

VERSUCH 47

Temperaturabhängigkeit der Molwärme von Kupfer

Katharina Brägelmann
katharina.braegelmann@tu-dortmund.de

Lars Kolk
lars.kolk@tu-dortmund.de

Durchführung: 13.01.2020

Abgabe: 17.01.2020

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1 Zielsetzung	3
2 Theorie	3
2.1 Grundlagen	3
2.2 Fresnel Formeln	3
2.3 Mehrschichtsysteme	4
2.4 Rauigkeit	5
2.5 Geometriefaktor und Geometriewinkel	6
3 Aufbau und Durchführung des Versuchs	6
3.1 Justage	7
3.2 Messung	8
4 Auswertung	9
4.1 Vorbereitung	9
4.2 Auswertung der Vermessung eines mit Polystyrol beschichteten Silicium-Wafers	12
5 Diskussion	13
Literatur	14
6 Anhang	15

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 $\lambda = 0,1 \text{ \AA}$ und $\lambda = 10 \text{ \AA}$.

Der Brechungsindex kann als

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

($\delta \hat{=}$ Korrekturterm ($O(10^{-6})$), $\beta \hat{=}$ Absorption ($O(10^{-7})$ 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 Absorption folgt für kleine Winkel näherungsweise

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

($r_e \hat{=}$ 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 Reflektivität befindet sich in Abbildung 1.

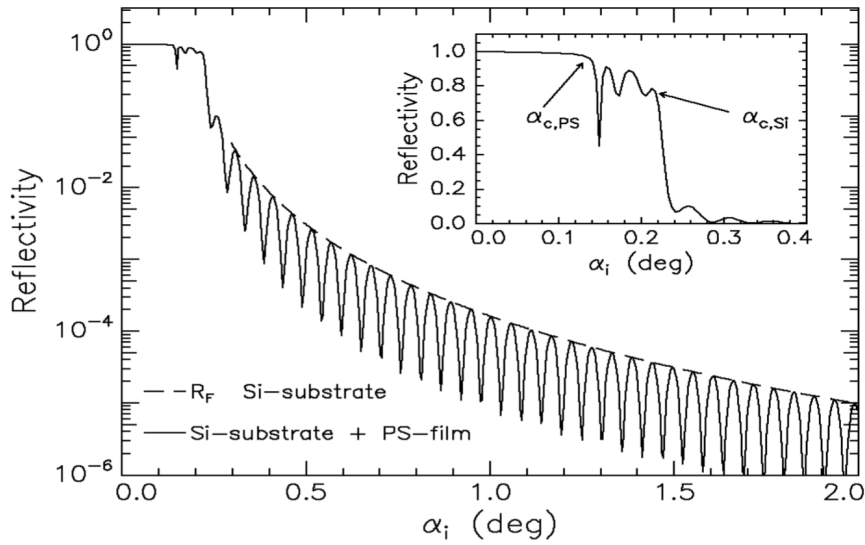


Abb. 1: Beispielhafte Auftragung der Röntgenreflektivität R gegen den Einfallswinkel α_i [1].

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 erwartende Abfall der Reflektivität. Die dabei beobachtbaren Oszillationen treten aufgrund von Interferenzeffekten 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 betrachtendem 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.

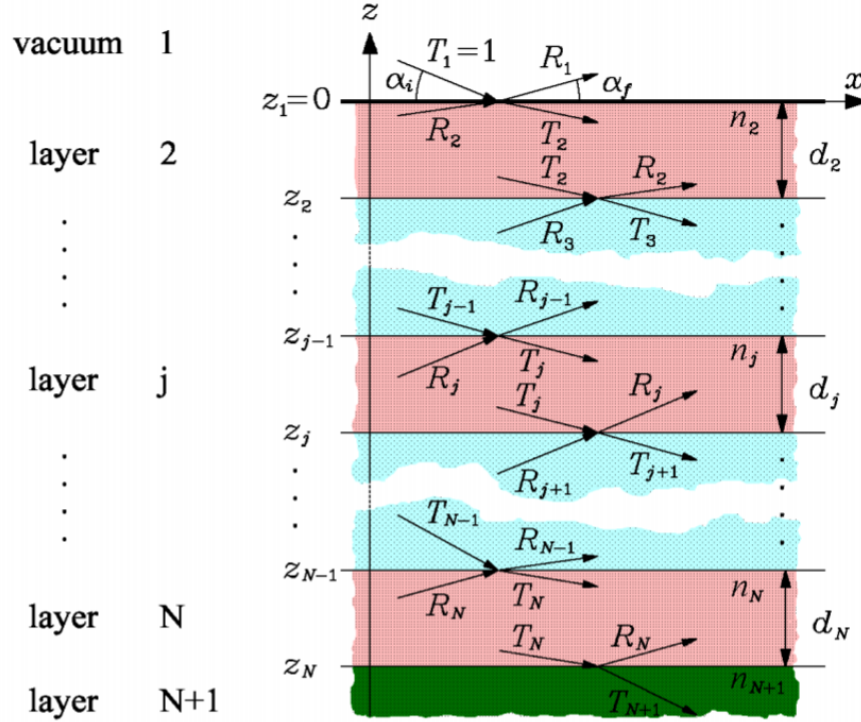


Abb. 2: Beispielhafte Darstellung eines Mehrschichtensystems mit $N+1$ Schichten [1].

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

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

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 definiert. Dabei gilt:

$$G = \frac{D \sin \alpha_i}{d_0} \quad \text{mit } \alpha_i < \alpha_g \quad \text{und} \quad (2)$$

$$G = 1 \quad \text{mit } \alpha_i > \alpha_g. \quad (3)$$

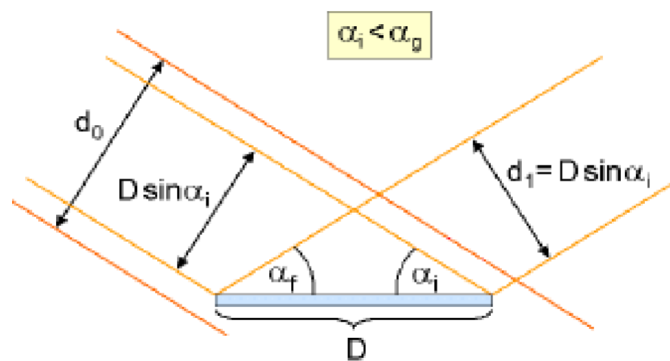


Abb. 3: Veranschaulichung des Geometriewinkels [2].

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 $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Ein Bild der verwendeten Röntgenröhre befindet sich in Abbildung 5.

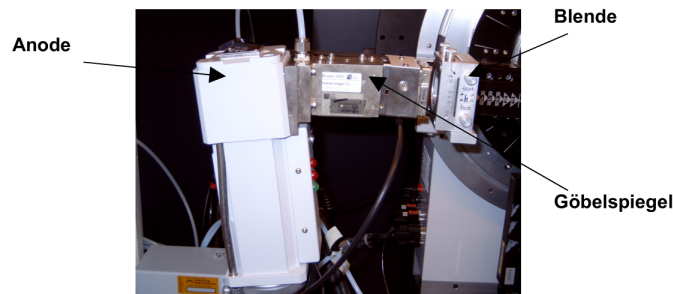


Abb. 5: Röntgenröhre des D8-Labordiffraktometers[2].

3.1 Justage

Detektorscan Um den Detektorscan durchzuführen, wird zunächst die Probe aus dem Strahlengang entfernt. Dabei werden Röntgenröhre und Detektor so zueinander eingestellt, dass sie einen Winkel von 0° einschließen. Um nun die tatsächliche Nulllage des Detektors zu finden, wird seine Lage um wenige Grad variiert, 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 variiert. 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 Röntgenröhre und Detektor um die Probe bewegt, wobei der Winkel zwischen Detektor und Probe bei Konstant $2\Theta = 0^\circ$ 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 Präzision wird nun ein zweiter Rockingscan mit $2\Theta = 0,3^\circ$ durchgeführt. Dabei wird für die Drehung ein Winkelbereich von $0,1^\circ$ bis $0,2^\circ$ gewählt.

Dritter Z-Scan Um die Präzision der Justage weiter zu erhöhen, wird anschließend ein dritter z-Scan bei $2\Theta = 0,3^\circ$ 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 $2\Theta = 1^\circ$ durchgeführt. Dabei wird ein Scanbereich zwischen den Werten $0,45^\circ$ und $0,55^\circ$ gewählt, da das erwartete Maximum bei $0,5^\circ$ 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. Im verwendeten wird hierbei ein Scanbereich von 0° bis 5° eingestellt und vermessen. Dazu wird eine Schrittweite $0,05^\circ$ verwendet, wobei als Messzeit pro Datenpunkt 5 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 $\Delta a = |\alpha_i - \alpha_f| = 0,1^\circ$ beträgt.

4 Auswertung

4.1 Vorbereitung

Detektor-Scan Zur Bestimmung der maximalen Intensität wird der erste Detektor-Scan in Abbildung 9 dargestellt. Das Maximum der aufgenommenen Daten wird zur

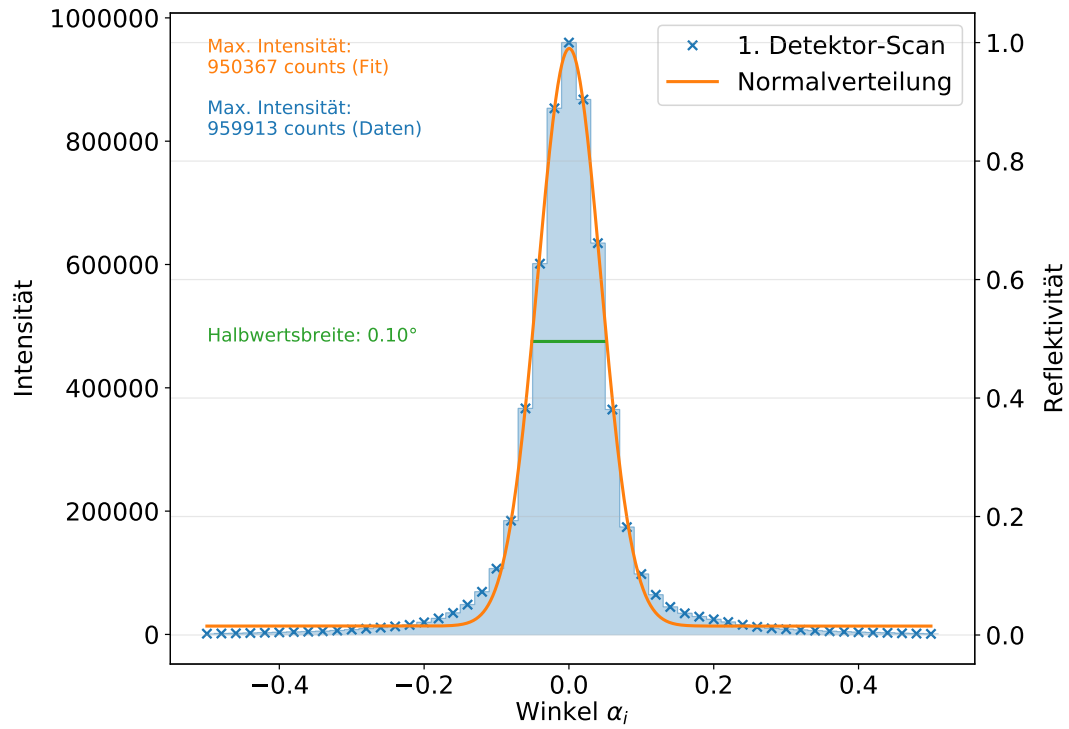


Abb. 6: Detektor-Scan: Die gemessene Intensität aufgetragen gegen den Einfallswinkel α_i .

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 Fit-Parameter, μ Erwartungswert, σ Standardabweichung

gefittet. Die Parameter ergeben sich zu

$$a = (102,109\,927\,00 \pm 1,089\,250\,87) \cdot 10^3 \text{ counts}$$

$$b = (13,559\,228\,90 \pm 2,242\,937\,88) \cdot 10^3 \text{ counts}$$

$$\mu = (4,734\,632\,15 \pm 4,710\,145\,25) \cdot 10^{-4}^\circ$$

$$\sigma = (4,348\,379\,540\,0 \pm 0,049\,348\,984\,1) \cdot 10^{-2}^\circ.$$

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. Aus dem Abstand auf der z-Achse,

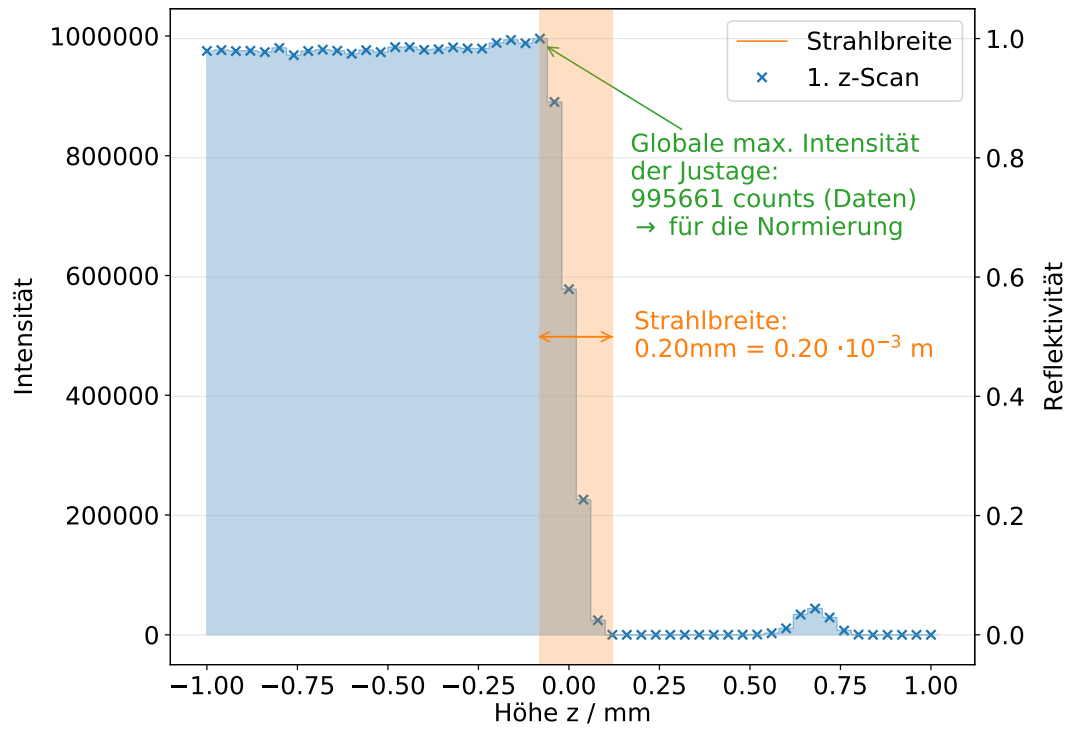


Abb. 7: z-Scan: Hier wird die gemessene Intensität gegen die vertikale Position der Probe aufgetragen.

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 diesen 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. Hier werden aus

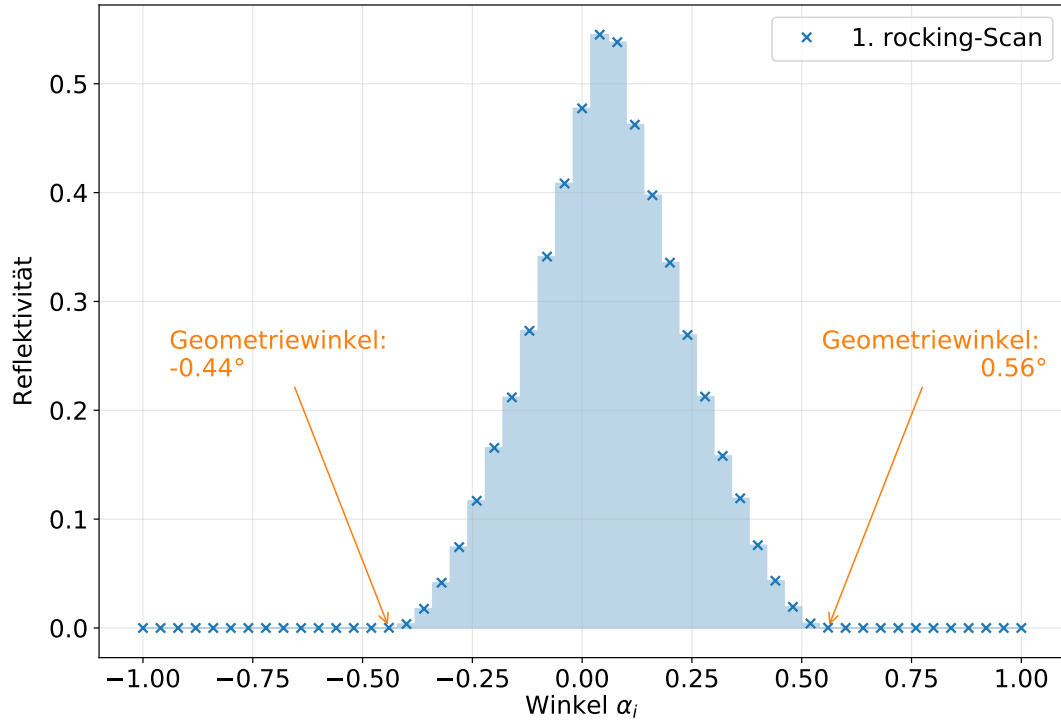


Abb. 8: rocking-Scan: Die Reflektivität der Probe in Abhängigkeit des Einfallswinkels α_i unter konstantem Winkel zwischen Strahlenquelle und Detektor.

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:

$$a_g = [0.44^\circ, 0.56^\circ]$$

$$\overline{a_g} = 0.50^\circ.$$

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 Rückstreuereffekte im Schichtsystem aus den Daten zu eliminieren. Anschließend wird der Geometriefaktor berechnet. Hierfür werden die Maße des Wafers ($2\text{ cm} \times 2\text{ cm}$), die in 4.1 berechnete Strahlbreite d und der Geometriewinkel α_g verwendet (Gleichungen (2) und (3)). 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

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

abgeschätzt. Sämtliche Graphen und die verwendeten Minima sind in Abbildung ?? 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 ??). Die Parameter der Theoriekurve sind die Brechungsindizes 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	$\sigma_1 = 8,1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
PS-Si	$\sigma_2 = 5,7 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
PS-Schichtdicke	$z = 870 \cdot 10^{-10} \text{ m.}$

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

$$\text{PS} \quad \alpha_c = 0,068^\circ \quad (4)$$

$$\text{Si} \quad \alpha_c = 0,208^\circ. \quad (5)$$

$$(6)$$

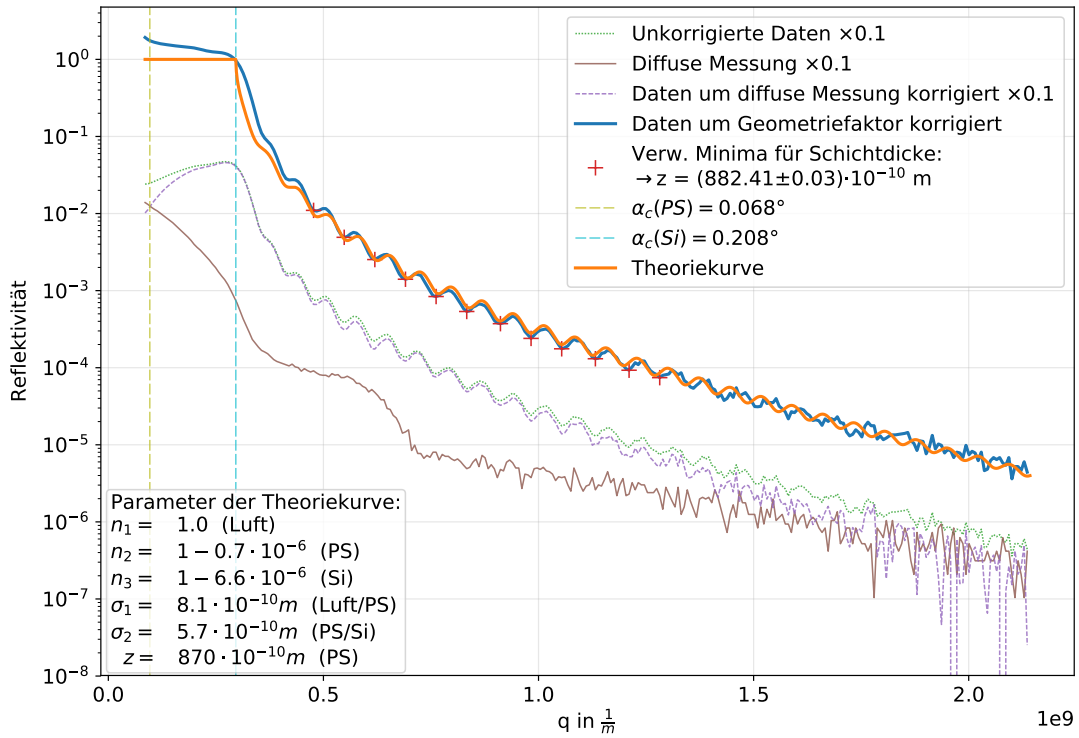


Abb. 9: Vermessung der Reflektivität des PS-Si-Wafers in Abhängigkeit des Wellenvektorübertrags q . Zur Übersichtlichkeit sind die Graphen der Datenaufbereitung nach unten verschoben, sonst verschwinden sie über große Teile der Abbildung unter den anderen Graphen.

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 $z_{\text{Theoriekurve}}$ ab:

Minima	Theoriekurve	Rel. Abw.
$z = (882,41 \pm 0,03) \cdot 10^{-10} \text{ m}$	$z = 870 \cdot 10^{-10} \text{ m}$	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 Größen 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	Angepasste ParameterRel. 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 AnpassungRel. Abw.
PS $\delta = 0,15^\circ$	$\delta = 0,068^\circ$ 54,67 %
Si $\delta = 0,22^\circ$	$\delta = 0,208^\circ$ 5,45 %.

Insgesamt trotz einiger Startschwierigkeiten lässt sich der Versuch 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/Heidelberg/New York: Springer-Verlag, 1999. Kap. Reflectivity of X-Rays from Surfaces - Multiple Interfaces.

6 Anhang

```
0 def lighten_color(color, amount=0.5):
1     import matplotlib.colors as mc
2     import colorsys
3     try:
4         c = mc.cnames[color]
5     except:
6         c = color
7     c = colorsys.rgb_to_hls(*mc.to_rgb(c))
8     return colorsys.hls_to_rgb(c[0], 1 - amount * (1 - c[1]), c[2])
9
10 def von_winkel_zu_q(x):
11     q = 4 * np.pi / l * np.sin(x * np.pi / 180)
12     return q
13
14 def lade_diffuse_messung():
15     a, b = np.loadtxt('1501_diffus.txt', unpack=True, delimiter=', ')
16     ### Normierung
17     b = b / 959913
18     qdiffus = von_winkel_zu_q(a)
19     return qdiffus, b
20
21 def korrektur_diffuse_messung(counts, b):
22     korrigierte_counts = []
23     for i in range(len(counts)):
24         tmp = 1e-01 * (counts[i] - b[i])
25         korrigierte_counts.append(tmp)
26     return korrigierte_counts
27
28 def korrektur_geometriefaktor():
29     alpha = 0.5
30     m = []
31     for i in range(len(x)):
32         if (x[i] <= alpha):
33             tmp = y[i] / ((np.sin(x[i])) / (np.sin(alpha)))
34             m.append(tmp)
35         else:
36             tmp = y[i]
37             m.append(tmp)
38     return m
39
40 def finde_minima(m, q):
41     ### Logarithmiere die Daten zur Basis 10
42     logm = []
43     for i in range(len(m)):
44         if (m[i] != 0):
45             tmp = np.log10(m[i])
46             logm.append(tmp)
47         else:
48             logm.append(0)
49     ### Negatives VZ um mit find_peaks arbeiten zu können
50     neglogm = []
51     for i in range(len(logm)):
52         tmp = -logm[i]
53         neglogm.append(tmp)
54     ### Peaks finden
55     peakfinder = sig.find_peaks(neglogm, prominence = 0.07)
```

```

52 ##### Peaks in den Einträgen:
53 peak_array = [ 66, 76, 86, 96, 106, 116, 127, 137, 147, 158, 169, 179,
54 # 190, 200, 211, 221, 232, 241, # 245, 252, 263, 266, 275, 278, 283,
55 # 285, 292, 294, 299, 304, 306, 312, 314, 316, 320, 326, 328, 331,
56 # 335, 338, 340, 344, 346, 349, 352, 355, 359, 363, 365, 368, 370,
57 # 372, 375, 377, 380, 382, 385, 390, 393, 396, 398, 402, 404, 408,
58 # 413, 415, 421, 423, 426, 429, 433, 435, 438, 442, 445, 448, 453,
59 # 455, 459, 462, 465, 469, 472, 478, 483, 489, 494, 7
60 ] ##### Manuell eingekürzt, da Minima bei großen q sehr unscharf
61
62 peak_x = []
63 peak_y = []
64 for i in peak_array:
65     peak_x.append(q[i])
66     peak_y.append(m[i])
67 return peak_x, peak_y, peak_array
68 def berechne_schichtdicke(q, peak_array):
69     abstandderpeaks = []
70     for i in peak_array:
71         if (i < 179):
72             tmp = q[i+1]-q[i]
73             abstandderpeaks.append(tmp)
74         else:
75             pass
76     mittelwert = np.mean(abstandderpeaks)
77     fehler = np.std(abstandderpeaks)
78     schichtdicke = 2*np.pi/ufloat(mittelwert, fehler)
79     return schichtdicke
80 def kritischerwinkel(delta):
81     alphakrit = np.sqrt(2*delta)*180/np.pi
82     qkrit = von_winkel_zu_q(alphakrit)
83     return(alphakrit, qkrit)
84 def parratt(z):
85     kz1=k*np.sqrt((n1**2-np.cos(ai)**2))
86     kz2=k*np.sqrt((n2**2-np.cos(ai)**2))
87     kz3=k*np.sqrt((n3**2-np.cos(ai)**2))
88
89     r12=(kz1-kz2)/(kz1+kz2)*np.exp(-2*kz1*kz2*sigma1**2)
90     r23=(kz2-kz3)/(kz2+kz3)*np.exp(-2*kz2*kz3*sigma2**2)
91     x2=np.exp(0-(kz2*z)*2j)*r23
92     x1=(r12+x2)/(1+r12*x2)
93     par = np.abs(x1)**2
94     for i in range(len(par)): # sonst gibts nur komplexe Daten vor Beginn
95         # der Kiessing-Oszillationen
96         if(i <= 296): # 296 ist manuell angepasst
97             par[i] = 1
98         else:
99             pass
100     return par
101 #####
102 ##### Ab hier werden die geschriebenen Funktionen aufgerufen
103 #####
104 def plotallgraphs(x, counts):

```



```

fig , ax = plt.subplots()
104 q = von_winkel_zu_q(x)

106 a,b = lade_diffuse_messung()
counts_korrigiert_diffus = korrektur_diffuse_messung(counts , b)
108 counts_korrigiert_geometriefaktor = korrektur_geometriefaktor()
counts_final = counts_korrigiert_geometriefaktor
110 minimum_x, minimum_y, peak_array = finde_minima(counts_final , q)
schichtdicke = berechne_schichtdicke(q, peak_array)
112 u = 40 # Ende des Plateaus
beg = 11 # Anfang der sinnvollen Messdaten
114 end = 300 # Ende der sinnvollen Messdaten

116 unkorrr = 1e-01*counts[beg:end] # Verschiebung der Datensätze um 0.1 nach
    unten.
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
118

ax.plot(q[beg:end], unkorrr, linestyle=denslydotted, linewidth = 1, color=
'C2', markersize=8, markeredgewidth=2, label='Unkorrigierte Daten ' + r'$\
times 0.1$', alpha=0.8)
120 ax.plot(a[beg:end], diffusedaten, linestyle='-', linewidth = 1, color='C5'
    , markersize=8, markeredgewidth=2, label='Diffuse Messung ' + r'$\times
    0.1$', alpha=0.8)
ax.plot(a[beg:end], counts_korrigiert_diffus[beg:end], linestyle=
denslydashed, linewidth = 1, color='C4', markersize=8, markeredgewidth=2,
    label='Daten um diffuse Messung korrigiert ' + r'$\times 0.1$', alpha
    =0.8)
122

ax.plot(q[beg:end], counts_final[beg:end], linestyle='-', color='C0',
    label='Daten um Geometriefaktor korrigiert')
124 ax.plot(minimum_x, minimum_y, '+', color='C3', markersize=10,
    markeredgewidth=1, label='Verw. Minima für Schichtdicke: \n' + r'$\
rightarrow$' + r'$z = (%.2f' %(schichtdicke.n * 1e9) + '$\mu\text{m}$' + r'$%.2f)'
    % (schichtdicke.s * 1e9) + r'$\cdot 10^{-10}$ m')

126 alphakritPS, qkritPS = kritischerwinkel(delta1)
ax.axvline(qkritPS, ymin=0, ymax=1, linewidth=0.7, linestyle=longdashes,
    color='C8', label=r'$\alpha_c$ (PS)=%.3f °' %alphakritPS)
128 alphakritSi, qkritSi = kritischerwinkel(delta2)
ax.axvline(qkritSi, ymin=0, ymax=1, linewidth=0.7, linestyle=longdashes,
    color='C9', label=r'$\alpha_c$ (Si)=%.3f °' %alphakritSi)
130

par = parratt(z)
132 plt.plot(qz, par, linestyle='-', color='C1', label='Theoriekurve')

134 textstr = '\n'.join((
    'Parameter der Theoriekurve:',
136 r'$n_1$ = $'+'\t'+r'$ %.1f $' % (n1) + ' (Luft)',
    r'$n_2$ = $'+'\t'+r'$ 1 - %.1f \cdot 10^{-6} $' % (delta1*1e06) +
    ', (PS)',

```

```

138     r'$n_3$' = '$'+'\t'+r'$ 1 - %.1f \cdot 10^{\{-6\}}$' % (delta2*1e06) +
    (Si)',
    r'$\sigma_1$' = '$'+'\t'+r'$ %.1f \cdot 10^{\{-10\}}$ m $' % (sigma1*1e10) +
    (Luft/PS)',
140     r'$\sigma_2$' = '$'+'\t'+r'$ %.1f \cdot 10^{\{-10\}}$ m $' % (sigma2*1e10) +
    (PS/Si)',
    '+ r'$z$' = '$'+'\t'+r'$ %s \cdot 10^{\{-10\}}$ m$' % (int(z*1
e10)) + (PS)',))
142 props = dict(facecolor='white', edgecolor=(0.808, 0.808, 0.808), alpha
=0.8, boxstyle='round', pad=0.2')
ax.text(0.01, 0.01, textstr, transform=ax.transAxes, va='bottom', ha='
left', bbox=props)
144
145 ### Plot-Basics
146 plt.yscale('log')
plt.grid(alpha=0.3)
148 ax.legend(fancybox=True, ncol=1)
ax.set_xlabel('q in ' + r'$\frac{1}{m}$', labelpad=2)
150 ax.set_ylabel('Reflektivität', labelpad=8)
fig.tight_layout()
152 plt.savefig('done_plot_messung.pdf')
154
155 if __name__ == "__main__":
156     import numpy as np
    import sympy as sp
158     import matplotlib.pyplot as plt
    import matplotlib.patches as mpatches
160     from matplotlib import transforms
    from matplotlib import rc
162     from scipy.optimize import curve_fit
    from pylab import figure, axes, pie, title, show
164     from numpy import NaN, Inf, arange, isscalar, asarray, array
    import sys
166     import scipy.signal as sig
    import uncertainties
168     import uncertainties.unumpy as unp
    from uncertainties import ufloat
170     from uncertainties.unumpy import (nominal_values as noms, std_devs as
stds)
    from math import exp, log, sin, atan
172     import scipy.constants as const
    from scipy.stats import norm
174     import cmath as cm

    plt.rcParams['figure.figsize'] = (10, 7)
    plt.rcParams['font.size'] = 13
178     plt.rcParams['lines.linewidth'] = 2
180
181 ### Verwendete alternative Linestyles
denslydotted = (0, (1, 1))
182 denslydashed = (0, (3, 1.25))
longdashes = (0, (10, 3))

```

```

184
185 ##### Variablen für den ganzen Entwickler
186 l=1.54e-10 # Wellenlänge
187 ai = np.arange(0.06,1.505,0.0005)*np.pi/180 # x-array für Theoriekurve
188 qz=4*np.pi/l*np.sin(ai) # q-array für die Theoriekurve
189 k=2*np.pi/l # k-Vektor
190
191 ##### Parameter für die manuelle Anpassung des Parratt-Algorithmus
192 ##### Angegebene Instruktionen beschäftigen sich mit der Vergrößerung eines
193 Parameters
194 #####
195 #Brechungsindices
196 delta1 = 0.7e-6 #PS schiebt runter und vergrößert die Amplitude, macht
197 die Kurve steiler
198 delta2 = 6.6e-6 #Si schiebt Kurve hoch, verkleinert die Amplitude
199 #####
200 n1=1 #Luft
201 n2=1- delta1 # PS
202 n3=1- delta2 # Si
203 #####
204 #Rauigkeit
205 sigma1=8.1e-10 #PS verkleinert die Amplitude in den hinteren
206 Oszillationen
207 sigma2=5.7e-10 #Si drückt Ende der Kurve runter und verkleinert die
208 Oszillationen
209 #####
210 #Schichtdicke
211 z = 870e-10 # verkleinert die Wellenlänge der Oszillationen
212 #####
213
214 x, y = np.loadtxt('1416_messung.txt', unpack=True, delimiter=' ', ')
215 y = y/(5*995661) # Normierung
216 plotallgraphs(x, y)
217
218 print('—— done ——')

```

content/messung.py