



## **V44**

### **- Röntgenreflektometrie -**

Raphael Rico Kaiser  
raphael.kaiser@tu-dortmund.de

Karina Overhoff  
karina.overhoff@tu-dortmund.de

Durchführung: 05.11.2021, Abgabe: 25.11.2021

TU Dortmund - Fakultät Physik

## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Ziel</b>	<b>3</b>
<b>2 Theorie</b>	<b>3</b>
2.1 Röntgenreflexivität . . . . .	3
2.2 Mehrschichtsysteme . . . . .	4
2.3 Raue Oberflächen . . . . .	5
2.4 Geometriefaktor und Geometriewinkel . . . . .	7
<b>3 Durchführung</b>	<b>7</b>
3.1 Justierung . . . . .	9
3.2 Messung . . . . .	9
<b>4 Auswertung</b>	<b>10</b>
4.1 Justierung und Kalibrierung . . . . .	10
4.2 Der Reflektivitätsscans und die Dispersionsprofile . . . . .	13
<b>5 Diskussion</b>	<b>17</b>
<b>6 Programmcode Parratt-Algorithmus</b>	<b>18</b>
<b>Literatur</b>	<b>20</b>

## 1 Ziel

In diesem Versuch soll ein beschichteter Siliziumwafer mittels Röntgenreflektometrie untersucht werden. Es sollen die Dispersion und Rauigkeit des Siliziumwafers und die Schichtdicke, Dispersion und Rauigkeit der Polyesterolschicht bestimmt werden.

## 2 Theorie

### 2.1 Röntgenreflexivität

Röntgenstrahlen sind elektromagnetische Wellen im Wellenlängenbereich von etwa 5 pm bis 10 nm. Trifft eine solche Welle auf ein Medium mit Brechungsindex  $n_2$ , wird diese zum Teil reflektiert und zum Teil transmittiert und gebrochen. Das ist schematisch in Abb. 1 zu sehen. Der komplexe Brechungsindex berücksichtigt sowohl die Brechung als auch die Dämpfung durch Absorption und ist durch den folgenden Ausdruck definiert

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

wobei  $\beta$  die Absorption und  $\delta$  eine Korrektur beschreibt. Für Röntgenstrahlen ist der Realteil des Brechungsindex kleiner als 1, wodurch die Möglichkeit zur Totalreflexion besteht. Aus dem Snelliusschen Brechungsgesetz

$$n_1 \cos(\alpha_i) = n_2 \cos(\alpha_f)$$

und der Tatsache, dass  $\text{Re}(n_2) < 1$  folgt, dass bei dem kritischen Winkel  $\alpha_c$  die transmittierte Welle in einem Winkel von  $0^\circ$  zur Grenzfläche steht und somit bei Winkeln unterhalb des kritischen Winkels Totalreflexion entsteht, d.h. es gibt keine transmittierte Welle. Dieser kritische Winkel wird beschrieben durch

$$\alpha_c = \arcsin(n) \quad \text{mit} \quad n = 1 - \delta. \quad (1)$$

Die Fresnelschen Formeln beschreiben quantitativ die Reflexion und Transmission einer ebenen elektromagnetischen Welle an einer ebenen Grenzfläche. Im Fall von Röntgenstrahlung muss nicht zwischen parallel und senkrecht polarisierter Strahlung unterschieden werden und die Fresnelkoeffizienten lauten somit

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

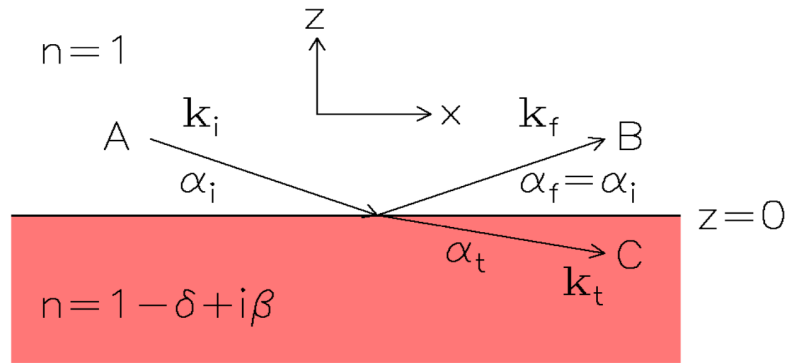


Abbildung 1: Eine ebene Welle trifft aus dem Vakuum mit Brechungsindex  $n = 1$  auf eine glatte Grenzfläche und wird dabei reflektiert und transmittiert. Der Einfallswinkel  $\alpha_i$  entspricht dem Ausfallswinkel  $\alpha_f$ . Der Winkel  $\alpha_t$  ist der Winkel der transmittierten Welle in Bezug auf die Grenzfläche. [1]

## 2.2 Mehrschichtsysteme

Bei einem aus mehreren Schichten bestehenden System wird die einfallende Strahlung sowohl an der Oberfläche, als auch an den Grenzflächen der einzelnen Schichten reflektiert. Das ist schematisch in Abb. 2 dargestellt. Durch die konstruktive und destruktive Interferenz der reflektierten Strahlen entstehen Oszillationen in der detektierten Intensität. Diese sogenannten Kiessig-Oszillationen sind abhängig vom Schichtabstand  $d$ , weshalb dieser mithilfe der Lage der Minima in der Reflexionskurve bestimmt werden kann durch

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

Dabei ist  $\lambda$  die Wellenlänge und  $\Delta\alpha_i$  die Differenz der Einfallswinkel an den einzelnen Schichten. Ein Beispiel einer solchen Reflexionskurve ist in Abb. 3 zu sehen.

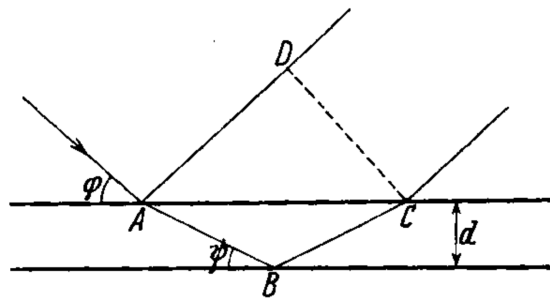


Abbildung 2: Ein Röntgenstrahl trifft unter dem Winkel  $\Phi$  auf eine dünne Schicht mit Dicke  $d$  und wird teilweise reflektiert und teilweise transmittiert unter dem Winkel  $\psi$  und wieder reflektiert. Die reflektierten Strahlen interferieren. [3]

Haben die Schichten unterschiedliche Brechungsindizes, ist die Reflektivität komplizierter.

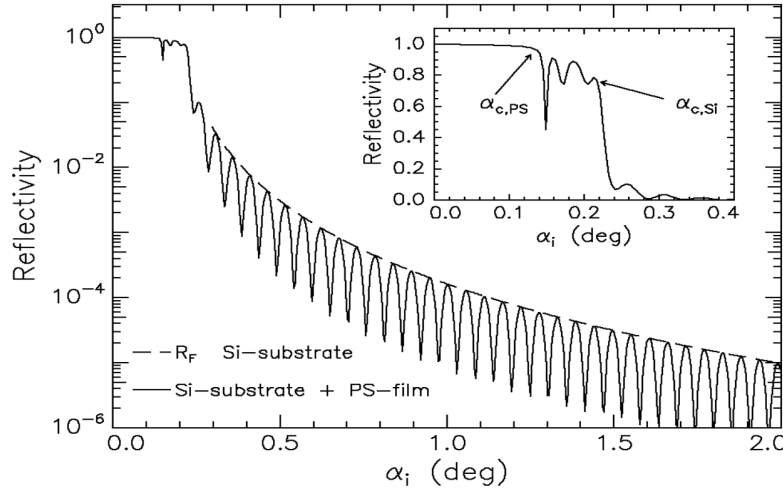


Abbildung 3: Die Reflektivität ist in Abhängigkeit vom Einfallswinkel  $\alpha_i$  aufgetragen. Zu sehen sind die Reflexionskurven für ein Silizium-Substrat und für ein mit einer Polyesterolschicht überzogenes Silizium-Substrat. Es sind außerdem die kritischen Winkel zu sehen. [1]

Um die Reflektivität eines solchen Systems zu berechnen, wird der Parratt-Algorithmus verwendet. Dieser berechnet rekursiv das Verhältnis der reflektierten und transmittierten Wellen an der  $i$ -ten Grenzfläche

$$X_i = \frac{R_i}{T_i} = \exp(-2i k_{z,i} z_i) \frac{r_{i,i+1} + X_{i+1} \exp(2i k_{z,i+1} z_i)}{1 + r_{i,i+1} X_{i+1} \exp(2i k_{z,i+1} z_i)}. \quad (3)$$

Die Fresnelreflektivität der  $i$ -ten Grenzfläche  $r_{i,i+1} = \frac{k_{z,i} - k_{z,i+1}}{k_{z,i} + k_{z,i+1}}$  wird aus der  $z$ -Komponente des Wellenvektors  $k_{z,i} = k \sqrt{n_i^2 - \cos^2(\alpha_i)}$  berechnet.

Das System besteht aus  $N$  Grenzflächen. Dabei bildet das Substrat die unterste Schicht, welche als unendlich dick angenommen wird. Ein Mehrschichtsystem mit unterschiedlichen Brechungsindizes ist in Abb. 4 skizziert.

### 2.3 Raue Oberflächen

Da reale Oberflächen eine Rauigkeit in Form von mikroskopischen Unebenheiten aufweisen und nicht glatt sind, müssen die Fresnelkoeffizienten modifiziert werden. Die reflektierte Intensität einer rauen Grenzfläche ist geringer als die einer glatten. Im Parratt-Algorithmus werden die Fresnelkoeffizienten durch die modifizierten Fresnelkomponenten ersetzt, um die Reflektivität eines Mehrschichtsystems mit rauen Grenzflächen zu bestimmen. Diese

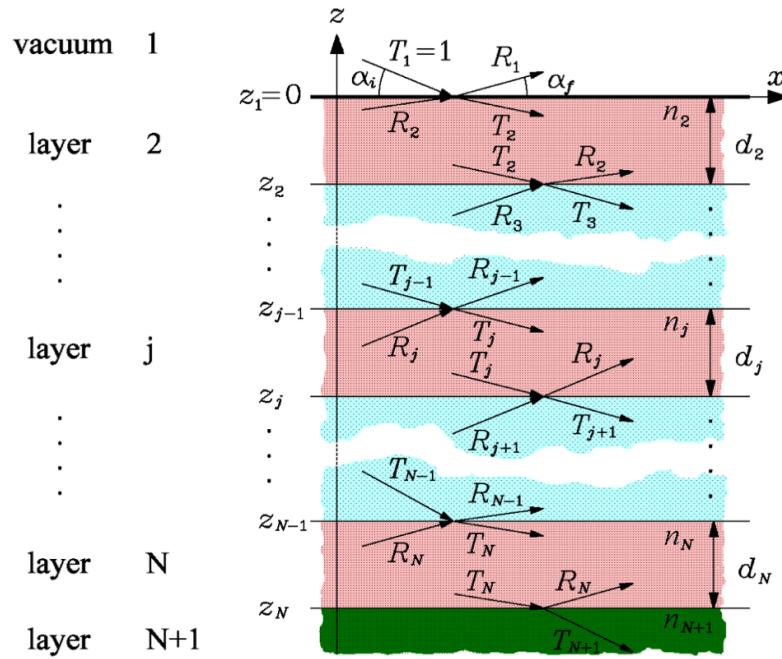


Abbildung 4: Das Mehrschichtsystem mit unterschiedlichen Brechungsindizes besteht aus  $N + 1$  Schichten. Die letzte Schicht bildet das unendlich dicke Substrat. Das Vakuum wird als erste Schicht angenommen. An den einzelnen Grenzflächen sind die reflektierten und transmittierten Wellen angedeutet. [1]

modifizierten Fresnelkoeffizienten werden folgendermaßen berechnet

$$\begin{aligned}\tilde{r}_{i,i+1} &= r_{i,i+1} \exp(-2 k_{z,i} k_{z,i+1} \sigma_i^2), \\ \tilde{t}_{i,i+1} &= t_{i,i+1} \exp((k_{z,i} - k_{z,i+1})^2 \sigma_i^2 / 2).\end{aligned}$$

## 2.4 Geometriefaktor und Geometriewinkel

Bei kleinen Einfallswinkeln trifft der Strahl eine größere Fläche als die Probenoberfläche, wodurch nicht die gesamte eingestrahlte Intensität reflektiert und detektiert wird (siehe Abb. 5). Erst wenn der Einfallswinkel genügend groß ist, trifft der gesamte Strahl auf die Oberfläche und wird reflektiert. Dieser Winkel wird dann Geometriewinkel genannt. Um die Reflektivität zu korrigieren, wird der Geometriefaktor

$$G = \frac{D \sin(\alpha_i)}{d_0} \quad (4)$$

genutzt, wobei  $D$  der Durchmesser der Probenoberfläche,  $\alpha_i$  der Einfallswinkel und  $d_0$  die Strahlbreite ist. Für Einfallswinkel, die mindestens so groß wie der Geometriewinkel sind, beträgt der Geometriefaktor  $G = 1$ .

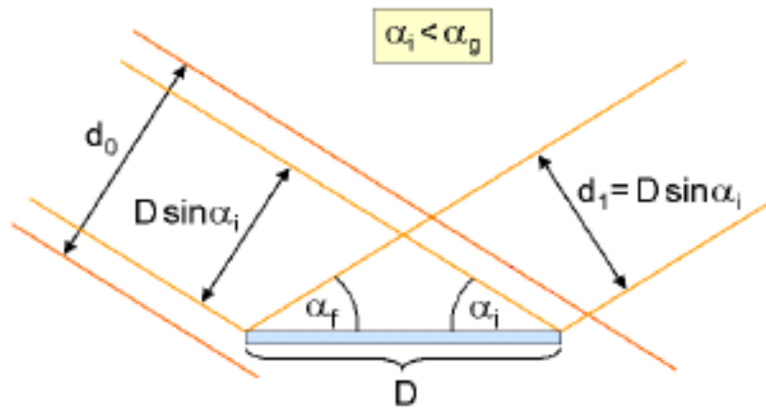


Abbildung 5: Schematische Darstellung des auf die Probe treffenden Strahls und des Gesamtstrahls. [1]

## 3 Durchführung

Der Versuch wird an einem D8-Labordiffraktometer (siehe Abb. 6) durchgeführt. Dabei wird eine Probe von einer Röntgenröhre, die mit einer Spannung von 40 kV und einem Strom von 35 mA betrieben wird, bestrahlt und die reflektierte Strahlung trifft auf einen Detektor. Die Probe ist ein mit einem Polymerfilm beschichteter Siliziumwafer, welcher als Substrat dient. Vor der Messung muss die Probe im Aufbau mittels mehrerer Scans justiert werden.



Abbildung 6: Foto eines D8-Labordiffraktometers, das eine winkelverstellbare Röntgenröhre sowie einen Detektor enthält. [1]



### 3.1 Justierung

#### Detektorscan

Zunächst wird die Probe aus dem Strahl gefahren und die Röntgenröhre auf  $0^\circ$  bewegt. Der Detektor wird beim Detektorscan um einen kleinen Winkelbereich um die Röhre bewegt. Dabei ergibt die aufgenommene Intensität eine Gaußverteilung. Das Maximum dieser Verteilung ist die neue Nullposition des Detektors.

#### Z-Scan

Anschließend wird die Probe im Strahl positioniert. Beim Z-Scan wird die Probe in der Höhe verschoben. Die Intensität nimmt immer mehr ab, je weiter die Probe in den Strahl fährt. Die neue z-Position der Probe ist dort, wo die halbe maximale Intensität detektiert wird, da die Probe den Strahl halb abschatten soll.

#### Rockingscan

Da der Strahl eventuell noch nicht parallel zur Probenoberfläche verläuft, wird ein Rockingscan durchgeführt. Dieser dreht die Röntgenröhre und den Detektor mit konstanter Winkelsumme um die Probe. Das entspricht einer Drehung der Probe im Strahl. Das Ziel dieses Scans ist es, die Probe in den Drehpunkt des Labordiffraktometers zu bringen und die Winkeleichung der Röhre in Bezug auf die Probe zu verbessern.

Nach den drei Scans wird erneut der Z-Scan durchgeführt, damit die Probe wieder den Strahl halb abschattet. Ein zweiter Rockingscan wird unter einem Winkel durchgeführt, um die Probe noch exakter zu justieren. Der letzte Z-Scan wird ebenfalls unter diesem Winkel durchgeführt und gewährleistet die endgültige halbe Abschattung.

### 3.2 Messung

Die eigentliche Messung besteht aus einem Reflektivitätsscan und einem diffusen Scan.

Beim Reflektivitätsscan sind der Röhren- und Detektorwinkel gleich groß. Es wird in einem Bereich von  $0^\circ$  bis  $2,5^\circ$  mit einer Schrittweite von  $0,005^\circ$  und einer Messzeit von 5 s gemessen.

Bei dem diffusen Scan ist der Detektorwinkel um  $0,1^\circ$  gegenüber dem Röhrenwinkel verschoben. Ansonsten wird die selbe Messung wiederholt. Dieser Scan ist wichtig, um die wahre Reflektivität zu erhalten.

## 4 Auswertung

### 4.1 Justierung und Kalibrierung

Bevor die eigentlichen Messergebnisse ausgewertet werden, finden eine Reihe von Kalibrationsmessungen statt, welche den Zweck erfüllen die Röntgenröhre optimal zu justieren und Zwischenergebnisse zu liefern. Diese Kalibrationsmessungen werden im Folgenden zuerst behandelt und ausgewertet.

#### Der Detektorscan

Die erste Messung ist die des Detektorscans, welcher in Abbildung 7 dargestellt ist.

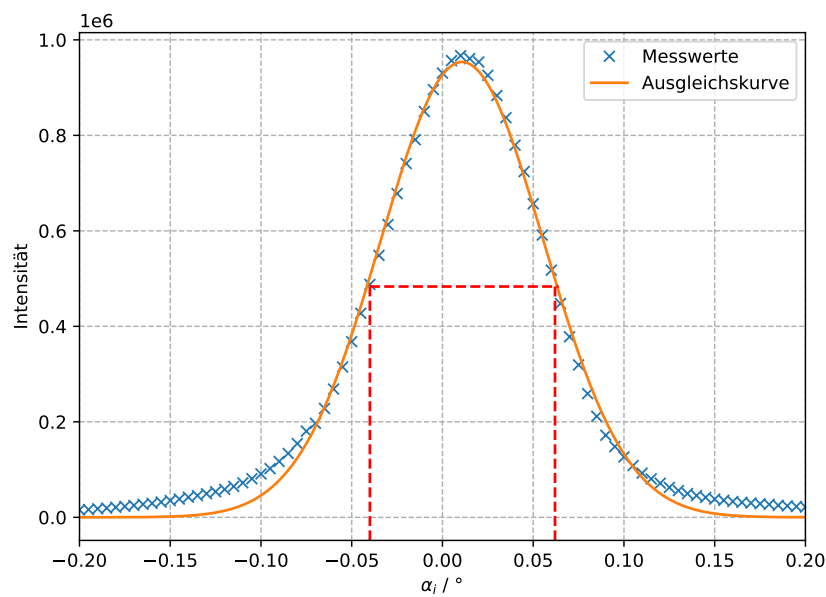


Abbildung 7: Verlauf des Detektorscans. Der Graph hat einen gaußförmigen Verlauf und besitzt eine maximale Intensität von  $I_{\max} = 107447.10 \pm 759.63$ . Die  $\alpha_i$ -Achse bezeichnet den Einfallswinkel unter dem die Röntgenstrahlen auf die Probe treffen.

In diesem Plot ist die Detektorintensität in Abhängigkeit des Einfallswinkels zu sehen. Die Messung wurde über einen Bereich von  $-0,3^\circ$  bis  $0,3^\circ$  durchgeführt. Die Messwerte wurden anschließend an einen Gaußfit mit der Formel

$$I(\alpha) = \frac{a}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\alpha - \alpha_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

angepasst. Die Fitparameter sind

$$\begin{aligned}a &= 107447.10 \pm 759.63 \\ \alpha_0 &= (0,0107 \pm 0,0003)^\circ \\ \sigma &= 0.045 \pm 0.00037.\end{aligned}$$

Anhand des Graphen lässt sich die Halbwertsbreite sowie die maximale Detektorintensität ermitteln. Die Halbwertsbreite beträgt  $\text{FWHM} = 0.102^\circ$  und die maximale Intensität  $I_{\text{max}} = 107447.10 \pm 759.63$ .

## Der Z-Scan

Mit Hilfe des Z-Scans lässt sich die Strahlenbreite der Röntgenröhre näherungsweise bestimmen. Dazu werden die abfallende und ansteigende Flanke des Scans betrachtet. Der Z-Scan ist in Abbildung 8 zu sehen.

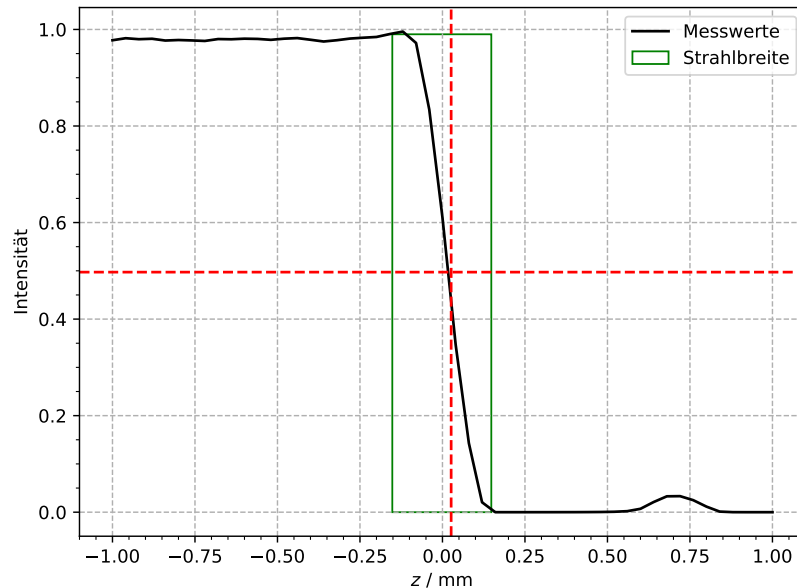


Abbildung 8: Verlauf des Z-Scans. Anhand der z-Achse lässt sich die Position der Probe im Strahlengang der Röntgenröhre identifizieren. Mit fallendem z-Wert wird die Probe immer weiter in der Strahlengang geschoben. Der grüne Kasten markiert die Strahlenbreite. Die Strahlbreite beträgt 0,3 mm.

Die ermittelte Strahlbreite beträgt

$$d = 0,3 \text{ mm.}$$

Aus der Strahlbreite und der Probendicke  $D = 20 \text{ mm}$  lässt sich der Geometriewinkel errechnen zu

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

$$\alpha_g = 0,86^\circ.$$

## Der Rockingscan

Anhand des Rockingscans Abbildung 9 lässt sich der Geometriewinkel durch Ablesen bestimmen. Der Geometriewinkel beträgt

$$\alpha_1 = -0,76^\circ$$

$$\alpha_2 = 0,68^\circ$$

$$\alpha_g = \frac{|\alpha_1| + |\alpha_2|}{2}$$

$$\alpha_g = 0,72^\circ.$$

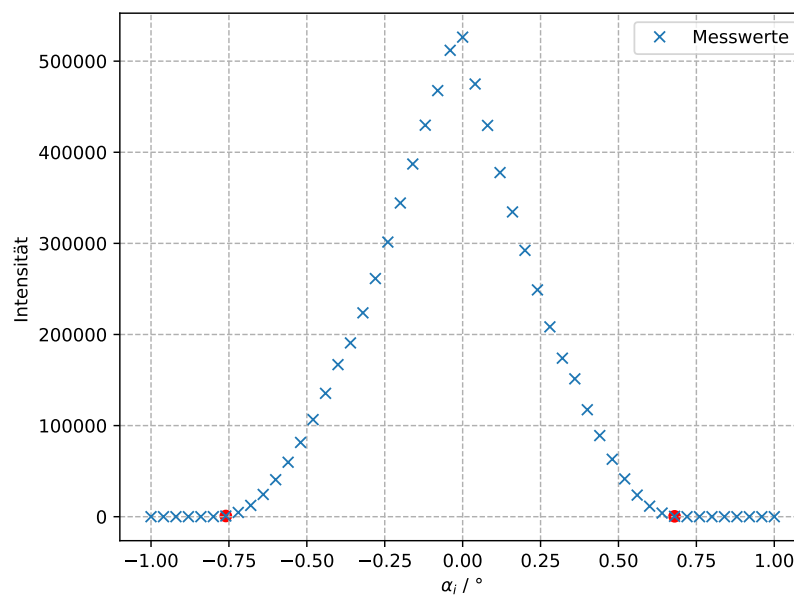


Abbildung 9: Verlauf des Rockingscans. Der Rockingscan liefert durch Ablesen einen Geometriewinkel von  $\alpha_g = 0,72^\circ$ .

## 4.2 Der Reflektivitätsscans und die Dispersionsprofile

In Abbildung 10 ist die Reflektivität in Abhängigkeit des Einfallswinkels dargestellt. Dazu wurde die Reflektivität auf das fünffache der Intensität normiert, da die Messdauer nach den Kalibrationsmessung fünf mal so lang gewesen ist.

Bei der Auswertung der Hauptmessung werden zu Beginn die Messwerte (schwarzer Graph, Abbildung 10) um die Messwerte des diffusen Scans (roter Graph) korrigiert.

Die Messwerte des diffusen Scans werden von den Messwerten abgezogen, um auftretende Rückstreuereffekte zu eliminieren. Der entstandene Graph (orange) in ebenfalls in Abbildung 10 zu sehen.

Anschließend wird mit Hilfe der Gleichung 4 der Geometriefaktor berechnet und der zuvor korrigierte Graph um den Geometriefaktor korrigiert. Die Korrektur um den Geometriefaktor geschieht, da bei geringen Einfallswinkeln nicht die vollständige Intensität auf die Probenoberfläche trifft. Dieser Graph ist in Abbildung 11 hellblau dargestellt. Werden die Kiesig-Oszillationen betrachtet und die Positionen der Minima eingezeichnet, lässt sich mit der Gleichung 2 die Schichtdicke von Polystyrol berechnen. Die ermittelte Schichtdicke ist

$$d_{\text{ps}} = 920,75 \text{ \AA}.$$

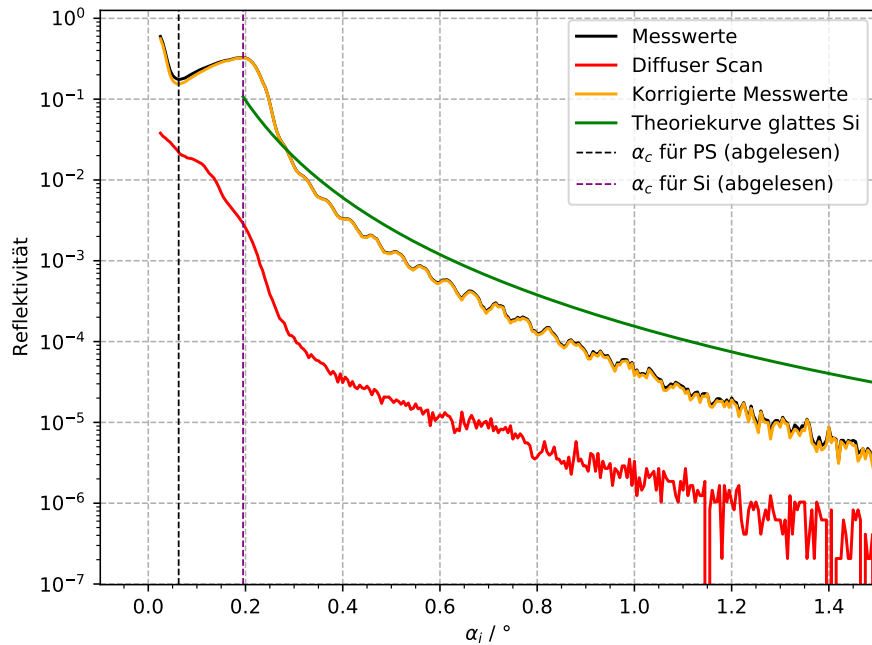


Abbildung 10: Reflektivitätsscan. Der orangene Plot beschreibt die Korrektur der Messwerte (Reflektivitätsscan, schwarz) um den diffusen Scan. Die grün eingezeichnete Kurve im Plot entspricht der Theoriekurve für ideal glattes Silizium. Die kritischen Winkel für Silizium  $\alpha_{\text{krit,si}} = 0,195^\circ$  und Polystyrol  $\alpha_{\text{krit,ps}} = 0,0625^\circ$  können ebenfalls abgelesen werden.

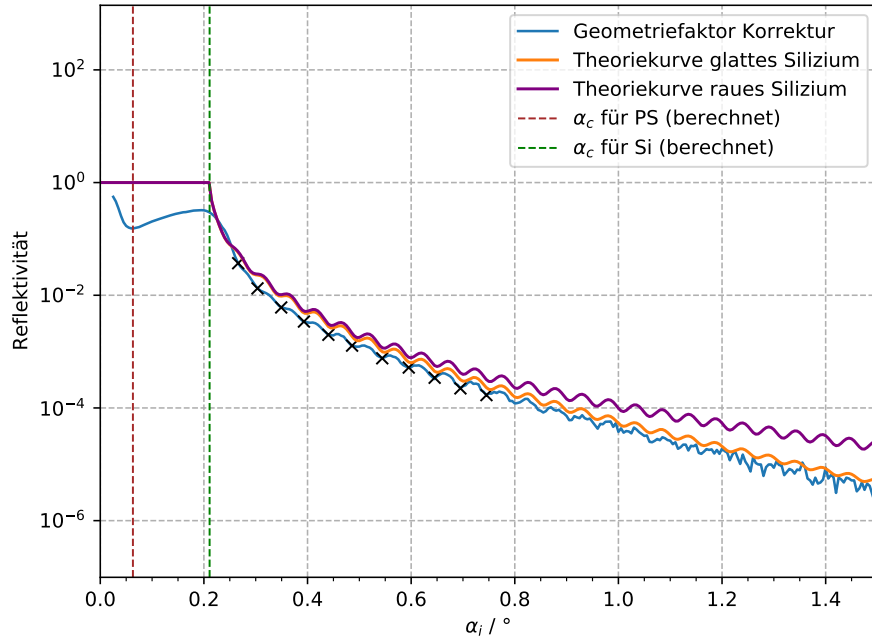


Abbildung 11: Der hellblaue Graph beschreibt die Korrektur um den Geometriefaktor. Die anderen beiden Graphen sind die jeweiligen Theoriekurven für glattes und raues Silizium. Die errechneten kritischen Winkel für Silizium  $\alpha_{\text{krit,si}} = 0,211^\circ$  und Polysterol  $\alpha_{\text{krit,ps}} = 0,063^\circ$  sind als vertikale Linien eingezeichnet.

Mit Hilfe des Parratt-Algorithmus lässt sich ebenfalls die Schichtdicke bestimmen. Dazu werden die unterschiedlichen Parameter (siehe Gleichung 5) in den Parratt-Algorithmus Gleichung 3 eingesetzt.

$$\begin{aligned}
 \lambda &= 855 \text{ \AA} \\
 \delta_{\text{ps}} &= 0,6 \cdot 10^{-6} \\
 \delta_{\text{si}} &= 6,8 \cdot 10^{-6} \\
 n_{\text{luft}} &= 1 \\
 n_{\text{ps}} &= 1 - \delta_{\text{ps}} \\
 n_{\text{si}} &= 1 - \delta_{\text{ps}}
 \end{aligned} \tag{5}$$

Die Parameter werden durch geringe Änderungen variiert bis die entstandene orangene Kurve (siehe Abbildung 11) mit der gemessenen Kurve näherungsweise übereinstimmt. Der Parratt-Algorithmus mit diesen Parametern repräsentiert eine glatte Oberfläche.

Werden die Rauigkeiten  $\sigma_{\text{ps}} = 7,9 \cdot 10^{-10}$  und  $\sigma_{\text{si}} = 5,7 \cdot 10^{-10}$  betrachtet, ergibt sich der lilafarbene Plot in Abbildung 11.

Mit Hilfe der unterschiedlichen Dispersionen von Polystyrol und Silizium lassen sich die kritischen Winkel ausrechnen, dazu wird Gleichung 1 verwendet. Die kritischen Winkel sind

$$\alpha_{\text{c,ps}} = 0,063^\circ$$

$$\alpha_{\text{c,si}} = 0,211^\circ.$$

Diese Winkel sind ebenfalls in Abbildung 11 eingezeichnet.



## 5 Diskussion

Der durch die Probendicke und die Strahlbreite ermittelte Geometriewinkel  $\alpha_g = 0,85^\circ$  weicht um 15% von dem Geometriewinkel, der am Graphen des Rockingscans mit  $\alpha_g = 0,72^\circ$  abgelesen wurde, ab. Diese Abweichung ist damit zu erklären, dass die Strahlbreite anhand des Z-Scans bestimmt worden ist und die Strahlbreite ebenfalls durch Ablesen am Graphen fehlerbehaftet ist.

Werden der Graph der Messwerte und die der beiden mit dem Parratt-Algorithmus erstellten Graphen miteinander verglichen, so lässt sich erkennen, dass diese gut übereinstimmen. Die Schichtdicken betragen

$$\begin{aligned} d_{\text{ps}} &= 855 \text{ \AA} \\ d_{\text{parratt}} &= 920,25 \text{ \AA}. \end{aligned}$$

Aus den Schichtdicken ergibt sich eine Abweichung von 7,14%.

Die ermittelten Dispersionen und die Literaturwerte[1] sind

$$\begin{aligned} \delta_{\text{ps}} &= 0,6 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{si}} &= 6,8 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{ps,lit}} &= 3,5 \cdot 10^{-6} \\ \delta_{\text{si,lit}} &= 7,6 \cdot 10^{-6}. \end{aligned} \tag{6}$$

Es fällt auf, dass die Dispersion von Polystyrol deutlich mehr vom Literaturwert abweicht als die von Silizium. Die Abweichungen betragen bei Polystyrol 82,86% und bei Silizium 10,53%. Die geringe gemessene Dispersion von Polystyrol ist darauf zurückzuführen, dass die Kiessig-Oszillationen eine sehr geringe Amplitude gezeigt haben.

Die anhand des Parratt-Algorithmus ermittelten kritischen Winkel und die Literaturwerte[1] sind

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{c,ps}} &= 0,063^\circ \\ \alpha_{\text{c,ps,lit}} &= 0,153^\circ \\ \alpha_{\text{c,si}} &= 0,211^\circ \\ \alpha_{\text{c,si,lit}} &= 0,210^\circ. \end{aligned}$$

Es fällt auf, dass der kritische Winkel von Silizium sehr gut zu dem Literaturwert passt. Bei dem Winkel von Polystyrol ist allerdings eine große Abweichung zu erkennen. Diese ist darauf zurückzuführen, dass sich der kritische Winkel aus der zuvor bestimmten Dispersion errechnet und diese ebenfalls stark abweicht.

## 6 Programmcode Parratt-Algorithmus

```

1      #Versuchsgrößen
2      l = 1.54e-10 # Wellenlänge
3      ai = np.arange(0, 2.5+0.005, 0.005)
4      k = 2*np.pi / l #Wellenvektor
5      qz = 2*k * np.sin(ai) #Wellenvektorübertrag -> y-Werte der Theoriekurve (
6
7      #Parameter des Parratt-Algorithmus
8
9      #Dispersionen # die werte orientieren sich an den theoriwerten
10
11     #d1 = 0.7e-6 #Polysterol Disperion
12     #d2 = 6.7e-6 #Silizium
13     d1 = 0.6e-6 #Polysterol Disperion
14     d2 = 6.8e-6 #Silizium
15
16     #Brechungsindizes
17     n1 = 1 #Luft
18     n2 = 1 - d1 #Polysterol
19     n3 = 1 - d2 #Silizium
20
21     #Rauigkeit
22     s1 = 7.9e-10 #Polysterol
23     s2 = 5.7e-10 #Silizium
24     z = 855e-10
25     #####
26     # Parratt
27
28     def parratt(z):
29         kz1 = k * np.sqrt(n1**2 - np.cos((np.pi/180) * ai, dtype=np.complex)**2)
30         kz2 = k * np.sqrt(n2**2 - np.cos((np.pi/180) * ai, dtype=np.complex)**2)
31         kz3 = k * np.sqrt(n3**2 - np.cos((np.pi/180) * ai, dtype=np.complex)**2)
32         #
33         r12 = (kz1 - kz2) / (kz1 + kz2) * np.exp(-2 * kz1 * kz2 * s1**2)
34         r23 = (kz2 - kz3) / (kz2 + kz3) * np.exp(-2 * kz2 * kz3 * s2**2)
35         #
36         x2 = np.exp(0 - (kz2 * z) * 2j) * r23
37         x1 = (r12 + x2) / (1 + r12 * x2)
38         par = np.abs(x1)**2
39
40     return par
41

```

```

42 plt.plot(ai, parratt(z), '-', label='Theoriekurve_glatte_Silizium')# Parratt
43 #####
44
45 def parratt2(z):
46     kz1 = k * np.sqrt(n1**2 - np.cos((np.pi/180) * ai, dtype=np.complex)**2)
47     kz2 = k * np.sqrt(n2**2 - np.cos((np.pi/180) * ai, dtype=np.complex)**2)
48     kz3 = k * np.sqrt(n3**2 - np.cos((np.pi/180) * ai, dtype=np.complex)**2)
49     #
50     r12 = (kz1 - kz2) / (kz1 + kz2)
51     r23 = (kz2 - kz3) / (kz2 + kz3)
52     r13 = ((kz1 - kz3) / (kz1 + kz3))**2
53     #
54     x2 = np.exp(0 - (kz2 * z) * 2j) * r23
55     x1 = (r12 + x2) / (1 + r12 * x2)
56     par = np.abs(x1)**2
57
58     return par
59
60 plt.plot(ai, parratt2(z), '-', color='purple', label='Theoriekurve_raue_Sili
61 #####
62
63 # Theoriewerte Literatur
64 alpha_crit_ps_theo= 0.063 # Polystyrol
65 plt.axvline(x = alpha_crit_ps_theo, linewidth = 1, linestyle='—', color =
66 print('Der Literaturwert für den kritischen Winkel von Polystyrol beträgt
67
68 #alpha_crit_si_theo= 0.223 # Silizium
69 alpha_crit_si_theo= 0.211 # Silizium
70 plt.axvline(x = alpha_crit_si_theo, linewidth = 1, linestyle='—', color =
71 print('Der Literaturwert für den kritischen Winkel von Silizium beträgt',
72
73 plt.legend(loc="best")
74
75 # kritischer Winkel Rechnung
76 alpha_crit_si_rech = np.degrees(np.arccos(1-d2))
77 alpha_crit_ps_rech = np.degrees(np.arccos(1-d1))
78 print('Der errechnete kritische Winkel von Polystyrol anhand des Parratt
79 print('Der errechnete kritische Winkel von Silizium anhand des Parratt Al
80
81 #####
82 #plt.show() # für die maxima werte zum eintragen
83 plt.savefig("build/parratt_und_geo.pdf")
84 #####

```

## Literatur

- [1] TU Dortmund. *Alte Versuchsanleitung. V44 Röntgenreflektometrie*. URL: [https://www.el.physik.tu-dortmund.de/cms/Medienpool/Downloads/Roentgenreflektometrie\\_Versuch.pdf](https://www.el.physik.tu-dortmund.de/cms/Medienpool/Downloads/Roentgenreflektometrie_Versuch.pdf).
- [2] TU Dortmund. *Versuchsanleitung. V44 Röntgenreflektometrie*. 2021.
- [3] Heinz Kiessig. „Interferenz von Röntgenstrahlen an dünnen Schichten“. In: (1931).
- [4] Metin Tolan. *X-Ray Scattering from Soft Matter Thin Films, Reflectivity of X-Rays from Surfaces - Multiple Interfaces*. Springer-Verlag, 1999.