

**VERSUCH NUMMER 65**

## **Röntgenreflektrometrie**

Dag-Björn Hering  
dag.hering@udo.edu

Henning Ptaszyk  
henning.ptaszyk@udo.edu

Durchführung: 18. Februar 2019

Abgabe: 1. Januar 1970

TU Dortmund – Fakultät Physik

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
1.1	Zielsetzung . . . . .	3
1.2	Brechung von Röntgenstrahlung an einer Grenzfläche . . . . .	3
1.3	Brechung von Röntgenstrahlung in Mehrschichtsystemen . . . . .	5
1.4	Rauigkeit . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Durchführung</b>	<b>7</b>
2.1	Justage des D8-Labordiffraktometers . . . . .	8
2.2	Messung . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Auswertung</b>	<b>11</b>
<b>4</b>	<b>Diskussion</b>	<b>16</b>
	<b>Literatur</b>	<b>16</b>

# 1 Theorie

## 1.1 Zielsetzung

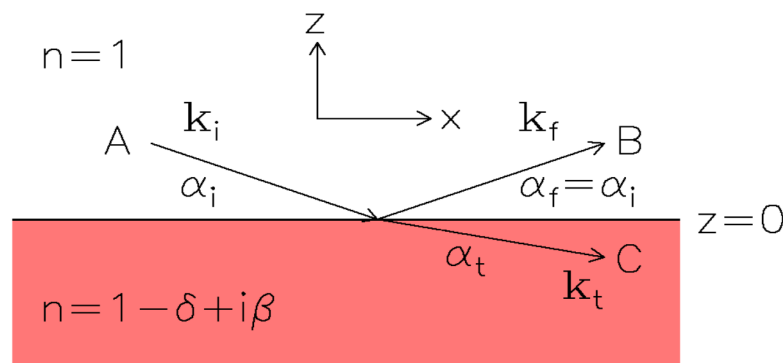
Ziel des im Folgenden beschriebenen Versuchs ist es, mit Hilfe des Prinzips der Röntgenreflektometrie einen Nanometer-dicken Polystyrolfilm, der auf einen Silizium Wafer aufgetragen ist, zu untersuchen. Dazu wird ein D8-Labordiffraktometer zunächst justiert und anschließend zu Messungen verwendet, aus deren Ergebnissen dann Schichtdicke, Rauigkeit und Elektronendichte der Probe, sowie des Siliziumwafers bestimmt werden.

## 1.2 Brechung von Röntgenstrahlung an einer Grenzfläche

Um das Prinzip der Röntgenreflektometrie zu verstehen ist es notwendig, sich mit der Brechung von Röntgenstrahlung an einer Grenzfläche auseinander zu setzen. Bei Röntgenstrahlung handelt es sich um elektromagnetische Wellen, deren Wellenlängen in einem Bereich von circa  $0,1 \text{ \AA}$  bis  $10 \text{ \AA}$  liegen. Um den Übergang einer solchen Welle von einem Medium mit Brechungsindex  $n_1$  in ein zweites mit Brechungsindex  $n_2$  (siehe Abbildung 1) zu beschreiben, kann das Brechungsgesetz nach Snellius

$$n_1 \cos \alpha_i = n_2 \cos \alpha_t \quad (1)$$

verwendet werden. Dabei bezeichnet  $\alpha_i$  den Einfallswinkel und  $\alpha_t$  den Winkel unter dem die Strahlung gebrochen wird (vgl. Abbildung 1). Es wird eine ideale glatte Grenzfläche angenommen.



**Abbildung 1:** Übergang einer elektromagnetischen Welle vom Vakuum in ein anderes Medium und dabei auftretende Reflexion und Transmission.[1]

In Abbildung 1 wird für das Ursprungsmedium das Vakuum gewählt, sodass gilt  $n_1 = 1$ . Für den Brechungsindex  $n_2$  des anderen Mediums, wird eine komplexe Zahl

$$n_2 = \alpha + i\beta \quad \text{mit } \alpha, \beta \in \mathbb{N} \quad (2)$$

gewählt. Der Realteil  $\alpha$  beinhaltet die Informationen bezüglich der eigentlichen Brechung und der Imaginarteil  $\beta$  die Dämpfung der Welle im Medium. Für Röntgenstrahlung gilt typischerweise  $\alpha < 1$ . Dies liegt daran, dass der reele Brechungsindex das Verhältnis von Lichtgeschwindigkeit im Medium zu der im Vakuum misst und für Röntgenstrahlung die Phasengeschwindigkeit im Medium schneller sein kann als die Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c_0$ . Da der Realteil von  $n$  den Wert 1 nur um sehr kleine Werte  $\delta \sim 10^{-6}$  unterschreitet, wird die Formulierung  $\alpha = 1 - \delta$  gewählt, sodass aus Gleichung (2),

$$n_2 = 1 - \delta + i\beta \quad (3)$$

wird.

Anhand des Brechungsgesetzes (1) wird klar, dass ein Winkel  $\alpha_{\text{crit.}} = \arccos(n_2)$  existiert, unter dem die Welle nicht mehr in das zweite Medium eintritt, also total reflektiert wird. Damit überhaupt transmittierte Strahlung auftritt, muss also gelten,  $\alpha_i > \alpha_{\text{crit.}}$ . Wird der Imaginarteil von  $n_2$  vernachlässigt und eine Entwicklung des Kosinus in Gleichung (1) für kleine Winkel in quadratischer Ordnung durchgeführt, so ergibt sich für den kritischen Winkel

$$\alpha_{\text{crit.}} \approx \sqrt{2\delta} = \lambda \sqrt{\frac{\rho r_e}{\pi}}. \quad (4)$$

Dabei entspricht  $\lambda$  der Wellenlänge der Strahlung,  $\rho$  der Volumendichte der Elektronen im Probenmaterial und  $r_e$  dem (klassischen) Elektronenradius.

Wie bereits erwähnt und in Abbildung 1 gezeigt, entsteht bei der Interaktion einer elektromagnetischen Welle, mit Wellenvektor  $k_i$  mit einer dünnen Schicht im Allgemeinen neben einer reflektierten Welle, mit dem Wellenvektor  $k_f$ , auch eine transmittierte mit dem Wellenvektor  $k_t$  auf. Die verschiedenen (elektrischen) Feldvektoren  $\vec{E}_{\text{index}}(\vec{r})$  lassen sich wie folgt angeben. Für die einlaufende Welle  $\vec{E}_i = (0, A, 0)^\top e^{i\vec{k}_i \vec{r}}$ , die reflektierte  $\vec{E}_f = (0, B, 0)^\top e^{i\vec{k}_f \vec{r}}$  und die transmittierte  $\vec{E}_t = (0, C, 0)^\top e^{i\vec{k}_t \vec{r}}$ . Dabei gilt für die Wellenvektoren

$$\begin{aligned} \vec{k}_i &= k (\cos \alpha_i, 0, -\sin \alpha_i)^\top \\ \vec{k}_f &= k (\cos \alpha_i, 0, \sin \alpha_i)^\top \\ \vec{k}_t &= n k (\cos \alpha_t, 0, -\sin \alpha_t)^\top. \end{aligned}$$

Hier wurde verwendet, dass bei Röntgenstrahlung nicht zwischen s- und p-Polarisation unterschieden werden muss.

Anhand der vorausgegangenen Definitionen für die Feldvektoren sowie Stetigkeitsbedingungen an den Grenzflächen, lassen sich die fresnelschen Formeln

$$r = \frac{B}{A} = \frac{k_{i,z} - k_{t,z}}{k_{i,z} + k_{t,z}} \quad (5)$$

$$(6)$$

und

$$t = \frac{C}{A} = \frac{2k_{i,z}}{k_{i,z} + k_{t,z}} \quad (7)$$

für den Reflektionskoeffizienten  $r$  und den Transmissionskoeffizienten  $t$  gewinnen.

Die Reflektivität  $R$  bezeichnet das Verhältnis der reflektierten Intensität zur einstrahlenden Intensität. Das Betragsquadrat der Feldstärke<sup>1</sup> dient als Maß für die Intensität, sodass sich die Reflektivität durch

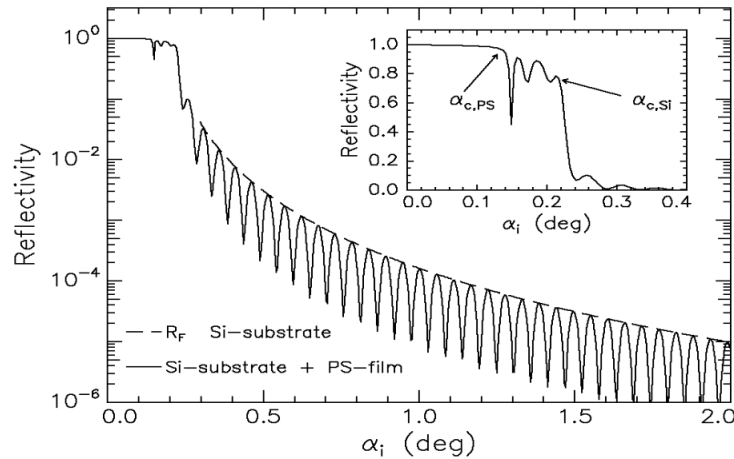
$$R = |r|^2 \approx \left( \frac{\alpha_{\text{crit.}}}{2\alpha_i} \right)^4 \quad (8)$$

ausdrücken lässt.

Die Näherung in Gleichung (8) ist für  $\alpha_i > 3\alpha_{\text{crit.}}$  vertretbar. Dabei ist zu erkennen, dass diese (Fresnel-)Reflektivität mit der vierten Potenz von  $\alpha_i$  abfällt.

### 1.3 Brechung von Röntgenstrahlung in Mehrschichtsystemen

Im Folgenden wird nun nicht mehr die Röntgenreflektivität eines einschichtigen Mediums betrachtet, sondern eines Mehrschichtsystem wie beispielsweise ein 800 Å dicker Polystyrolfilm (PS) auf Silizium (Si). Die berechnete Röntgenreflektivität dieses Systems ist in der Abbildung 2 dargestellt.



**Abbildung 2:** Berechnete Röntgenreflektivität für  $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$  sowohl für einen 800 Å dicker Polystyrolfilm (PS) auf Silizium (Si) als auch die reine Röntgenreflektivität von Si ohne Film. in Abhängigkeit des Einfallswinkel  $\alpha_i$ . [1]

Deutlich zu erkennen ist der Abfall in der Reflektivität wie schon bei einem Einschichtsystemen nach der Formel (8).

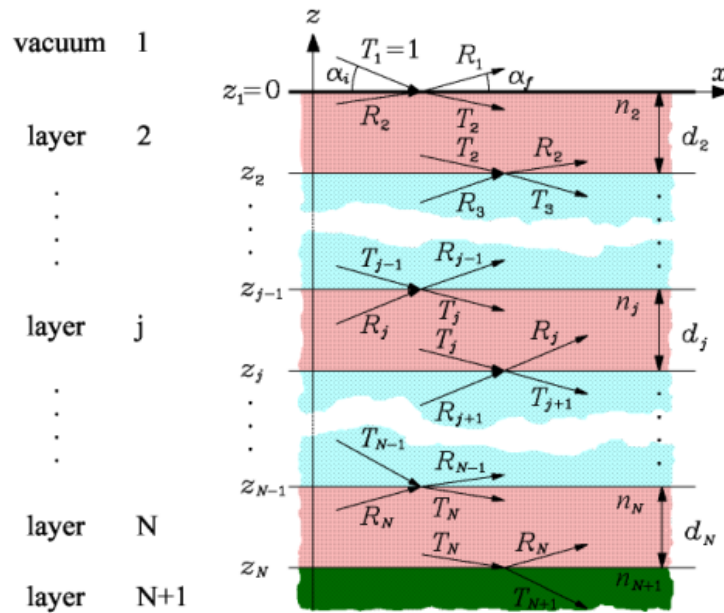
<sup>1</sup>Das Verhältnis der Feldstärken von einlaufender und reflektierter Welle wird durch  $r$  bemessen.

Die Oszillationen in der Reflektivität aus Abbildung 1.3 lassen sich auf konstruktive und destruktive Interferenzen der reflektierten Strahlung zurückführen. Da bei einem Mehrschichtsystem mehr Grenzflächen, an denen Reflexion auftritt, existieren, kommt es zu einer Überlagerung der an unterschiedlichen Grenzflächen reflektierten Strahlen. Beträgt der Gangunterschied der Strahlen ein ungerades Vielfaches der halben Wellenlänge kommt es zu destruktiver Interferenz und für gerade Vielfache liegt konstruktive Interferenz vor. Die so auftretenden Modulationen in der Reflektionskurve werden auch "Kiessig-Ringe" genannt. Für ein einfaches Modell mit zwei Grenzschichten mit Schichtabstand  $d$  ergibt sich der Zusammenhang

$$d = \frac{2\pi}{\Delta q_z} \approx \frac{\lambda}{2\Delta\alpha_i}. \quad (9)$$

Dabei ist  $q$  der Wellenvektorübertrag, für den gilt  $\vec{q} = \vec{k}_f \vec{k}_i$  und welcher die  $z$ -Komponente  $q_z = 2k \sin \alpha_i$  besitzt. Dabei sind  $\Delta q_z$  und  $\Delta\alpha_i$  Differenzen der jeweiligen Werte zwischen zwei benachbarten Minima.

Für Mehrschichtsysteme mit Schichten unterschiedlicher Brechungsindizes ergibt sich auf Grund der Überlagerungen der reflektierten Strahlen eine komplizierte Reflektivität, für die der rekursive Parratt-Algorithmus einen Lösungsansatz liefert. Der Parratt-Algorithmus geht, wie in Abbildung 3 dargestellt, von einem System mit  $N$  ideal glatten Grenzflächen und somit  $N + 1$  Schichten aus.



**Abbildung 3:** Beispielsystem für den Parratt-Algorithmus mit  $N + 1$  Schichten und  $N$  glatten Grenzflächen.[1]

Die erste Schicht ist das Vakuum mit Brechungsindex  $n = 1$  und die letzte Schicht ist das Substrat, welches als unendlich dick angenommen wird. Diese Annahme ist

eine gute Näherung solange die Substratdicke groß gegenüber der Eindringtiefe ist. Als Folge dessen existiert ein Startwert für den Parratt-Algorithmus, da aus dem Substrat keine reflektierte Strahlung  $R_{N+1}$  existiert. Für das Verhältnis von reflektierter und transmittierter Amplitude  $X_j$  an der  $j$ -ten Grenzfläche liefert der Parratt-Algorithmus den Zusammenhang

$$X_j = \frac{R_j}{T_j} = \exp(-2ik_{z,j}z_j) \frac{r_{j,j+1} + X_{j+1} \exp(2ik_{z,j+1}z_j)}{1 + r_{j,j+1} + X_{j+1} \exp(2ik_{z,j+1}z_j)}. \quad (10)$$

Der Koeffizient  $r_{j,j+1}$  entspricht dabei der Fresnelreflektivität an der  $j$ -ten Grenzfläche mit

$$r_{j,j+1} = \frac{k_{z,j} - k_{z,j+1}}{k_{z,j} + k_{z,j+1}} \quad (11)$$

und der  $z$ -Komponente des Wellenvektors in der  $j$ -ten Schicht

$$k_{z,j} = k \left( n_j^2 - \cos^2 \alpha_i \right)^{1/2} \quad (12)$$

## 1.4 Rauigkeit

Die zuvorher eingehende Annahme, dass es sich bei allen betrachteten Grenzflächen um glatte Grenzflächen wird nun verworfen, da in der Realität bei Grenzflächen immer eine endliche Rauigkeit auftritt. Die Rauigkeit lässt sich nur in  $z$ -Richtung bestimmen, da bei Reflektivitätsmessungen mit einem Impulsübertrag senkrecht zur Probenoberfläche das Signal keine Informationen über die laterale Oberflächenstruktur enthält. Die Übergangsbereiche zwischen zwei Schichten besitzen nun einen gemittelten Brechungsindex  $n(z)$ , der für den Grenzfall glatter Grenzflächen, also geringer Rauigkeit, einer Heavisidefunktion  $\Theta(z)$  entspricht. Die Breite dieses Übergangsbereiches entspricht der Rauigkeit  $\sigma_j$ . Durch die Rauigkeit schmiert der Übergang zwischen den Schichten aus und es ergeben sich die modifizierten Fresnelkoeffizienten

$$\bar{r}_{j,j+1} = r_{j,j+1} \exp(-2k_{z,j}k_{z,j+1}\sigma_j^2) \quad (13)$$

$$\bar{t}_{j,j+1} = t_{j,j+1} \exp\left[(k_{z,j} - k_{z,j+1})^2 \sigma_j^2 / 2\right]. \quad (14)$$

Die modifizierten Fresnelkoeffizienten werden anstelle der Fresnelkoeffizienten einer glatten Schicht in den Parratt-Algorithmus eingesetzt, um so die Reflektivität eines Schichtsystems mit rauen Schichtübergängen zu bestimmen.

[1]

## 2 Durchführung

Die Messung der Reflektivität der Probe wird mittels des D8-Labordiffraktometers durchgeführt, das in Abbildung 4 zu sehen ist. Mit Hilfe des Gerätes kann sowohl der



**Abbildung 4:** Das verwendete D8-Labordiffraktometers von der Firma Bruker AXS.  
[1]

Winkel der Röntgenröhre, als auch der Winkel des Detektors zum Probestisch genau eingestellt werden. Desweiteren ist es möglich den Probestisch in x-, y- und z-Richtung zu fahren. Die Abbildung 5 enthält zum Einen eine genaue Ansicht auf die Röntgenröhre mit Blende und zum Anderen auf den Detektor des Gerätes.



(a) Röntgenröhre mit Blende und Göbelspiegel.

(b) Detektor mit Blende.

**Abbildung 5:** Röntgenröhre 5a und Detektor 5b des D8-Labordiffraktometers. [1]

Die Röntgenröhre besitzt eine Kupferanode und wird mit einer Spannung von 40 kV und einem Strom von 40 mA betrieben. Die Röntgenstrahlen der Röntgenröhre werden durch den Göbelspiegel gebündelt und monochromatisiert, so dass der austretende Strahl eine Wellenlänge von  $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$  besitzt.

## 2.1 Justage des D8-Labordiffraktometers

Bevor mit der Messung gestartet wird, wird das D8-Labordiffraktometer justiert. Dabei wird zwischen unterschiedlichen Justageschritten unterschieden.



**Detektorscan** Bevor Justageschritte mit Probe unternommen werden, wird eine Primärstrahljustierung vorgenommen. Dabei werden Röntgenröhre und Detektor so zueinander eingestellt, dass sie einen Winkel von  $0^\circ$  einschließen. Weiterhin wird die Probe aus dem Strahlengang gefahren. Anschließend wird ein sogenannter Detektorscan durchgeführt. Dabei wird die Position der Röhre nicht verändert, allerdings die des Detektors. Letzterer wird durch eine Drehbewegung aufsteigend durch den Strahl bewegt. Der Scanbereich verläuft von  $-0,5^\circ$  bis  $0,5^\circ$ . Nachdem die Messung beendet ist, wird das Maximum lokalisiert und ein weiterer Detektorscan in einer symmetrischen Umgebung der Größe  $0,4^\circ$  um das Maximum herum, durchgeführt. Nach Ende der Messung werden der Wert des Maximums, sowie die Halbwertsbreite des Peaks notiert.

**Erster Z-Scan** Um die Probenjustage zu prüfen, wird ein sogenannter Z-Scan durchgeführt. Bei diesem wird die Probe entlang der z-Achse verschoben, sodass reguliert werden kann, wie stark die Probe den Strahlengang abdeckt. Im idealen Fall, bei dem die Probe parallel zur Strahlachse orientiert ist, wird die Hälfte der Strahlintensität abgedeckt. Daher wird genau der z-Wert gemessen, bei dem die Intensität auf die Hälfte abgefallen ist. Der gemessene Wert wird vom Programm automatisch verwendet um die Motoren entsprechend anzusteuern.

**Erster Rockingscan** Nachdem die Probe zuvor möglichst parallel zur Strahlachse ausgerichtet wurde, wird ein Rockingscan durchgeführt. Bei diesem werden Röntgenröhre und Detektor gemeinsam symmetrisch um die Probe gedreht. In diesem ersten Rockingscan wird für den Winkel zwischen Röhre und Detektor ein Wert von  $2\Theta = 0^\circ$  gewählt. Die Drehung erfolgt in einem Winkelbereich zwischen  $-1^\circ$  und  $1^\circ$ . Nach Beenden des Scans wird das Maximum der sich ergebenden Kurve ausgemessen und durch das Programm direkt an die Motoren zur Anpassung weitergegeben.

**Zweiter Z-Scan** Anschließend wird ein zweiter Z-Scan durchgeführt um zu gewährleisten, dass nach Anpassung gemäß des Rockingscans, die Probe wieder parallel zur Strahlachse ausgerichtet ist. Dieser und der vorherige Schritt werden so lange ausgeführt, bis die Justage sich nicht mehr verbessert.

**Zweiter Rockingscan** Für eine genauere Probenjustage, wird ein weiterer Rockingscan mit  $2\Theta = 0,3^\circ$  durchgeführt. Der Winkelbereich für die Drehung, wird von  $0,1^\circ$  bis  $0,2^\circ$  gewählt.

**Dritter Z-Scan** Zur feineren Justage, wird ein dritter Z-Scan durchgeführt. Dabei wird für den Winkel zwischen Röntgenröhre und Detektor ein Wert von  $2\Theta = 0,3^\circ$  gewählt. Der Bereich für die z-Koordinate ist  $[-0,5 \text{ mm}, 0,5 \text{ mm}]$ . Nach Abschluss der Messung wird wieder das Maximum gemessen und die Motoren entsprechend angesteuert, sodass die bestmögliche Höheneinstellung der Probe erreicht ist.

**Dritter Rockingscan** Abschließend wird ein Rockingscan mit einer Winkeleinstellung von  $2\Theta = 1^\circ$  durchgeführt. Der Scanbereich wird zwischen den Werten  $0,45^\circ$  und  $0,55^\circ$  gewählt. Die Wahl dieses Scanbereichs lässt sich dadurch begründen, dass bei  $0,5$  das Maximum prognostiziert wird. Nach Vollendung der Messung werden die Motoren wieder entsprechend angesteuert, sodass das Diffraktometer nun vollständig justiert ist.

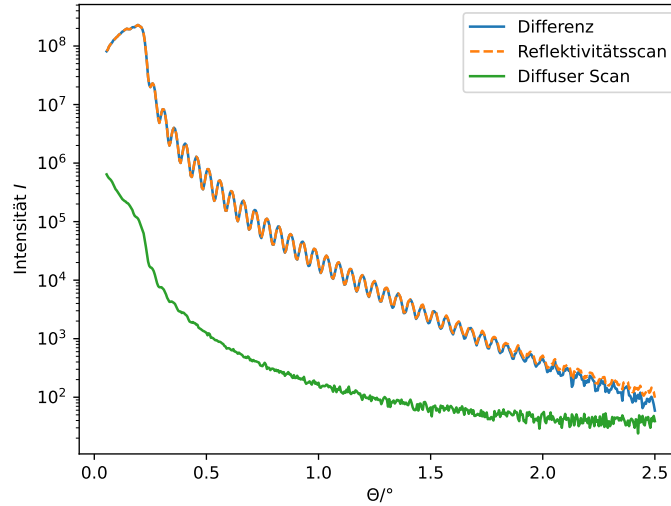
## 2.2 Messung

Nachdem das Diffraktometer justiert ist, wird die eigentliche Messung durchgeführt. Neben dieser Messung wird auch ein diffuser Scan durchgeführt, um später Störsignale abziehen.

Bei den Messvorgängen, wird ein Reflektivitätsscan vorgenommen. Dabei sind  $\alpha_i$  und der Winkel zwischen Probe und Detektor  $\alpha_f$  identisch. Beim diffusen Scan hingegen, ist der Winkel des Detektors  $\alpha_f$  um  $0,1^\circ$  verschieden vom Einfallswinkel  $\alpha_i$ . Im verwendeten Programm, das die Messeinstellungen verwaltet, wird "Omega / 2Theta" ausgewählt und ein Intervall von  $0^\circ$  bis  $5^\circ$  vermessen. Für die Schrittweite wird  $0,05^\circ$  gewählt. Für die Dauer werden jeweils 5 s gewählt.

### 3 Auswertung

Um aus den Messwerten des Reflektivitätsscans Schichtdicke, Dispersion und Rauigkeit der Polystyrolschicht, sowie Dispersion und Rauigkeit des Siliziumwafers zu ermitteln, wird zu Beginn der diffuse Scan von den Messwerten abgezogen, wie in Abbildung 6 zu sehen.



**Abbildung 6:** Reflektivitätsscan und diffuser Scan, sowie die Differenz von Reflektivitätsscan und diffusem Scan.

Da erst ab einem ausreichend großen Einfallswinkel, dem so definierten Geometriewinkel  $\alpha_g$ , der gesamte Strahl auf die Oberfläche trifft, werden die Messwerte mit  $\alpha_i < \alpha_g$  mit einem Geometriefaktor  $G$  korrigiert. Dieser berücksichtigt den Intensitätsverlust, da nicht der gesamte Strahl von der Probe reflektiert wird. Der Geometriefaktor ergibt sich zu

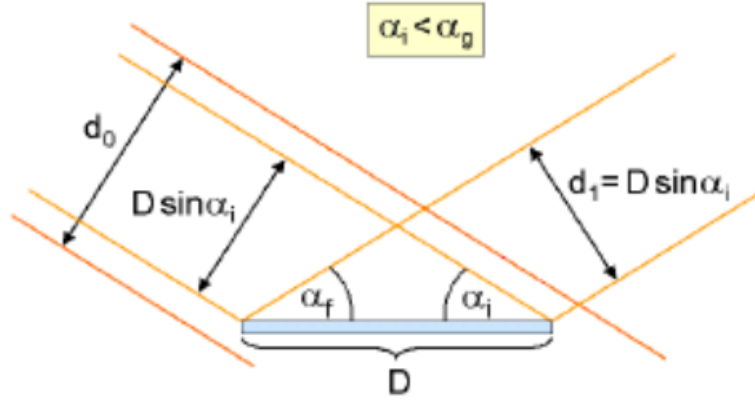
$$G = \frac{D \sin \alpha_i}{d_0} \quad \text{für } \alpha_i < \alpha_g \quad (15)$$

$$G = 1 \quad \text{für } \alpha_i > \alpha_g. \quad (16)$$

Mit der Gesamtstrahlbreite  $d_0$  und dem Durchmesser der Probenoberfläche  $D$ . Ein beispielhafter Strahlverlauf für  $\alpha_i < \alpha_g$  ist in Abbildung 7 dargestellt.

Der Strahldurchmesser  $d_0$  und der Durchmesser der Probenoberfläche  $D$  können in der Formel für den Geometriefaktor (15) durch den Zusammenhang

$$\sin(\alpha_g) = \frac{d_0}{D} \quad (17)$$



**Abbildung 7:** Strahlverlauf für  $\alpha_i < \alpha_g$ . [1]

mit dem Geometriewinkel  $\alpha_g$  ersetzt werden, sodass der Geometriefaktor

$$G = \frac{\sin \alpha_i}{\sin \alpha_g} \quad \text{für } \alpha_i < \alpha_g \quad (18)$$

$$G = 1 \quad \text{für } \alpha_i > \alpha_g \quad (19)$$

lautet. Der Geometriewinkel ergibt sich aus den Messungen, die zu Justagezwecken vor der eigentlichen Messung durchgeführt werden. Desweiteren wird die Intensität der einfallenden Strahlung  $I_0$  benötigt, um die normierte Reflektivität

$$R = \frac{I_R}{I_0} \quad (20)$$

zu erhalten. Aus den Messwerten des Detektorscans ergibt sich der in Abbildung 8 gezeigte Intensitätsverlauf in Abhängigkeit des Detektorwinkel  $\Theta'$ .

Durch einen Fit der Form

$$I(\Theta) = I_0 \exp \left( -\frac{(\Theta - \mu)^2}{\omega^2} \right) [2] \quad (21)$$

an die Intensitätsverteilung, ergibt sich die Intensität

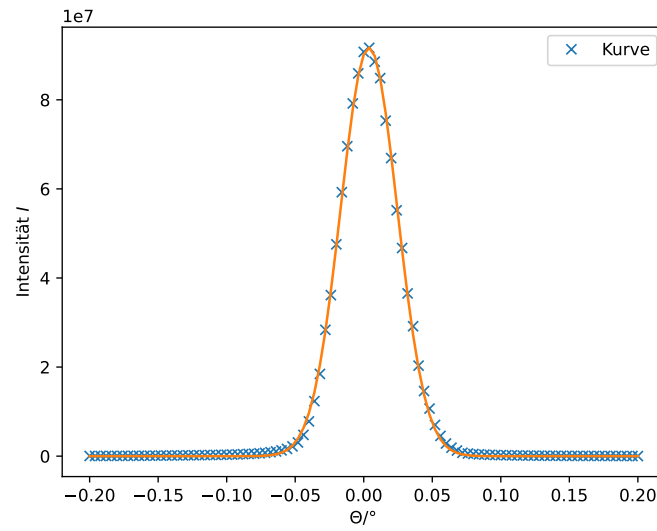
$$I_0 = (9,12 \pm 0,03) \cdot 10^7 \quad (22)$$

der einfallenden Strahlung.

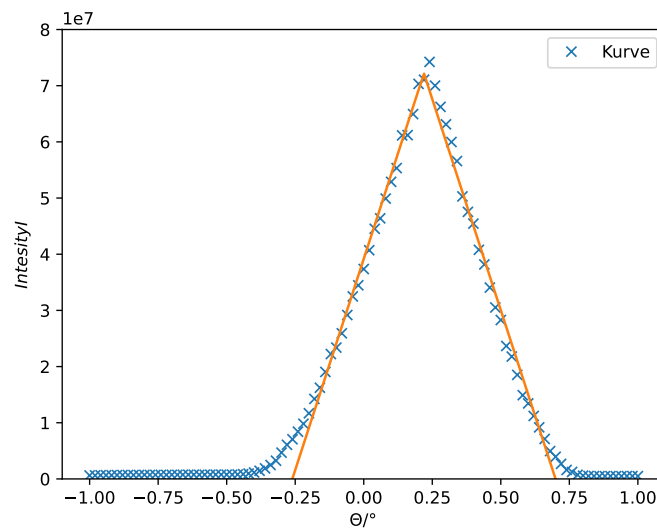
Zur Ermittlung des Geometriewinkels  $\alpha_g$  werden die Messwerte des Rockingscan mit  $2\Theta = 0^\circ$ , die in der Abbildung 9 dargestellt sind, verwendet.

Dafür wird eine Funktion der Form

$$f(x) = a|x + b| + c \quad (23)$$



**Abbildung 8:** Intensität in Abhängigkeit des Detektorwinkels  $\Theta'$  während eines Detektorscans und Fit an die Intensitätsverteilung.



**Abbildung 9:** Messwerte des Rockingscan mit  $2\Theta = 0^\circ$  und Fit.

an die Messwerte angepasst und es ergeben sich die Parameter

$$a = -(150 \pm 2) \cdot 10^6 \quad b = -0,220 \pm 0,002 \quad c = (722 \pm 7) \cdot 10^5. \quad (24)$$

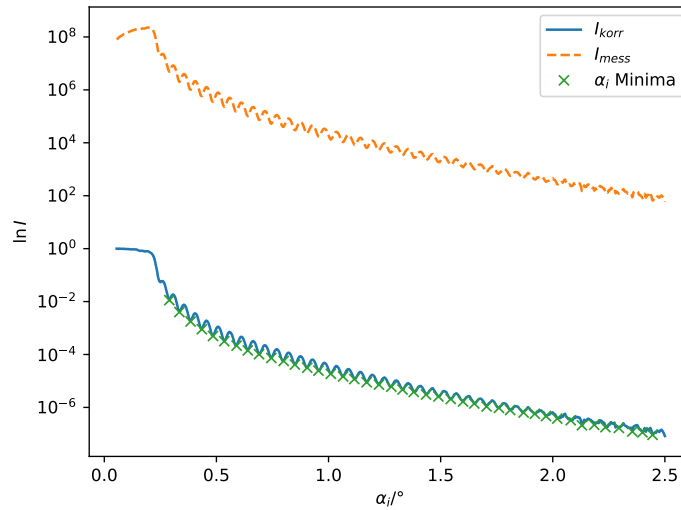
Dabei entspricht der Parameter  $b$  nur einer fehlenden Eichung in der Messung und es wird für die Berechnung des Geometriewinkels  $b = 0$  gesetzt. Der Geometriewinkel entspricht dem Winkel, ab dem der Strahl vollständig auf die Probe trifft. Bei dem Rockingscan für  $2\Theta = 0^\circ$  entspricht der Geometriewinkel genau dem Winkel ab dem keine Intensität mehr auf den Detektor fällt und somit genau dem Betrag der Nullstellen der an die Messwerte angepassten Funktion. Der bestimmte Geometriewinkel  $\alpha_g$  lautet somit

$$\alpha_g = |\pm \frac{c}{a}| = (0,48 \pm 0,01)^\circ. \quad (25)$$

Die Messwerte  $I_{\text{mess}}$  mit  $\alpha_i < \alpha_g$  werden mit dem Geometriefaktor  $G$  in der Form

$$I_{\text{kor}} = \frac{I_{\text{mess}}}{G} \quad (26)$$

korrigiert. Die mit Hilfe des Geometriefaktors korrigierten Messwerte sind in der Abbildung 10 dargestellt.



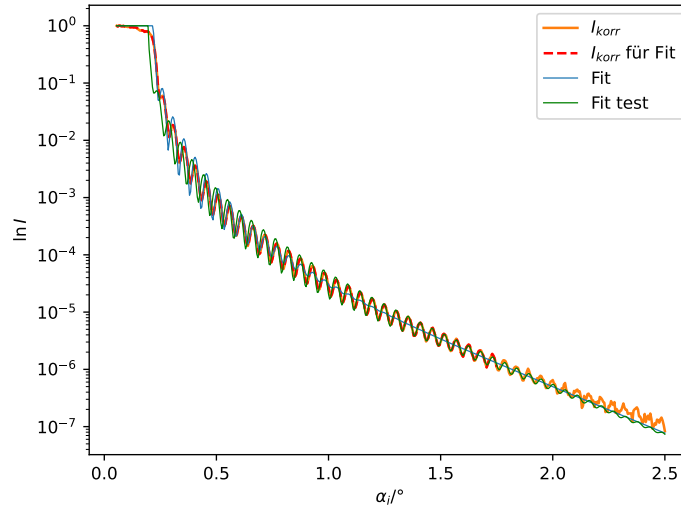
**Abbildung 10:**  $I_{\text{mess}}$  und normiertes  $I_{\text{kor}}$  in Abhängigkeit des Einfallswinkel  $\alpha_i$ .

Ebenfalls in der Abbildung 10 sind die lokalen Minima im Refektivitätsscan markiert. Über die Differenz der Einfallswinkel bei lokalen Minima lässt sich der Schichtabstand  $d$  nach Gleichung (9) bestimmen. Dazu werden alle Differenzen berechnet und über alle Werte gemittelt, wobei Einfallswinkel über  $2^\circ$  auf Grund von Signalstörungen vernachlässigt werden. Es ergibt sich eine Differenz von  $\Delta\alpha_i = (0,053 \pm 0,003)^\circ$  und mit einer

Wellenlänge von  $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$  ein Schichtabstand von

$$d \approx \frac{\lambda}{2\Delta\alpha_i} = (840 \pm 50) \text{ \AA}. \quad (27)$$

Um aus den Daten der Reflektivitätsmessung Dispersion und Rauigkeit der Probe, sowie des Substrats zu bestimmen, werden die Messwerte in der Form Einfallswinkel  $\alpha_i$  gegen die normierte Reflektivität  $R$  aufgetragen, wie in Abbildung 11 zusehen. Zusätzlich wird an die markierten Messwerte eine Funktion gefittet, die sich über den modifizierten Parratt-Algorithmus für raue Grenzflächen ergibt und aus der Versuchsanleitung [1] entnommen wird.



**Abbildung 11:** Normierte Reflektivität  $R$  gegen den Einfallswinkel  $\alpha_i$  aufgetragen und Fit an die markierten Messwerte.

Aus den Parametern ergeben sich für Dispersion  $n_i$ , Rauigkeit  $\sigma_i$  und Schichtdicke  $d$  die Werte

$$n_{\text{Schicht}} = 1 - (3,33 \pm 0,04) \cdot 10^{-6} \quad \sigma_{\text{Schicht}} = (17,9 \pm 0,5) \cdot 10^{-10} \quad (28)$$

$$n_{\text{Substrat}} = 1 - (7,33 \pm 0,04) \cdot 10^{-6} \quad \sigma_{\text{Substrat}} = (4,6 \pm 0,1) \cdot 10^{-10} \quad (29)$$

$$d = (815,4 \pm 0,9) \text{ \AA} \quad (30)$$

für die verwendete Probe. Die Elektronendichte  $\rho_i$  der zwei Materialien ergibt sich aus dem Zusammenhang (4) zu

$$\rho_i = \frac{2\delta_i\pi}{\lambda^2 r_e} \quad \text{mit} \quad \delta_i = 1 - n_i. \quad (31)$$

$$(32)$$

Aus den berechneten Dispersionen ergeben sich die Elektronendichten

$$\rho_{\text{Schicht}} = (3,13 \pm 0,04) \cdot 10^{29} \frac{1}{\text{m}^3} \quad \rho_{\text{Substrat}} = (6,89 \pm 0,04) \cdot 10^{29} \frac{1}{\text{m}^3} \quad (33)$$

## 4 Diskussion

In Tabelle 1 sind die bestimmten Werte für Elektronendichte  $\rho$  und  $\delta$  und Literaturwerte und die relative Abweichung gezeigt. Die sich ergebenden relativen Abweichungen

**Tabelle 1:** Bestimmte Werte für  $\rho$  und  $\delta = n - 1$  der Schicht(PS) und dem Substrat(Silizium) im Vergleich mit Literaturwerten.

Messgröße	Messwerte	Literaturwerte [1]	rel. Abweichung
$\rho_{\text{PS}}$ in $1/\text{m}^3$	$(3,13 \pm 0,04) \cdot 10^{29}$	$3,371 \cdot 10^{29}$	$(7 \pm 1) \%$
$\rho_{\text{Silizium}}$ in $1/\text{m}^3$	$(6,89 \pm 0,04) \cdot 10^{29}$	$7,097 \cdot 10^{29}$	$(3 \pm 1) \%$
$\delta_{\text{PS}}$	$(3,33 \pm 0,04) \cdot 10^{-6}$	$3,5 \cdot 10^{-6}$	$(5 \pm 1) \%$
$\delta_{\text{Silizium}}$	$(7,33 \pm 0,04) \cdot 10^{-6}$	$7,6 \cdot 10^{-6}$	$(4 \pm 1) \%$

zu den Literaturwerten aus Tabelle 1 sind zu groß, um von einer genauen Messung auszugehen. Mögliche Ursachen liegen zum einen an der Anzahl der Freiheitsgerade bei dem Fit mit dem modifizierten Parrat Algorithmus. Um bessere Ergebnisse zu erhalten könnte noch in Erwägung gezogen werden, die verschiedenen Bereiche im Fit gesondert zu gewichten. So könnten relevantere Bereiche besonders berücksichtigt werden.

Für die Rauigkeit der Polystyrolschicht wurde ein Wert von  $(17,9 \pm 0,5) \cdot 10^{-10}$  und für die Rauigkeit des Wafers ein Wert von  $(4,6 \pm 0,1) \cdot 10^{-10}$  gemessen. Diese liegen im Bereich der erwarteten Größenordnung. Sie können jedoch nicht mit Literaturwerten verglichen werden, da die Rauigkeit vom Herstellungsvorgang abhängt. Desweiteren fällt in Abbildung 11 auf, dass der Fit nicht in allen Bereichen an die Messwerte passt, da die Schwingungen für höhere  $\alpha_i$  nicht mehr in der Fitkurve vorzufinden sind. Dies liegt zum einen an dem verwendeten Zwei-Schichten-Modell, da Silizium oxidiert und somit in der Realität zwischen PS und Siliziumwafer eine nicht berücksichtigte Siliziumoxid Schicht liegt. Zum anderen führen verschiedene Startparameter des Fits mit dem modifizierten Parrat Algorithmus, zu varrierenden Fit-Parametern im Programm. Dies ist der hohen Anzahl an Freiheitsgraden geschuldet.

Abschließend lässt sich sagen, dass bei der durchgeführten Messung, Brechungsindizes und Elektronendichten bis auf wenige Prozent genau bestimmt werden konnten. Weiterhin konnte durch den Versuch die Oberflächenstruktur im Bezug auf die Rauigkeit untersucht werden. Bessere Ergebnisse lassen sich durch Berücksichtigung der Siliziumoxidschicht und aufwändigerem Variieren der Schätzparameter beim fitten gewinnen.

## Literatur

[1] TU Dortmund. *Röntgenreflektrometrie - V65*. (Besucht am 03.04.2019).



- [2] *Gauss-Strahl*. URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Gau%C3%9F-Strahl> (besucht am 03.04.2019).