

Wiederholung: Keimbildungsraten

Sowohl die einfache Nukleationstheorie des isolierten Keimes als auch die Ratengleichungen liefern **Keimbildungsraten I** der Form:

$$I[\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}] \cong A \cdot R^p e^{\frac{E}{k_B T_S}}$$

Tröpfchenmodell: $E=E(\Delta G^*) \Rightarrow$ eindeutig
Teilchenmodell: $E=E(i, E_i) \Rightarrow$ mehrdeutig

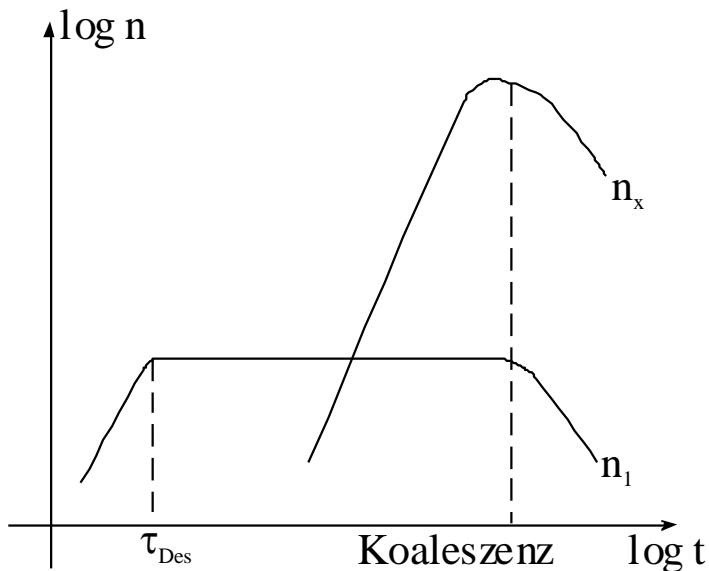
Der Exponent p kann ganzzahlige oder nicht-ganzzahlige Werte annehmen.

Wiederholung: Ratengleichungen allgemein

Inkomplette Kondensation

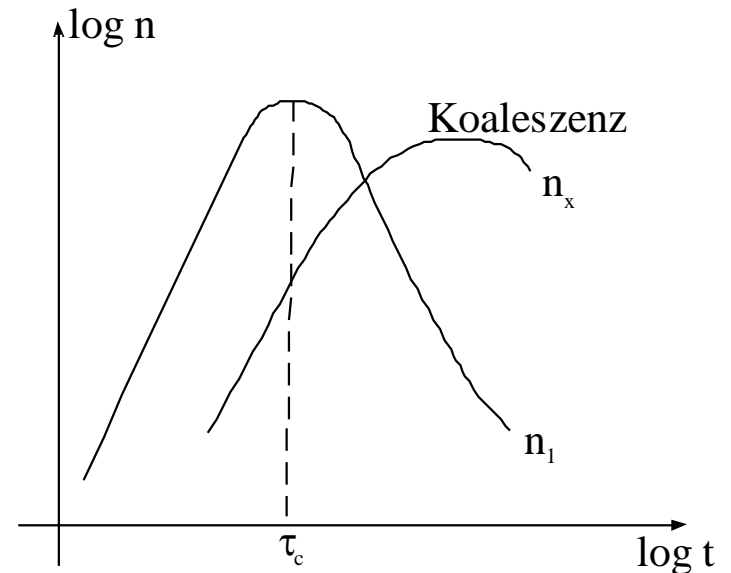
$$\frac{dn_1}{dt} = 0 = R - \frac{n_1}{\tau_{\text{Des}}}$$

$$\frac{d(n_x w_x)}{dt} \cong 0$$



Komplette Kondensation

$$\frac{dn_1}{dt} = R - \frac{d(n_x w_x)}{dt}$$



Wiederholung: KMC Simulation

Kinetische Monte Carlo (KMC) Simulationen erlauben die Bestimmung

- **der Form der stabilen Inseln**
- **der Größenverteilung der stabilen Inseln**
- **des Einflusses von Defekten auf die Nukleation**

da sie einzig und allein die Elementarereignisse des Schichtwachstums (Deposition, Oberflächendiffusion, Desorption, Teilchenbindung) zur Simulation des Schichtaufbaues heranziehen.

Wiederholung: KMC - Prinzip

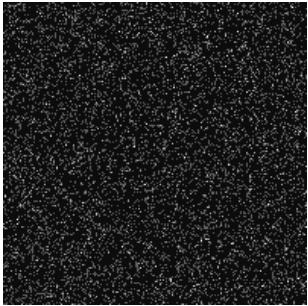
- **Definition von Ereignistypen**
- **Bestimmung der relativen Ereigniswahrscheinlichkeiten ("konditionale Wahrscheinlichkeiten")**
- **Auswahl eines Teilchens und Durchführung des Ereignisses**
- **Bestimmung des Zeitintervalles zwischen den spezifischen Ereignissen**

Vorteil: Jedes gewählte Ereignis ändert das System

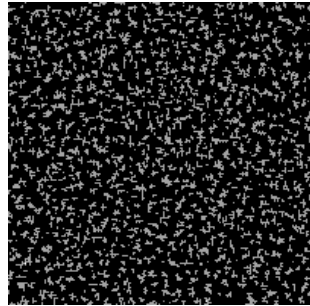
Nachteil: Nicht alle Ereignistypen sind a priori bekannt; Algorithmus ist speicherintensiv

Wiederholung: KMC – Resultate und Trends

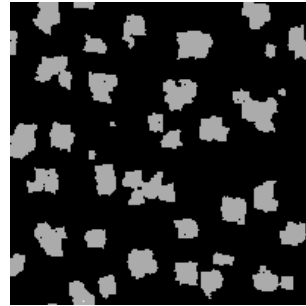
Variation der Substrattemperatur T_S



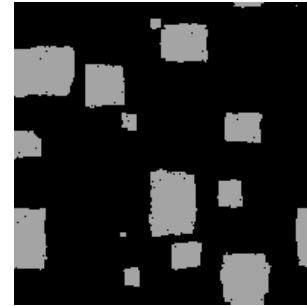
$T_S=10K$



300K



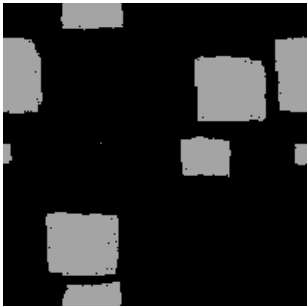
600K



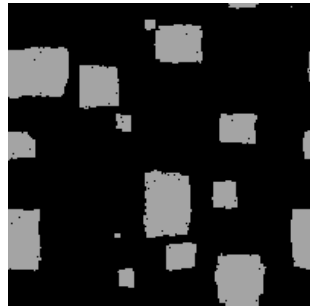
700K

$R=1ML/s$
 $E_{Diff}=0.5 eV$
 $E_{Des}=1 eV$
 $E_b=0.5 eV$

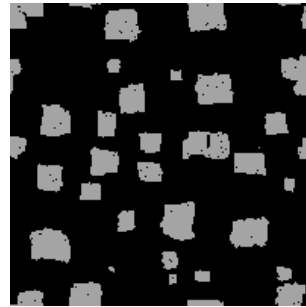
Variation Beschichtungsrate R



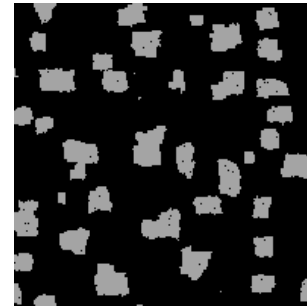
$R=0.5 ML/s$



1ML/s



5 ML/s



10 ML/s

$T_S=700 K$
 $E_{Diff}=0.5 eV$
 $E_{Des}=1 eV$
 $E_b=0.5 eV$

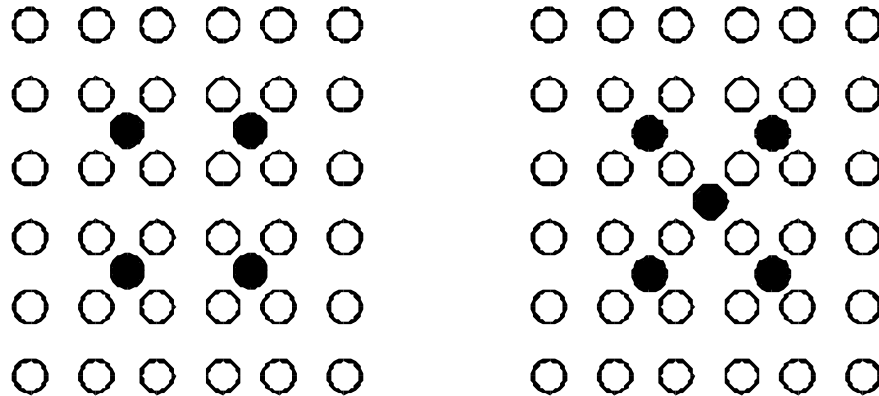
Epitaxie

Epitaxie ist die Herstellung von Schichten, welche in grossen Bereichen einkristallin sind

- **Homoepitaxie:**
Substratmaterial = Schichtmaterial
- **Heteroepitaxie:**
Substratmaterial \neq Schichtmaterial

Heteroepitaxie I

Epitaktische Relation:



○ Substratmaterial

● Schichtmaterial

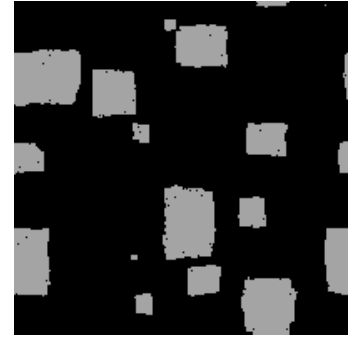
Van-der-Waals Epitaxie:

Die Wechselwirkung zwischen Substratmaterial und Schichtmaterial ist so gering, dass sich die Schichtatome selbstständig kristallographisch anordnen.

Heteroepitaxie II

Hochtemperaturepitaxie:

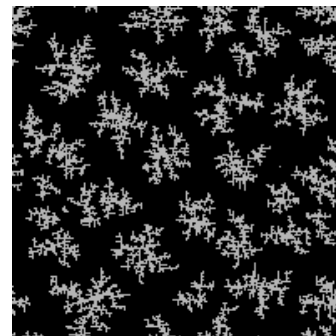
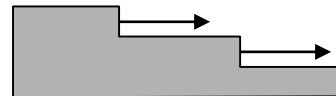
Die kristallographisch günstige Anordnung der Atome wird durch eine hohe Substrattemperatur erreicht



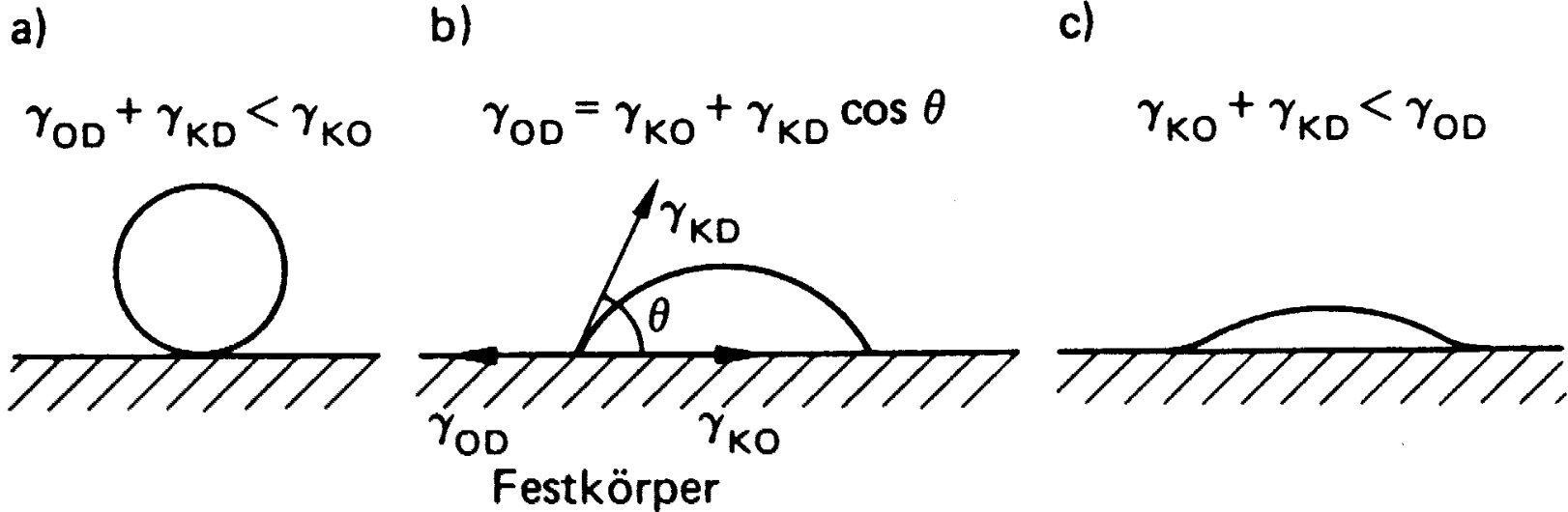
Niedertemperaturepitaxie:

Die kristallographisch günstige Anordnung der Atome wird durch lokale Defektstrukturen erreicht

- Vicinalflächen
- Dendritische Inseln



Schichtwachstum: Keimform/Benetzung



γ ...Oberflächenenergie

O...Oberfläche

D...Dampf

K...Keim

Schichtwachstum: Wachstumsmoden

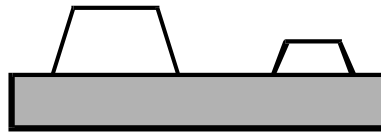
Wachstumsmoden:

A: Substratmaterial

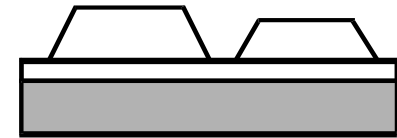
B: Schichtmaterial



Frank-Van der Merwe:
Lagenweise, $W_{AB} > W_{BB}$

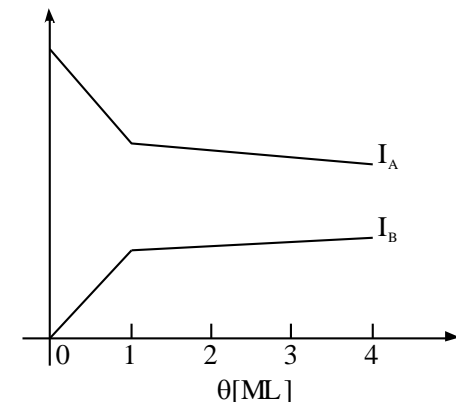
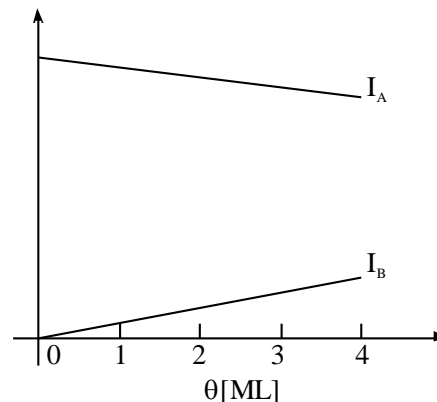
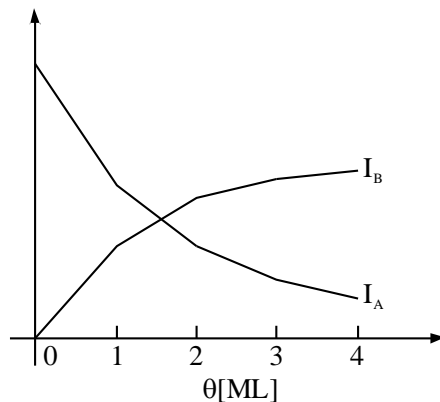


Volmer-Weber:
Inseln, $W_{AB} < W_{BB}$



Stranski-Krastanov:
Lagen-Inseln, $W_{AB} > W_{BB}$
Spannungsabbau durch 3d-Inseln

Charakterisierung: z. B.: Auger-Elektronenspektroskopie



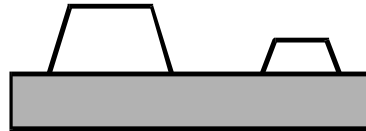
Spannungen und Schichtwachstum I

Wachstumsmoden:

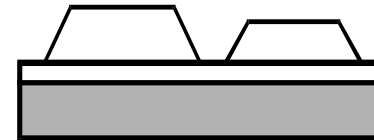
A: Substratmaterial
B: Schichtmaterial



Frank-van der Merwe:
Lagenweise, $W_{AB} > W_{BB}$



Volmer-Weber:
Inseln, $W_{AB} < W_{BB}$



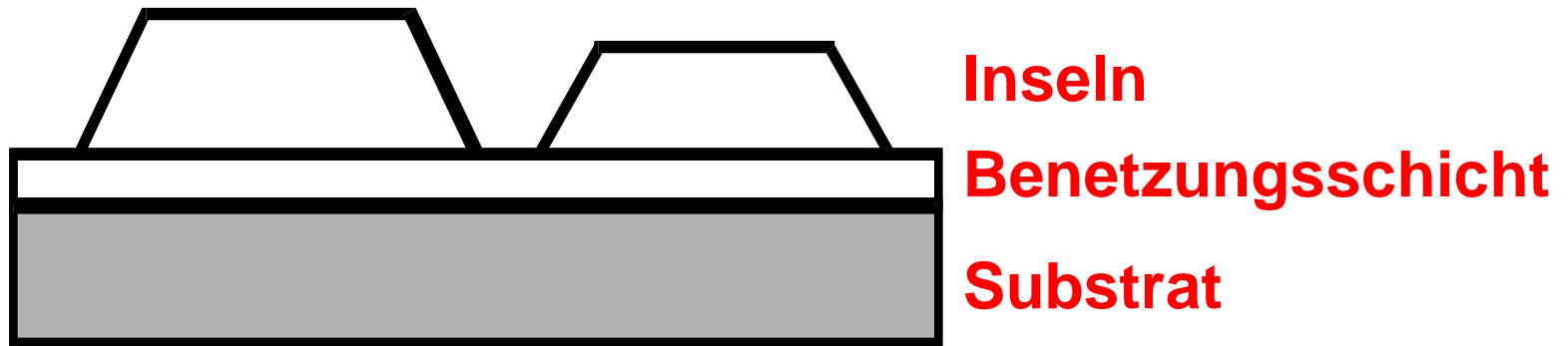
Stranski-Krastanov:
Lagen-Inseln, $W_{AB} > W_{BB}$
Spannungsabbau durch 3d-Inseln

Während die Frank-van der Merwe und Volmer-Weber Wachstumsmoden weitgehend spannungsfreie Schichten erzeugen, kommt es beim Stranski-Krastanov-Modus zum Aufbau signifikanter Spannungen in den ersten Wachstumsphasen.

Spannungen und Schichtwachstum II

Stranski-Krastanov-Wachstum:

- + Gitterfehlanpassung (Misfit)
- + Fehlanpassungsversetzungen (Misfit-Dislocations)
- + Inseln

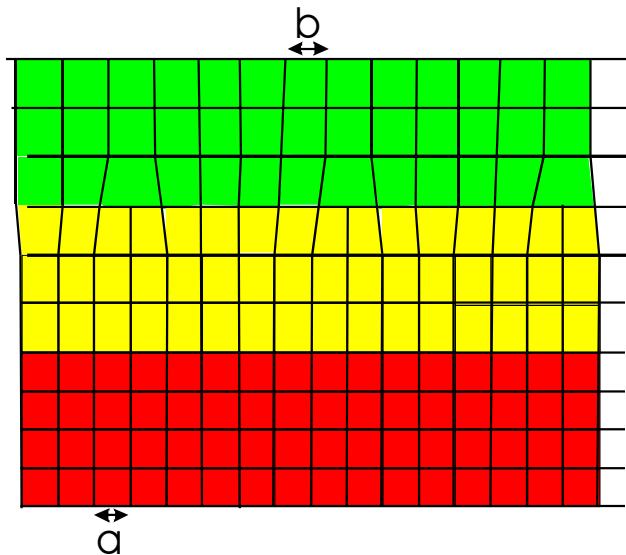


Spannungen und Schichtwachstum III

Detaillierter Mechanismus:

Gitterfehlanpassung (Lattice Mismatch) Δ :

$$\Delta = \frac{a - b}{a} \cdot 100[\%]$$



Schicht, Gitterkonstante b

Pseudomorphe Übergangszone

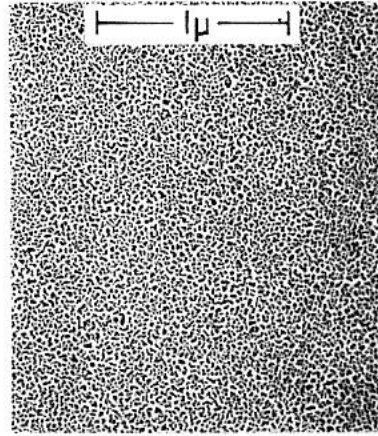
Substrat, Gitterkonstante a

Schichtwachstum: Experimentelles I

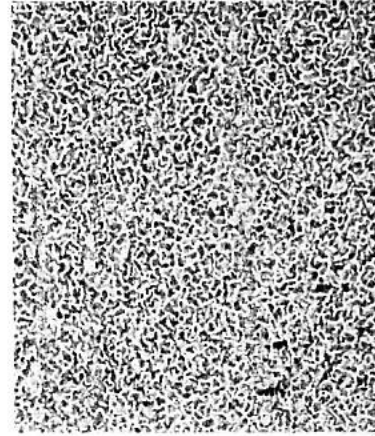
Au auf NaCl, $R=0.1$ nm/s



(a) 25°C 15Å

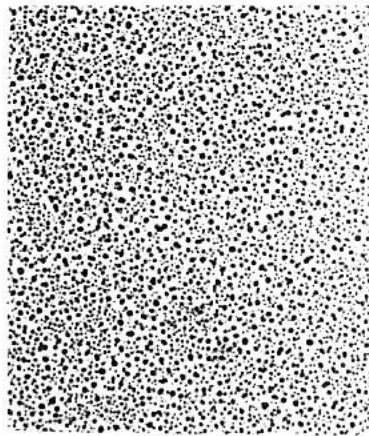


45Å

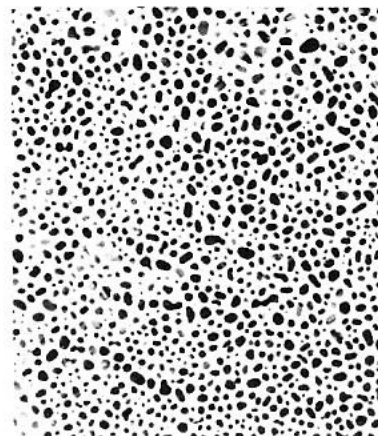


75Å

Schichtdicke



(b) 100Å 100°C



200°C

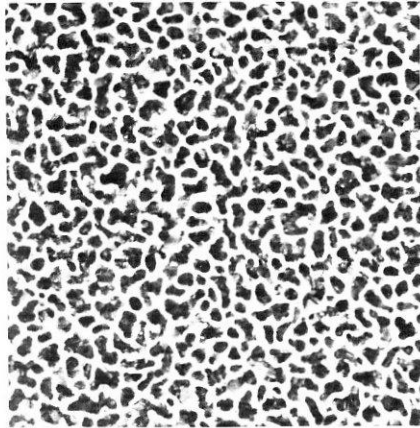


300°C

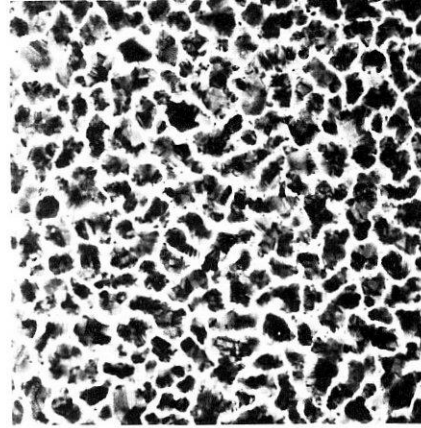
**Substrat-
temperatur**

Schichtwachstum: Experimentelles II

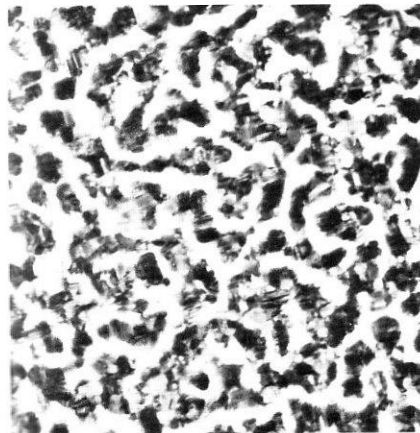
Ag auf NaCl, $R=0.1$ nm/s, $T=100^\circ\text{C}$



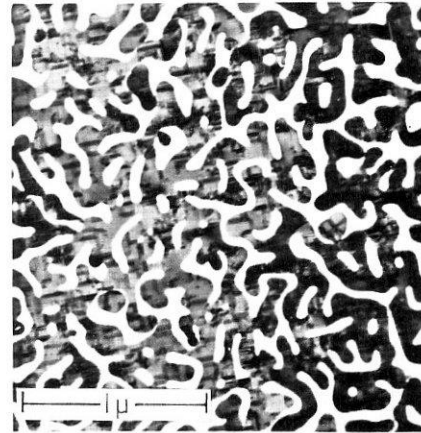
(a)



(b)



(c)



(d)

Koaleszenz:

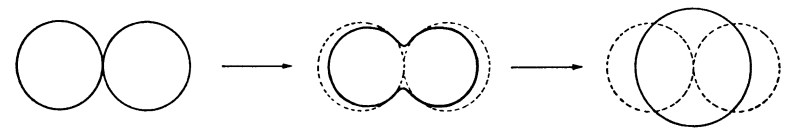
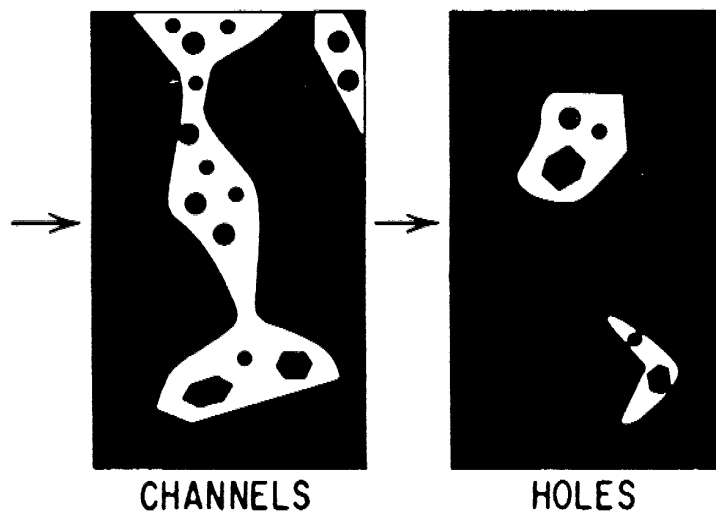
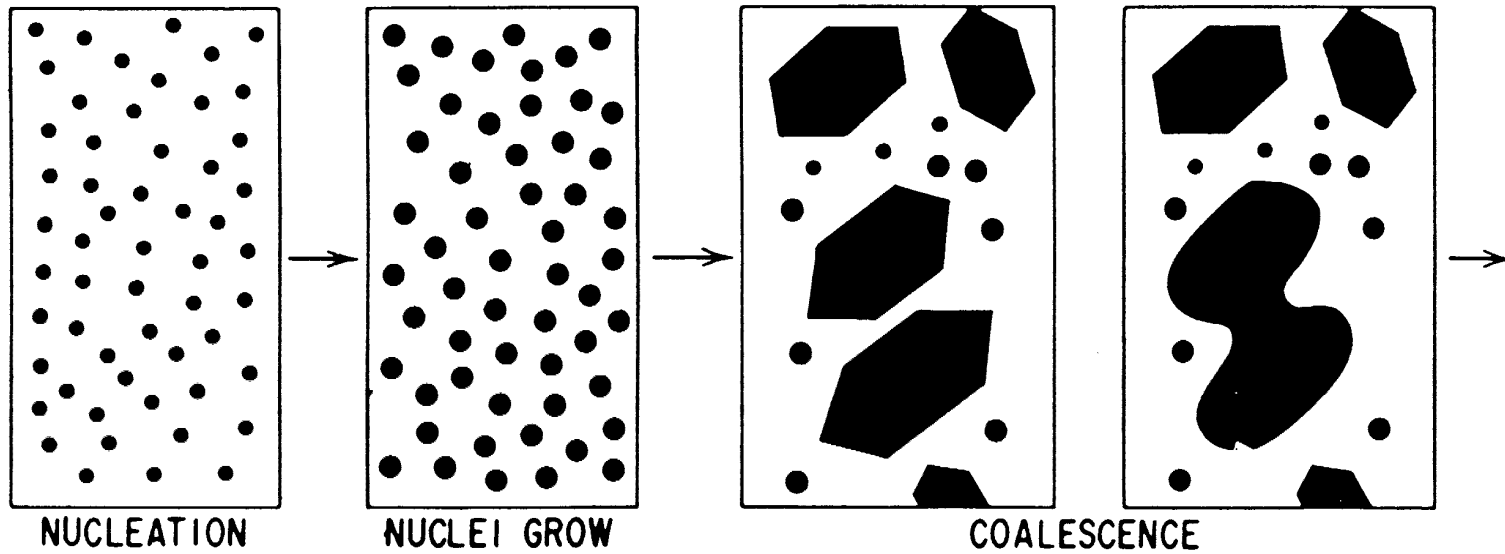
(a) $d=10$ nm

(b) $d=10.5$ nm

(c) $d=11$ nm

(d) $d=11.5$ nm

Schichtwachstum: weitere Schritte

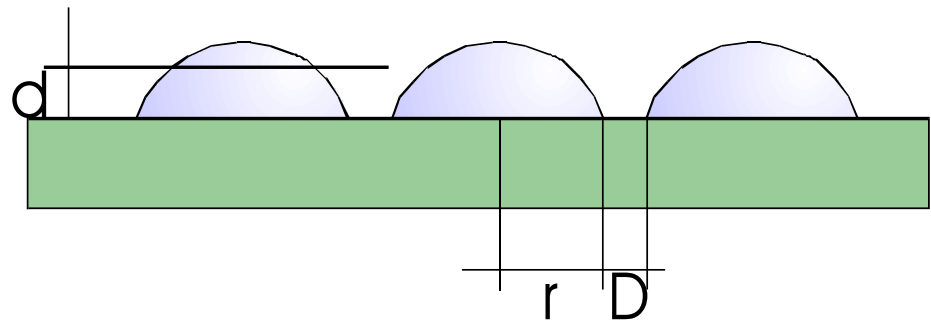


→ CONTINUOUS FILM

Weiteres Wachstum: Rauhigkeit/Schichtstruktur

Die Schichtstruktur ist zu einem guten Teil von der Rauhigkeit der Wachstumsfront in den verschiedenen Wachstumsphasen bestimmt.

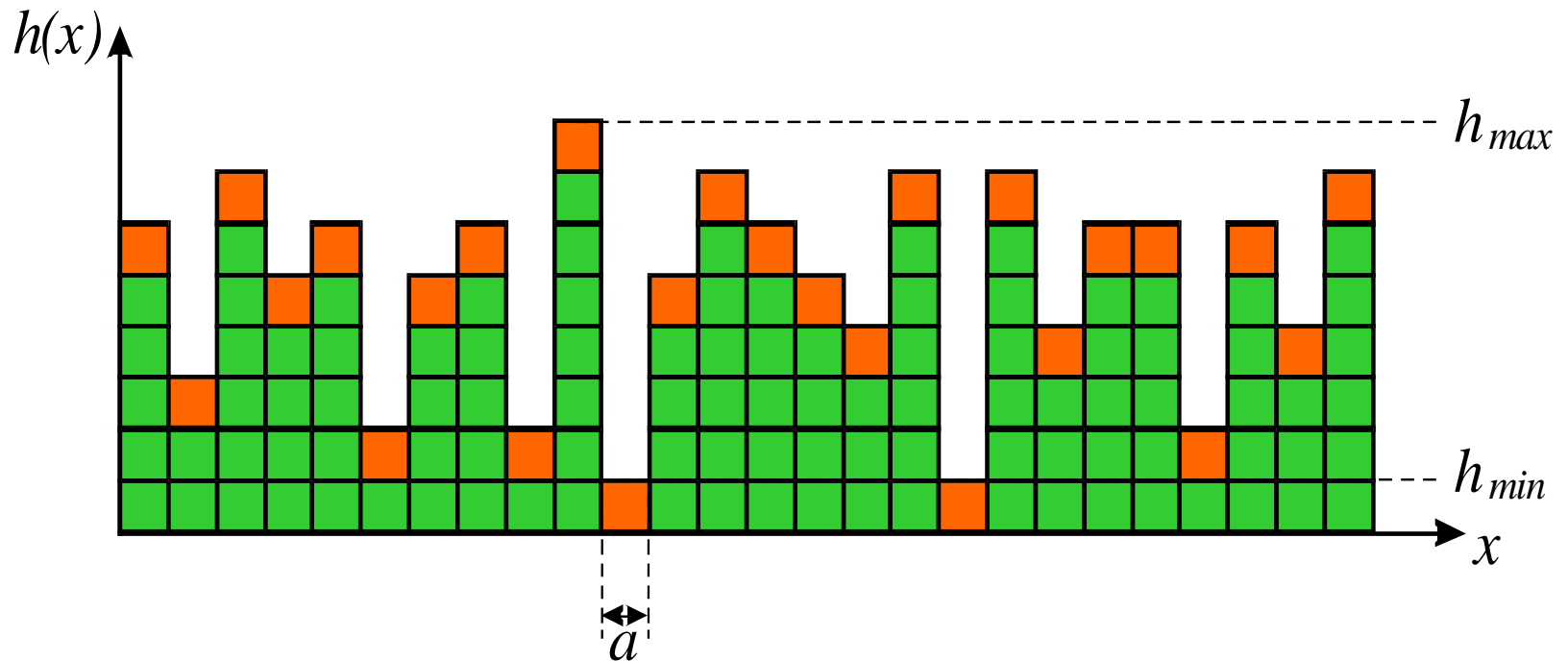
Für sehr dünne Schichten kommt die Rauhigkeit in die Grössenordnung der Schichtdicke und wird daher wichtiger als die mittlere Schichtdicke .



Rauhigkeitstypen I

Stochastische Rauigkeit – Solid on Solid (SOS) Modell

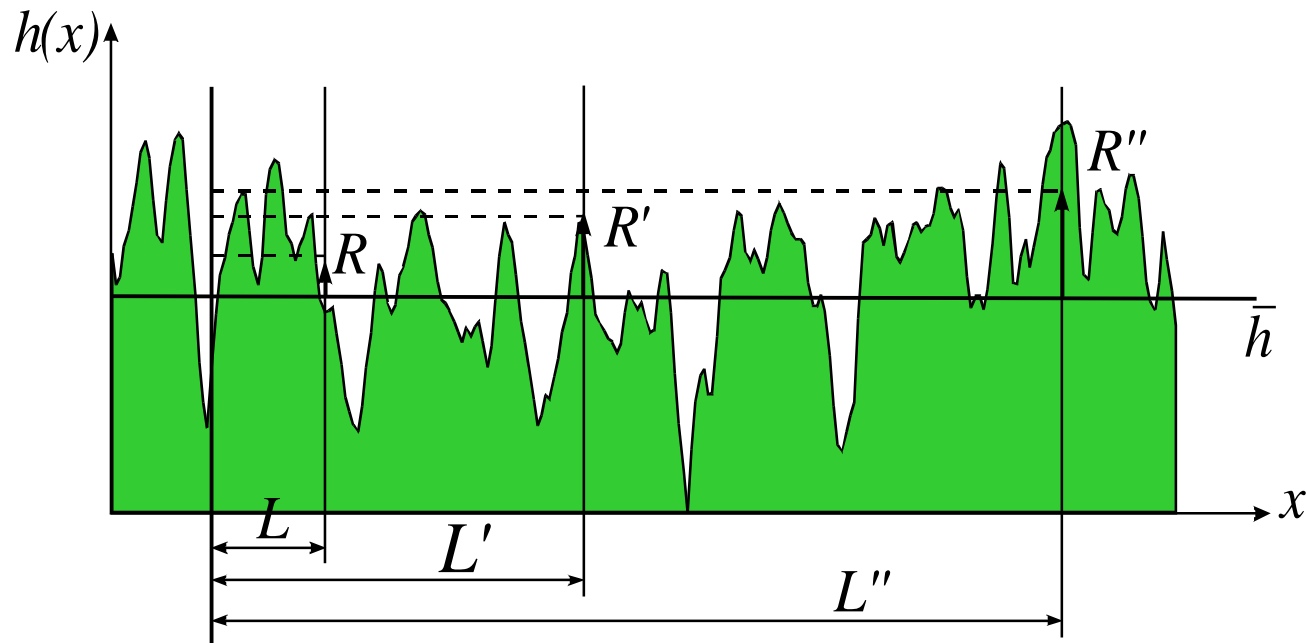
- + Partikel müssen unter sich einen NN haben
- + Partikel haften, wo sie landen



Rauhigkeitstypen II

Selbstähnliche Oberflächen – SOS Modell

- + Partikel können energetisch günstige Positionen einnehmen (z. B. hohe Koordinationszahl)
- + Partikelmigration z. B. durch Oberflächendiffusion

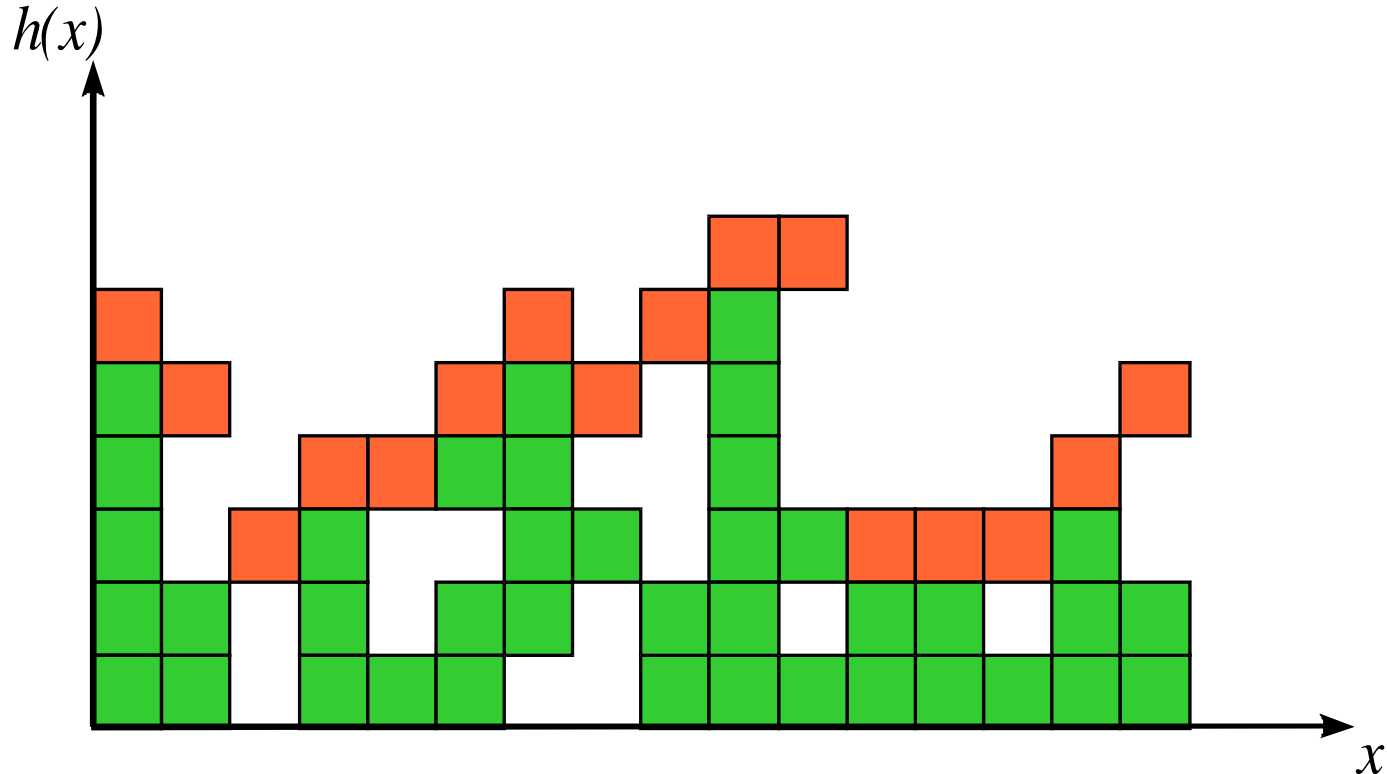


$$R=f(L), R''>R'>R$$

Rauhigkeitstypen III

Ballistische Aggregation – Porenbildung

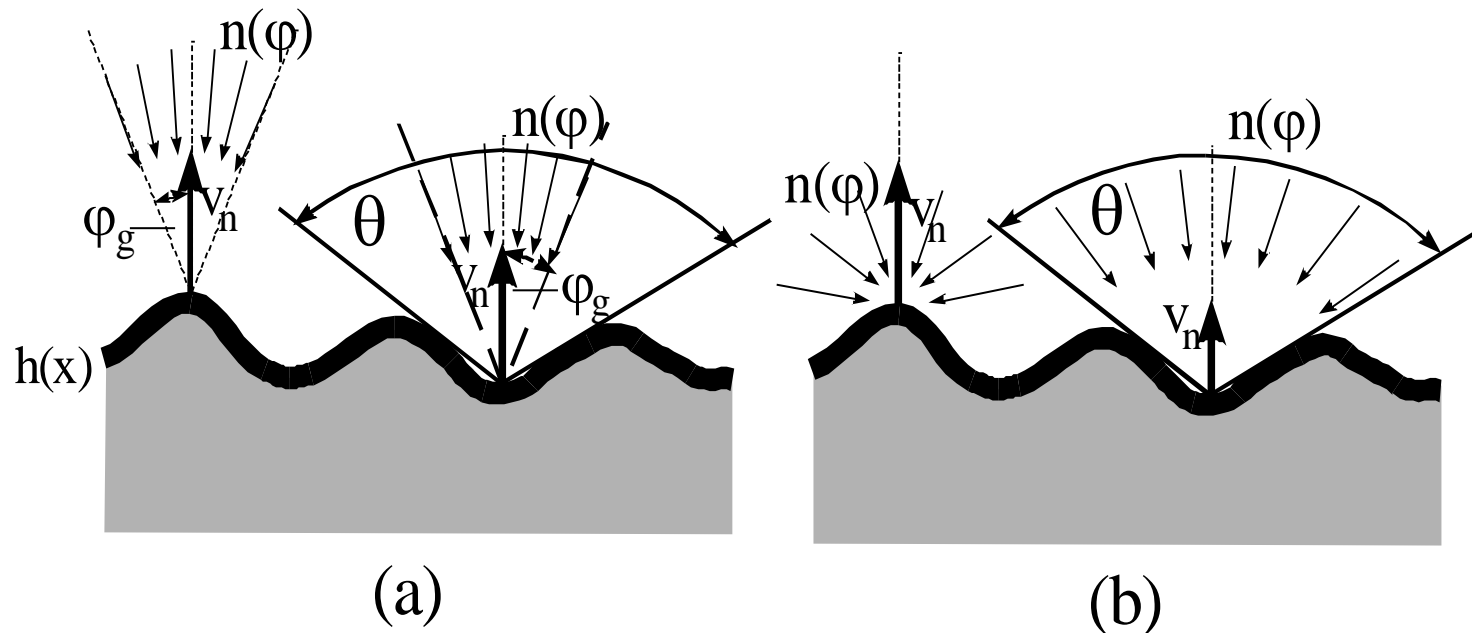
- + Partikel haften, wo sie landen
- + Partikel müssen keinen unteren NN haben



Abschattung

Vorgegebenes Anfangsprofil und Einfallswinkelverteilung

- + **Schmale Einfallswinkelverteilung: Spitzen sehen gleichen Partikelfluss wie Täler (a)**
- + **Breite Einfallswinkelverteilung: Spitzen sehen grösseren Partikelfluss als Täler (b)**

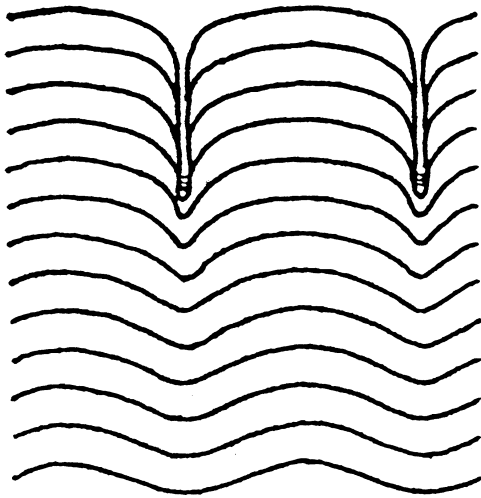


Abschattungsdominiertes Wachstum

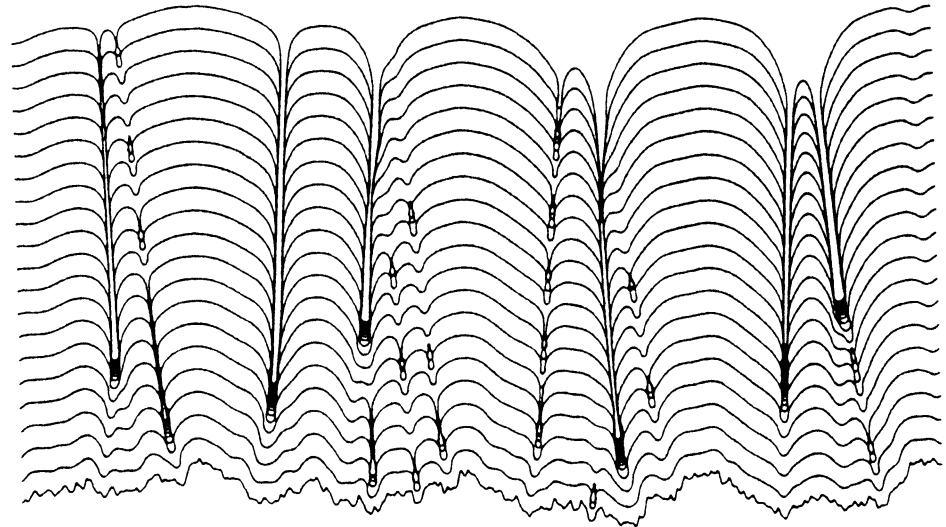
Spitzen wachsen schneller als Täler

+ **Bildung Kolumnarer Strukturen (a)**

+ **Porenbildung in Kombination mit Oberflächendiffusion (b)**



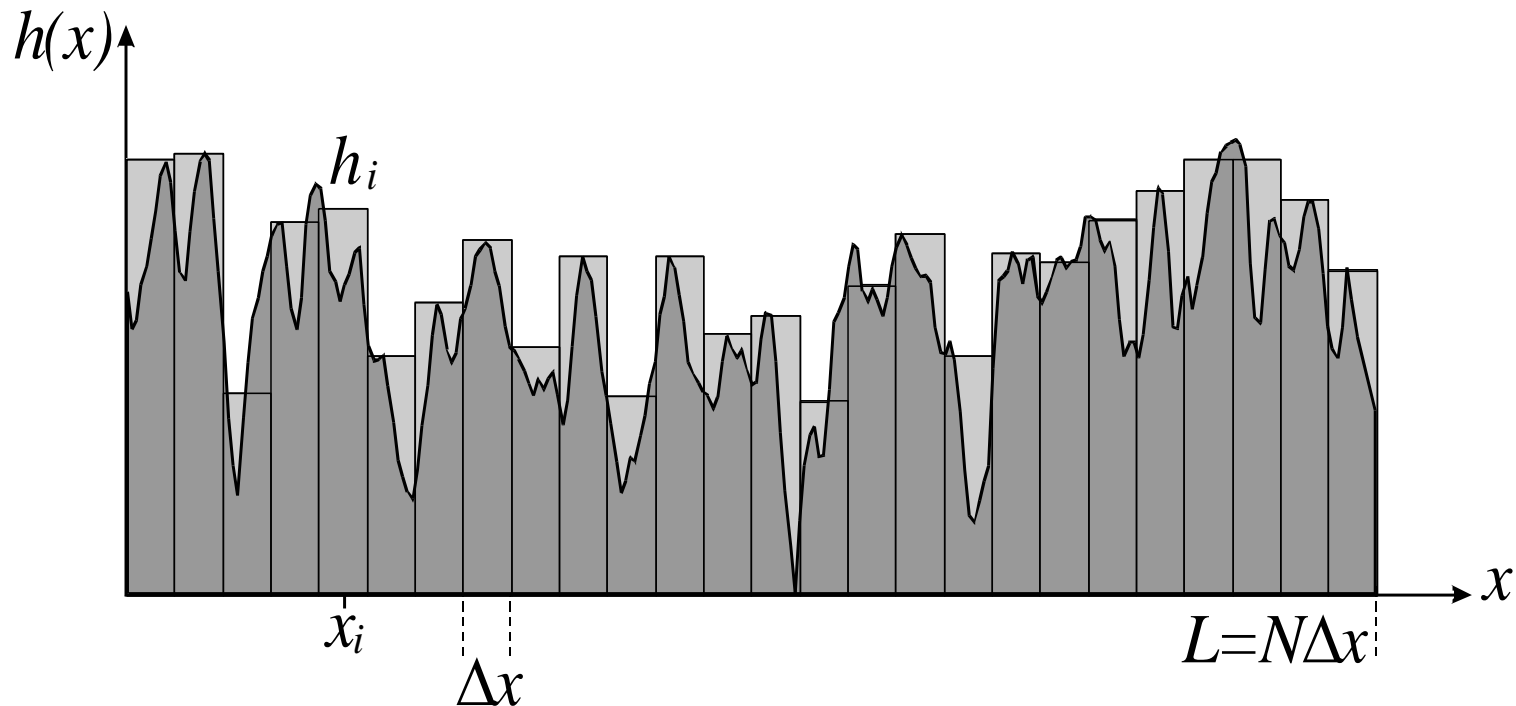
(a)



(b)

Rauhigkeitsmessung im Realraum: Prinzip

Umwandlung einer kontinuierlichen Funktion in diskrete Höhenwerte durch endliche laterale Auflösung eines Messgerätes.



Rauhigkeitswerte (vertikal) können von der lateralen Auflösung des Messgerätes abhängen.

Rauhigkeitsmessung im Realraum: Geräte

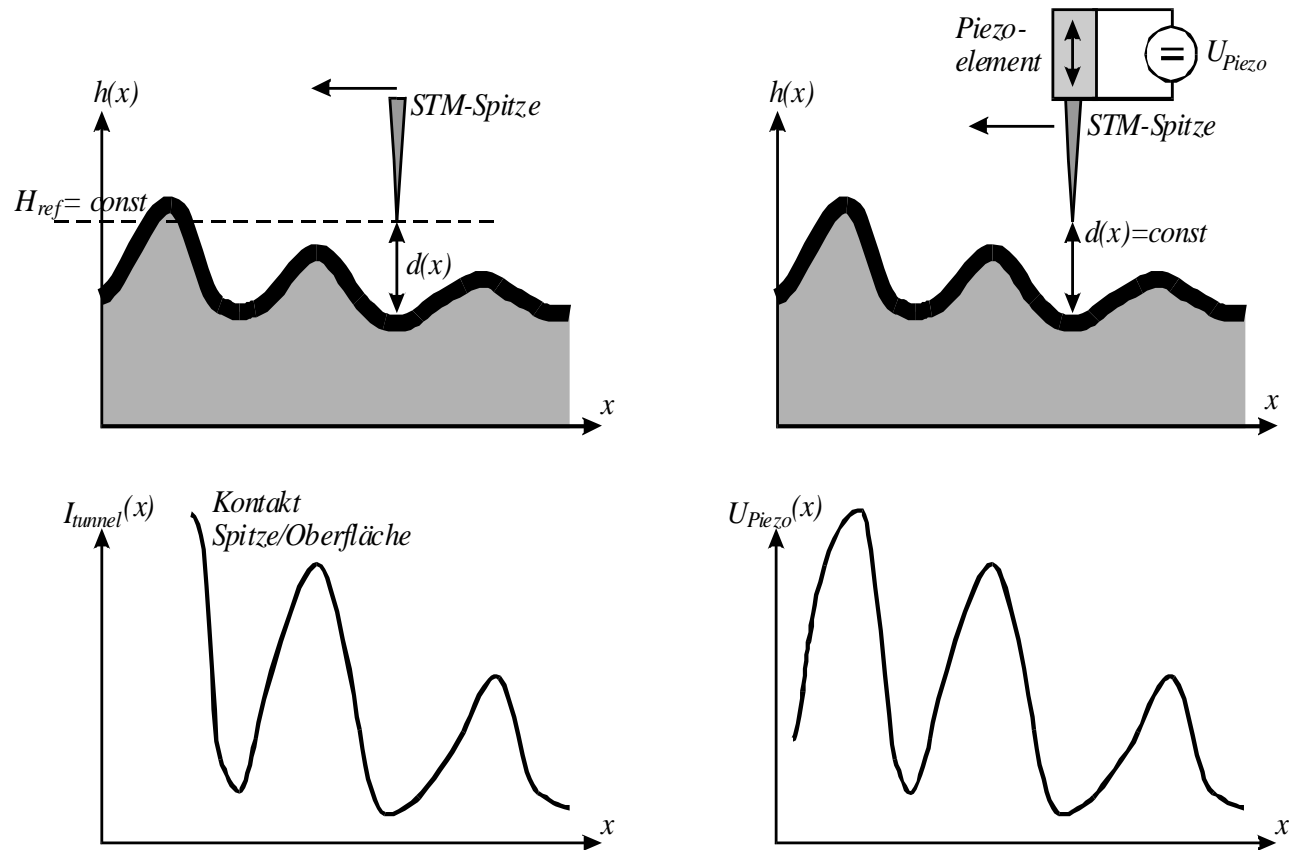
- + **Stylusprofilometer:** **1d**
- + **Rastertunnelmikroskop, STM:** **2d**
- + **Rasterkraftmikroskop, AFM:** **2d**
- + **Opt. Nahfeldmikroskopie, SNOM:** **2d**

Das Rückkopplungsprinzip

Beispiel: STM

(a) absolute Spitzenposition konstant

(b) relative Spitzenposition konstant

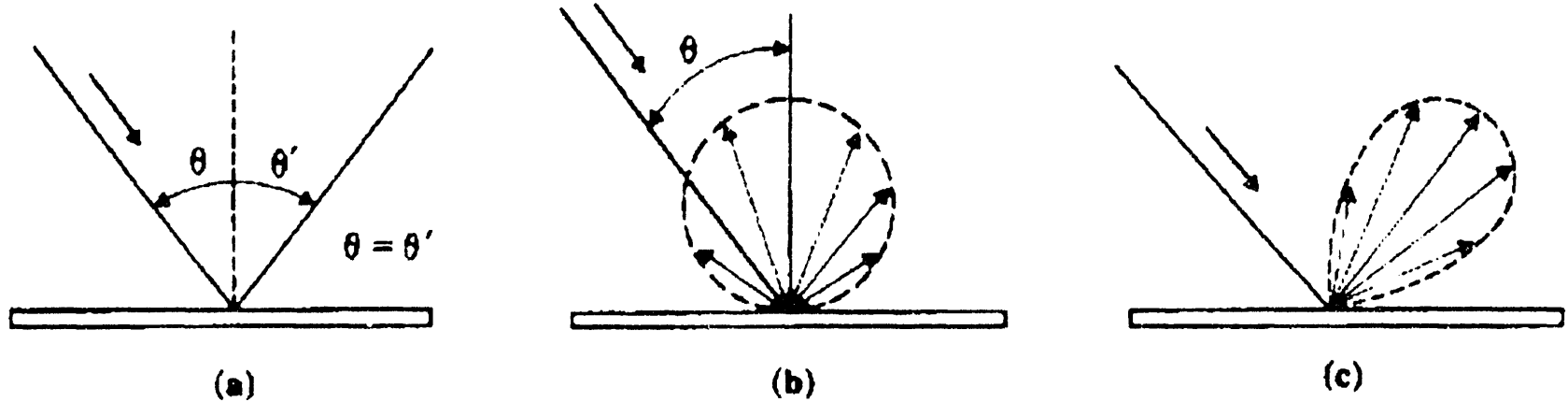


(a)

(b)

Rauhigkeitsmessung im Fourierraum I

Streuung von sichtbarem Licht, Röntgenstrahlen oder Teilchen an äusseren und inneren Oberflächen



(a) Spekulare Reflexion

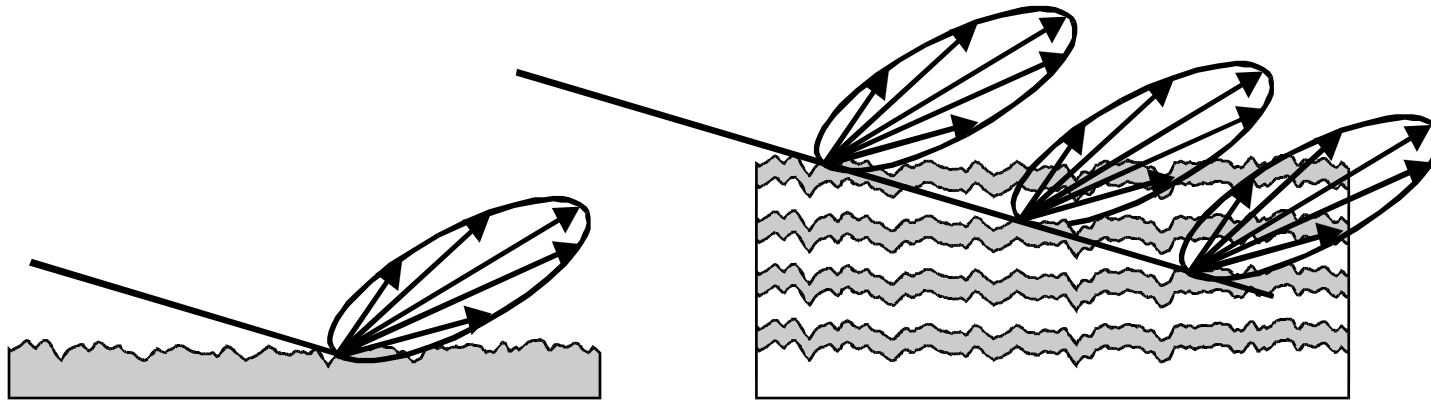
(b) Diffuse Reflexion

(c) Kombiniertes Signal aus (a) und (b)

Rauhigkeitsmessung im Fourierraum II

Äussere Oberflächen

Innere Oberflächen



Licht
Elektronen
Ionen

Röntgenstrahlung
Synchrotronstrahlung

Vorteile:

- + Zerstörungsfrei
- + nicht notwendigerweise vakuumbasiert

Nachteil:

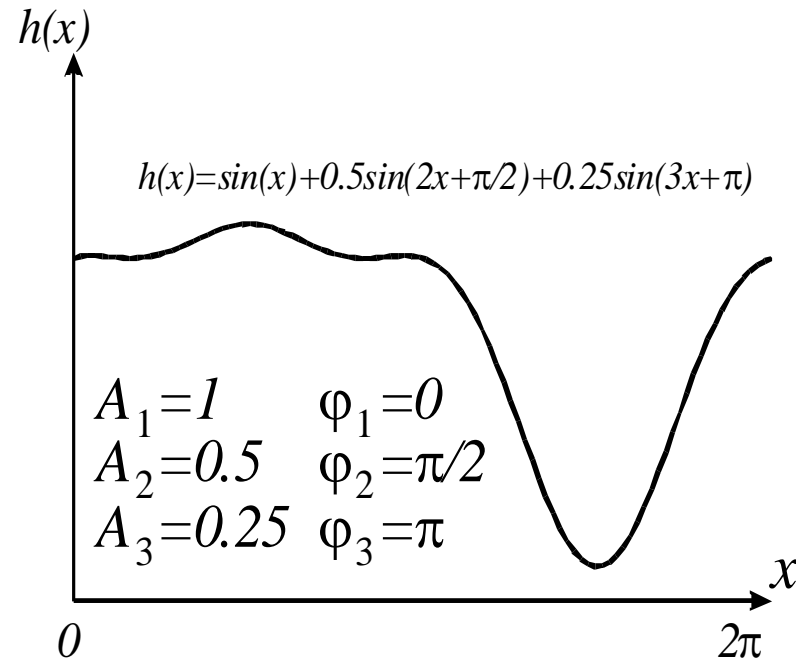
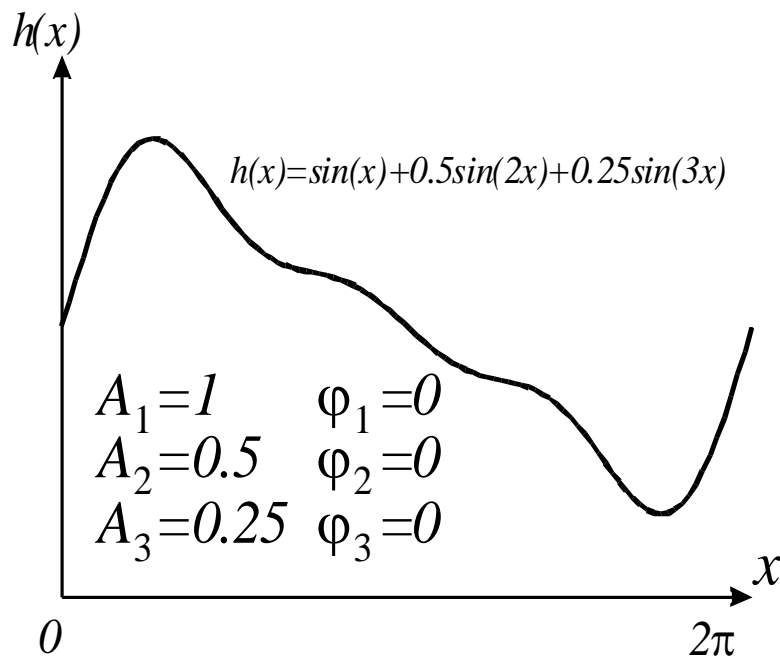
- + Oberflächenprofil nicht eindeutig rekonstruierbar

Verlust der Phaseninformation

Streuung liefert im wesentlichen das Fourerspektrum einer Oberfläche \Rightarrow Verlust der Phaseninformation \Rightarrow keine eindeutige Rekonstruierbarkeit des Profils

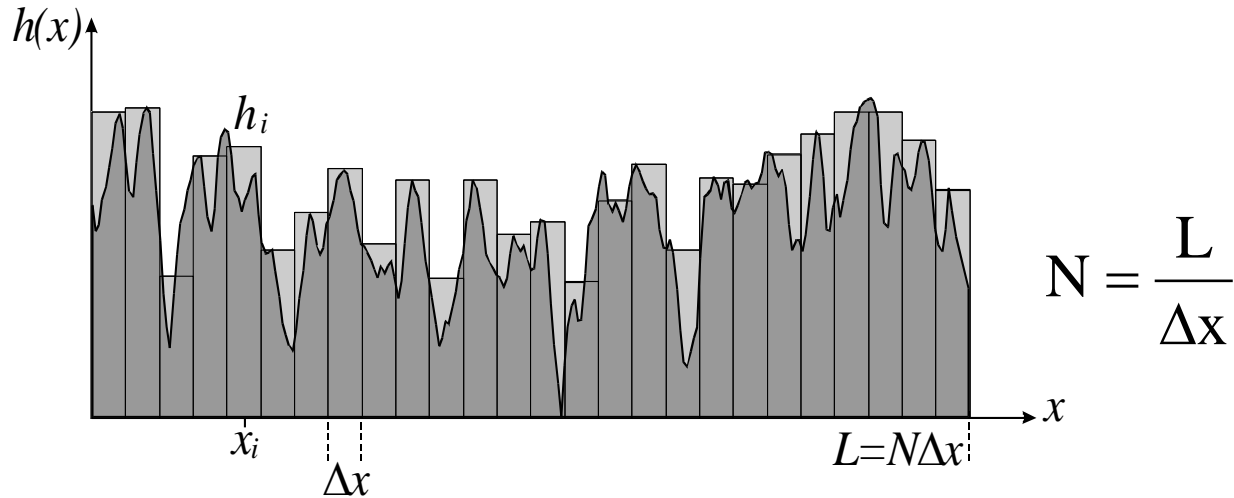
$$h(x) = \sum_{k=0}^N \boxed{A_k} \sin(kx + \boxed{\varphi_k})$$

 bekannt
 unbekannt



Quantifizierung von Rauigkeiten I

Lineares Profil, Sampling Interval Δx



Quadratischer Scan

$$N = \left(\frac{L}{\Delta x} \right)^2$$

$$L_x = L_y \equiv L$$

$$\Delta x = \Delta y \equiv \Delta x$$

Mittlere Schichtdicke

$$\bar{h} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h_i$$

Quantifizierung von Rauigkeiten II

R_a -Wert: Mittlere absolute Abweichung

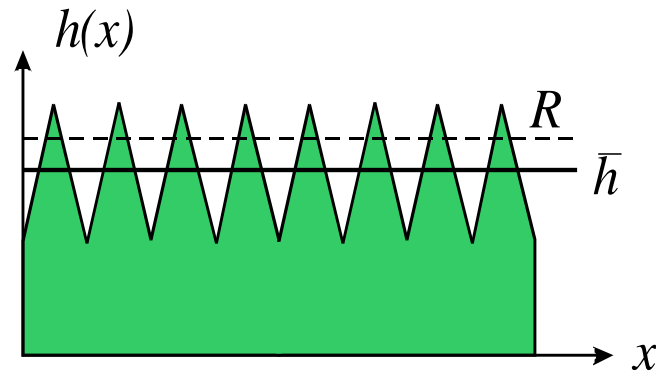
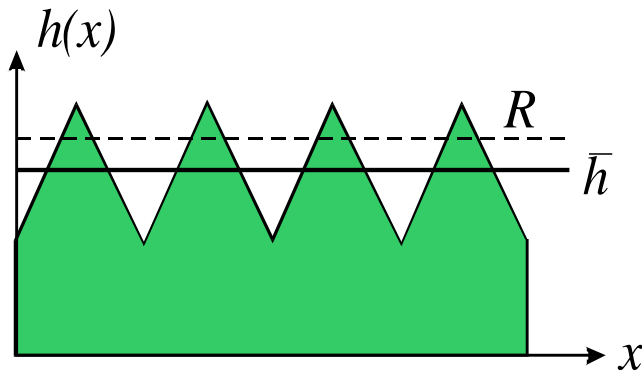
$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\bar{h} - h_i|$$

**R_q -Wert oder RMS-Wert:
Mittlere quadratische Abweichung**

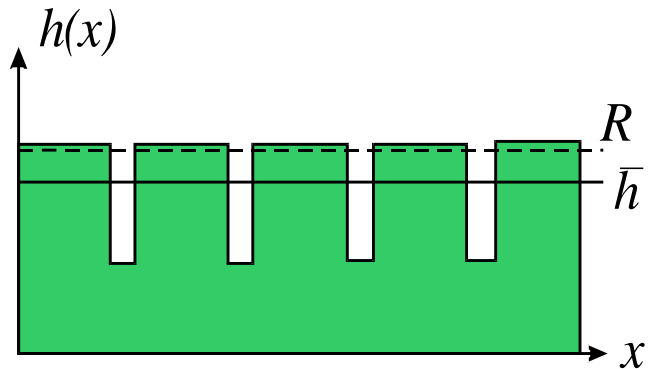
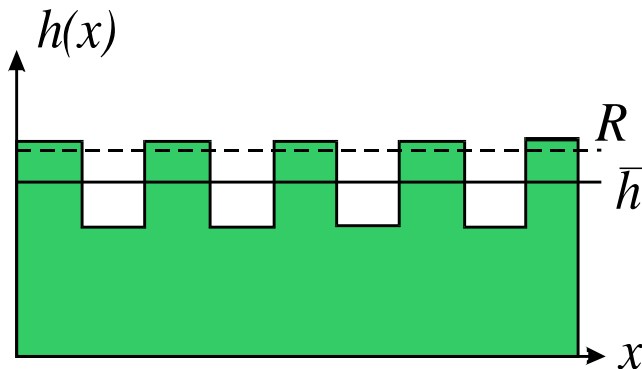
$$R_q = R_{\text{RMS}} = \text{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{h} - h_i)^2}$$

Quantifizierung von Rauigkeiten III

Verschiedene Profile können gleiche R_a bzw. RMS-Werte liefern:



verschiedene Periodizitäten



verschiedene Symmetrien

Formspezifische Parameter

Erlauben begrenzte Aussagen über Profilform:

Skewness Sk:

$$Sk = \frac{1}{NR_q^3} \sum_{i=1}^N (h_i - \bar{h})^3$$

Sk<0:

viele Höhenwerte < \bar{h}

Sk>0:

viele Höhenwerte > \bar{h}

Kurtosis K:

$$K = \frac{1}{NR_q^4} \sum_{i=1}^N (h_i - \bar{h})^4$$

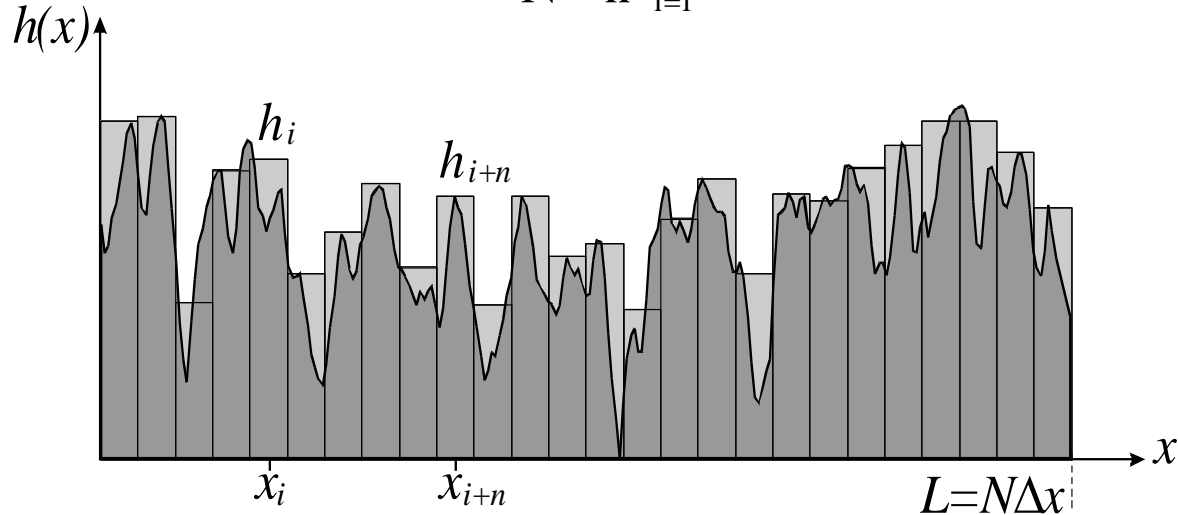
**K: Mass für die mittlere
Flankensteilheit**

Korrelationsfunktionen

Erlauben detaillierte Aussagen sowohl über vertikale als auch laterale Profileigenschaften:

Punkt-Punkt-Korrelationen an einem diskretisierten Profil:

z. B.:
$$R(X) = R(n \cdot \Delta x) = \frac{1}{N-n} \sum_{i=1}^{N-n} (h_i - \bar{h}) \cdot (h_{i+n} - \bar{h})$$



$n=0 \Rightarrow N$ Punktpaare

$n=1 \Rightarrow N-1$ Punktpaare

$n=2 \Rightarrow N-2$ Punktpaare

Es können daher immer $N-n$ Punktpaare im Intervall korreliert werden

Autokovarianzfunktion

Diskretisiert

$$R(X) = R(n \cdot \Delta x) = \frac{1}{N-n} \sum_{i=1}^{N-n} (h_i - \bar{h}) \cdot (h_{i+n} - \bar{h})$$

Kontinuum

$$R(\tau) = \frac{1}{L-\tau} \int_0^{L-\tau} (h(x) - \bar{h}) \cdot (h(x+\tau) - \bar{h}) dx$$

Strukturfunktion

Diskretisiert

$$S(X) = S(n \cdot \Delta x) = \frac{1}{N - n} \sum_{i=1}^{N-n} [(h_i - \bar{h}) - (h_{i+n} - \bar{h})]^2$$

Kontinuum

$$S(\tau) = \frac{1}{L - \tau} \int_0^{L-\tau} [(h(x) - \bar{h}) - (h(x + \tau) - \bar{h})]^2 dx$$

Zusammenhang zwischen $R(\tau)$ und $S(\tau)$

Normierte Autokovarianzfunktion (Autokorrelationsfunktion):

$$\rho(X) = R(X) / R(0) \quad \text{oder} \quad \rho(\tau) = R(\tau) / R(0)$$

Es gilt:

$$R(0) = R_q^2$$
$$S(\tau) = 2R_q^2 [1 - \rho(\tau)]$$

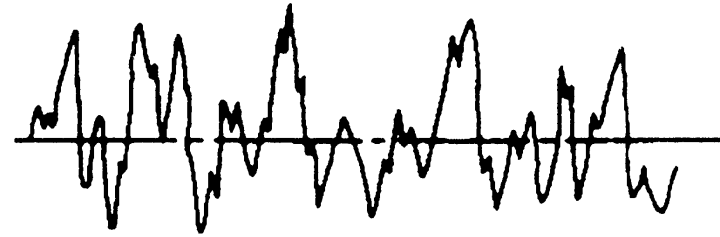
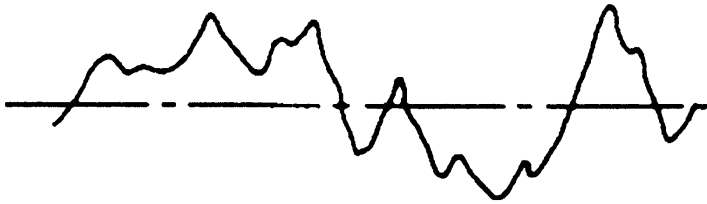
Zusammenfassung Korrelationsfunktionen

Nicht normierte Größen	Normierte Größen
Autokovarianzfunktion $R(\tau) = \langle h(x) \cdot h(x + \tau) \rangle dx$	Autokorrelationsfunktion $\rho(\tau) = R(\tau) / R(0)$
Strukturfunktion $S(\tau) = \langle [h(x) - h(x + \tau)]^2 \rangle$ $S(\tau) = 2R_q^2 [1 - \rho(\tau)]$	

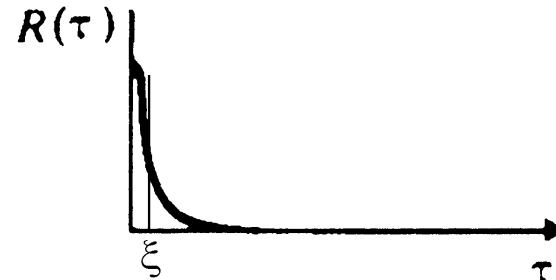
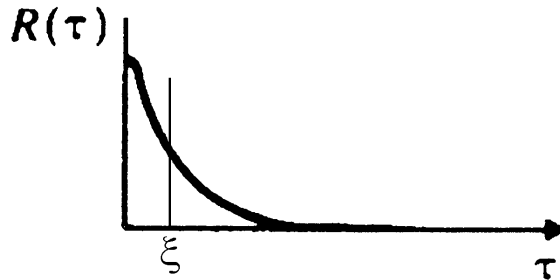
Man beachte: Alle Höhenwerte werden von der mittleren Höhe \bar{h} aus gemessen.

Korrelationslänge ξ

Oberflächenprofil



Autokovarianzfunktion



Innerhalb von ξ weist das Profil ähnliche Höhenwerte auf.

Periodizitäten liegen vor, wenn $R(\tau)$ maxima bei $\tau \neq 0$ aufweist.

Korrelationsfunktionen und Fourierspektren

**Ergebnis eines Streuexperimentes:
"Power Spectral Density"**

$$P(k) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L \cdot (2\pi)^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} h(r) e^{ikr} dr \right|^2$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

λ ... **Wellenlänge
eines Oberflächen-
merkmals**

**P(k) ist die Fouriertransformierte der
Autokovarianzfunktion R(τ).**

$$P(k) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} R(r) e^{ikr} dr$$

***Ein Streuexperiment liefert daher im wesentlichen
die Autokovarianzfunktion mit allen zugehörigen
statistischen Kenngrößen (ξ , R_q).***