

Fortgeschrittenenpraktikum

V44 Röntgenreflektometrie - Korrektur

Felix Gläsemann

felix.glaesemann@tu-dortmund.de

Tobias Brützel

tobias.bruetzel@tu-dortmund.de

Durchführung: 25.04.2022

Abgabe: 04.05.2022

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1	Zielsetzung	3
2	Theorie	3
2.1	Brechungsindex und Reflexion	3
2.2	Mehrschichtensysteme	4
2.3	Rauigkeit	5
2.4	Funktionsweise der Geräte	5
3	Durchführung	6
3.1	Justage	6
3.2	Messung	8
4	Auswertung	9
4.1	Justage	9
4.1.1	Detektorscan	9
4.1.2	Z-Scan	10
4.1.3	Rockingscan	11
4.2	Bestimmung des Dipersionsprofil	11
4.2.1	Reflektivitätsmessung	13
4.2.2	Parratt-Algorithmus	13
5	Diskussion	14
6	Anhang	17
	Literatur	18

1 Zielsetzung

In diesem Versuch wird das Verfahren der Röntgenreflektometrie genutzt, um die Struktur der Oberfläche einer Probe zu analysieren. Dazu gehören Daten wie Schichtdicke, Dispersion und Rauigkeit.

2 Theorie

2.1 Brechungsindex und Reflexion

Beim Auftreffen von Röntgenstrahlung vom Vakuum auf ein Medium, dessen Brechungsindex von eins abweicht, ist dieser gegeben durch:

$$n = 1 - \delta + i \cdot \beta \quad (1)$$

β ist dabei die Absorption und δ ist eine Korrektur. Bei Röntgenstrahlung ist bei diesem Übergang eine Totalreflexion möglich, da der Brechungsindex in Materie kleiner als Eins ist. Im allgemeinen Fall trifft die elektromagnetische Welle in einem Winkel α_e auf eine unendlich dicke, homogene, glatte Materialschicht. Ein Teil wird dann im Winkel $\alpha_e = \alpha_r$ reflektiert. Der restliche Teil wird unter dem Winkel α_t gebrochen und transmittiert. Die Totalreflexion tritt hierbei unter dem kritischen Winkel α_c auf. Dies bedeutet, dass keine Transmission auftritt. Dieser Kritische Winkel beim Auftreffen von Röntgenstrahlung vom Vakuum auf ein Medium, dessen Brechungsindex von eins abweicht, ist gegeben durch:

$$a_c = \sqrt{2\delta} \quad (2)$$

$$a_c = \lambda \cdot \sqrt{\frac{r_e \cdot \rho}{\pi}} \quad (3)$$

Die Fresnelschen-Gleichungen beschreiben die Reflexion und Transmission an ebenen Grenzschichten. Die Polarisation kann aufgrund des Sonderfalles, dass die magnetischen Permeabilitäten ungefähr gleich groß sind, vernachlässigt werden. Die Gleichungen vereinfachen sich so zu:

$$t = \frac{2 \cdot n_1 \sin(\alpha_e)}{n_1 \sin(\alpha_e) + n_2 \sin(\alpha_c)} \quad (4)$$

$$r = \frac{n_1 \sin(\alpha_e) - n_2 \sin(\alpha_c)}{n_1 \sin(\alpha_e) + n_2 \sin(\alpha_c)} \quad (5)$$

r und t beschreiben dabei die Fresnel'schen Reflexions- und Transmissionskoeffizienten. Diese beschreiben die Amplitudenverhältnisse. Die Intensitätsverhältnisse können über die Fresnel'sche Reflektivität mit der Annahme, dass $\alpha_e > 3\alpha_c$ als:

$$R_F = |r|^2 = \left(\frac{\alpha_c}{2\alpha_e} \right)^4 \quad (6)$$

beschrieben werden.

2.2 Mehrschichtensysteme

Die Systeme bestehen in der Realität meist aus mehreren inhomogenen Schichten. Als erstes wird die Reflexion an einer inhomogenen Schicht untersucht, hier an einer Polystyrolschicht mit einer Dicke von 80 nm. Wenn nun die Reflektivität gegen den Einfallswinkel aufgetragen wird, ergibt sich:

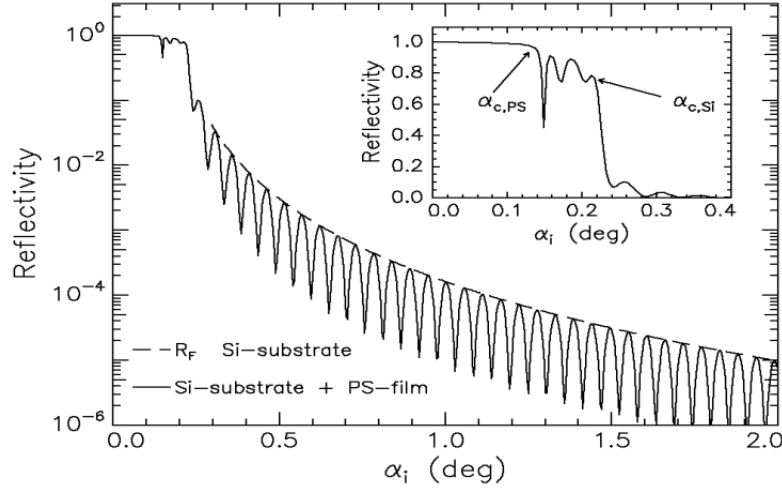


Abbildung 1: Reflektivität eines Siliziumwafers mit einer 80 nm dicken Polystyrolschicht [3, S. 8]

Die theoretische Fresnelreflektivität wird dabei als gestrichelte Linie dargestellt. In der Realität oszilliert die Reflektivität, dies wird als Kiessig-Oszillation bezeichnet. Diese entstehen durch Interferenzen an den Grenzschichten, die je nach Phasendifferenz konstruktiv oder destruktiv sind. Die Minima entstehen bei einem Gangunterschied von $N \cdot \frac{\lambda}{2}$, wobei N eine ungerade Zahl ist. Bei den kritischen Winkel α_c sind Einbrüche im Plot zu finden, wodurch diese bestimmt werden können. Die Schichtdicke kann über die Oszillation und die Wellenlänge λ bestimmt werden als:

$$d = \frac{\lambda}{2\Delta a_i} \quad (7)$$

wobei d die Schichtdicke ist und a_i der Winkel zwischen zwei Minima der Kiessig-Oszillation ist. Wenn nun weitere Schichten hinzukommen, werden sich die Oszillationen der einzelnen Schichten überlagern. Um dennoch etwas über die Reflektivität aussagen zu können, wird der Parratt-Algorithmus verwendet. Dieser besteht aus dem rekursiven Durchlaufen aller Schichten, angefangen von der untersten Schicht. Dabei wird die jeweils j -te Schicht und deren Amplitudenverhältnisse untersucht. Dabei ist der Parratt-Algorithmus gegeben durch:

$$X_j = \exp(-2ik_{z,j}z_j) \cdot \frac{r_{j,j+1} + X_j \exp(-2ik_{z,j+1}z_j)}{1 + r_{j,j+1} + X_j \exp(-2ik_{z,j+1}z_j)} \quad (8)$$

Hierbei ist

$$k_{z,j} = k \cdot \sqrt{n_j^2 - (\cos(\alpha_i))^2} \quad (9)$$

die z-Komponente des j-ten Wellenvektors. Der Betrag ist dabei $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Die Fresnelkoeffizienten werden dann über

$$r_{j,j+1} = \frac{k_{z,j} - k_{z,j+1}}{k_{z,j} + k_{z,j+1}} \quad (10)$$

berechnet.

2.3 Rauigkeit

Die nächste Korrektur ist die der Rauigkeit. Glatte Materialschichten sind in der Realität nicht anzutreffen, weshalb die Rauigkeit der j-ten Grenzfläche eingeführt wird. Dies ist gegeben durch:

$$\sigma_j^2 = \int (z - z_j) \cdot P_j(z) dz. \quad (11)$$

$P_j(z)$ ist dabei die Wahrscheinlichkeit des Antreffens der j-ten Grenzfläche im Intervall $(z_j + z, z_j + z + dz)$. Damit werden die Fresnelkoeffizienten zu:

$$\bar{r}_{j,j+1} = r_{j,j+1} \cdot \exp(-2k_{z,j}k_{z,j+1}\sigma_j^2) \quad (12)$$

$$\bar{t}_{j,j+1} = t_{j,j+1} \cdot \exp\left((k_{z,j} - k_{z,j+1})^2 \frac{\sigma_j^2}{2}\right) \quad (13)$$

Diese modifizierten Koeffizienten können im Parratt-Algorithmus verwendet werden.

2.4 Funktionsweise der Geräte

Für die Röntgenstrahlung wird eine Kupfer-Röntgenröhre verwendet. Elektronen werden zu einer Kupfer-Anode beschleunigt. Dort wird Bremsstrahlung abgegeben und durch Stoßprozesse mit den Hüllenelektronen entstehen die charakteristische Strahlung, wobei die K_α -Linie für diesen Versuch verwendet wird. Um nur diese für die Reflektometrie zu verwenden, wird ein Göbelspiegel benutzt. Dieser bündelt die Strahlen, sodass diese monochromatisiert werden und parallel verlaufen. Die Wellenlänge, die durch gelassen wird, beträgt $\lambda = 1,54 \cdot 10^{-10}$ m und entspricht der K_α -Linie. Bei dem Versuch definieren zwei Blenden jeweils den Einfallswinkel und den Ausfallswinkel. Eine zusätzliche Bedingung ist, dass erst ab einem Geometrie-Winkel α_g der gesamte Strahl reflektiert wird. Dieser Winkel lässt sich über

$$a_g = \arcsin\left(\frac{d_0}{D}\right) \quad (14)$$

berechnen. Dabei ist d_0 die Gesamtstrahlbreite und D die Probelänge. Mit der tatsächlichen Strahlbreite $D \cdot \sin(\alpha_e)$, die auf die Probe trifft lässt sich der Geometriefaktor G als

$$G = \frac{D \cdot \sin(\alpha_e)}{d_0} \quad (15)$$

im Bereich $\alpha_e < \alpha_g$ bestimmen. Für den Bereich $\alpha_e \geq \alpha_g$ beträgt der Geometriefaktor $G = 1$.

3 Durchführung

3.1 Justage

Für die Durchführung des Versuches ist zunächst eine Justage der Apparatur nötig. Bei den verschiedenen Scans beträgt die Messdauer jeweils $t = 1$ s pro Winkel. Als erstes wird ein Detektorscan durchgeführt und das Maximum dieses Scans wird als Nullpunkt des Detektors genommen. Dieser Scan wird um den Nullpunkt durchgeführt von $-0,5^\circ$ bis $0,5^\circ$. Mithilfe eines Z-Scans wird die Probe so justiert, dass sie sich genau an der Position in Z-Richtung befindet an der die maximale Intensität I_{\max} halbiert ist.

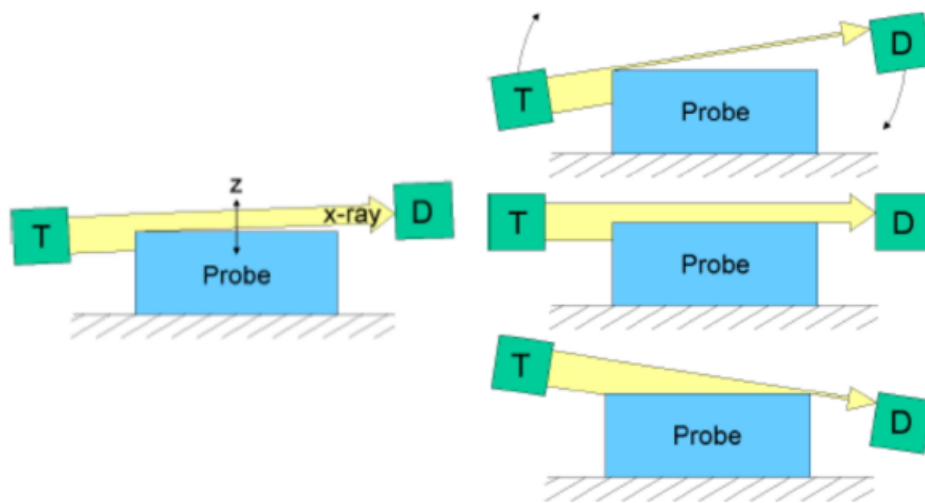


Abbildung 2: Schematische Darstellung des Z-Scans (links) und des Rockingscan (rechts). [2, S. 5]

Mit einem X-Scan wird nun die Position in X-Richtung justiert. Daraufhin wird ein Rockingscan durchgeführt, wobei der Detektor und die Röhre um die Probe gedreht werden. Als Ergebnis sollte ein gleichschenkliges Dreieck herauskommen. Falls dies nicht der Fall sein sollte, muss nachjustiert werden.

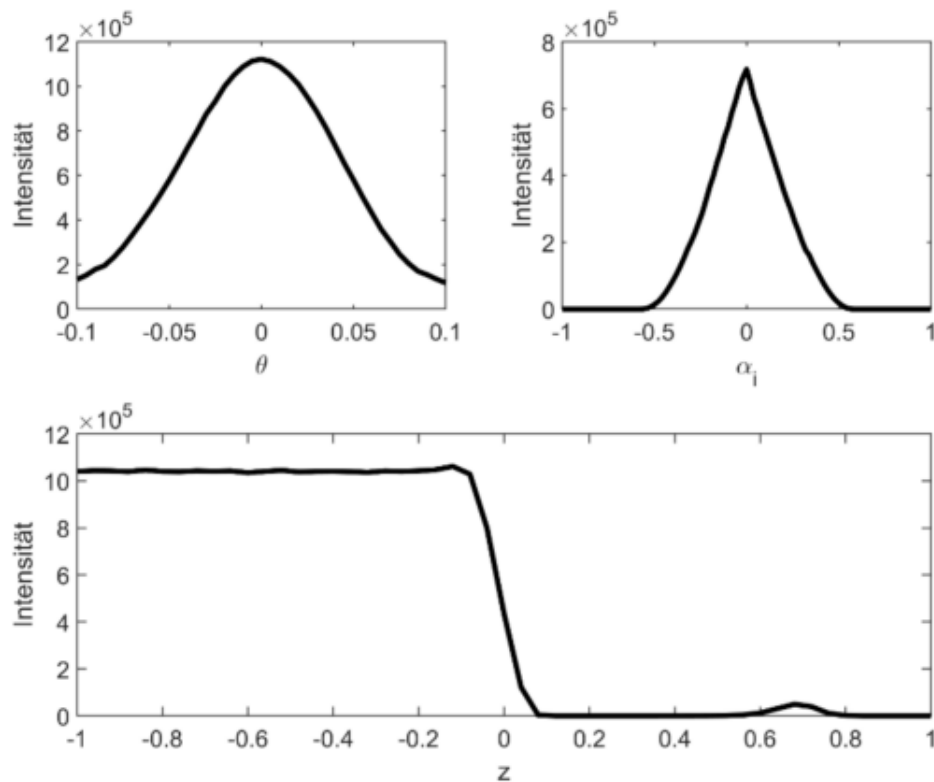


Abbildung 3: Beispielplots von Detektorscan (oben links), Rockingscan (oben rechts) und Z-Scan (unten). [2, S. 6]

Durch die Ausrichtung im Rockingscan ist die Z-Position der Probe nicht mehr exakt, sodass ein weiterer Z-Scan durchgeführt wird. Für die Feinjustierung wird ein weiterer Rockingscan durchgeführt, dieser weicht vom ersten ab, da er unter einem Winkel von $2\theta = 0,3^\circ$ durchgeführt wird. Es sollte ein deutlicher Reflex zu sehen sein. Das Maximum der Kurve wird im Programm im Feld "Enter theoretical Positon" auf $0,15^\circ$ gesetzt. Abschließend wird ein dritter Z-Scan durchgeführt, allerdings sind hier bei Detektor und Röhre jeweils um $0,15^\circ$ geneigt. Dies ist in Abbildung (4) dargestellt.

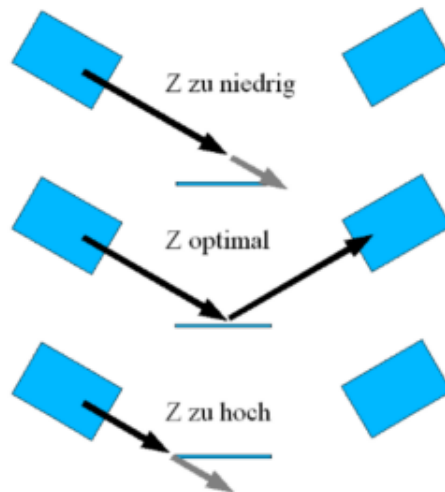


Abbildung 4: Z-Scan mit geneigter Röhre und Detektor [2, S. 7]

Damit ist die Justage der Messapparatur abgeschlossen.

3.2 Messung

Nachdem die Justage abgeschlossen ist, findet die eigentliche Messung der Probe statt. Dafür wird der "Omega/2Theta-Scan" verwendet. Der Scannbereich liegt dabei zwischen 0° bis $2,5^\circ$ und die Schrittweite beträgt $0,005^\circ$ bei einer Messdauer von $t = 5\text{ s}$ pro Winkel. Zusätzlich wird ein "Diffuse Scan" durchgeführt, wo der Detektor um $0,1^\circ$ zur Röntgenröhre geneigt ist. Die sonstigen Einstellungen bleiben dabei gleich. Abschließend werden die aufgenommenen Messdaten mit FileExchanger von einer .raw-Datei in eine .UXD-Datei umgewandelt und können ausgewertet werden.

4 Auswertung

In diesem Abschnitt werden die aufgenommenen Messdaten in Grafiken dargestellt und ausgewertet. Grafiken sowie dazugehörige Rechnungen sind mit Python [4] erstellt bzw. berechnet worden.

4.1 Justage

Im ersten Auswertungsabschnitt des Versuches, werden zunächst zur Justage von Apparat und Probe einige Scans aufgenommen und später benötigte Parameter erfasst.

4.1.1 Detektorscan

Wie in Abschnitt (3) beschrieben, wird zu Beginn ein Detektorscan durchgeführt. Die aufgenommenen Daten sind Abbildung (5) zu finden. Die Ausgleichsfunktion hat die

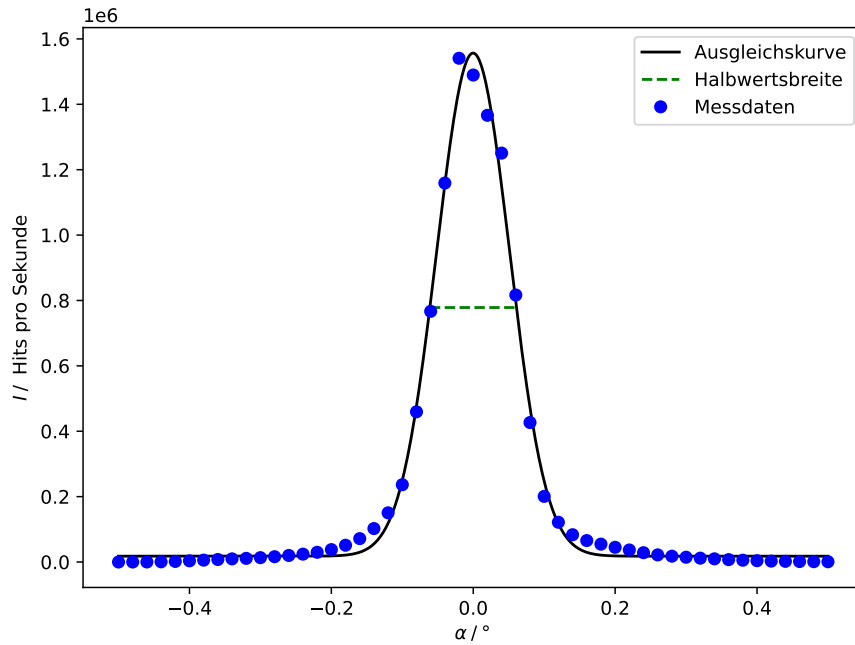


Abbildung 5: Messdaten des Detektorscan mit Gaußfunktion.

Form einer Gaußfunktion und ist gegeben durch:

$$I(\alpha) = \frac{a}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) + b \quad (16)$$

Die Parameter ergeben sich zu:

$$a = (1,98 \pm 0,03) \cdot 10^5$$

$$b = (1,8 \pm 0,5) \cdot 10^4$$

$$\sigma = (0,0513 \pm 0,0008)^\circ$$

$$\mu = (0,002 \pm 0,007)^\circ$$

Jetzt werden noch die maximale Intensität I_{\max} und die Halbwertsbreite von der Gaußfunktion abgelesen. Diese lauten:

$$\text{HWB} = 0.122$$

$$I_{\max} = 1,557 \cdot 10^6$$

4.1.2 Z-Scan

In diesem Abschnitt wird aus dem aufgenommenen Z-Scan die Strahlbreite d_0 bestimmt. Die Strahlbreite ist der Abstand zwischen minimaler und maximaler Intensität. In Abbildung (6) ist dies grafisch dargestellt:

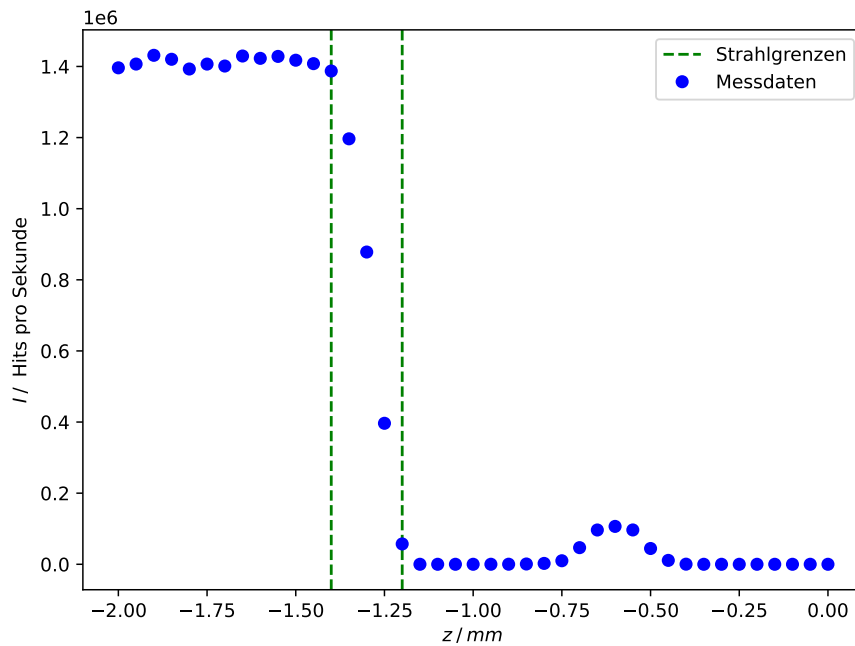


Abbildung 6: Messdaten des Z-Scan mit Strahlbreite d_0 .

Damit ergibt sich die Strahlbreite zu:

$$d_0 = 0,2 \text{ mm}$$

4.1.3 Rockingscan

Im letzten Teil der Justage wird aus dem aufgenommenen Rockingscan der Geometriewinkel α_g bestimmt. Dazu ist in Abbildung (7) das Ergebnis des Scans grafisch dargestellt:

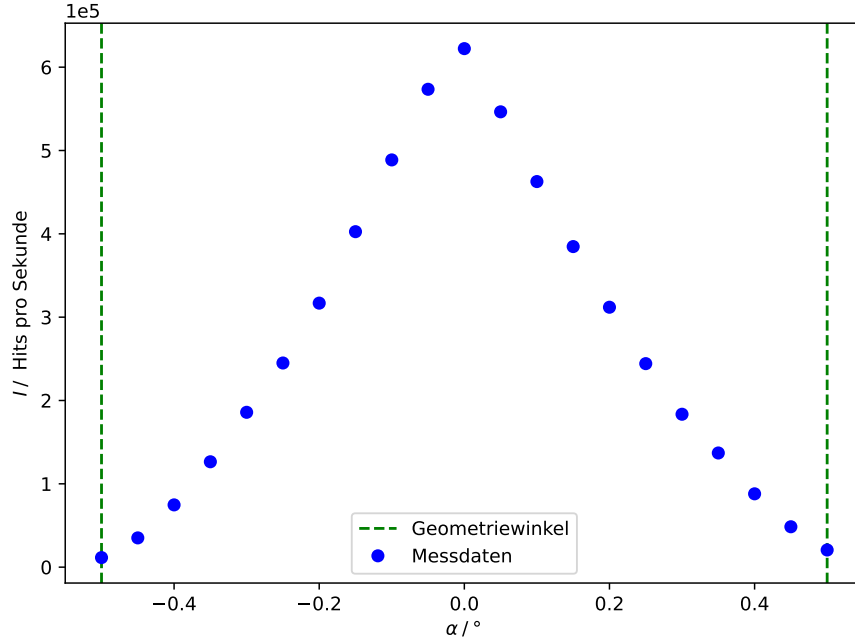


Abbildung 7: Messdaten des Rockingscan mit Geometriewinkeln α_0 .

Die beiden abgelesenen Geometriewinkel sowie der gemittelte Wert lauten:

$$\alpha_{g,\text{links}} = 0,5^\circ$$

$$\alpha_{g,\text{rechts}} = 0,5^\circ$$

$$\bar{\alpha}_g = 0,5^\circ$$

Mit Gleichung (14) kann mit der ermittelten Strahlbreite $d_0 = 0,2 \text{ mm}$ sowie der Probenlänge $D = 20 \text{ mm}$ ein theoretischer Wert für den Geometriewinkel bestimmt werden. Dieser ergibt sich zu:

$$\alpha_{g,\text{Theorie}} = 0,573^\circ$$

4.2 Bestimmung des Dipersionsprofil

In diesem Abschnitt wird aus dem aufgenommenen Reflektivitätsscan das Dipersionsprofil der Probe bestimmt. In den Abbildungen (8) und (9) sind die Ergebnisse zusammengefasst:

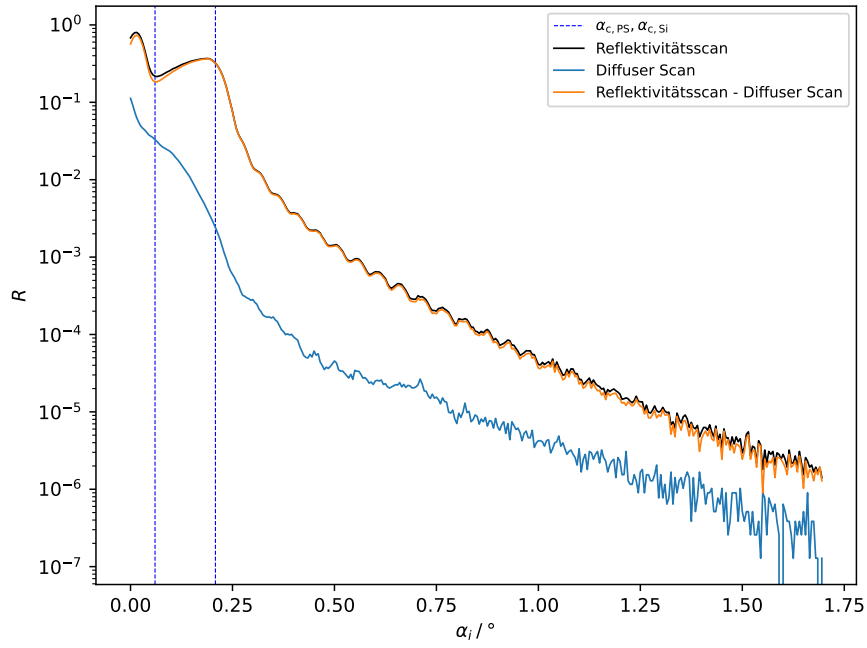


Abbildung 8: Aufgenommene Messdaten vom Diffuse-Scan und Reflektivitätsscan sowie deren Differenz, dazu die kritischen Winkel von Polystyrol und Silizium.

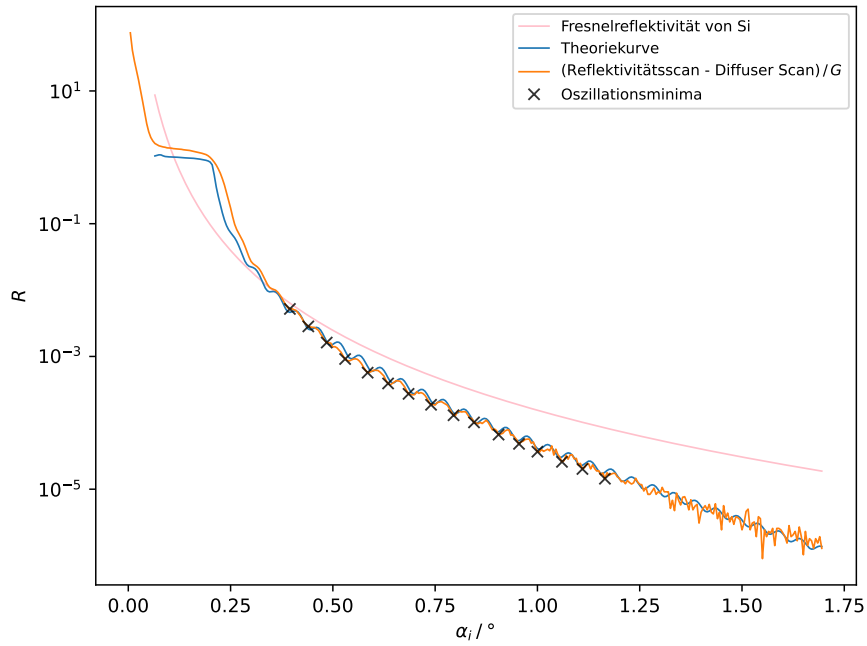


Abbildung 9: Theoretische Fresnelreflektivität von Silizium, Theoriekurve des Parratt-Algorithmus sowie mit Geometriefaktor korrigierter Reflektivitätsscan mit eingezeichneten Kiessing-Minima.

Da die Messdaten im Bereich $\alpha_e > 1,7^\circ$ nicht aussagekräftig sind, werden diese in den Grafiken nicht angezeigt. Die Reflektivität R ergibt sich mit einer Abtastrate von fünf aus folgender Formel:

$$R = \frac{I}{5 \cdot I_{\max}} \quad (17)$$

Der aufgenommene diffuse Scan wird, um Streueffekte so gut wie möglich zu unterdrücken, vom Reflektivitätsscan abgezogen. Da die gemessenen Intensitäten beim diffusen Scan gering waren, fällt dies in der Grafik kaum auf (siehe Abbildung (8)). Die Reflektivität wird mit einem Geometriefaktor korrigiert, dieser ergibt sich mit den aus der Justage ermittelten Größen nach Gleichung (15).

Außerdem ist in Abbildung (9) zu Vergleichszwecken die Fresnelreflektivität einer ideal glatten Siliziumoberfläche aufgetragen. Diese wird aus dem Literaturwert [3, S. 5] $\alpha_{c,\text{Silizium}} = 0,223^\circ$ mit Hilfe von Gleichung (6) bestimmt.

Desweiteren sind ideale Fresnelaktivität und Parratt-Theoriekurve nur bis zum kritischen Winkel $\alpha_{c,\text{PS}} = 0,06^\circ$ aufgetragen. Für $\alpha_e < \alpha_{c,\text{PS}}$ findet Totalreflexion statt.

4.2.1 Reflektivitätsmessung

Zur Bestimmung der Schichtdicke der Polystyrolschicht werden aus dem durch den Geometriefaktor korrigierten Reflektivitätsscan die Abstände $\Delta\alpha_e$ der Minima der Kiessig-Oszillation ermittelt. Der Mittelwert dieser Abstände ergibt sich zu:

$$\overline{\Delta\alpha_e} = (8,8 \pm 0,3) \cdot 10^{-4}^\circ \quad (18)$$

Die Schichtdicke berechnet sich aus Gleichung (7) mit $\lambda = 1,54 \cdot 10^{-10}$ m zu:

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

4.2.2 Parratt-Algorithmus

In diesem Abschnitt wird ebenfalls die Schichtdicke sowie die kritischen Winkel der verschiedenen Substanzen ermittelt. Dazu wird der Parratt-Algorithmus aus Abschnitt (2.2) verwendet. Als erstes wird dafür die Reflektivität R für den jeweiligen Einfallswinkel α_e aus den Gleichungen (8), (9) und (12) berechnet. Die hier betrachteten Schichten sind Luft (Schicht 1), Polystyrol (Schicht 2) und Silizium bzw. Substrat (Schicht 3). Da das Substrat als unendlich dick angenommen wird und damit die transmittierte Strahlung t_{N+1} nicht mehr reflektiert wird ergibt sich für $r_{N+1} = 0$, der als Startwert dient.

Zusätzlich ist zu bemerken, dass die Absorption nochmals um eine Größenordnung kleiner als die Dispersion ist und somit für den Intensitätsverlauf keine wirkliche Rolle spielt [1, S. 34, 35], daher wird sie im Folgenden konstant gehalten. Die Absorption berechnet sich aus:

$$\beta = \frac{\lambda}{4\pi} \mu \quad (19)$$

Dafür werden für die linearen Absorptionskoeffizienten μ die Literaturwerte verwendet [3, S. 5]. Die bekannten Parameter sind dann gegeben durch:

$$\begin{aligned}\delta_{1,\text{Luft}} &= 0 \\ z_1 &= 0 \\ \lambda &= 1,54 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ \beta_{\text{PS}} &= 0,49 \cdot 10^{-8} \\ \beta_{\text{Si}} &= 1,73 \cdot 10^{-7}\end{aligned}$$

Die weiteren Parameter δ_2 , δ_3 , σ_1 , σ_2 und z_2 werden so gewählt, dass die Theoriekurve und die gemessene Reflektivität so gut wie möglich übereinstimmen. Die Theoriekurve aus Abbildung (8) hat die folgenden Parameter:

$$\begin{aligned}\delta_{2,\text{PS}} &= 0,55 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{3,\text{Si}} &= 6,6 \cdot 10^{-6} \\ \sigma_1 &= 7,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ \sigma_2 &= 6,3 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ z_2 &= 8,6 \cdot 10^{-8} \text{ m}\end{aligned}$$

Aus den Dispersionen für Polystyrol δ_{PS} und Silizium δ_{Si} werden die kritischen Winkel α_c bestimmt. Dafür wird Gleichung (2) verwendet und die folgenden Werte ergeben sich:

$$\begin{aligned}\alpha_{c,\text{PS}} &= 0,06^\circ \\ \alpha_{c,\text{Si}} &= 0,208^\circ\end{aligned}$$

Diese sind in Abbildung (8) durch die gestrichelten Linien gekennzeichnet.

5 Diskussion

Die durchgeführten Scans zur Justierung aus den Abbildungen (5), (6) und (7) entsprechen den erwarteten Plots aus Abbildung (3), daher lässt sich sagen, dass die Justage erfolgreich durchgeführt werden konnte, allerdings wären die Ergebnisse vermutlich etwas genauer wären bei Detektor- und Z-Scan mehr Datenpunkte vorhanden. Dies wirkt sich beispielsweise auf den Geometriewinkel aus, denn die Strahlbreite, aus der der Geometriewinkel berechnet wird, kann nur relativ ungenau aus Abbildung (6) ermittelt werden. Der gemessene Geometriewinkel $\alpha_{g,\text{Messung}}$ weicht vom berechneten Geometriewinkel $\alpha_{g,\text{Theorie}}$ ab mit:

$$\begin{aligned}\alpha_{g,\text{Messung}} &= 0,5^\circ \\ \alpha_{g,\text{Theorie}} &= 0,573^\circ\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich eine Abweichung von ca. 12.7%.

Der in Abbildung (8) zu sehende korrigierte Reflektivitätsscan liegt zwar in der selben Größenordnung, aber dennoch über das ganze betrachtete Intervall unter dem Wert der Fresnelreflektivität von Silizium. Die erwarteten Kiessing-Oszillationen sind gut zu erkennen und auch die Näherung an die Kurve mit Hilfe des Parratt-Algorithmus ist für $\alpha_i > 0,5^\circ$ gut gelungen. Allerdings sind die Parameter dafür manuell angepasst worden. Im Folgenden sind die eingestellten Parameter mit den Literaturwerten [3, S. 5] verglichen. Zunächst wird die Dispersion sowie die Schichtdicke betrachtet:

$$\begin{aligned}\delta_{\text{PS,Parratt}} &= 0,55 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{PS,Literatur}} &= 3,5 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{Si,Parratt}} &= 6,6 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{Si,Literatur}} &= 7,6 \cdot 10^{-6} \\ d_{\text{PS,Messung}} &= 8,7 \cdot 10^{-8} \text{ m} \\ d_{\text{PS,Parratt}} &= 8,6 \cdot 10^{-8} \text{ m}\end{aligned}$$

Während für Silizium die Dispersion relativ gut übereinstimmt mit einer Abweichung von ca. 13%, ist die Abweichung beim Polystyrol deutlich höher mit ca. 84%. Die Schichtdicken, die einerseits aus dem Abstand der Minima der Kiessing-Oszillation und andererseits mit Hilfe des Parratt-Algorithmus berechnet wurden, stimmen fast exakt überein und sollten daher eine gute Einschätzung für die tatsächlichen Dicke der Probe geben können.

Jetzt werden noch die kritischen Winkel betrachtet:

$$\begin{aligned}\alpha_{\text{c,PS,Messung}} &= 0,060^\circ \\ \alpha_{\text{c,PS,Literatur}} &= 0,153^\circ \\ \alpha_{\text{c,Si,Messung}} &= 0,208^\circ \\ \alpha_{\text{c,Si,Literatur}} &= 0,223^\circ\end{aligned}$$

Da die Winkel direkt aus den Dispersionen bestimmt wurden mit Gleichung (2), hat auch hier wieder der Wert für Silizium die wesentlich geringere Abweichung. In Abbildung (8) ist zu erkennen, dass die kritischen Winkel sehr gut mit den Intensitätseinbrüchen der jeweiligen Kurven übereinander liegen.

Die letzten beiden Parameter, die für den Parratt-Algorithmus verwendet wurden sind die Rauigkeiten, diese lauten:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= 7,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ \sigma_2 &= 6,3 \cdot 10^{-10} \text{ m}\end{aligned}$$

Dabei ist σ_1 die Rauigkeit zwischen Luft und Polystyrol und σ_2 die Rauigkeit zwischen Polystyrol und Silizium. Für diese Parameter liegen keine Literaturwerte vor. Allerdings

hat σ_2 einen großen Einfluss auf den Verlauf der Kurve des Parratt-Algorithmus, daher ist anzunehmen, dass die Rauigkeit σ_2 relativ genau bestimmt wurde.

Insgesamt lässt sich sagen, dass über den Parratt-Algorithmus als auch über die Abstände der Minima ein gutes Ergebnis für die Schichtdicke erzielt wurde. Allerdings war die Anpassung des Parratt-Algorithmus sehr subjektiv und es ist möglich, dass mit anderen Parametern eine bessere Annäherung an die Messung erzielt werden kann. Weitere Gründe für Abweichungen können eine nicht optimale Justage der Apparatur oder nicht genügend Datenpunkte wie oben beschrieben.

6 Anhang

```
messung.py x
## Parrat algorithm

# save R_G und a_i for interactive plot
np.savetxt('R_G.csv', list(zip(a, R_G)), header='a_i,R_G', fmt='%0.4f,%0.10e')

# a_i angle of incidence
# n refractive index
# n1 air, n2 nano-film, n3 substrat
# sigma roughness
# sigma1 nano-film, sigma2 substrat
# z1=0, z2 layer thickness
# k=2pi/lambda value of wave vector
# constants:
n1 = 1.
z1 = 0.
k = 2 * np.pi / lambda_

# parameters to adjust R_parr to R_G
delta2 = 0.55 * 10 ** (-6)
delta3 = 6.6 * 10 ** (-6)
sigma1 = 7.5 * 10 ** (-10) # m
sigma2 = 6.3 * 10 ** (-10) # m
z2 = 8.6 * 10 ** (-8) # m
```

Abbildung 10: Code für den Parratt-Algorithmus I

```

def parrat_rau(a_i, delta2, delta3, sigma1, sigma2, z2):
    n2 = 1. - delta2 + 0.49 * 10 ** (-8) * 1.j
    n3 = 1. - delta3 + 1.72 * 10 ** (-7) * 1.j

    a_i = np.deg2rad(a_i)

    kz1 = k * np.emath.sqrt(n1 ** 2 - np.cos(a_i) ** 2)
    kz2 = k * np.emath.sqrt(n2 ** 2 - np.cos(a_i) ** 2)
    kz3 = k * np.emath.sqrt(n3 ** 2 - np.cos(a_i) ** 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(-2.j * kz2 * z2) * r23
    x1 = (r12 + x2) / (1 + r12 * x2)
    R_parr = np.abs(x1) ** 2

    return R_parr

params = [delta2, delta3, sigma1, sigma2, z2]
R_parr = parrat_rau(a, *params)

```

Abbildung 11: Code für den Parratt-Algorithmus II

Literatur

- [1] Florian Bertram. *Röntgenreflektometrie an ultradünnen Schichten*. URL: https://www.physik.uni-osnabrueck.de/fileadmin/documents/AG-Woll/Bachelor_Arbeiten/BachelorarbeitFlorianBertram.pdf (besucht am 04.05.2022).
- [2] TU-Dortmund. *Anleitung zu V44 Röntgenreflektometrie*. URL: https://moodle.tu-dortmund.de/pluginfile.php/1893660/mod_resource/content/2/V44.pdf (besucht am 26.04.2022).
- [3] TU Dortmund. *Roentgenreflektometrieversuch*. URL: https://www.e1.physik.tu-dortmund.de/cms/Medienpool/Downloads/Roentgenreflektometrie_Versuch.pdf (besucht am 26.04.2022).
- [4] Python. URL: <https://www.python.org> (besucht am 27.04.2022).