VERSUCH 44

Röntgenreflektometrie an einem Polystyrol-beschichteten Silicium-Wafer

Katharina Brägelmann
katharina.braegelmann@tu-dortmund.de

Lars Kolk
lars.kolk@tu-dortmund.de

Durchführung: 20.01.2020 Abgabe: 04.03.2020

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1 Zielsetzung

In diesem Versuch sollen mithilfe der Röntgenreflektometrie die Dichte, Rauigkeit und Schichtdicke eines dünnen Polystyrolfilms untersucht werden.

2 Theorie

2.1 Grundlagen

Brechung findet statt, wenn eine elektromagnetische Welle mit einem elektrischen Feldvektor der Form

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

($\vec{k}\hat{=}$Wellenvektor, $\vec{r}\hat{=}$Ortsvektor)

von einem Medium mit Brechungsindex n_1 in ein Medium mit Brechungsindex n_2 ($n_1 \neq n_2$) übergeht. Bei der in diesem Versuch verwendeten Röntgenstrahlung handelt es sich dabei um eine elektromagnetische Welle mit einer Wellenlänge zwischen $\lambda = 0{,}1\,\text{Å}$ und $\lambda = 10\,\text{Å}$.
Der Brechungsindex kann als

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

($\delta\hat{=}$Korrekturterm$(O)10^{-6}$), $\beta\hat{=}$Absorbtion$(O)(10^{-7}$(für $E = 6\,\text{keV}$)

geschrieben werden und ist für Röntgenstrahlung kleiner als eins. Aus dem Snelliusschen Brechungsgesetz

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

und der Annahme, dass es sich bei der Grenzfläche der Medien um eine homogene Ebene handelt, ergibt sich ein kritischer Winkel α_C, bei dem es zur Totalreflexion kommt. Unter Vernachlässigung der Absorbtion folgt für kleine Winkel näherungsweise

$$\alpha_c \approx \sqrt{2\delta} = \lambda\sqrt{\frac{r_e\rho}{\pi}}. \tag{1}$$

($r_e\hat{=}$Klassischer Elektronenradius, $\rho\hat{=}$Elektronendichte des Materials)

2.2 Fresnel Formeln

Im allgemeinen muss bei der Reflektion und Transmission elektromagnetischer Wellen die Polarisation des Lichts berücksichtigt werden. Dies geschieht mithilfe der Fresnel Formeln. Für s-polarisiertes Licht ergeben sich

$$r = \frac{n_1\cos\alpha_1 - n_2\cos\alpha_2}{n_1\cos\alpha_1 + n_2\cos\alpha_2}$$
$$t = \frac{2n_1}{n_1\cos\alpha_1 + n_2\cos\alpha_2}.$$

Für diesen Versuch ist eine Unterscheidung zwischen p und s Polarisation aufgrund der ähnlichen Brechungsindizes $n_1 \approx n_2$ nicht nötig. Die Fresnel Fresnelreflektivität ist für Röntgenstrahlung und für $\alpha_i > 3\alpha_c$ näherungsweise

$$R_f = \left(\frac{\alpha_c}{2\alpha_i}\right).$$

2.3 Mehrschichtsysteme

Da in diesem Versuch mit Polystyrolschicht auf einem Siliziumsubstrat gearbeitet wird, wird im folgendem der Umgang mit Mehrschichtsystemen erläutert. Ein beispielhaftes Verhalten der Refletivität befindet sich in Abbildung 1.

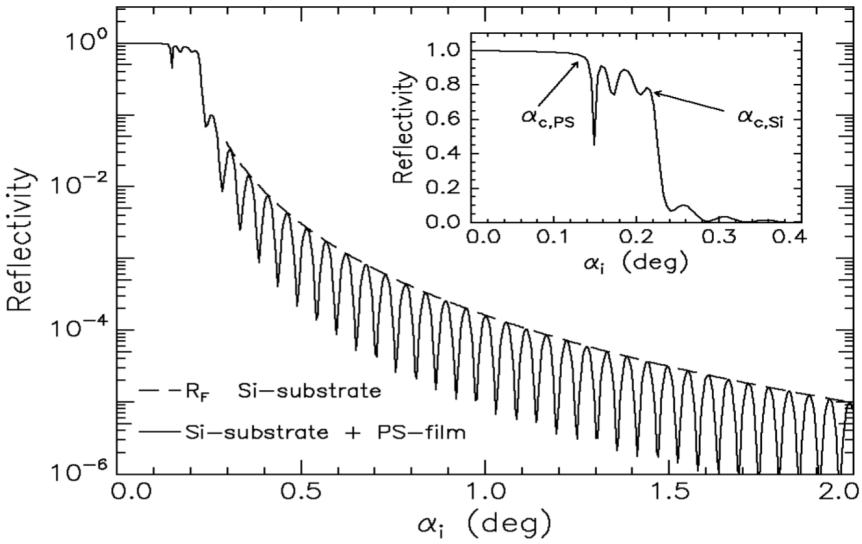

Abb. 1: Beispielhafte Auftragung der Röntgenreflektivität R gegen den Einfallswinkel α_i [1].

In dem dort vergrößerten Bereich sind zwei Totalreflexionen zu erkennen. Bei diesen handelt es sich um die Totalreflexionen von Silizium und des Polystyrolfilm. Für höhere Einfallswinkel folgt der zu erwartene Abfall der Refletivität. Die dabei beobachtbaren Oszillationen treten aufgrund von Interferenteffekten an der Oberfläche auf. Mithilfe dieser Oszillationen lassen sich Rückschlüsse auf den Schichtabstand ziehen, da der Gangunterschied für destruktive Interferenzen ein ungerades Vielfaches von $\frac{\lambda}{2}$ sein muss. Damit folgt der Zusammenhang

$$d = \frac{2\pi}{\delta q_z} = \frac{\lambda}{2\delta\alpha_1}.$$

$(\vec{q} = \vec{k_2} - \vec{k_1},\ q_z = 2k\sin\alpha_1\ )$

Handelt es sich nun bei dem zu betrachtenem System um - wie in Abbild 2 dargestellt - ein System mit N+1 Schichten, kann die Reflektivität mithilfe des rekursiven Parratt-Algorithmus berechnet werden. Dieser trifft die Annahme, dass es sich bei der untersten Schicht um eine unendlich dicke Schicht handelt, sodass an dieser keine Transmission stattfindet. Mathematisch wird der Parratt-Algorithmus beschrieben durch

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

($r_{j,j+1} \hat{=}$ Fresnelreflektivität der j-ten Grenzfläche.)

An der untersten Grenzfläche Z_N findet keine Reflektion mehr statt. Damit ist $R_{N+1} = 0$. Mit dieser Startbedingung können die Verhältnisse der reflektierten und transmittierten rekursiv von unten nach oben berechnet werden.

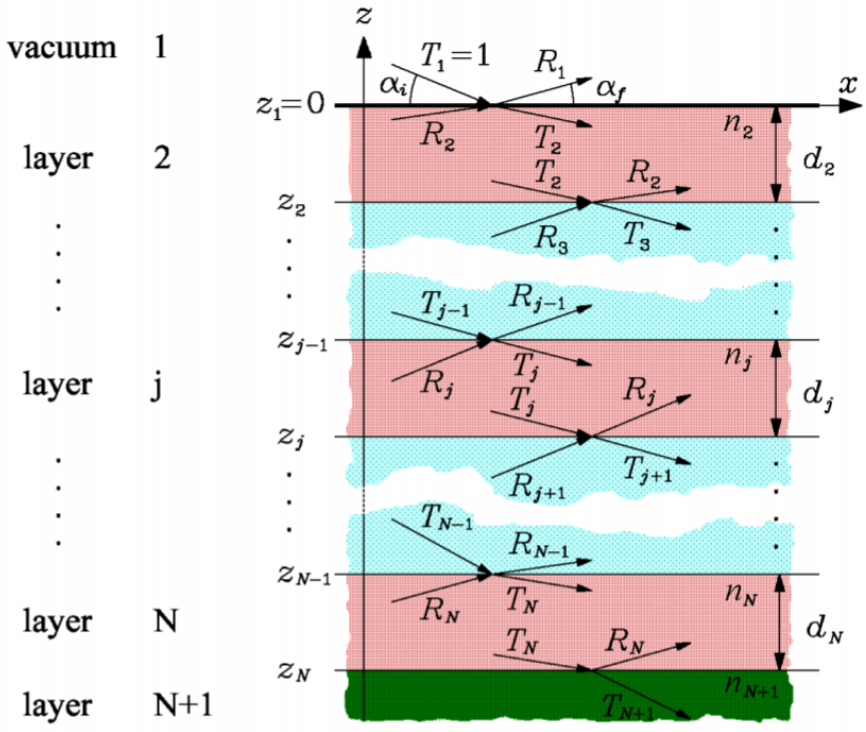

Abb. 2: Beispielhafte Darstellung eines Mehrschichtensystems mit N+1 Schichten [1].

2.4 Rauigkeit

Im Kapitel 2.1 wurde angenommen, dass es sich bei den Oberflächen perfekt glatte Oberflächen handelt. Da dies im Experiment jedoch nicht der Fall ist, muss dies bei der Berechnung der Reflektivität berücksichtigt werden. Dafür werden die modifizierten

Fresnelkoeffizienten

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

genutzt.

2.5 Geometriefaktor und Geometriewinkel

Wie in Abbildung 3 zu sehen ist, überstreicht der verwendete Strahl eine größere Fläche, als die Probenoberfläche. Dies führt dazu, dass nur ein Teil der Intensität I reflektiert und somit später detektiert wird. Dies wird durch den Geometriefaktor G berücksichtigt und wird als das Verhältnis der Strahlbreite $D \sin \alpha_i$, die die Probenoberfläche trifft, zur Gesamtstrahlbreite d_0 defniert. Dabei gilt:

$$G = \frac{D \sin \alpha_i}{d_0} \qquad \text{mit} \quad \alpha_i < \alpha_g \quad \text{und} \tag{3}$$
$$G = 1 \qquad \text{mit} \quad \alpha_i > \alpha_g. \tag{4}$$

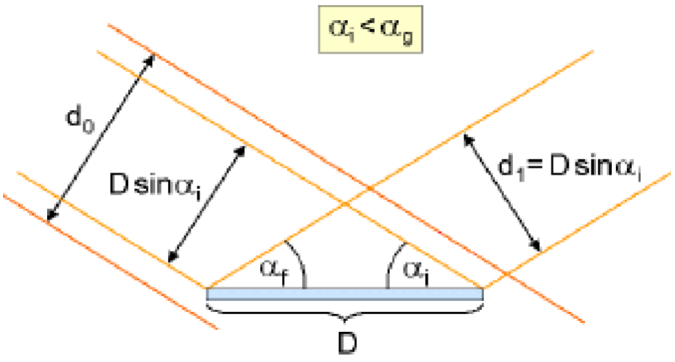

Abb. 3: Veranschaulichung des Geometriewinkels [2].

3 Aufbau und Durchführung des Versuchs

Die Messung wird mit dem in Abbildung 4 zu sehenden D8-Diffraktometer durchgeführt. Bei diesem handelt es sich um eine Röntgenröhre mit einer Kupferanode welche mit einer Spannung von 40 kV und einem Strom von 40 mA betrieben wird.

Abb. 4: Das verwendete D8-Labordiffraktometer [2].

Die aus der Röntgenröhre divergierende Strahlung wird hier mithilfe eines Göbelspiegel gebündelt und monochromatisiert. Der daraus resultierende Strahl besitzt dann eine Wellenlänge von $\lambda = 1{,}54\,\text{Å}$. Ein Bild der verwendeten Röntgenröhre befindet sich in Abbildung 5.

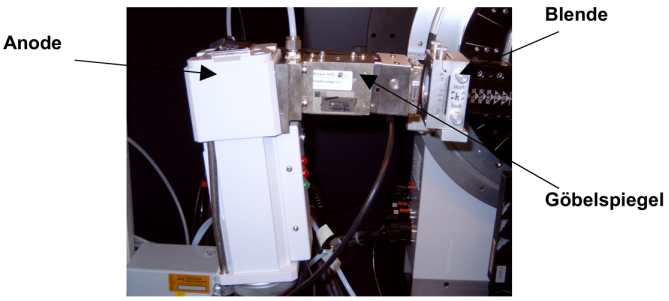

Abb. 5: Röntgenröhre des D8-Labordiffraktometers[2].

3.1 Justage

Detektorscan Um den Detektorscan durchzuführen, wird zunächst die Probe aus dem Strahlengang entfernt. Dabei werden Röntgenröhre und Detektor auf die Position 0° gefahren. Um nun die tatsächliche Nulllage des Detektors zu finden, wird seine Lage um wenige Grad varriert, bis die Intensität des Primärstrahles ein durchläuft Maximum durchläuft, welches für die folgenden Schritte als neue Nullposition des Detektors verwendet wird.

Erster Z-Scan In diesem Schritt wird die Probenjustage angepasst. Dabei wird die z-Position der Probe varriert. Dazu wird diese wieder in den Strahlengang geschoben und die Intensität I gemessen. Ziel dieser Messung ist es, herauszufinden, wann dabei die gemessene Intensität I auf $\frac{1}{2}I_{\text{Max}}$ sinkt. Der z-Wert wird notiert und die Motoren in die entsprechende Position gebracht.

Erster Rockingscan Nachdem in den vorherigen Schritten die zu untersuchende Probe parallel zur Strahlachse ausgerichtet wurde, erfolgt nun der Rockingscan. Bei diesem werden Röntgenröhre und Detektor um die Probe bewegt, wobei der Winkel zwischen Detektor und Probe bei Konstant $2\Theta = 0°$ bleibt. Die Drehung erfolgt dabei im Winkelbereich zwischen $-1°$ und $1°$. Aus dem daraus folgendem Intensitätsverlauf wird das Maximum ausgelesen und für die weiteren Schritte verwendet.

Zweiter Z-Scan Die Probe befindet sich aufgrund des Rockingscans nun nicht mehr in der Position, in der die gemessene Intensität I der halben maximalen Intensität $\frac{1}{2}I_{\text{Max}}$ entspricht. Aus diesem Grund muss hier ein erneuter Z-Scan durchgeführt werden.

Zweiter Rockingscan Zur Erhöhung der Präzission wird nun ein zweiter Rockingscan mit $2\Theta = 0{,}3°$ durchgeführt. Dabei wird für die Drehung ein Winkelbereich von $0{,}1°$ bis $0{,}2°$ gewählt.

Dritter Z-Scan Um die Präzission der Justage weiter zu erhöhen, wird anschließend ein dritter z-Scan bei $2\Theta = 0{,}3°$ durchgeführt. Dabei wird ein Scanbereich zwischen $-0{,}5\,\text{mm}$ und $0{,}5\,\text{mm}$ gewählt. Wie auch bei den vorherigen z-Scans wird hier erneut das Maximum gemessen und die Motoren entsprechend angesteuert.

Dritter Rockingscan Als letzter Schritt wird ein abschließender Rockingscan unter einem Winkel von $2\Theta = 1°$ durchgeführt. Dabei wird ein Scanbereich zwischen den Werten $0{,}45°$ und $0{,}55°$ gewählt, da das erwartete Maximum bei $0{,}5°$ liegt. Nachdem das Maximum gefunden wurde, werden die Motoren entsprechend angesteuert.

3.2 Messung

Nachdem die Justage des D8-Diffraktometer durchgeführt wurde, wird ein sogenannter Reflektivitätsscan durchgeführt. Bei diesem sind der Einfallswinkel α_i und der Winkel zwischen Probe und Detektor α_f gleich. Hierbei wird ein Scanbereich von $0°$ bis $5°$ eingestellt und vermessen. Dazu wird eine Schrittweite von $0{,}05°$ verwendet, wobei als Messzeit pro Datenpunkt $5\,\text{s}$ gewählt wird.
Zusätzlich wird ein sogenannter diffuser Scan durchgeführt, der den Anteil der gestreuten Intensität an der Reflektivität bestimmt. Dieser Scan wird mit dem Unterschied durchgeführt, dass die Differenz hier $\Delta a = |\alpha_i - \alpha_\text{f}| = 0{,}1°$ beträgt.

4 Auswertung

4.1 Vorbereitung

Detektor-Scan Zur Bestimmung der maximalen Intensität wird der erste Detektor-Scan in Abbildung 6 dargestellt.

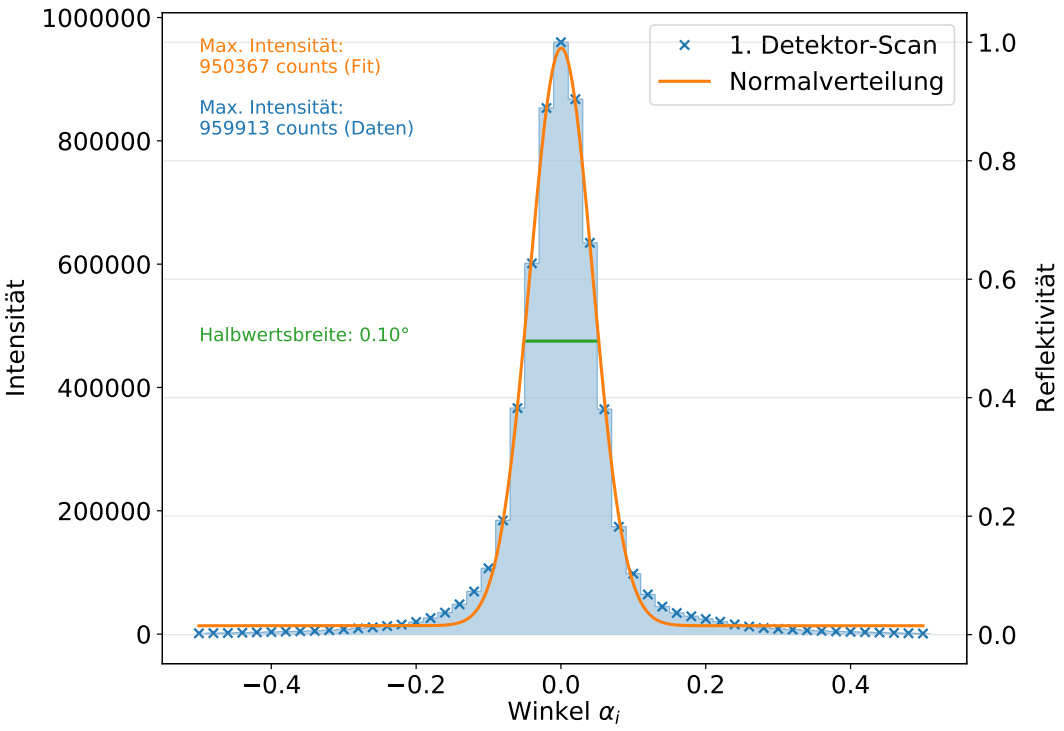

Abb. 6: Detektor-Scan: Die gemessene Intensität aufgetragen gegen den Einfallswinkel α_i.

Das Maximum der aufgenommenen Daten wird zur Normierung der Reflektivitätskala verwendet. An die Daten wird mit *ipython 3.6.8* und *scipy.optimize.curve_fit* eine Gaussverteilung der Form

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

$a, b \widehat{=}$Fit-Parameter, $\mu \widehat{=}$Erwartungswert, $\sigma \widehat{=}$Standardabweichung

gefittet. Die Parameter ergeben sich zu

$$
\begin{aligned}
a &= && (102{,}109\,927\,00 \pm 1{,}089\,250\,87) \cdot 10^{3}\ \text{counts} \\
b &= && (13{,}559\,228\,90 \pm 2{,}242\,937\,88) \cdot 10^{3}\ \text{counts} \\
\mu &= && (4{,}734\,632\,15 \pm 4{,}710\,145\,25) \cdot 10^{-4}\,^{\circ} \\
\sigma &= && (4{,}348\,379\,540\,0 \pm 0{,}049\,348\,984\,1) \cdot 10^{-2}\,^{\circ}.
\end{aligned}
$$

Innerhalb aus den Daten wird die Halbwertsbreite (FWHM) zu folgendem Wert berechnet:

$$\text{FWHM} = 10\,^{\circ}.$$

z-Scan Der erste z-Scan wird in Abbildung 7 gezeigt.

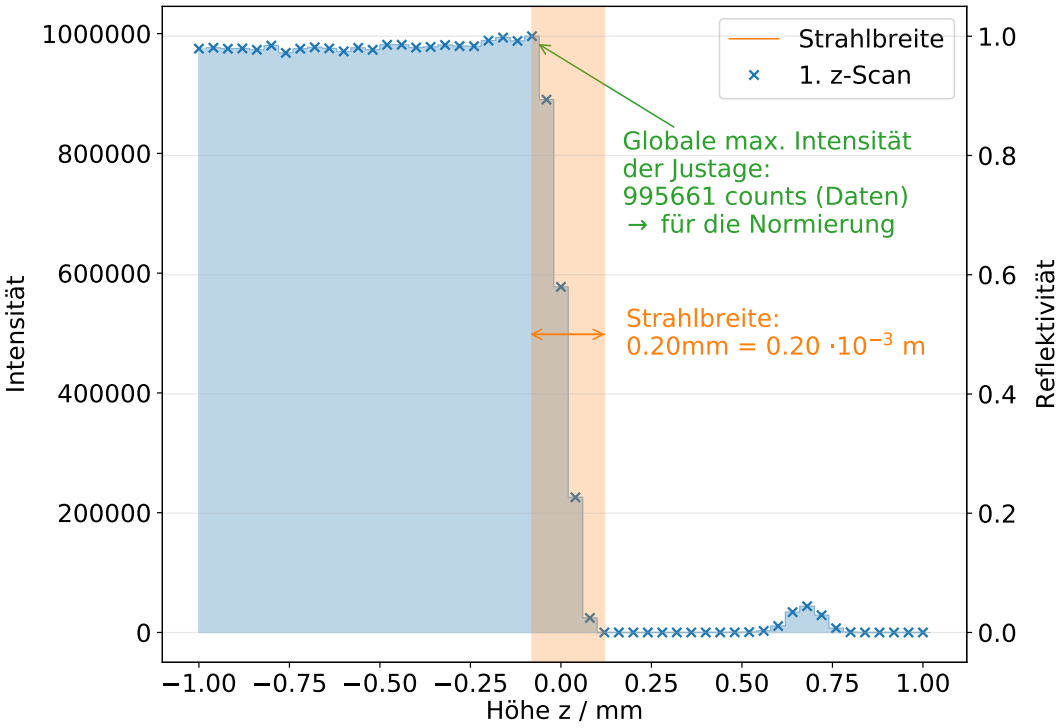

Abb. 7: z-Scan: Hier wird die gemessene Intensität gegen die vertikale Position der Probe aufgetragen.

Aus dem Abstand auf der z-Achse, der zwischen Maximum und Minimum liegt, wird die Strahlbreite bestimmt. Sie wird den Daten als

$$d = 0{,}2 \cdot 10^{-3}\,\text{m}$$

entnommen. Bei der Auswertung dieses Datensatzes fällt auf, dass hier global eine größere Intensität gemessen wird, als im Detektor-Scan, trotz gleicher Messdauer. Somit wird die maximale Intensität

$$I_{max} = 995\,661 \text{ counts}$$

zur Normierung der restlichen Datensätze verwendet.

rocking-Scan Der erste rocking-Scan ist in Abbildung 8 verbildlicht.

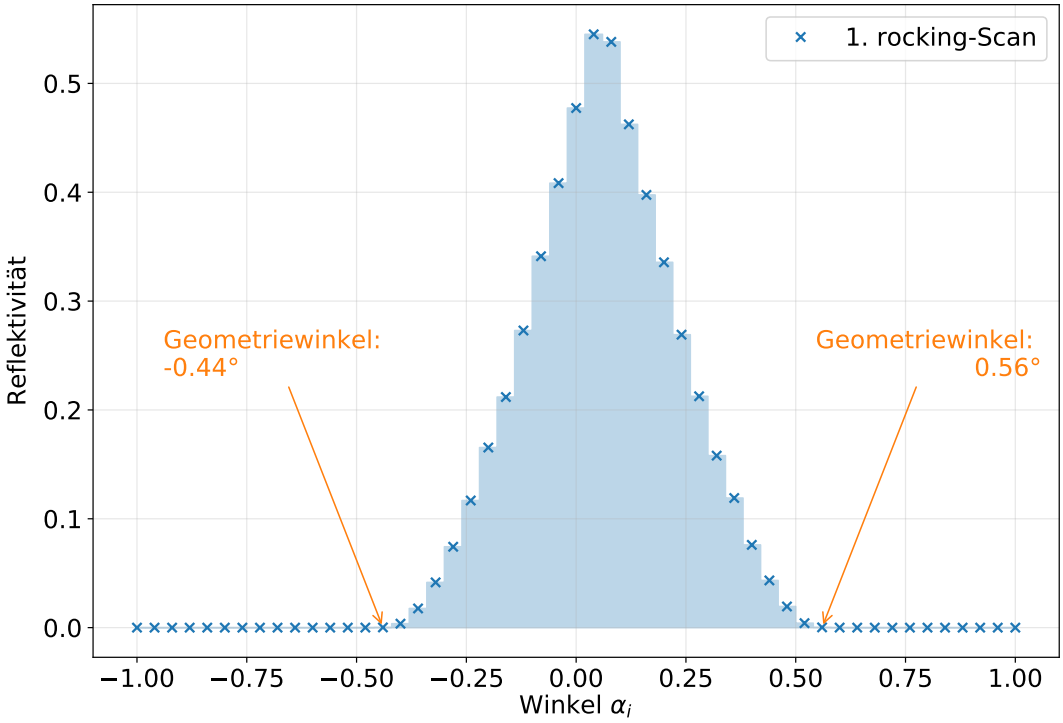

Abb. 8: rocking-Scan: Die Reflektivität der Probe in Abhängigkeit des Einfallswinkels α_i unter konstantem Winkel zwischen Strahlenquelle und Detektor.

Hier werden aus den Daten zwei Werte für den Geometriewinkel abgelesen. Dazu werden die Werte gewählt, bei denen sich die Intensität relevant von 0 unterscheidet. Diese werden anschließend gemittelt:

$$a_g = [0.44°, 0.56°]$$
$$\overline{a_g} = 0{,}50\,°.$$

4.2 Auswertung der Vermessung eines mit Polystyrol beschichteten Silicium-Wafers

Zunächst werden die Daten normiert und aufbereitet. Die Messdauer beträgt hier fünf mal so lange, wie die Justage-Messungen. Dieser Faktor wird in die Normierung einbezogen. Die Daten zum Einfallswinkel α_i werden in den Wellenvektorübertrag $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\pi}{180} \alpha_i$ überführt. Danach wird der Datensatz der diffusen Messung von dem Datensatz der eigentlichen Messung abgezogen, um Rückstreueffekte im Schichtsystem aus den Daten zu eliminieren. Anschließend wird der Geometriefaktor berechnet. Hierfür werden die Maße des Wafers ($2\,\mathrm{cm} \times 2\,\mathrm{cm}$), die in 4.1 berechnete Strahlbreite d und der Geometriewinkel α_g verwendet (Gleichungen (3) und (4)). Der Geometriefaktor ist abhängig vom Einfallswinkel und verhindert die Unterrepräsentation sehr kleiner Winkel, bei denen nicht die gesamte Strahlbreite am Wafer reflektiert wird. Die normierten, korrigierten Daten werden nun durch den Geometriefaktor geteilt und sind hiermit vollständig korrigiert.
Nun wird mithilfe von *scipy.signal.find_peaks* die Region der Kiessing-Oszillationen nach Minima durchsucht. Aus dem Abstand der Minima wird die Schichtdicke des Polystyrol(PS)-Films auf dem Silicium(Si)-Wafer als

$$z_{\mathrm{Minima}} = (882{,}41 \pm 0{,}03) \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$$

abgeschätzt.

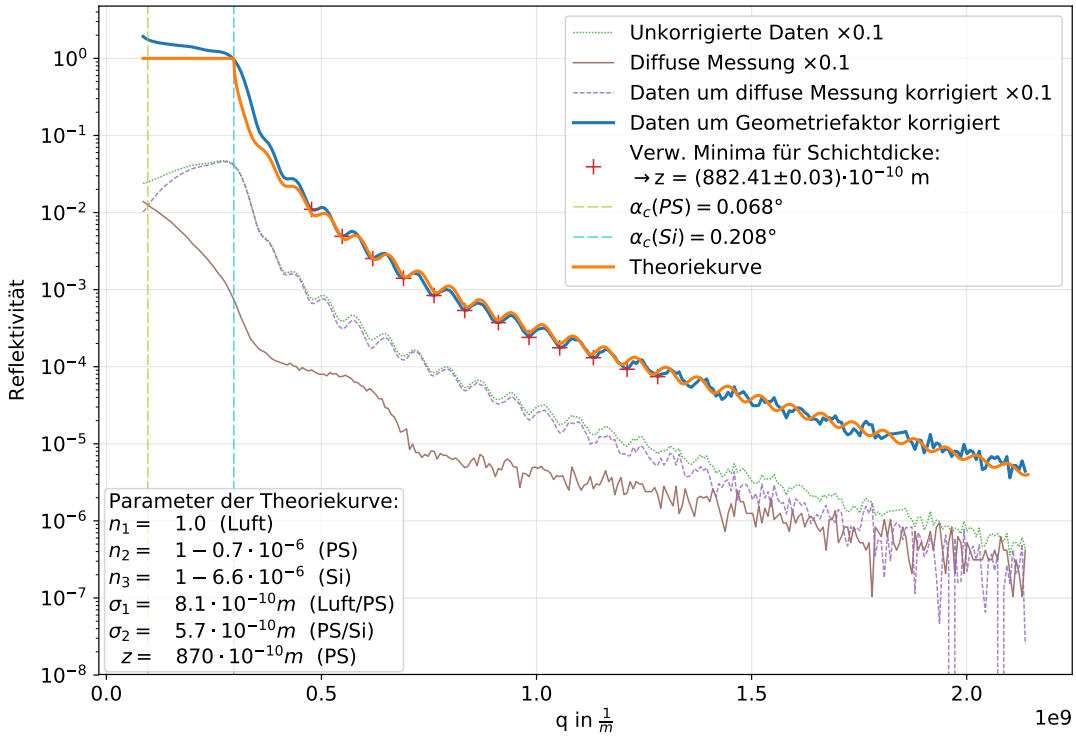

Abb. 9: Vermessung der Reflektivität des PS-Si-Wafers in Abhängigkeit des Wellenvektorübertrags q. Zur Übersichtlichkeit sind die Graphen der Datenaufbereitung nach unten verschoben, sonst verschwinden sie über große Teile der Abbildung unter den anderen Graphen.

Sämtliche Graphen und die verwendeten Minima sind in Abbildung 9 dargestellt. Die Graphen zu den jeweiligen Aufbereitungsschritten sind zur Übersichtlichkeit mit einem dem Faktor 0.1 multipliziert und aufgetragen.
Zur weiteren Bestimmung der interessanten Größen wird eine Theoriekurve nach dem Parratt-Algorithmus konstruiert (Anhang 6). Die Parameter der Theoriekurve sind die Brechungsindices n_i der drei beteiligten Materialien (Luft, PS, Si), die Rauigkeiten σ_i der beiden Grenzflächen (Luft-PS, PS-Si) und die Schichtdicke z. Manuell werden diese Parameter angepasst, um die Theoriekurve den Daten zu nähern. Die gewählten

Parameter liegen bei:

Luft	$n_1 =$	1,0
PS	$n_2 =$	$1 - 0{,}7 \cdot 10^{-6}$
Si	$n_3 =$	$1 - 6{,}6 \cdot 10^{-6}$
Luft-PS	$\sigma_1 =$	$8{,}1 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$
PS-Si	$\sigma_2 =$	$5{,}7 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$
PS-Schichtdicke	$z =$	$870 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$.

Aus den Korrekturtermen δ (in $n = 1 - \delta$) lassen sich die kritischen Winkel der Totalreflexion der beiden Materialien berechnen (Gleichung (1)):

PS	$\alpha_c =$	$0{,}068\,^\circ$	(5)
Si	$\alpha_c =$	$0{,}208\,^\circ$.	(6)
			(7)

5 Diskussion

Initial lässt sich sagen, dass der Versuch nicht von den Erwartungen abweicht. Die gemessenen Größen liegen in den Größenordnungen der Literaturwerte und der eigenständig reproduzierten Werte. So weicht die abgeschätzte Schichtdicke z_{Minima} nur gering von der manuell angepassten Schichtdicke $z_{\mathrm{Theoriekurve}}$ ab:

Minima	Theoriekurve	Rel. Abw.
$z = (882{,}41 \pm 0{,}03) \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$	$z = 870 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$	1,43 %.

Die Abweichung lässt sich einerseits durch eine nicht optimale Anpassung der Parameter der Theoriekurve erklären, andererseits sind nur begrenzt viele Minima in den anderen Wert der Schichtdicke eingegangen. Eine weitere Messung mit längerer Messdauer pro Winkel könnte die Intensität bei großen Winkeln α_i bzw. Wellenvektorüberträgen q auf repräsentative Zählraten anheben. In der Messung in diesem Versuch werden die Messdaten bei größeren q vom Rauschen überlagert. Zu den Dispersionen δ (in $n = 1 - \delta$) liegen die Literaturwerte [3] bei

	Literatur	aus der Angepassung	Rel. Abw.
PS	$\delta = 3{,}5 \cdot 10^{-6}$	$\delta = 0{,}7 \cdot 10^{-6}$	80 %
Si	$\delta = 7{,}56 \cdot 10^{-6}$	$\delta = 6{,}6 \cdot 10^{-6}$	12,70 %.

Dabei fällt gerade die starke Abweichung des Korrekturterms des Polystyrols ins Auge. Eine mögliche Erklärung hierfür ist eine möglicherweise ungenaue Wahl des Parameters. Weiterhin sind aber die kritischen Winkel in der passenden Größenordnung [3]:

	Literatur	aus der Angepassung	Rel. Abw.
PS	$\alpha_c = 0{,}15\,^\circ$	$\alpha_c = 0{,}068\,^\circ$	54,67 %
Si	$\alpha_c = 0{,}22\,^\circ$	$\alpha_c = 0{,}208\,^\circ$	5,45 %.

Insgesamt lässt sich der Versuch trotz einiger Startschwierigkeiten jedoch als Erfolg betrachten.

Literatur

[1] Lehrstuhl Experimentelle Physik I. Roentgenreflektometrie Versuch. 2007. URL: http://e1.physik.tu-dortmund.de/cms/Medienpool/Downloads/Roentgenreflektometrie_Versuch.pdf.

[2] TU Dortmund. Versuchsanleitung V44. Röntgenreflektometrie.

[3] M. Tolan. X-Ray Scattering from Soft Matter Thin Films. Berlin/Heigelberg/New York: Springer-Verlag, 1999. Kap. Reflectivity of X-Rays from Surfaces - Multiple Interfaces.

6 Anhang

```
if __name__=="__main__":
    import numpy as np
    import sympy as sp
    import matplotlib.pyplot as plt
    import matplotlib.patches as mpatches
    from matplotlib import transforms
    from matplotlib import rc
    from scipy.optimize import curve_fit
    from pylab import figure, axes, pie, title, show
    from numpy import NaN, Inf, arange, isscalar, asarray, array
    import sys
    import scipy.signal as sig
    import uncertainties
    import uncertainties.unumpy as unp
    from uncertainties import ufloat
    from uncertainties.unumpy import (nominal_values as noms, std_devs as
    stds)
    from math import exp, log, sin, atan
    import scipy.constants as const
    from scipy.stats import norm
    import cmath as cm  # was sich halt so ansammelt und was man hier und da
    gebrauchen könnte...

### Variablen für die ganze Datei
    l = 1.54e-10  # Wellenlänge
    ai = np.arange(0.06,1.505,0.0005)*np.pi/180 # x-array für Theoriekurve
    qz = 4*np.pi/l*np.sin(ai) # q-array für die Theoriekurve
    k = 2*np.pi/l # k-Vektor

### Parameter für die manuelle Anpassung des Parratt-Algorithmus
### Angegebene Instruktionen beschäftigen sich mit der Vergrößerung eines
    Parameters
##########################################################################
    #Brechungsindices
    delta1 = 0.7e-6 #PS schiebt runter und vergrößert die Amplitude, macht
    die Kurve steiler
    delta2 = 6.6e-6 #Si schiebt Kurve hoch, verkleinert die Amplitude
##########################################################################
    n1 = 1 #Luft
    n2 = 1 - delta1    # PS
    n3 = 1 - delta2    # Si
##########################################################################
    #Rauigkeit
    sigma1 = 8.1e-10 #PS verkleinert die Amplitude in den hinteren
    Oszillationen
    sigma2 = 5.7e-10 #Si drückt Ende der Kurve runter und verkleinert die
    Oszillationen
##########################################################################
    #Schichtdicke
    z = 870e-10  # verkleinert die Wellenlänge der Oszillationen
##########################################################################
```

```
46
    x, y = np.loadtxt('1416_messung.txt', unpack=True,delimiter=' , ') #
    Einlesen der Messdaten
48  y = y/(5*995661)    # Normierung
    plotallgraphs(x, y)     # hier passiert die Magie
50
    print('--- done ---')
52
def plotallgraphs(x, counts):   # Magie
54 ### allg. Plot-Einstellungen
    plt.rcParams['figure.figsize'] = (10, 7)
56  plt.rcParams['font.size'] = 13
    plt.rcParams['lines.linewidth'] = 2
58 ### Verwendete alternative Linestyles
    denslydotted = (0, (1, 1))
60  denslydashed = (0, (3, 1.25))
    longdashs = (0, (10, 3))
62
    fig, ax = plt.subplots()
64 ### ab hier werden die Daten aufbereitet
    q = von_winkel_zu_q(x)  # Umrechnung von Winkel zu Wellenvektorübertrag q
66
    a,b = lade_diffuse_messung()    # Einlesen der diffusen Messung
68  counts_korrigiert_diffus = korrektur_diffuse_messung(counts, b) #
    Korrigieren der Messung um die diffuse Messung
    counts_korrigiert_geometriefaktor = korrektur_geometriefaktor() #
    Korrigieren der korrigierten Messung um den Geometriefaktor
70  counts_final = counts_korrigiert_geometriefaktor    # Umbennenung da mein
     Variablenname furchtbar war...
    minimum_x, minimum_y, peak_array = finde_minima(counts_final, q) # Findet
     Minima im logaritmischen Graph und gibt verschiedene Arrays mit xy-
    Position und zugehörigem Array-Index aus
72  schichtdicke = berechne_schichtdicke(q, peak_array) # Selbsterklärend


74
    u = 40 # Ende des Plateaus
76  beg = 11    # Anfang der sinnvollen Messdaten
    end = 300   # Ende der sinnvollen Messdaten
78
    unkorr = 1e-01*counts[beg:end]  # Verschiebung der Datensätze um 0.1 nach
     unten.
80  diffusedaten = 1e-01*b[beg:end] # Verschiebung der Datensätze um 0.1 nach
     unten. counts_korrigiert_diffus wird in der produzierenden Funktion mit
    0.1 multipliziert, da es sonst Fehler mit den Listen etc gibt... Yolo

82 ### Hier wird geplottet
    ax.plot(q[beg:end], unkorr,
84          linestyle=denslydotted,
            linewidth = 1,
86          color='C2',
            label='Unkorrigierte Daten ' +r'$\times 0.1$',
88          alpha=0.8)
```

```
    ax.plot(a[beg:end], diffusedaten,
90          linestyle='-',
            linewidth = 1,
92          color='C5',
            label='Diffuse Messung ' +r'$\times 0.1$',
94          alpha=0.8)
    ax.plot(a[beg:end], counts_korrigiert_diffus[beg:end],
96          linestyle=denslydashed,
            linewidth = 1,
98          color='C4',
            label='Daten um diffuse Messung korrigiert ' +r'$\times 0.1$',
100          alpha=0.8)

102 ax.plot(q[beg:end], counts_final[beg:end],
            linestyle='-',
104         color='C0',
            label='Daten um Geometriefaktor korrigiert')
106 ax.plot(minimum_x, minimum_y,
            markerstyle='+',
108         color='C3',
            markersize=10,
110         markeredgewidth=1,
            label='Verw. Minima für Schichtdicke: \n' + r'$\rightarrow$' +
112             r'z = (%.2f' %(schichtdicke.n * 1e9) + '$\pm$' +
                r'%.2f)' %(schichtdicke.s * 1e9) + r'$\cdot 10^{-10}$ m')
114
    alphakritPS, qkritPS = kritischerwinkel(delta1) # berechnet den
    kritischen Winkel und plottet ihn anschließend als vertikale Linie
116 ax.axvline(qkritPS, ymin=0, ymax=1,
            linewidth=0.7,
118         linestyle=longdashs,
            color='C8',
120         label=r'$\alpha_c (PS)=%.3f °$' %alphakritPS)

122 alphakritSi, qkritSi = kritischerwinkel(delta2)
    ax.axvline(qkritSi, ymin=0, ymax=1,
124         linewidth=0.7,
            linestyle=longdashs,
126         color='C9',
            label=r'$\alpha_c (Si)=%.3f °$' %alphakritSi)
128 ##########################################################################
    ### Hier ist der wichtige Aufruf:
130 par = parratt(z)
    plt.plot(qz, par, linestyle='-', color='C1',label='Theoriekurve')
132 ##########################################################################
    ### hier werden die Ergebnisse auch in die Box im Plot geplottet
134 textstr = '\n'.join((
            'Parameter der Theoriekurve:',
136
            r'$n_1      = $'+'\t'+
138         r'$ %.1f $' % (n1) + '  (Luft)',

140         r'$n_2      = $'+'\t'+
```

```
        r'$ 1 - %.1f \cdot 10^{-6} $' % (delta1*1e06) + '  (PS)',

        r'$n_3      = $'+'\t'+
        r'$ 1 - %.1f \cdot 10^{-6} $' % (delta2*1e06) + '  (Si)',

        r'$\sigma_1 = $'+'\t'+
        r'$ %.1f \cdot 10^{-10} m $' % (sigma1*1e10) + '  (Luft/PS)',

        r'$\sigma_2 = $'+'\t'+
        r'$ %.1f \cdot 10^{-10} m $' % (sigma2*1e10) + '  (PS/Si)',

        '  ' + r'$z        = $'+'\t  '+
        r'$  %s \cdot 10^{-10} m$' % (int(z*1e10)) + '  (PS)',))

    props = dict(facecolor='white',
        edgecolor=(0.808, 0.808, 0.808),
        alpha=0.8,
        boxstyle='round, pad=0.2')
    ax.text(0.01, 0.01,
        textstr,
        transform=ax.transAxes,
        va='bottom',
        ha='left',
        bbox=props)

### Plot-Basics
    plt.yscale('log')
    plt.grid(alpha=0.3)
    ax.legend(fancybox=True, ncol=1)
    ax.set_xlabel('q in ' +r'$\frac{1}{m}$',
        labelpad=2)
    ax.set_ylabel('Reflektivität',
        labelpad=8)
    fig.tight_layout()
    plt.savefig('done_plot_messung.pdf')

################################################################################
def parratt(z):
    kz1=k*np.sqrt((n1**2-np.cos(ai)**2))
    kz2=k*np.sqrt((n2**2-np.cos(ai)**2))
    kz3=k*np.sqrt((n3**2-np.cos(ai)**2))

    r12=(kz1-kz2)/(kz1+kz2)*np.exp(-2*kz1*kz2*sigma1**2)
    r23=(kz2-kz3)/(kz2+kz3)*np.exp(-2*kz2*kz3*sigma2**2)
    x2=np.exp(0-(kz2*z)*2j)*r23
    x1=(r12+x2)/(1+r12*x2)
    par = np.abs(x1)**2
    # Es gibt eine ganze Strecke komplexe Daten vor Beginn der Kiessing-
    Oszillationen, daher werden die ersten Werte des Arrays nachträglich auf
    1 gesetzt. Sieht interessant aus, wenn man einen Betrag um den Inhalt der
     Wurzel in den modifizierten Fresnel-Koeffizienten setzt. Ich hab den
    Runtime Error ertragen...
    for i in range(len(par)):
```

```
        if(i <= 296):           # 296 ist manuell angepasst
            par[i] = 1
        else:
            pass
    return par
#############################################################################

def kritischerwinkel(delta):
    alphakrit = np.sqrt(2*delta)*180/np.pi
    qkrit = von_winkel_zu_q(alphakrit)
    return(alphakrit, qkrit)

def berechne_schichtdicke(q, peak_array):
    abstandderpeaks = []
    for i in peak_array:
        if (i<179):
            tmp = q[i+1]-q[i]
            abstandderpeaks.append(tmp)
        else:
            pass
    mittelwert = np.mean(abstandderpeaks)
    fehler = np.std(abstandderpeaks)
    schichtdicke = 2*np.pi/ufloat(mittelwert, fehler)
    return schichtdicke

def finde_minima(m, q):
### Logarithmiere die Daten zur Basis 10
    logm = []
    for i in range(len(m)):
        if (m[i] != 0):
            tmp = np.log10(m[i])
            logm.append(tmp)
        else:
            logm.append(0)
### Negatives VZ um mit find_peaks arbeiten zu können
    neglogm = []
    for i in range(len(logm)):
        tmp = -logm[i]
        neglogm.append(tmp)
### Peaks finden
    peakfinder = sig.find_peaks(neglogm, prominence = 0.07)
### Peaks in den Einträgen:
    peak_array = [ 66,  76,  86,  96, 106, 116, 127, 137, 147, 158, 169, 179,
#       190, 200, 211, 221, 232, 241,# 245, 252, 263, 266, 275, 278, 283,
#       285, 292, 294, 299, 304, 306, 312, 314, 316, 320, 326, 328, 331,
#       335, 338, 340, 344, 346, 349, 352, 355, 359, 363, 365, 368, 370,
#       372, 375, 377, 380, 382, 385, 390, 393, 396, 398, 402, 404, 408,
#       413, 415, 421, 423, 426, 429, 433, 435, 438, 442, 445, 448, 453,
#       455, 459, 462, 465, 469, 472, 478, 483, 489, 494, 7
       ] ### Manuell eingekürzt, da Minima bei großen q sehr unscharf

    peak_x = []
    peak_y = []
```

```
    for i in peak_array:
        peak_x.append(q[i])
        peak_y.append(m[i])
    return peak_x, peak_y, peak_array

def korrektur_geometriefaktor():
    alpha = 0.5
    m = []
    for i in range(len(x)):
        if (x[i] <= alpha):
            tmp = y[i] / ((np.sin(x[i]))/(np.sin(alpha)))
            m.append(tmp)
        else:
            tmp = y[i]
            m.append(tmp)
    return m

def korrektur_diffuse_messung(counts, b):
    korrigierte_counts = []
    for i in range(len(counts)):
        tmp = 1e-01*(counts[i]-b[i])
        korrigierte_counts.append(tmp)
    return korrigierte_counts

def lade_diffuse_messung():
    a, b = np.loadtxt('1501_diffus.txt', unpack=True,delimiter=' , ')
### Normierung
    b = b/959913
    qdiffus = von_winkel_zu_q(a)
    return qdiffus, b

def von_winkel_zu_q(x):
    q = 4 * np.pi /l *np.sin(x*np.pi/180)
    return q

### bin kein Informatik-Talent, aber ich bemühe mich um Übersichtlichkeit -
    ob das geklappt hat, werden wir sehen.
```

content/messung.py