

Versuch Nr.V44

# Röntgenreflektometrie

Jana Schlücking  
jana.schluecking@tu-dortmund.de

Benedikt Sander  
benedikt.sander@tu-dortmund.de

Durchführung: 17.10.2022

Abgabe: 04.10.2022

TU Dortmund – Fakultät Physik

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Zielsetzung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
2.1	Brechung . . . . .	3
2.2	Fresnel Formel . . . . .	3
2.3	Mehrschichtsystem . . . . .	4
2.4	Geometriefaktor und Geometriewinkel . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Aufbau</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Durchführung</b>	<b>7</b>
4.1	Justage . . . . .	7
4.2	Messung . . . . .	8
<b>5</b>	<b>Auswertung</b>	<b>9</b>
5.1	Detektorscan . . . . .	9
5.2	Erster Z-Scan . . . . .	10
5.3	Rockingscan . . . . .	10
5.4	Reflektivitäts- und Diffuser Scan . . . . .	11
5.5	Parratt-Algorithmus . . . . .	13
<b>6</b>	<b>Diskussion</b>	<b>15</b>

# 1 Zielsetzung

In diesem Versuch soll die Dichte, Rauigkeit und Schichtdicke eines dünnen Polystyrolfilms mit Hilfe von Röntgenreflektometrie ermittelt werden.

## 2 Theorie

Die Probe wird mit Röntgenstrahlen, welche Wellenlängen zwischen  $\lambda = 0,1 \text{ \AA}$  und  $\lambda = 10 \text{ \AA}$  haben, untersucht.

### 2.1 Brechung

Trifft eine elektromagnetische Welle auf eine Grenzfläche zweier Medien, die verschiedene Brechungsindizes  $n_1 \neq n_2$  haben, findet Brechung statt. Nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\cos(\alpha_2)}{\cos(\alpha_1)}$$

ändert sich die Ausbreitungsrichtung der Welle. Der Brechungsindex kann über

$$n = 1 - \delta + i\beta$$

ausgedrückt werden. Dabei ist  $\delta$  ein Korrekturterm der Größenordnung  $10 \cdot 10^{-6}$  und  $\beta$  steht für die Absorption der Strahlung in dem bestimmten Medium. Für Röntgenstrahlung ist  $\delta > 0$ . Der Realteil des Brechungsindex ist dementsprechend kleiner als eins. Dies ermöglicht die äußere Totalreflexion, die nur beim Übergang eines optischen dichteren Mediums in ein optisch dünneres Medium auftreten kann, solange die Grenzfläche zwischen den Medien eine homogene Ebene bildet. Der kritische Winkel  $\alpha_c$ , bei dem es zur Totalreflexion kommt, kann bei Vernachlässigung der Absorption und für kleine Winkel als

$$\sqrt{2\delta} \approx \alpha_c = \lambda \sqrt{\frac{r_e \rho}{\pi}} \quad (1)$$

ausgedrückt werden. Dabei ist  $r_e$  der klassische Elektronenradius und  $\rho$  die Elektronendichte des Materials.

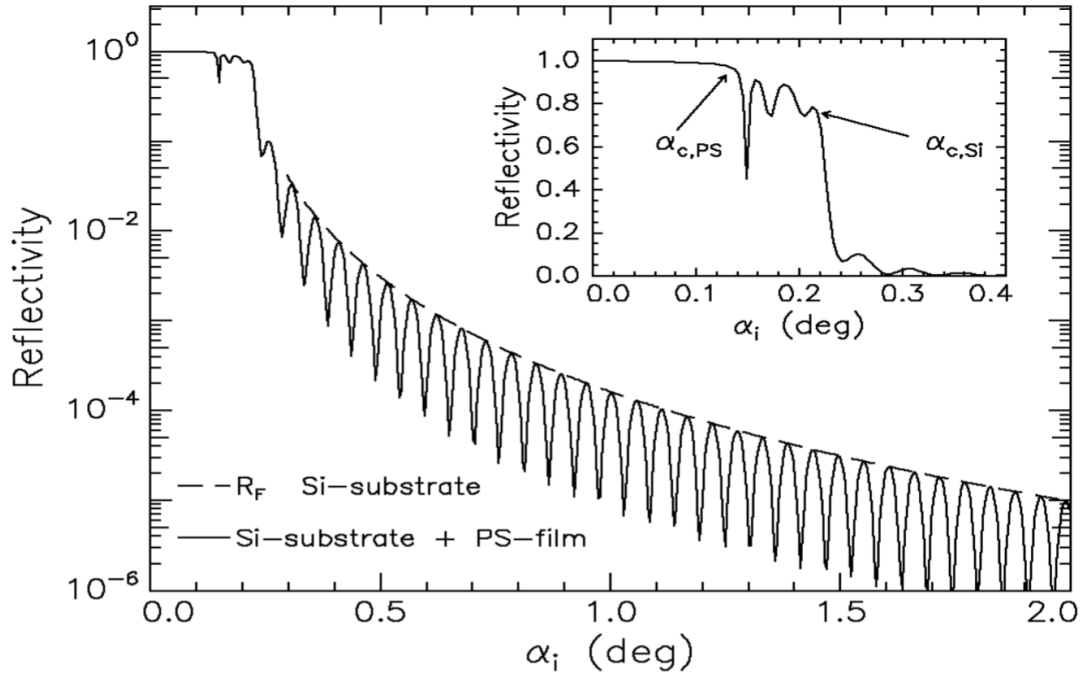
### 2.2 Fresnel Formel

Die Intensitäten der reflektierten und transmittierten Anteile von elektromagnetischen Wellen können durch die Fresnel Formel beschrieben werden. Hier wird keine Unterscheidung zwischen  $s$ - und  $p$ -Polarisation gemacht, da diese bei sehr ähnlichen Brechungsindizes  $n_1 \approx n_2$  nicht notwendig ist. Es ergeben sich

$$r = \frac{n \cos(\alpha_1) - n \cos(\alpha_2)}{n \cos(\alpha_1) + n \cos(\alpha_2)}$$
$$t = \frac{2n \cos(\alpha_1)}{n \cos(\alpha_1) + n \cos(\alpha_2)}.$$

### 2.3 Mehrschichtsystem

Besteht die Probe nicht nur aus einem Material, sondern aus mehreren Schichten, so wird an jeder Grenzfläche ein Teil der Strahlung reflektiert und der andere Teil gebrochen und transmittiert. Unter den an verschiedenen Grenzflächen reflektierten Anteilen tritt Interferenz auf. In Abbildung 1 ist die Reflektivität abhängig vom Einfallswinkel aufgetragen. Es handelt sich dort um ein Material mit zwei Schichten. In dem vergrößerten Bereich sind



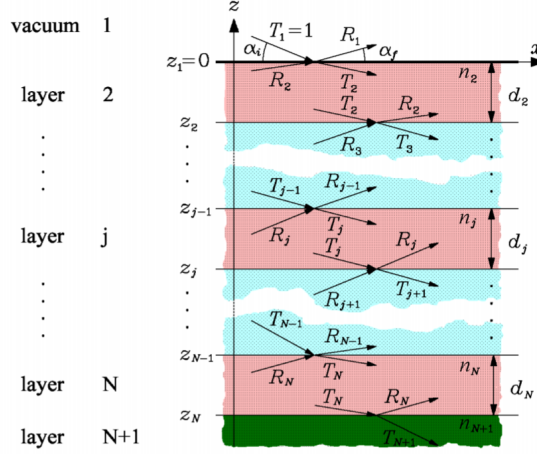
**Abbildung 1:** Die Reflektivität eines Siliziumwafers mit einer 800 Å dicken Polystyrolschicht aufgetragen gegen den Einfallswinkel der Röntgenstrahlung. [1]

zwei Winkel  $\alpha_c$  aufgetragen, welche für die Totalreflexion der Röntgenstrahlung an der Polystyrolschicht und an dem Siliziumwafer stehen. Anschließend fällt die Reflektivität ab. Dabei werden die sogenannten Kiessig-Oszillationen sichtbar. Aus dem Abstand aufeinanderfolgender Minima (oder Maxima) können Schichtdicken ermittelt werden, da der Gangunterschied der interferierenden Wellen für destruktive Interferenz ein Vielfaches von  $\frac{\pi}{2}$  sein muss. Es folgt

$$d = \frac{2\pi}{\delta q_z} = \frac{\lambda}{2\delta \alpha_1} \quad , \quad (2)$$

wobei  $\vec{q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1$  und  $q_z = 2k \sin(\alpha_1)$  gilt.

Bei einem System mit mehr Schichten, wie es in Abbildung 2 zu sehen ist, kann die Reflektivität mithilfe des rekursiven Parratt-Algorithmus berechnet werden. Hier wird angenommen, dass die unterste Schicht unendlich dick ist und hier keine Reflexion stattfindet. Es gilt also  $R_{N+1} = 0 = X_{N+1}$ , dies dient als Startpunkt der Rekursion. Der



**Abbildung 2:** Schematische Darstellung eines Mehrschichtensystems mit  $N + 1$  Schichten. An der ersten Schicht trifft der Strahl unter dem Winkel  $\alpha_1$  ein mit  $T_1 = 1$ . An jeder Grenze zweier Schichten, beispielsweise an der Höhe  $z_{j+1}$ , kommt von oben der durch die letzte Schicht transmittierte Strahl mit  $T_{j-1}$  und der an der nächsten Schicht reflektierte Strahl  $R_j$  an. Der an dieser Grenze reflektierte Anteil wird mit  $R_{j-1}$  bezeichnet und der transmittierte Teil mit  $T_j$ . Die letzte Schicht ist so dick, dass an der letzten Grenzfläche kein reflektierter Anteil  $R_{N+1}$  ankommt. [1]

Parratt-Algorithmus besitzt folgende Form

$$X_j = \frac{R_j}{T_j} = \exp\left(-2ik_{z,j}z_j\right) \cdot \frac{r_{j,j+1} + X_{j+1} \exp\left(2ik_{z,j+1}z_j\right)}{1 + r_{j,j+1}X_{j+1} \exp\left(2ik_{z,j+1}z_j\right)}.$$

Hierbei steht  $r_{j,j+1}$  für die Fresnelreflektivität der  $j$ -ten Grenzfläche und  $k_{z,j}$  für die  $z$ -Komponente des Wellenvektors in der  $j$ -ten Schicht.

Um die Rauigkeit der Grenzflächen einzubeziehen wird die „root-mean-square“-Rauigkeit eingeführt

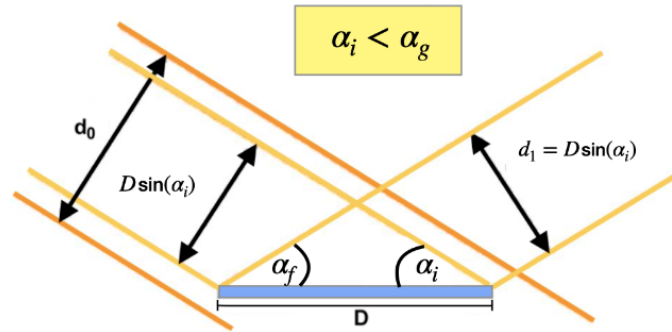
$$\sigma_j^2 = \int (z - z_j)^2 P_j(z) dz.$$

Es steht  $z_j$  für die Position der  $j$ -ten Grenzfläche und  $P_j(z)$  für die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Grenzsicht im Intervall  $z + z_j, z + z_j +$  befindet. Der Parratt-Algorithmus arbeitet dann mit den modifizierten Fresnel-Koeffizienten

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{j,j+1} &= r_{j,j+1} \cdot \exp\left(-2k_{z,j}k_{z,j+1}\sigma_j^2\right) \\ \tilde{t}_{j,j+1} &= t_{j,j+1} \cdot \exp\left((k_{z,j} - k_{z,j+1})^2 \frac{\sigma_j^2}{2}\right). \end{aligned}$$

## 2.4 Geometriefaktor und Geometriewinkel

In Abbildung 3 ist veranschaulicht dass erst ab einem genügend großen Einfallswinkel der gesamte Strahl die Oberfläche trifft. Dieser Winkel wird Geometriewinkel  $\alpha_g$  genannt. Der Geometriefaktor wird für eine Probe des Durchmessers  $D$  und bei einer Strahlhöhe



**Abbildung 3:** Strahlverlauf zur Veranschaulichung des Geometriewinkels  $G$ . [17]

von  $d_0$  geschrieben als

$$G = \begin{cases} \frac{D \sin \alpha_i}{d_0} & \alpha_i < \alpha_g \\ 1 & \alpha_i > \alpha_g \end{cases} . \quad (3)$$

Er berücksichtigt die Tatsache, dass kleine Winkel unterrepräsentiert sind, und durch ihn können die Daten später skaliert werden.

## 3 Aufbau

Der Versuch wird mithilfe eines D8-Labordiffraktometers der Firma Bruker-AXS durchgeführt. Dieses ist in Abbildung 4 zu sehen. Es handelt sich um ein  $\theta$ - $\theta$ -Diffraktometer, wobei sich der Detektor und die Röntgenröhre jeweils um den Proben Tisch bewegen können. Die Röntgenstrahlen werden mithilfe einer Röntgenröhre erzeugt. Diese hat eine Kupferanode und wird mit einem Strom von 35 mA bei einer Spannung von 40 kV betrieben.

Das Diffraktometer wird mit dem Programm „XRD Commander“ gesteuert.



Abbildung 4: Das im Versuch benutzte D8-Labordiffraktometer. [2]

## 4 Durchführung

Der Versuch besteht aus der Justage des Röntgenreflektometers und den anschließenden zwei Messungen. Bevor mit der Justage begonnen werden kann, muss der Siliziumwafer mit einer Pinzette vorsichtig möglichst mittig auf den Proben­­tisch gelegt werden. In der Justage werden alle Scans mit einer Messdauer von 1 s pro Messpunkt durchgeführt.

### 4.1 Justage

Zuerst wird der **Detektorscan** durchgeführt. Dafür wird der Proben­­tisch aus dem Strahlengang gefahren. Anschließend wird der Detektor im Bereich von  $-0,5\text{ mm}$  bis  $0,5\text{ mm}$ , bei einer Schrittbreite von  $0,02\text{ mm}$ , bewegt. Damit wird die genaue Nulllage des Detektors ermittelt. Anschließend wird die neue Nulllage auf die Stelle des Intensitätsmaximums dieser Messung gelegt.

Nach Augenmaß wird der Proben­­tisch an eine gute Position gefahren. Nun wird ein **Z-Scan** gemacht, wobei der Bereich von  $-1\text{ mm}$  bis  $1\text{ mm}$ , bei einer Schrittweite von  $0,04\text{ mm}$ , vermessen wird. Hierbei bewegt sich der Proben­­tisch auf der  $z$ -Achse und fährt sich von unten in den Strahlengang. Sobald die Probe im Strahlengang ist, nimmt die Intensität ab. Es wird anschließend die  $z$ -Position eingestellt, bei der die halbe Intensität gemessen wurde.

Nun wird ein **X-Scan** gemacht, wo die Intensität gemessen wird während der Proben­­tisch entlang der  $x$ -Richtung von  $-20\text{ mm}$  bis  $20\text{ mm}$  in Schritten von  $1\text{ mm}$  durch den Strahlengang geschoben wird. Dabei ergibt sich ein tiefliegendes Plateau, welches dem

Durchlaufen der Probe entspricht. Die neue  $x$ -Koordinate des Probenstisch wird auf einen Wert innerhalb des Plateaus gelegt.

Es wird ein **Rockingscan** mit einem Winkel  $2\Theta = 0$  durchgeführt. Dabei bewegen sich Röhre und Detektor um die Probe. Es wird von  $-1^\circ$  bis  $1^\circ$  bei einer Schrittweite von  $0,04^\circ$  gemessen. Die Intensitäten sollen möglichst einem gleichschenkligen Dreieck entsprechen. Falls dies nicht der Fall ist, wird die  $y$ -Koordinate des Probenstischs verändert. Der Winkel bei dem Intensitätsmaximum wird gespeichert und so werden Röhre und Detektor ausgerichtet.

Nun liegt die Probe nicht mehr mittig im Strahl und wird mit einem **zweiten Z-Scan** auf ihre  $z$ -Koordinate untersucht. Es wird wieder im Bereich von  $-0,5$  mm bis  $0,5$  mm in Schritten von  $0,02$  mm die Intensität gemessen. Die  $z$ -Koordinate des Probenstischs wird auf die Stelle der Hälfte der maximalen Intensität gestellt.

Um die Probe noch genauer zu justieren wird ein **zweiter Rockingscan** mit einem Winkel von  $2\Theta = 0,3^\circ$  durchgeführt. Es wird von  $0^\circ$  bis  $0,3^\circ$  in Schritten von  $0,005^\circ$  gemessen. Dabei sollte ein deutlicher Reflex zu sehen sein. Ist dies der Fall, so wird das Maximum des Reflexes durch das Computerprogramm gefunden und diese Auslenkung als Winkel von  $0,15^\circ$  gespeichert.

Aus einem abschließenden **dritten Z-Scans** kann die halbe Abschattung genauer bestimmt werden. Es wird unter einem Winkel von  $2\Theta = 0,3^\circ$  in einem Bereich von  $-0,5$  mm bis  $0,5$  mm, mit Schritten von  $0,02$  mm, gemessen. Es wird die  $z$ -Position gewählt, welche die maximale Intensität aufweist.

## 4.2 Messung

Nach der Justage des Diffraktometers wird zuerst ein Reflektivitätsscan durchgeführt. Dabei handelt es sich um ein „Omega/2 Theta“ Scan, wobei hier der Winkel zwischen Detektor und Probe genau dem zwischen Probe und Röhre entspricht. Nun werden Röhre und Detektor immer zusammen um die Probe bewegt im Scanbereich von  $0^\circ$  bis  $2,5^\circ$  bei einer Schrittweite von  $0,005^\circ$ . Die Messzeit pro Messpunkt beträgt hier 5 s.

Zusätzlich wird ein diffuser Scan gemacht. Hier ist der Detektorwinkel um  $0,1^\circ$  im Bezug zum Röhrenwinkel verschoben. Sonst werden alle Einstellungen beibehalten und die neue Messung gestartet.



## 5 Auswertung

Für die Messungen wurde eine Cu-Röntgenröhre verwendet. Daher wird im Folgenden für die Wellenlänge der Röntgenstrahlung die Wellenlänge des  $K_\alpha$ -Übergangs, mit  $\lambda = 1,541 \cdot 10^{-10}$  m, genutzt.

### 5.1 Detektorscan

Zunächst wird mit Hilfe des Detektorscans die maximale Intensität des Röntgenstrahls und die Halbwertsbreite bestimmt. Dafür wird auf die in Abbildung 5 dargestellten Messwerte mit einer Gauß-Funktion der Form

$$I_G(\alpha_i) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\alpha_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4)$$

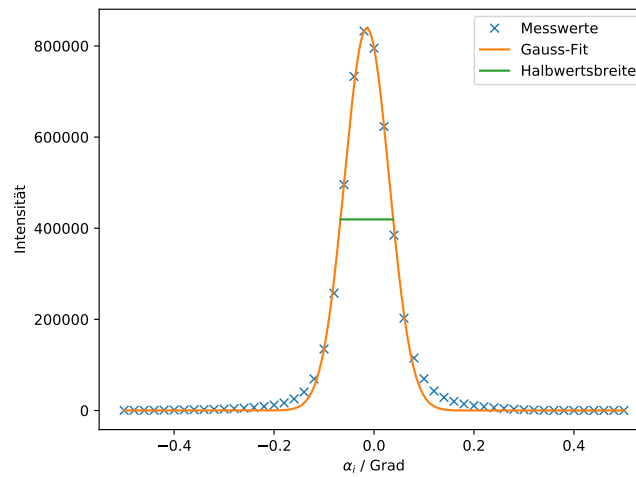
ein Fit berechnet. Die Parameter der Ausgleichsrechnung ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \mu &= (-0,0144 \pm 0,0005)^\circ \\ \sigma &= (0,0448 \pm 0,0005)^\circ \\ A &= 444\,895,9705 \pm 3477,7836 \quad . \end{aligned}$$

Daraus lassen sich die maximale Intensität und die Halbwertsbreite zu

$$\begin{aligned} I_G(\mu) &= I_{\max} = 838646.2462 \\ \text{FWHM} &= 2\sqrt{2\ln(2)} \cdot \sigma = (0,1055 \pm 0,0012)^\circ \end{aligned}$$

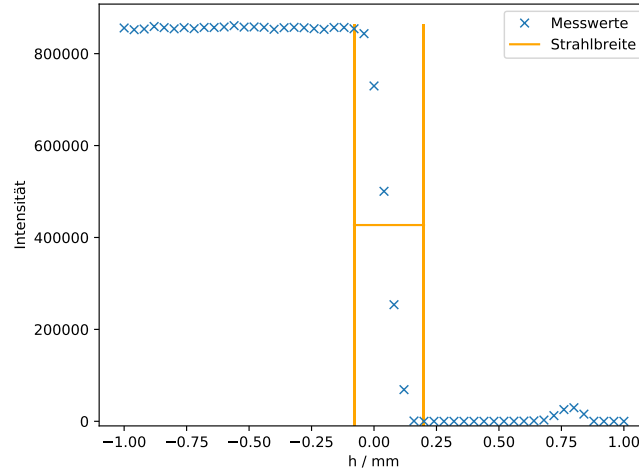
bestimmen.  $I_{\max}$  wird dabei im Weiteren zum Normieren von Messwerten genutzt.



**Abbildung 5:** Die gemessenen Intensitäten des Detektorscans gegen den Winkel aufgetragen. Zusätzlich sind noch die Halbwertsbreite des Gauß-Fits und der Gauß-Fit eingezeichnet.

## 5.2 Erster Z-Scan

Über die in Abbildung 5 dargestellten Messwerte des ersten  $z$ -Scans lässt sich grafisch die Breite des Röntgenstrahls abschätzen. Dabei wird angenommen, dass der Abstand über dem die Intensität von  $I_{\max}$  auf 0 fällt, der Strahlbreite entspricht. Dies lässt sich darüber erklären, dass der Strahl zuerst gar nicht und dann vollkommen auf die Probe trifft.



**Abbildung 6:** Die gemessenen Intensitäten des Z-Scans, die damit korrespondierenden  $z$ -Komponenten und die grafisch ermittelte Strahlbreite eingezeichnet.

Für den Start- und den Endpunkt werden die Punkte

$$z_1 = -0,08 \text{ mm}$$

$$z_2 = 0,2 \text{ mm}$$

abgelesen. Damit gilt für die Strahlbreite

$$\Delta z = 0,28 \text{ mm} \quad .$$

Aus der Strahlbreite lässt sich über Gleichung (3) der Geometriewinkel  $\alpha_g$ , bei dem bei Drehung der gesamte Strahl die Probe trifft, bestimmen. Dabei ergibt sich

$$\alpha_{g,1} = \arcsin\left(\frac{\Delta z}{D}\right) = 0,802^\circ \quad .$$

$D$  steht dabei für die Länge der Probe.

## 5.3 Rockingscan

Alternativ lässt sich der Geometriewinkel über die Messwerte des Rockingscans, welche in Abbildung 7 grafisch dargestellt sind, bestimmen. Dabei entspricht der halbierte Abstand der äußeren Ränder des in der Abbildung zu erkennenen „Dreiecks“ dem Geometriewinkel.

Dies lässt sich damit erklären, dass bei einem bestimmten Einfallswinkel des Strahls, nicht mehr der gesamte Strahl die Probe trifft und deswegen der Detektor hinter der Probe eine Intensität misst.

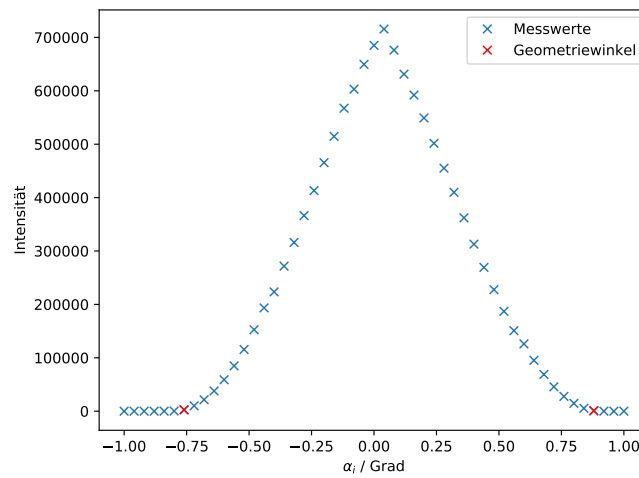
Die grafisch bestimmten Punkte

$$\alpha_1 = -0,76^\circ$$

$$\alpha_2 = 0,88^\circ$$

sind in der Abbildung noch einmal hervorgehoben. Gemittelt ergibt sich nun

$$\alpha_{g,2} = \frac{|\alpha_1| + |\alpha_2|}{2} = 0,82^\circ \quad .$$



**Abbildung 7:** Die gemessenen Intensitäten des ersten Rockingscans gegen die Winkel aufgetragen. Die zur Bestimmung des Geometriewinkel genutzten Punkte sind besonders hervorgehoben.

## 5.4 Reflektivitäts- und Diffuser Scan

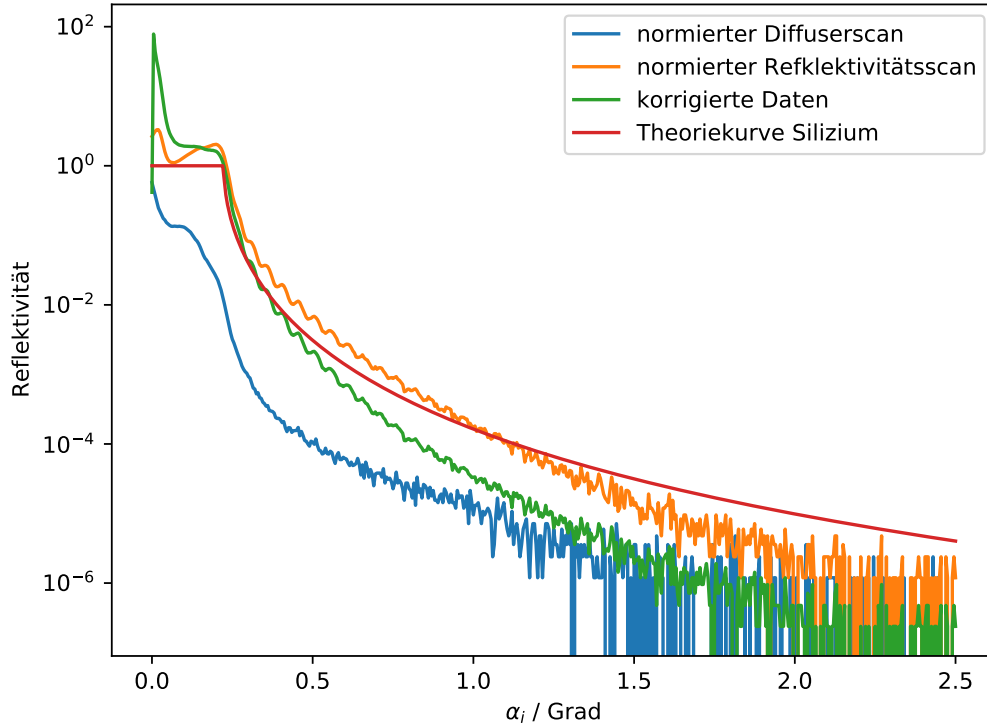
Beim Reflektivitätsscan misst der Detektor die von der Probe zurückgeworfene Strahlung. Über das Normieren der gemessenen Intensität auf die maximale Intensität  $I_{\max}$  und auf die Messzeit zwischen zwei Datenaufnahmen, lässt sich die Reflektivität betrachten. Um Rückstreuungseffekte herauszurechnen werden die ebenfalls normierten Ergebnisse des diffusen Scans von denen der Reflektivität abgezogen. Des Weiteren werden die gemessenen Intensitäten noch über den Geometriefaktor  $G$ , nach Gleichung (3) korrigiert, um zu berücksichtigen dass nicht der gesamte Strahl die Probe trifft.

Dies ist in Abbildung 8 grafisch dargestellt, wobei die Korrektur mit  $G$  nur für die komplett korrigierte Reflektivität durchgeführt wurde. Dort ist zusätzlich noch die Theoriekurve

der Fresnelreflektivität von Silizium  $R_F$  abgebildet. Diese ergibt sich aus der Funktion

$$R_F(\alpha) = \left| \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}}{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}} \right|^2, \quad ,$$

mit  $\alpha_c$  als kritischen Winkel unter dem es zur Totalreflexion kommt und  $\beta = \frac{\mu\lambda}{2\pi}$ . Hierbei ist  $\lambda$  wiederum die Wellenlänge und  $\mu$  [17] der Absorptionskoeffizient.

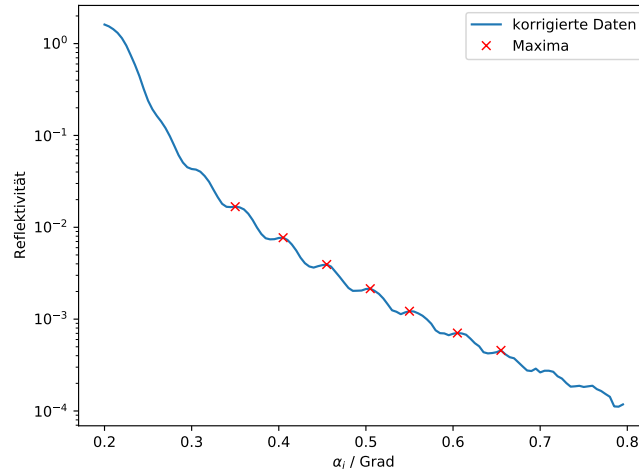


**Abbildung 8:** Die normierten Messwerte des Reflektivitäts- und diffusen Scans. Des Weiteren sind die vom diffusen Scan bereinigten und mit  $G$  korrigierten Werte der Reflektivitätsmessung aufgetragen, so wie die theoretische Fresnelreflektivität von Silizium.

Aus den korrigierten Daten lässt sich die Schichtdicke von Silizium bestimmen. Dafür wird die Wellenlänge der Kiessig-Oszillationen benötigt. Um diese zu erhalten, werden, wie in Abbildung 9 dargestellt, die korrigierten Daten, auf einem Intervall, welches nach den kritischen Winkeln beginnt, und vor dem Ausfasern der Daten endet. Hier wurde  $\alpha \in [0,2^\circ, 0,8^\circ]$  genutzt.

Nun wurden mit der Funktion `scipy.find_peaks` die Maxima der Oszillationen bestimmt, ihre Abstände berechnet und gemittelt und über die Gleichung (2) die Dicke der Fläche bestimmt.

Für den gemittelten Abstand ergibt sich  $\Delta\alpha = 0,051^\circ$ , was zu einer Schichtdicke von  $d_1 = 8,68 \cdot 10^{-8}$  m führt.



**Abbildung 9:** Die Reflektivität im Intervall  $\alpha \in [0,2, 0,8]$  mit den von *scipy.find\_peaks* gefundenen Maxima, grafisch dargestellt.

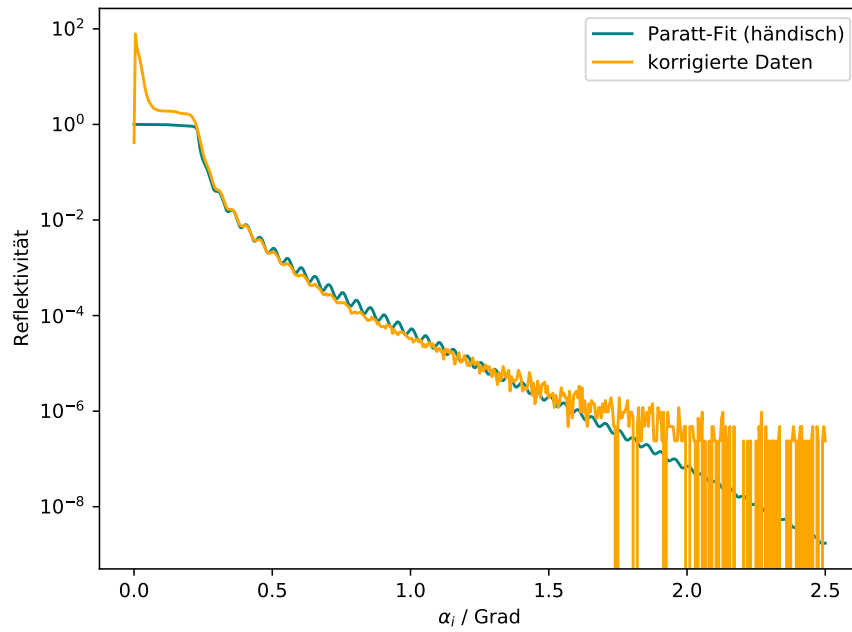
Außerdem lässt sich mit den in Abbildung 8 dargestellten Messwerten der kritische Winkel  $\alpha_c$  bestimmen, unter dem es zur Totalreflexion kommt. Dafür wird mit der Funktion *scipy.find\_peaks* das Maxima, bei dem es zu einer starken Reflexion kommt, welches vor den Kiessig-Oszillationen liegt, ausgelesen. Dabei ergibt sich  $\alpha_c = 0,2^\circ$ . Er lässt sich außerdem mit

$$\alpha_{c,theo} \approx \sqrt{2\delta} = 0,223^\circ$$

berechnen. Wobei  $\delta$  [17] die Dispersion bei der Brechung berücksichtigt. Die über  $\frac{\alpha_{c,theo} - \alpha_c}{\alpha_{c,theo}}$  berechnete relative Abweichung, liefert für den kritischen Winkel  $\Delta\alpha = 10,46$ .

## 5.5 Parratt-Algorithmus

Über den Parratt-Algorithmus lässt sich das Dispersionsprofil der Probe bestimmen. Dazu gehört die Dicke der Schichten  $d$ , die Dispersion  $\delta$ , die Rauigkeit  $\sigma$  und ein Absorptionsfaktor  $\beta$ . Auf die korrigierten und auf die Zeit normierten Messwerte wurde die über den Parratt-Algorithmus berechnete Reflektivität grafisch aufgetragen. Anschließend wird die Funktion über manuelles Variieren der Parameter möglichst genau an die gemessene Reflektivität angepasst. Das Ergebnis ist in Abbildung 10 dargestellt.



**Abbildung 10:** Die Messdaten der Reflektivität mit den auf ihnen gebildeten Ausgleichsfunktion des Parratt-Algorithmus.

Für die Parameter ergibt sich dabei

$$\begin{aligned}
 \delta_{\text{Poly}} &= 1 \cdot 10^{-6} \\
 \delta_{\text{Si}} &= 8,15 \cdot 10^{-6} \\
 \sigma_{\text{Luft, Poly}} &= 9 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\
 \sigma_{\text{Poly, Si}} &= 7,8 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\
 d_2 &= 8,8 \cdot 10^{-8} \text{ m} \\
 \beta_{\text{Poly}} &= 3 \cdot 10^{-10} \\
 \beta_{\text{Si}} &= 1,63 \cdot 10^{-7} \quad .
 \end{aligned}$$

## 6 Diskussion

Die Durchführung des Versuchs lief ohne Probleme ab. Die Justagemessungen haben erwarteten Ergebnisse geliefert. Der aus dem Rockingscan bestimmte Geometriewinkel  $\alpha_{g,2} = 0,82^\circ$  besitzt nur eine relative Abweichung von 2,223 % von dem errechneten Wert  $\alpha_{g,1} = 0,802^\circ$ . Dies ist ein sehr gutes Ergebnis, welches zeigt, dass die Justagemessungen erfolgreich waren.

Die in Abbildung 8 dargestellte theoretische Reflektivität einer glatten Siliziumoberfläche stimmt nur ungefähr mit den Messwerten überein, da sie eine etwas stärkere Krümmung besitzt. Ein Ansatz um dies zu erklären wäre, dass die Theoriekurve für eine glatte Oberfläche gilt, was für die reale Oberfläche nicht gilt. Dies könnte zu der leicht unterschiedlichen Krümmung der Kurve führen.

Die manuelle Ausgleichsrechnung für den Parratt-Algorithmus hat viele Probleme hervor gebracht. Zum einen haben gängige Fit-Algorithmen keine passenden Ergebnisse geliefert. Zum anderen war das manuelle Anpassen der Parameter schwierig, da das Variieren eines Parameters die Kurve sehr stark in vielen Eigenschaften verändern kann. Das nacheinander Variieren war deswegen nicht möglich, wodurch das Fiten chaotisch war und es anspruchsvoll war ein zufriedenstellendes Ergebnis zu erreichen. Die in Tabelle 1 aufgetragenen Ergebnisse und relativen Abweichungen der Theoriewerte[17] unterstreichen dies auch. Die Dispersion von Polysterol zeigt eine starke Abweichung von dem Referenzwert. Dafür das nur ein ungenauer Fit durchgeführt wurde, ist die von Silizium aber überraschend nah an der Literatur und liefert ein gutes Ergebnis.

**Tabelle 1:** Relative Abweichung von den Literaturwerten [17] für die einzelnen Parameter des Parratt-Algorithmus.

Größe	Fit-Parameter	Literaturwert	relative Abweichung
$\delta_{\text{Poly}}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3,5 \cdot 10^{-6}$	71,43 %
$\delta_{\text{Si}}$	$8,15 \cdot 10^{-6}$	$7,6 \cdot 10^{-6}$	-7,23 %
$d$	$8,8 \cdot 10^{-8} \text{ m}$	$8,68 \cdot 10^{-8}$	-1,40 %

Die Schichtdicke  $d$  des Parratt-Algorithmus wird mit der aus den Kiessig-Oszillationen berechneten verglichen. Die beiden besitzen auch nur eine sehr geringe Abweichung voneinander, obwohl der Parratt-Fit problematisch war

Alles in allem hat der Versuch gute Ergebnisse geliefert, vor allem in Anbetracht des händischen Parratt-Fits.

## Literatur

- [1] Lehrstuhl Experimentelle Physik 1. *Röntgenreflektometrie*. URL: [https://e1.physik.tu-dortmund.de/cms/Medienpool/Downloads/Roentgenreflektometrie\\_Versuch.pdf](https://e1.physik.tu-dortmund.de/cms/Medienpool/Downloads/Roentgenreflektometrie_Versuch.pdf).
- [2] TU Dortmund. *Versuchsanleitung V44. Röntgenreflektometrie*.
- [3] John D. Hunter. „Matplotlib: A 2D Graphics Environment“. Version 1.4.3. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 90–95. URL: <http://matplotlib.org/>.
- [4] Eric Jones, Travis E. Oliphant, Pearu Peterson u. a. *SciPy: Open source scientific tools for Python*. Version 0.16.0. URL: <http://www.scipy.org/>.
- [5] Heinz Kiessig. „Interferenz von Röntgenstrahlen an dünnen Schichten“. In: *Annalen der Physik* 402.7 (1931), S. 769–788. DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.19314020702>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19314020702>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19314020702>.
- [6] Eric O. Lebigot. *Uncertainties: a Python package for calculations with uncertainties*. Version 2.4.6.1. URL: <http://pythonhosted.org/uncertainties/>.
- [7] *Literaturwert für die Elementarladung*. 2020. URL: <https://www.chemie.de/lexikon/Elementarladung.html> (besucht am 05.12.2020).
- [8] *Literaturwert für die Lichtgeschwindigkeit c*. 2020. URL: <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/lichtgeschwindigkeit/9012> (besucht am 05.12.2020).
- [9] *Literaturwert für die Ruhemasse eines Elektrons*. 2020. URL: <https://www.chemie.de/lexikon/Elektron.html> (besucht am 05.12.2020).
- [10] *Literaturwerte für das plancksche Wirkungsquantum*. 2020. URL: [https://www.chemie.de/lexikon/Plancksches\\_Wirkungsquantum.html](https://www.chemie.de/lexikon/Plancksches_Wirkungsquantum.html) (besucht am 05.12.2020).
- [11] *Literaturwerte für die Rydberg-Konstante und Energie*. 2020. URL: <https://www.chemie.de/lexikon/Rydberg-Konstante.html> (besucht am 06.12.2021).
- [12] *Literaturwerte für die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante*. 2020. URL: <https://www.chemie.de/lexikon/Feinstrukturkonstante.html>.
- [13] Travis E. Oliphant. „NumPy: Python for Scientific Computing“. Version 1.9.2. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 10–20. URL: <http://www.numpy.org/>.
- [14] L. G. Parratt. „Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays“. In: *Phys. Rev.* 95 (2 Juli 1954), S. 359–369. DOI: 10.1103/PhysRev.95.359. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.95.359>.
- [15] *Röntgenreflektometrie zur Untersuchung von Oberflächen und dünnen Schichtsystemen*. 2008. URL: <https://www.hep.physik.uni-siegen.de/teaching/masterlab/manuals/xrger.pdf> (besucht am 11.03.2022).



- [16] Metin Tolan und M Tolan. *X-ray scattering from soft-matter thin films: materials science and basic research*. Bd. 148. Springer, 1999.
- [17] *Versuchsanleitung zu Versuch V44: "Röntgenreflektrometrie"*. Fakultät Physik, TU Dortmund. 2022.