verfasst habe. Aus fremden Quellen entnommene Inhalte wurden als solche kenntlich gemacht.

Des Weiteren erkläre ich, dass ich mich nicht bereits früher um den Doktorgrad beworben habe, weder an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, noch an einer anderen Bildungseinrichtung.

Halle (Saale), den 30.09.2012

M. Dubslaff