

Olaf Schmidt

Vermessung von Kristallstrukturen mit
Methoden der Bildverarbeitung und
Statistik

Diplomarbeit

BEI GRIN MACHT SICH IHR WISSEN BEZAHLT



- Wir veröffentlichen Ihre Hausarbeit, Bachelor- und Masterarbeit
- Ihr eigenes eBook und Buch - weltweit in allen wichtigen Shops
- Verdienen Sie an jedem Verkauf

Jetzt bei www.GRIN.com hochladen
und kostenlos publizieren



VERMESSUNG VON KRISTALLSTRUKTUREN
MIT METHODEN DER
BILDVERARBEITUNG UND STATISTIK

Diplomarbeit

Olaf Schmidt

Institut für Informatik III, Universität Bonn

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
1.1	Kristallstrukturen	9
1.2	Vermessung der Strukturen	10
1.3	Anwendungen	13
1.4	Aufbau dieser Arbeit	13
2	Physikalische Grundlagen	15
2.1	Kristalle	15
2.1.1	Grundlagen	15
2.1.2	Kontrolliertes Kristallwachstum	18
2.1.3	Quantum-Well-Strukturen	20
2.1.4	Elastische Verzerrung	22
2.2	Elektronenmikroskopie	23
2.2.1	Auflösungsvermögen	24
2.2.2	Aufbau des Transmissions-Elektronen-Mikroskops	24
2.2.3	HREM-Bild als Interferenzmuster	25
2.2.4	Bildakquisition	27
2.2.5	Probenpräparation	28
2.3	Simulierte Bilder	29
2.3.1	Theoretischer Hintergrund	29
2.3.2	Parameter für die Simulation	31
2.3.3	Der Einfluß von Rauschen auf das Verfahren	31
2.4	Berechnung der physikalischen Größen	34
2.4.1	AlGaN/GaN-Systeme	34
2.4.2	SiGe/Si-Systeme	36

2.4.3	Grenzen	37
2.4.4	Anwendung	37
3	Hochgenaue Positionsbestimmung	41
3.1	Vorverarbeitung	41
3.1.1	Bildtransformation	41
3.1.2	Filterung	41
3.1.3	Blob Extraktion	43
3.2	Fitting	43
3.2.1	Modellfunktionen	45
3.2.2	Minimierung von χ^2	47
3.2.3	Diskussion	48
3.2.4	Startparameter	49
3.3	Globales Fitting	49
3.3.1	Schrittweise Reduzierung der Parameter	50
3.3.2	Komplexität der Berechnung	54
3.3.3	Ergebnisse	54
3.4	Nachbearbeitung	55
3.4.1	Gitter	55
3.4.2	Darstellung	55
3.5	Validierung	56
3.5.1	Konfidenzintervalle	56
3.5.2	Test auf Normalverteilung	58
3.6	Alternative Verfahren	60
3.6.1	Größte Intensität	60
3.6.2	Schwerpunkt	60
3.6.3	Geometrisches Zentrum	62
3.6.4	Vergleich der Verfahren	64
3.7	Unsicherheiten	64
4	Experimentelle Ergebnisse	67
4.1	GaN/AlGaN	67
4.2	GaN/InGaN/AlGaN	73

4.3	Si/SiGe	75
4.4	Weitergehende Messungen	77
4.4.1	Bestimmen von elastischen Konstanten	77
4.4.2	Validierung mit EELS	77
5	Zusammenfassung und Ausblick	79
5.1	Zusammenfassung	79
5.1.1	Grundlagen	79
5.1.2	Ziel	79
5.1.3	Verfahren	80
5.1.4	Ergebnisse	81
5.1.5	Fazit	81
5.2	Ausblick	81
A	Periodensystem der Elemente	83
B	Symbolverzeichnis	84

Abbildungsverzeichnis

1.1	Hochauflösende, elektronenmikroskopische Aufnahme von GaN. Unten rechts ist eine Bildeinheit zelle markiert. Die Breite der Zelle wird mit c , die Höhe mit a bezeichnet.	10
1.2	Profil einer GaN/AlGaN Heterostruktur. Es sind die durchschnittlichen Breiten \bar{c} der Bildeinheit zellen pro Spalte mit Varianz σ^2 als Fehlerbalken aufgetragen.	11
1.3	(a) 20x20 Punkte eines Beispiel Blobs; auf der z -Achse ist die Intensität aufgetragen; (b) Schema der parametrisierten Modellfunktion „Kegel“ mit den Parametern $\vec{p} = (p_a, p_b, p_c, p_x, p_y, p_z)$	11
2.1	(a) Schema eines einfachen Raumgitters; (b) dazugehörige Elementarzelle ($\alpha \triangleleft (b, c)$, $\beta \triangleleft (c, a)$, $\gamma \triangleleft (a, b)$) (aus [34] S.554).	15
2.2	Die Gittervektoren von Kristallen werden nach Miller mit einem Zahlentripel $[u, v, w]$ bezeichnet (aus [4]).	16
2.3	Atome können auf verschiedene, energetisch günstige Weisen in einem Gitter angeordnet werden. Hier ist eine Übersicht über die 14 Bravaisgitter dargestellt. (P) primitives Gitter, (C) einseitige Flächenzentrierung, (I) innen zentriert, (F) flächenzentriert (aus [4]).	17
2.4	Aufbau einer Kristallstruktur aus Gitter und Basis mit den Atomsorten A, B und C (Schema). Jede Gitterzelle besteht aus derselben Basisanordnung, die im Gitter fortgeführt wird (aus [4]).	18
2.5	3D-Bild eines GaN-Gitters in Zentralprojektion.	19
2.6	Schematische Darstellung eines (a) Si- und (b) GaN-Gitters mit Einheitszelle (aus [6]).	19
2.7	Eine Quantum-Well-Struktur am Beispiel von Si/Ge. Der Kristall wächst von unten nach oben. Beim Aufwachsen wird kurzzeitig eine gewisse Menge Ge beigefügt, so daß dünne Mischkristallschichten entstehen.	21
2.8	Quantum-Well-Struktur. GaN mit 5 Schichten $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ mit von unten nach oben $x=1.0, 0.75, 0.50, 0.25, 0.10$ (aus [25]).	21

2.9	Schema der elastischen Verzerrung Ge in einer Si/Ge Quantum-Well-Struktur. Ge hat eine größere Gitterkonstante. So kommt es zu einer elastischen Verzerrung in Wachstumsrichtung.	22
2.10	Die elastische Spannung kann durch eine Stufenversetzung aufgelöst werden. Diese Art der Relaxation wird in dieser Arbeit nicht gewünscht (aus [4]). . .	23
2.11	Aufbau eines Transmissions-Elektronen-Mikroskops (TEM). Der Elektronenstrahl aus der Elektronenkanone durchstrahlt die Probe und wird von der Objektivlinse vergrößert. Auf dem Schirm wird das Interferenzbild sichtbar gemacht und hinterher auf einem Negativ bzw. mit einer CCD-Kamera festgehalten.	25
2.12	Elektronenbeugung an Hülle und Kern. Der Beugungswinkel des Elektronenstrahls ist vom Abstand zum Atomkern abhängig. In dieser Arbeit werden nur Elektronen mit geringem Beugungswinkel betrachtet (aus [44]).	26
2.13	Eine planare Elektronenwelle erzeugt eine Schar von Kugelwellen an den Atomen der Probe. Diese Wellen interferieren (aus [44]).	26
2.14	Beispiel HREM-Bild von reinem GaN. Die Probe ist keilförmig und wird nach rechts (Kristalloboberfläche) flacher.	27
2.15	Eine Probe wird als Keil zugeschnitten. Man betrachtet einen Ausschnitt des Keils, der hier mit einem schwarzen Rahmen markiert ist.	28
2.16	Eine Probe wird immer von einer ungeordneten Oberflächenschicht bedeckt (aus [26]).	28
2.17	Multislice Methode als Sequenz von Streuung und Fortpflanzung (aus [39]). .	29
2.18	Schema der Bilderzeugung. Der Probenaustritt O wird in die hintere Focusebene S abgebildet. Die (gedachten) Kugelwellen interferieren in der Bildebene I (aus [39]).	30
2.19	Karte von HREM-Mustern von GaN mit verschiedenen Dicken und Defoki; $\langle 110 \rangle$ Projektion; x-Achse: Dicke (Anzahl der Atomlagen); y-Achse: Defokus (Abstand der Probe zur Fokusebene des fokussierten Elektronenstrahls); siehe Text.	32
2.20	Messung an simulierten Bildern mit 2 mal 7 verschiedenen Rauschstufen. Der erwartete Gitterabstand von 25.6 Pixeln wird immer gemessen. Nur die Varianz steigt mit dem Grad des Rauschens.	33
2.21	(a) 3D-Projektion von GaN. Markiert ist eine Gittereinheitszelle der Breite c (in nm). Die rechts unten markierten Spalten von Atomen fallen im Interferenzbild zu einem Blob zusammen. (b) HREM-Aufnahme von GaN. Es ist diesmal die korrespondierende Bildeinheitszelle der Breite c (in Pixel) markiert.	38
2.22	HREM-Bild einer GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Heterostruktur.	39

2.23	Profil der GaN/Al _x Ga _{1-x} N Heterostruktur aus Abbildung 2.22. Dargestellt sind die durchschnittlichen Zellbreiten: (a) in Pixel, (b) in nm und (c) Konzentration von Al in Prozent. Die Fehlerbalken geben die Varianz wieder.	40
3.1	(a) Schematische Darstellung der Fourierkomponenten des aufgenommenen Signals; (b) Histogramm der Intensitäten. Die „Outliers“ entsprechen dem kristallinen Anteil (aus [21]).	42
3.2	(a) 20x20 Punkte eines Beispiel Blobs; auf der z-Achse ist die Intensität aufgetragen; (b) Schema der parametrisierten Modellfunktion „Kegel“ mit den Parametern $\vec{p} = (p_a, p_b, p_c, p_x, p_y, p_z)$	44
3.3	Verschiedene Modellfunktionen in 2D-Projektion.	45
3.4	Schema eines globalen Gitters. Das globale Fitting bestimmt einen Gitterursprung (x_0, y_0) , einen Gitterabstand in y-Richtung $dy = \Delta y$, Kippwinkel zu den Achsen $a = \alpha$ und $b = \beta$ und die Abstände der einzelnen Spalten x_i	52
3.5	(a) Beispielbild GaAs mit einem Monolayer InAs; (b) Darstellung der Differenzvektoren; (c) bereinigte Darstellung von (b) (aus [3]).	61
3.6	Messung der Verzerrung mit dem Verfahren von Jouneau; (a) HREM-Bild (b) Differenzvektoren (c) Ableitung (d) Verschiebungsprofil (aus [17]).	61
3.7	Schema des Seitz-Verfahrens.	62
3.8	von Seitz [36] verwendete Struktur.	63
3.9	Messung der Verzerrung von Seitz [36]. Die Prozentzahlen geben die Indiumkonzentration in den entsprechenden Schichten wieder. Die 0% strain entspricht 52% Indium.	63
4.1	GaN/AlGaN Heterostruktur; TEM Aufnahme und Profil (aus [25]).	68
4.2	GaN/AlGaN Heterostruktur; Ausschnitt I; 75% Al.	69
4.3	GaN/AlGaN Heterostruktur; Ausschnitt II; 50% Al.	70
4.4	GaN/AlGaN Heterostruktur; Ausschnitt III; 25% Al.	71
4.5	GaN/AlGaN Heterostruktur; Ausschnitt (aus [25]).	72
4.6	GaN/InGaN/AlGaN Struktur einer kommerziell erhältlichen blauen LED. Links ist eine Übersicht über die Struktur und rechts eine Vergrößerung der optisch aktiven InGaN-Schicht dargestellt (aus [22]).	73
4.7	Auswertung von zwei InGaN/AlGaN/GaN Strukturen. Es sind eine blaue LED (Kreise) und grüne LED (Quadrate) dargestellt. Die gestrichelte Linie stellt zusätzlich die erwarteten Werte für eine blaue LED dar (aus [22]).	74
4.8	Vergleich von mehreren optisch aktiven Schichten. Die Breite des Quantum-Well und die In-Konzentration bestimmen die Wellenlänge und Intensität (in eV) des abgestrahlten Lichts (aus [22]).	74

4.9	Si/Ge _{0.25} Si _{0.75} /Si-Quantum-Well-Struktur; Oben: TEM-Bild; Unten: Profil der Zellbreiten. Der hohe Rauschanteil kommt von der sehr geringen Ge-Konzentration.	76
4.10	Messung der elastischen Konstanten (aus [22]).	77
4.11	Vergleich mit EELS (aus [22]).	78