

V44

Röntgenreflektrometrie

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1. Zielsetzung	3
2. Theorie	3
2.1. Röntgenstrahlung an einer Grenzfläche	3
2.2. Multischichtsysteme	4
2.3. Korrektur durch Geometriefaktor	6
3. Durchführung	6
3.1. Justage	6
3.2. Messung eines Polymerfilmes auf einem Silizium-Wafer	7
4. Auswertung	8
4.1. Detektorscan	8
4.2. Z-Scan	8
4.3. Rockingscan	10
4.4. Reflektivitätsscan	10
4.5. Bestimmung des Dispersionsprofils mit dem Parratt-Algorithmus	11
5. Diskussion	12
Literatur	15
A. Anhang	15

1. Zielsetzung

Das Ziel dieses Versuchs ist es, die Dichte, Rauigkeit und Schichtdicke eines Films auf einem Siliziumwafer mit Hilfe von Röntgenreflektivität zu bestimmen.

2. Theorie

Bei Röntgenstrahlung handelt es sich um durch das Abbremsen von geladenen Teilchen erzeugte elektromagnetische Strahlung mit Energien über 100 eV. Elektromagnetische Strahlung lässt sich aufgrund des Superpositionsprinzips als Linearkombination zweier linear polarisierter Wellen beschreiben, die senkrecht zueinander stehen.

2.1. Röntgenstrahlung an einer Grenzfläche

Beim Einfall auf eine ebene Grenzfläche, wie in Abbildung 1 dargestellt, gilt unter Betrachtung von Röntgenstrahlung für den Brechungsindex eines Mediums

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

wobei δ eine kleine Korrektur in der Größenordnung 10^{-6} und β die Absorption des Mediums beschreibt.

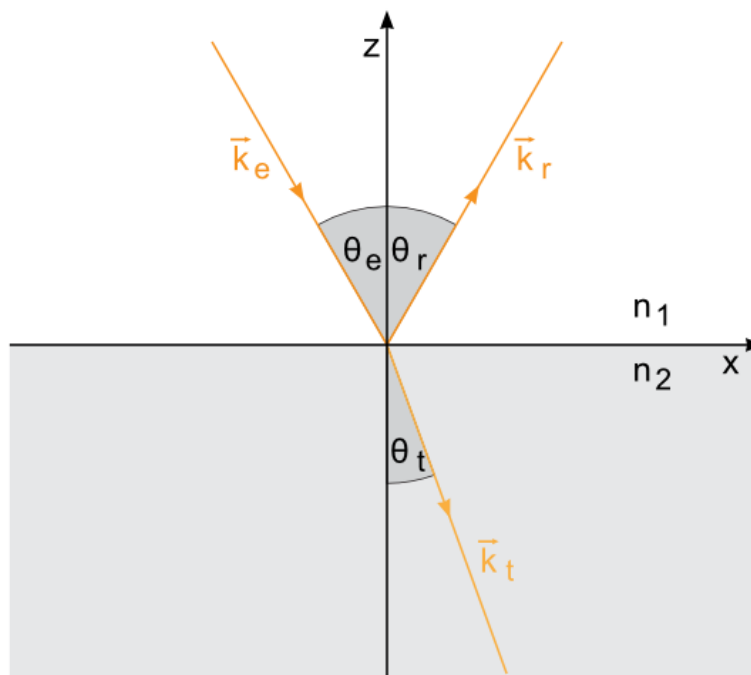


Abbildung 1: Eindimensionale Skizze zur Reflexion und Transmission von elektromagnetischer Strahlung an einer Grenzschicht [1].

In der Abbildung beschreiben $\vec{k}_{e,r,t}$ den Wellenvektor der einfallenden (e), reflektierten (r) und transmittierten (t) Welle und $\theta_{e,r,t}$ den jeweiligen Winkel zur Ebene. Aufgrund des Snellius-Brechungsgesetzes $n_1 \cos \theta_e = n_2 \cos(\theta_a)$ mit dem Ausfallswinkel θ_a gilt $\theta_e = \theta_r$. Im Weiteren wird zur Benennung von Winkeln statt θ der Buchstabe α verwendet. Die Fresnel-Gleichungen dienen im Allgemeinen zur quantitativen Beschreibung der Amplitudenverhältnisse senkrecht und parallel polarisierten Lichts an einem Grenzmedium. Unter Betrachtung von Röntgenstrahlung sind diese näherungsweise gleich für den parallel und senkrecht polarisierten Teil, da sich die Brechungsindices kaum unterscheiden. Sie lassen sich demnach definieren als

$$t = \frac{2n_1 \sin \alpha_i}{n_1 \sin \alpha_i + n_2 \sin \alpha_t} \quad r = \frac{n_1 \sin \alpha_i - n_2 \sin \alpha_t}{n_1 \sin \alpha_i + n_2 \sin \alpha_t}.$$

Handelt es sich nun beim ersten Medium um das Vakuum ($n = 1$), so kommt es unter einem kritischen Winkel α_c zu Totalreflexion, da jeder Brechungsindex von Materie für Röntgenstrahlung < 1 ist. Dieser ist näherungsweise gegeben durch

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

wobei λ die Wellenlänge der Röntgenstrahlung, r_e der klassische Elektronenradius und ρ die Elektronendichte des Materials sind. Für die Reflektivität $R = |r|^2$, die das Verhältnis der Intensitäten der reflektierten und einfallenden Welle beschreibt, gilt demnach unter der Annahme $\alpha_i > 3\alpha_c$

$$R = \left(\frac{\alpha_c}{2\alpha_i} \right)^4. \quad (2)$$

2.2. Multischichtsysteme

In Abbildung 2 ist eine Photometeraufnahme zu sehen, die die Reflektivität eines Nickelspiegels darstellt. Dieser besteht aus einem dünnen Nickelniederschlag auf einer Glasunterfläche. Hierbei sind Oszillationen der Reflektivität zu beobachten. Diese sogenannten Kiessig-Oszillationen kommen dadurch zustande, dass ein Teil des am ersten Medium transmittierten Strahlungsanteils am zweiten Medium reflektiert wird, welcher dann mit dem am ersten Medium reflektierten Teilstrahl interferiert. Mit Hilfe der Kiessig-Oszillationen lässt sich über die Gleichung

$$d = \frac{\lambda}{2\Delta\alpha_i} \quad (3)$$

die Dicke der Schicht bestimmen, wobei λ die Wellenlänge der Strahlung ist und $\Delta\alpha_i$ dem Abstand zweier Extrempunkte mit gleichem Vorzeichen entspricht.

Bei Systemen aus mehr als zwei Schichten werden die Oszillationen überlagert. Zur Quantisierung dieser Überlagerung dient der Parratt-Algorithmus [7]. Hierbei handelt es sich

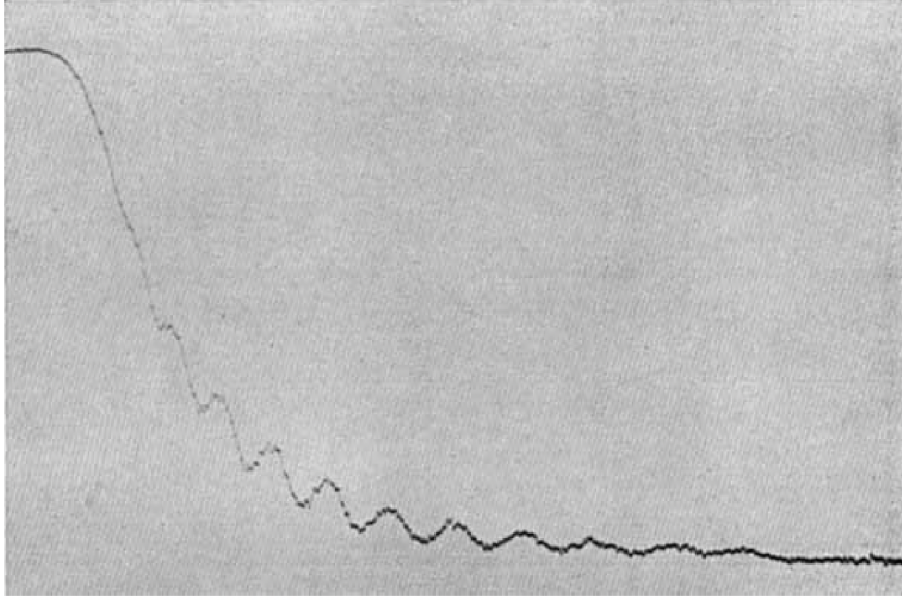


Abbildung 2: Photometerkurve der Röntgenreflektivität eines Nickelspiegels als Funktion des Eingangswinkels.[4]

um einen rekursiven Algorithmus zur Beschreibung eines Systems mit N Grenzschichten z_j mit der Rekursionsformel

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

wobei $r_{j,j+1}$ die Fresnelreflektivität der j -ten Grenzschicht und $k_{z,j} = \sqrt{n_j^2 - \cos^2 \alpha_i}$ die z -Komponente des Wellenvektors in der j -ten Schicht ist. Da die durch die letzte Grenzschicht z_N transmittierte Strahlung T_{N+1} nicht weiter reflektiert wird, gilt $R_{N+1} = X_{N+1} = 0$, wobei es sich um den Startwert der Rekursion handelt. Dies beruht auf der Annahme, dass die $(N + 1)$ -te Schicht (das Substrat), genau wie die erste Schicht (das Vakuum) als unendlich angenommen wird.

Um den Parratt-Algorithmus auch auf Multischichtsysteme anzuwenden, deren Oberflächen nicht als glatt angenommen werden, müssen die Fresnel-Koeffizienten modifiziert werden. Hierzu wird zunächst die *root-mean-square*-Rauigkeit

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

eingeführt, wobei z_j die Position der j -ten Grenzschicht und $P_j(z)$ die Wahrscheinlichkeit, dass sich die j -te Grenzschicht im Intervall $[z_j + z, z_j + z + dz]$ befindet, ist. Bei Letzterem handelt es sich um eine Gauss-Glockenfunktion der Breite σ_j . Die modifizierten Fresnel-

Koeffizienten sind dann gegeben durch

$$\tilde{r}_{j,j+1} = r_{j,j+1} \exp\left(-2k_{z,j}k_{z,j+1}\sigma_j^2\right) \quad \tilde{t}_{j,j+1} = t_{j,j+1} \exp\left(\frac{(k_{z,j} - k_{z,j+1})^2 \sigma_j^2}{2}\right)$$

und können anstatt der normalen Fresnel-Koeffizienten in den Parratt-Algorithmus eingefügt werden.

2.3. Korrektur durch Geometriefaktor

Für Einfallswinkel unter einem Grenzwinkel α_g trifft nicht die gesamte Strahlbreite d_0 des Röntgenstrahls auf die Oberfläche der Probe. Für den Grenzwinkel gilt im Allgemeinen

$$\alpha_g = \arcsin\left(\frac{d_0}{D}\right),$$

wobei D die Länge der Probe ist. Um diesen Effekt zu korrigieren, wird der sogenannte Geometriefaktor

$$G = \begin{cases} \frac{D \sin \alpha_i}{d_0} & \text{für } \alpha_i < \alpha_g \\ 1 & \text{für } \alpha_i \geq \alpha_g \end{cases} \quad (4)$$

eingeführt. Dabei ist $D \sin \alpha_i$ die effektive Strahlbreite.

3. Durchführung

Die Durchführung lässt sich grob in zwei Teile gliedern: zunächst wird die Justage des Versuchsaufbaus erläutert und im Weiteren die eigentliche Messreihe.

Für die Versuchsdurchführung wird das D8-Labordiffraktometer der Firma Bruker-AXS verwendet, wie es in Abbildung 3 zu sehen ist. Dieses beinhaltet den Probenstisch, sowie eine Röntgenröhre und einen Detektor, die um den Probenstisch drehbar sind. Zur Bedienung der Apparatur und der Aufnahme der Messwerte wird das Programm *XRD Commander* verwendet. Die erhaltenen Messdaten werden im .raw-Format abgespeichert und für die Auswertung mit dem Programm *File Exchange* in .uxd-Dateien umgewandelt. Vor Beginn der ersten Messung muss der maximale Absorber eingeschaltet werden, damit Schäden am Detektor vermieden werden.

3.1. Justage

Messbereiche und weitere Informationen zu den einzelnen Justage-Scans sind Tabelle 1 zu entnehmen. Die Justage wird begonnen mit einem Detektorscan. Hierfür wird der Probenstisch aus dem Strahlengang gefahren. Der Scan dient dazu, die 0°-Lage des Detektors zu bestimmen. Ist diese ermittelt und gespeichert worden, wird ein erster Z-Scan durchgeführt. Dieser ermittelt die Position des Strahls, sodass die Probe die halbe Strahlintensität abdeckt. Da der Z-Scan nicht sensitiv auf die parallele Ausrichtung des Strahls zur Probenoberfläche ist, wird daraufhin ein Rockingscan durchgeführt. Dieser



Abbildung 3: Das verwendete D8-Labordiffraktometer der Firma Bruker-AXS.

entspricht einer Drehung der Probe im Strahlengang. Da die Anpassung der Neigung auch die Abschattung ändert, wird im Anschluss ein zweiter Z-Scan gefahren, um wieder die Position halber Abschattung zu finden. Zur noch exakteren Bestimmung der idealen Position werden daraufhin ein weiterer Rocking- und Z-Scan gefahren, diesmal unter einem Ein- und Ausfallswinkel von $0,15^\circ$. Anschließend ist die Probe justiert.

3.2. Messung eines Polymerfilmes auf einem Silizium-Wafer

Der Messvorgang eines Polymerfilmes auf einem Silizium-Wafer besteht aus zwei Schritten. Zunächst wird ein Scan gefahren, bei dem der Einfallswinkel der Strahlung auf die Probe gleich dem Winkel zwischen Probe und Detektor ist. Hierbei wird ein Bereich von 0° – $2,5^\circ$ abgefahren bei einer Schrittweite von $0,005^\circ$ und einer Messdauer pro Messpunkt von 5 s. Zur Ermittlung der wahren Reflektivität wird daraufhin ein zweiter Scan mit den gleichen Einstellungen gefahren. Dieses Mal wird der Detektorwinkel allerdings so eingestellt, dass er $0,1^\circ$ gegenüber dem Einfallswinkel verschoben ist. So lässt sich der Anteil der gestreuten Intensität an der Reflektivität bestimmen, welcher dann von der ersten Messreihe abgezogen wird.

Tabelle 1: Angaben zu Messbereich und -Intervall für die einzelnen Justage-Scans.

Typ	Messbereich/°	Schrittweite/°	Messdauer pro Messpunkt/s
Detektorscan	−0,5 bis 0,5	0,02	1
Z-Scan	−1 bis 1	0,04	1
Rockingscan $2\theta = 0$	−1 bis 1	0,04	1
Z-Scan	−0,5 bis 0,5	0,02	1
Rockingscan $2\theta = 0,3$	0 bis 0,3	0,005	1
Z-Scan $2\theta = 0,3$	−0,5 bis 0,5	0,02	1

4. Auswertung

Die hier durchgeführte Datenanalyse wurde mithilfe der *Python* 3.8.0 Bibliothek *Numeric Python* [6] erstellt und mit *matplotlib* [2] grafisch dargestellt. Des Weiteren wird die Bibliothek *uncertainties* [5] genutzt, um die Fehlerrechnung zu automatisieren. Zunächst werden Scans, welche bei der Justierung aufgenommen wurden, ausgewertet und aus ihnen Konstanten bestimmt, welche für die weitere Auswertung nötig sind.

4.1. Detektorscan

Zunächst werden im Detektorscan die Halbwertsbreite und die maximale Intensität bestimmt. Dazu wird eine Gaußfunktion der Form

$$I(\alpha) = \frac{a}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \exp\left(-\frac{(\alpha - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) + b$$

an die Messwerte angepasst. Eine Darstellung der Messwerte und der Ausgleichskurve ist in Abbildung 4 zu sehen. Mittels der *Python*-Bibliothek *SciPy* [3] ergeben sich die Parameter der Gaußfunktion zu

$$a = (1,06 \pm 0,01) \cdot 10^5$$

$$b = (1,1 \pm 0,3) \cdot 10^4$$

$$\sigma = (0.0441 \pm 0.0006)^\circ$$

$$\mu = (-0,0017 \pm 0.0005)^\circ.$$

Mittels der angelegten Gaußkurve ergibt sich die Halbwertsbreite FWHM, sowie die maximale Intensität I_{\max} zu

$$I_{\max} = (9,7 \pm 0,2) \cdot 10^5$$

$$\text{FWHM} = (0,105 \pm 0,001)^\circ.$$

4.2. Z-Scan

Aus dem ersten durchgeführten Z-Scan kann die Strahlbreite ermittelt werden. Dazu wird die abfallende Intensität die auftritt, wenn die Probe in den Strahl gefahren wird.

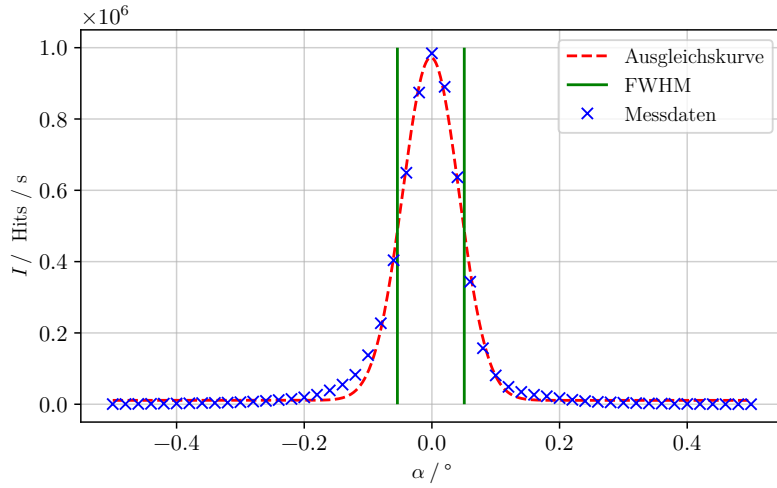


Abbildung 4: Messwerte des Detektorscans mit Ausgleichskurve und eingezeichneter Halbwertsbreite.

Dargestellt ist dies in Abbildung 5. Die Strahlbreite entspricht dann dem geringsten Abstand zwischen maximaler Intensität (wenn der Strahl die Probe noch nicht trifft) und minimaler Intensität (wenn der komplette Strahl die Probe trifft). Die Strahlbreite ergibt

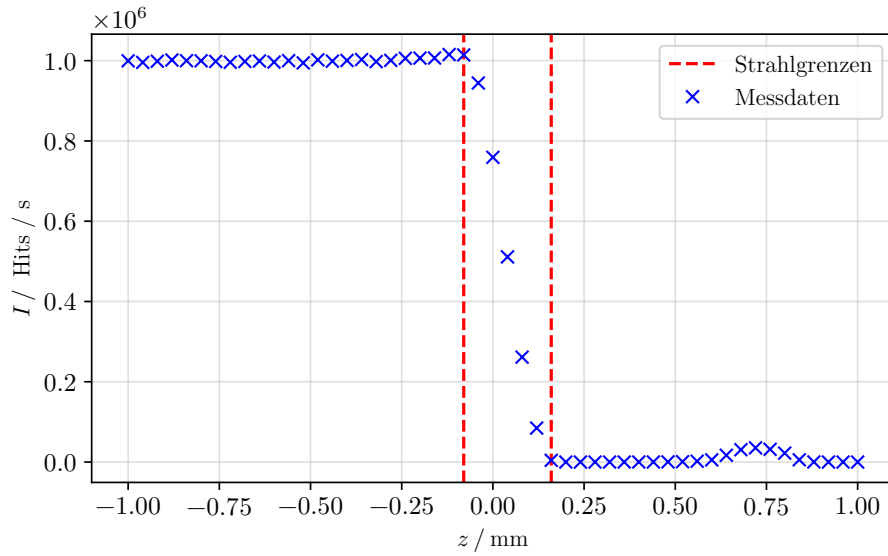


Abbildung 5: Messwerte des ersten Z-Scans mit eingezeichneter Strahlbreite.

sich dadurch zu

$$d_0 \approx 0,24 \text{ mm.}$$

4.3. Rockingscan

Der erste durchgeführte Rockingscan ist in Abbildung 6 zu sehen. Aus diesem lässt sich der Geometriewinkel α_g ablesen. Der gemessene Geometriewinkel ist

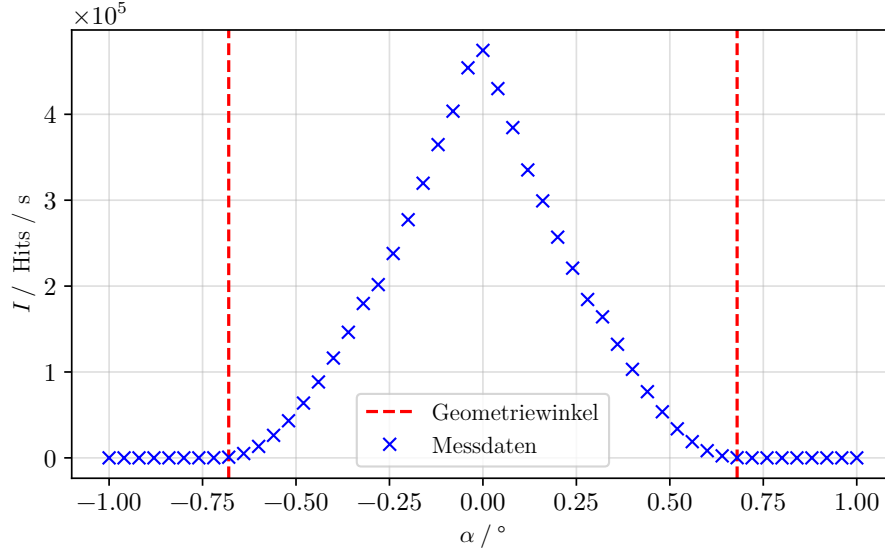


Abbildung 6: Rockingscan mit $2\alpha = 0$ und eingezeichnete Geometriewinkel.

$$\alpha_g = 0,68^\circ.$$

Mit der Strahlbreite d_0 und der Probenlänge $D = 20$ mm ergibt sich über Gleichung 4 der theoretische Wert

$$\alpha_{\text{Theorie}} = 0,6876^\circ.$$

4.4. Reflektivitätsscan

Mittels des aufgenommenen Reflektivitätsscan wird die Probe untersucht. Zunächst wird dazu der diffuse Scan vom Reflektivitätsscan abgezogen um Effekte durch Rückstreuung zu vermeiden und so die tatsächliche Reflektivität zu bestimmen. Dies ist in Abbildung 7 dargestellt. Des Weiteren ist die Reflektivität mit der Korrektur durch den über Gleichung 4 berechneten Geometriefaktor zu sehen. Mit dieser wird auch im Folgenden weiter gerechnet. Zum Vergleich mit theoretischen Werten ist außerdem die Kurve der Fresnelreflektivität einer idealen glatten Siliziumoberfläche zu sehen. Diese wird über Gleichung 2 bestimmt, wobei der Literaturwert des kritischen Winkels $\alpha_{\text{Si}} = 0,223^\circ$ [8] ist. Außerdem ist zu Beachten, dass statt der Intensität I die Reflektivität R verwendet wird, mit

$$R = \frac{I}{5 \cdot I_{\text{max}}}.$$

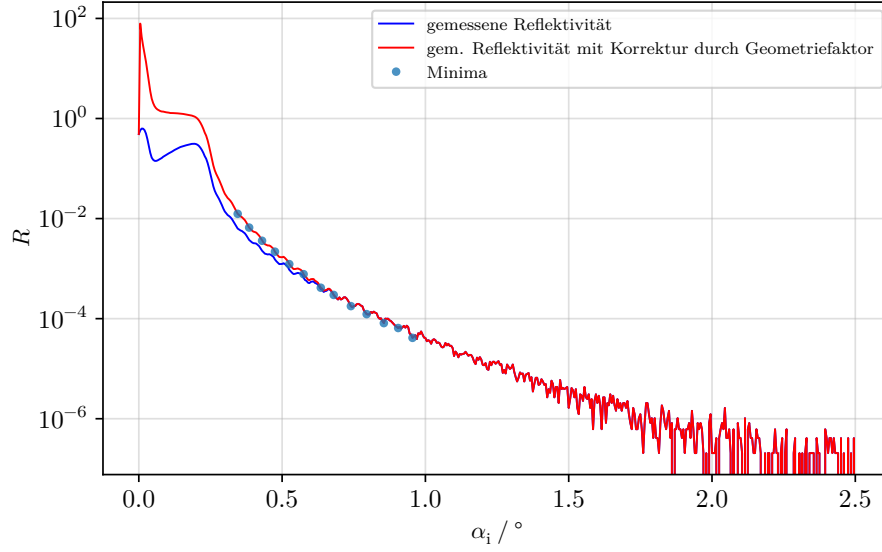


Abbildung 7: Gemessene Reflektivität, Korrektur mit dem Geometriefaktor und theoretische Fresnelreflektivität von idealem, glatten Silizium aufgetragen gegen den Winkel.

Um die Schichtdicke der Polystyrolschicht zunächst abzuschätzen werden die Abstände der Minima der Kiessig-Oszillationen $\Delta\alpha_i$ bestimmt und gemittelt. Dazu wird wiederum die *Python*-Bibliothek *SciPy* [3] verwendet. Die gefundenen Minima sind ebenfalls in Abbildung 7 eingezeichnet. Es ist zu Beachten, dass nur Minima im Bereich $\alpha = [0, 3^\circ; 1, 0^\circ]$, also in welchem die Minima noch gut findbar sind, verwendet werden. Der gemittelte Abstand der Minima ergibt sich zu

$$\Delta\alpha = (8,9 \pm 0,3) \cdot 10^{-4}^\circ$$

und damit über Gleichung 3 mit der Wellenlänge der $K_{\alpha 1}$ -Linie $\lambda = 1,541 \cdot 10^{-10}$ m eine Schichtdicke von

$$(8,7 \pm 0,3) \cdot 10^{-8} \text{ m.}$$

4.5. Bestimmung des Dispersionsprofils mit dem Parratt-Algorithmus

Mittels des Parratt-Algorithmus [7] lässt sich das Dispersionsprofil der Probe bestimmen. Dazu werden modifizierte Fresnelkoeffizienten verwendet um die Rauigkeit der Probe mit einzubeziehen. Das hier verwendete Programm ist in Anhang A zu sehen. Es werden dabei zwei Schichten betrachtet; eine Schicht aus Polystyrol und eine Schicht aus Silizium. Des Weiteren wird die Umgebungsluft als erste Schicht mit einer Schichtdicke und Dispersion von $\delta = d = 0$ angenommen. Die so berechnete Reflektivität wird mit der gemessenen, korrigierten Reflektivität und über Parameter manuell angepasst um eine möglichst gute Übereinstimmung zu erhalten. Die endgültige Kurve ist in Abbildung 8 zu sehen. Die

verwendeten Parameter lauten

$$\begin{aligned}
\delta_{\text{Poly}} &= 6 \cdot 10^{-7} \\
\delta_{\text{Si}} &= 6 \cdot 10^{-6} \\
\sigma_{\text{Luft, Poly}} &= 5,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\
\sigma_{\text{Poly, Si}} &= 6,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\
d_2 &= 8,6 \cdot 10^{-8} \text{ m} \\
\beta_{\text{Poly}} &= \frac{\delta_{\text{Poly}}}{200} \\
\beta_{\text{Si}} &= \frac{\delta_{\text{Si}}}{40},
\end{aligned}$$

wobei die Parameter β_{Poly} und β_{Si} der Literatur[7] entnommen sind. Des Weiteren können

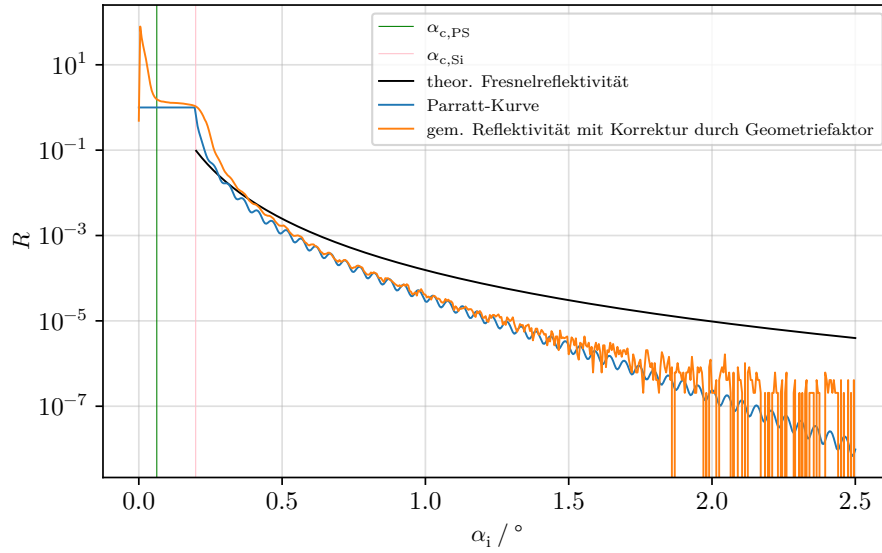


Abbildung 8: Darstellung der Parratt-Reflektivität im Vergleich zur gemessenen Reflektivität mit eingezeichneten kritischen Winkeln.

die kritischen Winkel von Silizium und Polystyrol über Gleichung 1 zu

$$\begin{aligned}
\alpha_{c, \text{Pol}} &= 0,063^\circ \\
\alpha_{c, \text{Si}} &= 0,198^\circ
\end{aligned}$$

bestimmt werden. Diese Werte sind ebenfalls in Abbildung 8 dargestellt.

5. Diskussion

Die durchgeführten Scans zur Justierung des Strahls verliefen gut entsprechend der Erwartung. Der gemessene Geometriewinkel $\alpha = 0,68^\circ$ entspricht dem theoretischen

Wert von $\alpha_{\text{theo}} = 0,6876^\circ$ mit einer relativen Abweichung von 1,1% sehr gut. Dies spricht daher allgemein für eine gute Justierung. Über die gut erkennbaren Kiessig-Oszillationen wurde eine Schichtdicke zu $d_{\text{Kiessig}} = (8,7 \pm 0,3) \cdot 10^{-8}$ m bestimmt. Über den Parratt-Algorithmus konnte ebenfalls eine Schichtdicke bestimmt werden, welche mit $d_{\text{Parratt}} = 8,6 \cdot 10^{-8}$ m mit der vorherigen Abschätzung im Bereich dessen Ungenauigkeit übereinstimmt. Die Abschätzung der Schichtdicke über die Kiessig-Oszillationen wird also als gut angenommen. Dass es sich bei der durch den Parratt-Algorithmus erhaltene Schichtdicke um die richtige Schichtdicke handelt, lässt sich in Abbildung 8 erkennen. Eine Veränderung der Schichtdicke hätte eine Veränderung der Frequenz der Kiessig-Oszillationen zur Folge, welche aber hier gut mit der gemessenen Frequenz übereinstimmt. Allgemein ist aber zu Beachten, dass die Parameter des Parratt-Algorithmus durch manuelle, menschliche Anpassung an die gemessene Kurve erfolgt ist und daher auch nur mit menschlicher Genauigkeit behaftet sind.

Über den Parratt-Algorithmus wurden des Weiteren die Dispersionen

$$\begin{aligned}\delta_{\text{Poly}} &= 6 \cdot 10^{-7} \\ \delta_{\text{Si}} &= 6 \cdot 10^{-6}\end{aligned}$$

bestimmt. Die theoretischen Werte [8] der Dispersionen sind

$$\begin{aligned}\delta_{\text{Poly}} &= 3,5 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{Si}} &= 7,6 \cdot 10^{-6}.\end{aligned}$$

Für das Polystyrol ergibt sich dadurch eine relative Abweichung von 82,9% und für das Silizium eine relative Abweichung von 21,0%. Die im Vergleich zum Silizium sehr hohe Abweichung der Dispersion Polystyrol lässt darauf schließen, dass wahrscheinlich ein systematischer Fehler vorliegt. Worin genau dieser besteht, kann allerdings nicht angegeben werden.

Aus den bestimmten Dispersionen konnten ebenfalls die kritischen Winkel der Materialien bestimmt werden. Die Ergebnisse lauten

$$\begin{aligned}\alpha_{\text{c, Pol}} &= 0,063^\circ \\ \alpha_{\text{c, Si}} &= 0,198^\circ.\end{aligned}$$

Im Vergleich zu den Theoriewerten [8]

$$\begin{aligned}\alpha_{\text{c, Pol}} &= 0,153^\circ \\ \alpha_{\text{c, Si}} &= 0,223^\circ\end{aligned}$$

ergeben sich relative Abweichungen bei Polystyrol von 58,8% beziehungsweise bei Silizium von 11,2%. Die Abweichung Die hohe Abweichung bei Polystyrol ist eine direkte Folge der hohen Unsicherheit bei der Dispersionsmessung. Der kritische Winkel von Silizium weist ebenfalls eine sehr geringe Abweichung auf, weswegen die Messung des Siliziums als erfolgreich betrachtet werden kann.

Mit dem Parratt-Algorithmus konnte ebenfalls die Rauigkeit zwischen Polystyrol und Silizium zu

$$\sigma_{\text{Poly, Si}} = 6,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

bestimmt werden. Die Parratt-Kurve ist sehr empfindlich bezüglich dieser Parameter, weswegen die Bestimmung der Rauigkeit im Rahmen der Genauigkeit der Anpassung des Parratt-Algorithmus als gut angenommen werden kann. Die zweite Rauigkeit zwischen Luft und Polystyrol

$$\sigma_{\text{Luft, Poly}} = 5,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

hat eine eher untergeordnete Rolle in der Anpassung gespielt, weshalb keine Aussage über ihre Genauigkeit getroffen werden kann.

Allgemein ist die manuelle Anpassung der Parameter im Parratt-Algorithmus sehr ungenau und daher sind alle Ergebnisse mit diesem Algorithmus mit dieser Ungenauigkeit zu betrachten. Eine andere Einstellung der Parameter hätte möglicherweise ähnliche oder sogar bessere Ergebnisse hervorgebracht. Die Parratt-Kurve beschreibt die gemessene Reflektivität aber gut genau, sodass den Ergebnissen dennoch eine Aussagekraft zugeschrieben werden kann, wie auch die Vergleiche mit Literaturwerten zeigen.

Literatur

- [1] 30. Nov. 2021. URL: <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/5653>.
- [2] 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/>.
- [3] 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/>.
- [4] Heinz Kiessig. „Interferenz von Röntgenstrahlen an dünnen Schichten“. In: *Annalen der Physik* 402 (März 2006), S. 769–788. DOI: 10.1002/andp.19314020702.
- [5] Eric O. Lebigot. *Uncertainties: a Python package for calculations with uncertainties*. Version 2.4.6.1. URL: <http://pythonhosted.org/uncertainties/>.
- [6] 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/>.
- [7] L. G. Parratt. „Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays“. In: *Phys. Rev.* 95 (2 1954), S. 359–369. DOI: 10.1103/PhysRev.95.359.
- [8] Metin Tolan. „X-Ray Scattering from Soft-Matter Thin Films“. In: *Springer* (1999).
- [9] *V44 - Röntgenreflektrometrie*. TU Dortmund, 8. Nov. 2021.

A. Anhang

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Reflektivitätsscan:
angle_refl, intensity_refl = np.genfromtxt("data/scan1.UXD", unpack=True)
# Diffuser Scan
angle_diff, intensity_diff = np.genfromtxt("data/scan2.UXD", unpack=True)

# Reflektivität:  $R=I/5I_0$ ; 5 durch 5s Messzeit
I_0 = 9.7272e05 # Werte jeweils aus vorherigen Berechnungen
R_refl = intensity_refl / (5 * I_0)
R_diff = intensity_diff / (5 * I_0)
R = R_refl - R_diff

# Geometriefaktor anwenden; für Vergleich mit Parratt
a_g = 0.6875658564108561
R_G = np.zeros(np.size(R))
for i in np.arange(np.size(a)):
```

```

    if(a[i] <= a_g and a[i] >0 ):
        R_G[i] = R[i] * np.sin(np.deg2rad(a_g)) / np.sin(np.deg2rad(a[i]))
    else:
        R_G[i] = R[i]

# Parratt-Algorithmus

# a_i Einfallswinkel, Brechungsindex: n1 Luft, n2 Polystyrol, n3 Silicium
# Rauigkeiten: sigma1 Polystyrol, sigma2 Silizium
# Schichtdicken: d1=0 (Luft), d2: Dicke der Schicht Polystyrol

n1 = 1.0
d1 = 0.0
wellenlaenge = 1.54e-10
# Ermittelte Werte durch Anpassung des Parratt
delta2 = 0.6 * 10 ** (-6)
delta3 = 6.0 * 10 ** (-6)
sigma1 = 5.5 * 10 ** (-10) # m
sigma2 = 6.45 * 10 ** (-10) # m
d2 = 8.6 * 10 ** (-8) # m
b2 = (delta2 / 40) * 1j
b3 = (delta3 / 200) * 1j

def parratt(a_i, delta2, delta3, sigma1, sigma2, d2, b1, b2):
    n2 = 1.0 - delta2 + b2
    n3 = 1.0 - delta3 + b3
    a_i = np.deg2rad(a_i)
    k = 2 * np.pi / wellenlaenge
    kd1 = k * np.sqrt(n1 ** 2 - np.cos(a_i) ** 2)
    kd2 = k * np.sqrt(n2 ** 2 - np.cos(a_i) ** 2)
    kd3 = k * np.sqrt(n3 ** 2 - np.cos(a_i) ** 2)

    r12 = (kd1 - kd2) / (kd1 + kd2) * np.exp(-2 * kd1 * kd2 * sigma1 ** 2)
    r23 = (kd2 - kd3) / (kd2 + kd3) * np.exp(-2 * kd2 * kd3 * sigma2 ** 2)

    x2 = np.exp(-2j * kd2 * d2) * r23
    x1 = (r12 + x2) / (1 + r12 * x2)

    return np.abs(x1) ** 2

params = [delta2, delta3, sigma1, sigma2, d2, b1, b2]
print(params)

```



```

parratt_curve = parratt(angle_refl, *params)

# Kritischer Winkel
a_Poly = np.rad2deg(np.sqrt(2 * delta2))
a_Si = np.rad2deg(np.sqrt(2 * delta3))

print("Kritischer Winkel Polystyrol: ", a_Poly)
print("Kritischer Winkel Silicium: ", a_Si)

# Plot

plt.axvline(a_Poly, linewidth=0.5, color="green", label="Polystyrol")
plt.axvline(a_Si, linewidth=0.5, color="pink", label="Silizium")
plt.plot(angle_refl, parratt_curve, "-", label="Parratt-Kurve")
plt.plot(angle_refl, R_G, "-", label="gem. Reflektivität mit Korrektur durch")
plt.xlabel(" / °")
plt.ylabel("R")
plt.yscale("log")
plt.grid(alpha=0.4)
plt.legend()
plt.savefig("parratt.pdf")

```