

# VIII. Röntgen-Reflektometrie (XSR)

---

**Motivation:** Analyse von dünnen und ultradünnen Schichten

- Schichtdicken
- Rauigkeit (Oberfläche, Grenzflächen)
- Vertikaler Dichteverlauf
- Dichtefluktuationen (diffuse Streuung)

X-Ray Specular Reflection

**Vorteile** gegenüber hochauflösender Beugung:

- Schichten können sein: einkristallin, polykristallin, amorph, flüssig, soft matter, ..
- “Kontraststärke” hängt nicht von der Schichtdicke ab → auch sehr dünne Schichten können untersucht werden
- Interpretation ist in der Regel einfacher, da nicht empfindlich auf Gitterverzerrungen

**Nachteile** gegenüber hochauflösender Beugung:

- Wegen der kleinen Einfallswinkel muss Probe
  - relativ groß sein ( $> 10 \times 10 \text{ mm}^2$ )
  - glatte Oberfläche besitzen
- zu kleine Dichteunterschiede erzeugen oft zu kleinen Kontrast
- während Strain den Kontrast in der hochauflösenden Röntgenbeugung erhöht

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung

Wiederholung dynamische Theorie

$$\Delta \bar{\mathbf{D}} + \text{rot rot}(\chi \bar{\mathbf{D}}) + \frac{\omega^2}{c^2} \bar{\mathbf{D}} = 0 \quad \Delta \bar{\mathbf{E}} + \frac{\omega^2}{c^2} \text{grad} \cdot \text{div} \bar{\mathbf{E}} + \frac{\omega^2}{c^2} (1 + \chi) \bar{\mathbf{E}} = 0 \quad (8.1)$$

Wellengleichungen für die Felder **D** und **E**

Wird die Bragg-Bedingung (z.B. für einen Kristall) nicht erfüllt

- gibt es **nur die transmittierte Welle** im Medium (**Einstrahlfall**)
- spielt die **atomare Struktur keine Rolle**
- kann die Ortsabhängigkeit (auf atomarer Skala!) der dielektrischen Suszeptibilität  $\chi$  vernachlässigt werden

$$\chi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} \chi_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}} = \sum_{\vec{g}} (\chi_{\vec{g}}^r + i\chi_{\vec{g}}^i) e^{i\vec{g}\vec{r}} \approx \chi_0 = \langle \chi(\vec{r}) \rangle \quad (8.2)$$

$$\begin{aligned} \text{Einsetzen in (8.1)} \quad \Rightarrow \quad \Delta \bar{\mathbf{d}} + \text{rot rot}(\chi \bar{\mathbf{d}}) + \frac{\omega^2}{c^2} \bar{\mathbf{d}} &= \Delta \bar{\mathbf{d}} + \chi_0 \text{rot rot} \bar{\mathbf{d}} + \frac{\omega^2}{c^2} \bar{\mathbf{d}} = \\ &= \Delta \bar{\mathbf{d}} + \chi_0 (\underbrace{\text{grad}(\text{div} \bar{\mathbf{d}})}_0) - \Delta \bar{\mathbf{d}} + \frac{\omega^2}{c^2} \bar{\mathbf{d}} = \Delta \bar{\mathbf{d}} (1 - \chi_0) + \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}}_{\kappa^2} \bar{\mathbf{d}} = 0 \end{aligned}$$

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung

$$\begin{aligned}\Delta \vec{d} + \text{rot rot}(\chi \vec{d}) + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{d} &= \Delta \vec{d} + \chi_0 \text{rot rot} \vec{d} + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{d} = \\ &= \Delta \vec{d} + \chi_0 (\underbrace{\text{grad}(\text{div} \vec{d})}_0 - \Delta \vec{d}) + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{d} = \Delta \vec{d}(1 - \chi_0) + \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}}_{K^2} \vec{d} = 0\end{aligned}$$

Wir nähern  $1 - \chi_0 \approx \frac{1}{1 + \chi_0}$  und schreiben  $k_0^2 = K^2(1 + \chi_0) = n^2 K^2$  Wellenvektor  
 $n = \sqrt{1 + \chi_0} \approx 1 + \chi_0/2$  Brechungsindex

und erhalten:

$$\Delta \vec{d} + k_0^2 \vec{d} = 0$$

$$\Delta \vec{e} + k_0^2 \vec{e} = 0 \quad (8.3)$$



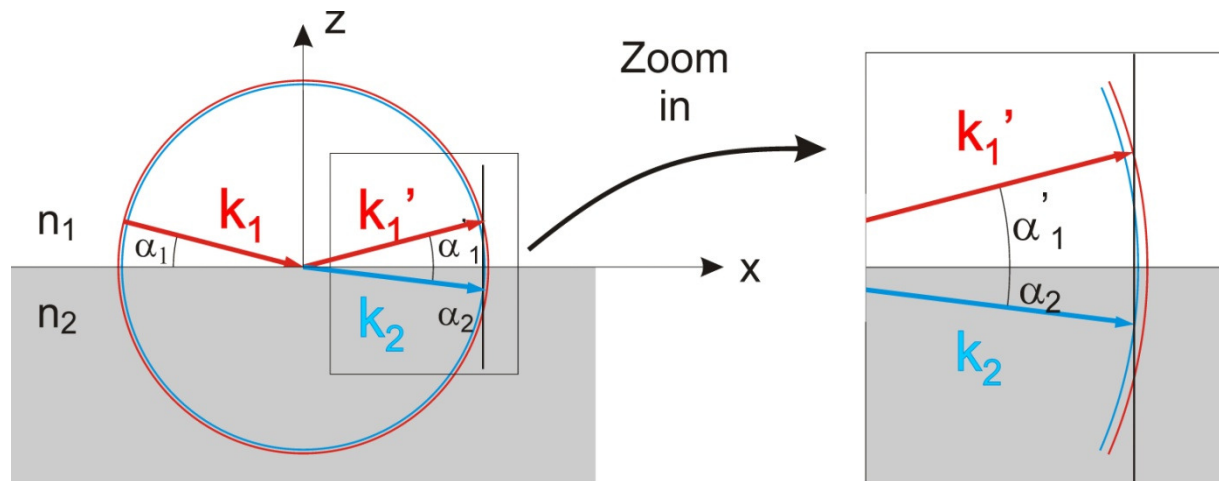
Helmholtz-Gleichung

Nach Hermann von Helmholtz, 1821-1894, Physiker und Physiologe  
(Universalgelehrter, *Reichskanzler der Physik*)

1848

Röntgen-Reflektometrie

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung



**Ansatz:**

$$\bar{E}(\bar{r}) = \bar{E}_1 \exp[i(\bar{k}_1 \cdot \bar{r})]$$

$$\bar{E}_r(\bar{r}) = \bar{E}_1' \exp[i(\bar{k}_1' \cdot \bar{r})]$$

$$\bar{E}_t(\bar{r}) = \bar{E}_2 \exp[i(\bar{k}_2 \cdot \bar{r})]$$

Einfallender Strahl

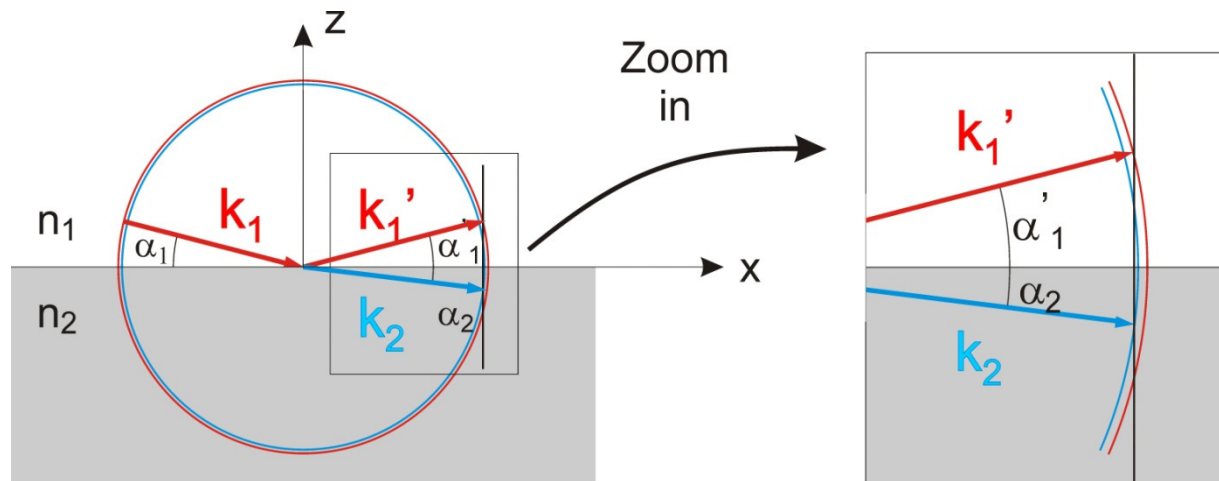
Reflektierter Strahl

Transmittierter Strahl

(8.4)

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung

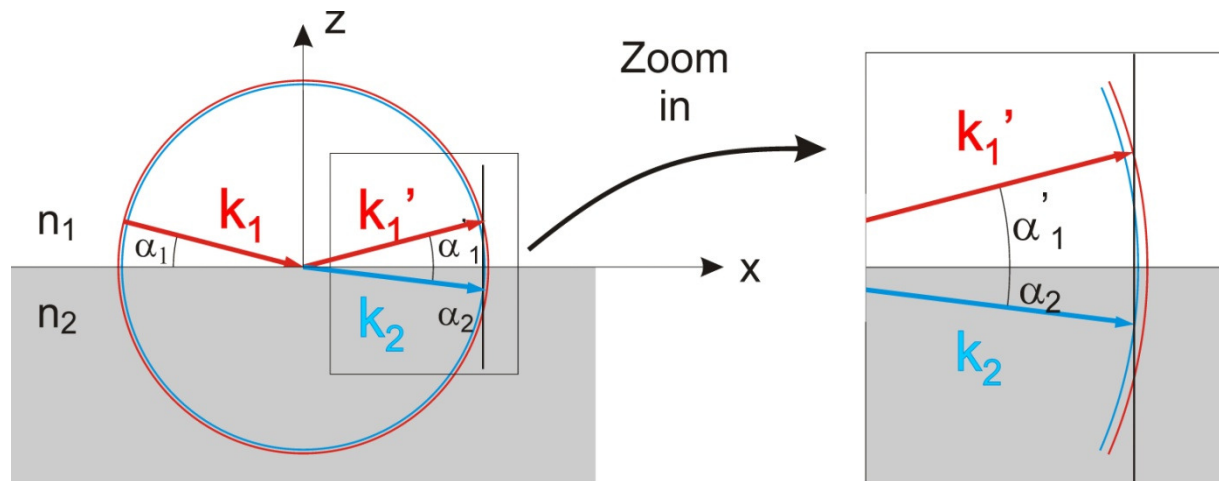
---



**Welche Stetigkeitsrelationen helfen bei der Lösung der Wellengleichung?**

- Tangentialkomponenten der Wellenvektoren ( $k_1$ ,  $k_1'$ ,  $k_2$ ) sind stetig beim Übergang in ein Medium
- Tangentialkomponenten von  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  sind stetig beim Übergang in ein Medium

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung



Tangentialkomponenten der Wellenvektoren sind stetig beim Übergang in ein Medium

$$(\vec{k}_1 \cdot \vec{r})_{z=0} = (\vec{k}_1' \cdot \vec{r})_{z=0} = (\vec{k}_2 \cdot \vec{r})_{z=0} \quad (8.5)$$

$$k_1 \cos \alpha_1 = k_1' \cos \alpha_1' = k_2 \cos \alpha_2 \quad (8.6)$$

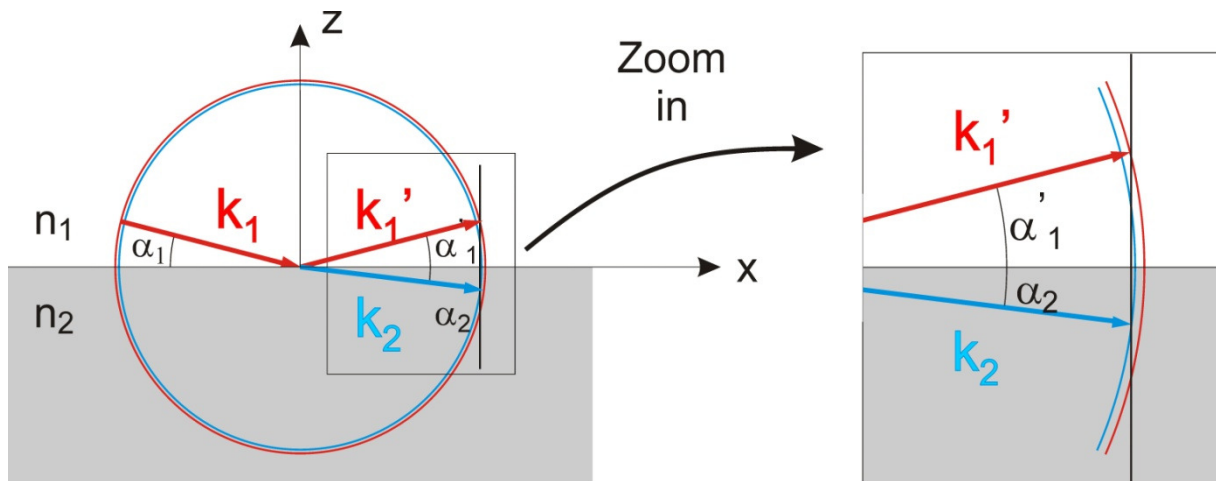
da  $k_1 = k_1'$   $\Rightarrow$   $\alpha_1 = \alpha_1'$

Spiegelgesetz

$$\frac{\cos \alpha_1}{\cos \alpha_2} = \frac{k_2}{k_1} = \frac{n_2}{n_1} \quad (8.7)$$

Brechungsgesetz

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung



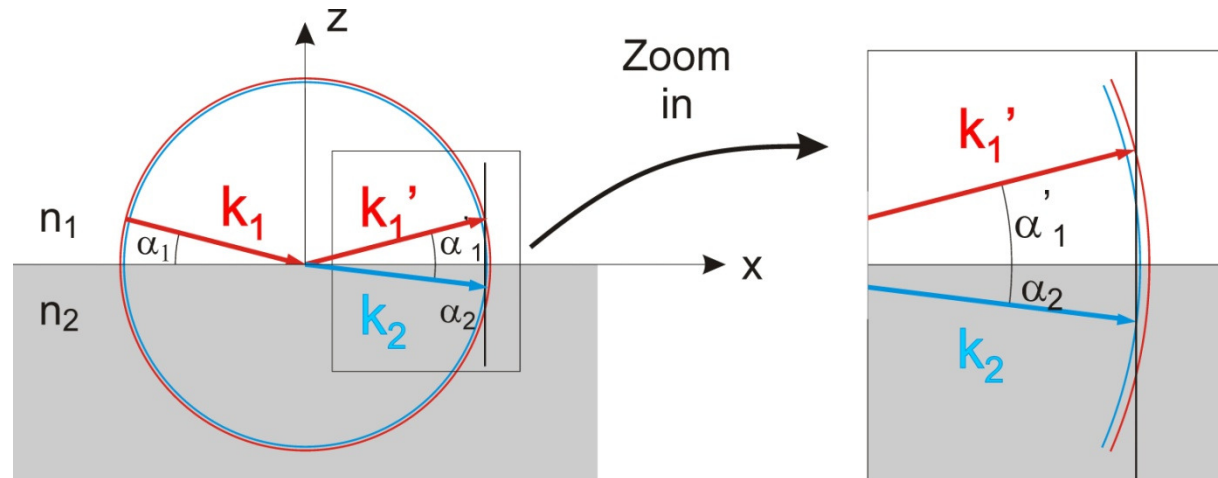
Tangentialkomponenten von **E** und **H** sind stetig beim Übergang in ein Medium

$$\begin{aligned}
 & (\vec{E}_1 + \vec{E}_1') \times \hat{z} = \vec{E}_2 \times \hat{z} \\
 \rightarrow & n_1 [\vec{k}_1 \times \vec{E}_1 + \vec{k}_1' \times \vec{E}_1'] \times \hat{z} = n_2 [\vec{k}_2 \times \vec{E}_2] \times \hat{z}
 \end{aligned} \tag{8.8}$$

s-Polarisation

$$\begin{aligned}
 & E_1 + E_1' = E_2 \\
 & (E_1 - E_1') n_1 \sin \alpha_1 = E_2 n_2 \sin \alpha_2
 \end{aligned} \tag{8.9}$$

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung



Reflexionskoeffizient

$$r(\alpha_1) := \frac{E_1'}{E_1} = \frac{n_1 \sin \alpha_1 - n_2 \sin \alpha_2}{n_1 \sin \alpha_1 + n_2 \sin \alpha_2} = \frac{\sin(\alpha_1 - \alpha_2)}{\sin(\alpha_1 + \alpha_2)} \quad (8.10)$$

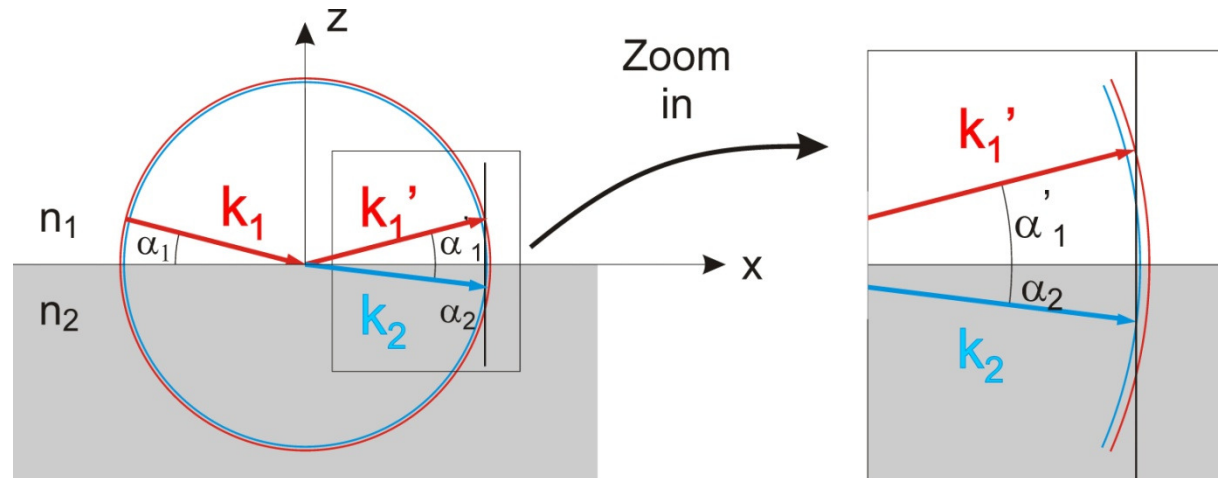
Transmissionskoeffizient

$$t(\alpha_1) := \frac{E_2}{E_1} = \frac{2n_1 \sin \alpha_1}{n_1 \sin \alpha_1 + n_2 \sin \alpha_2} = \frac{2n_1 \sin \alpha_1 \cos \alpha_2}{\sin(\alpha_1 + \alpha_2)}$$

Fresnel'sche Gleichungen für s-Polarisation



# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung

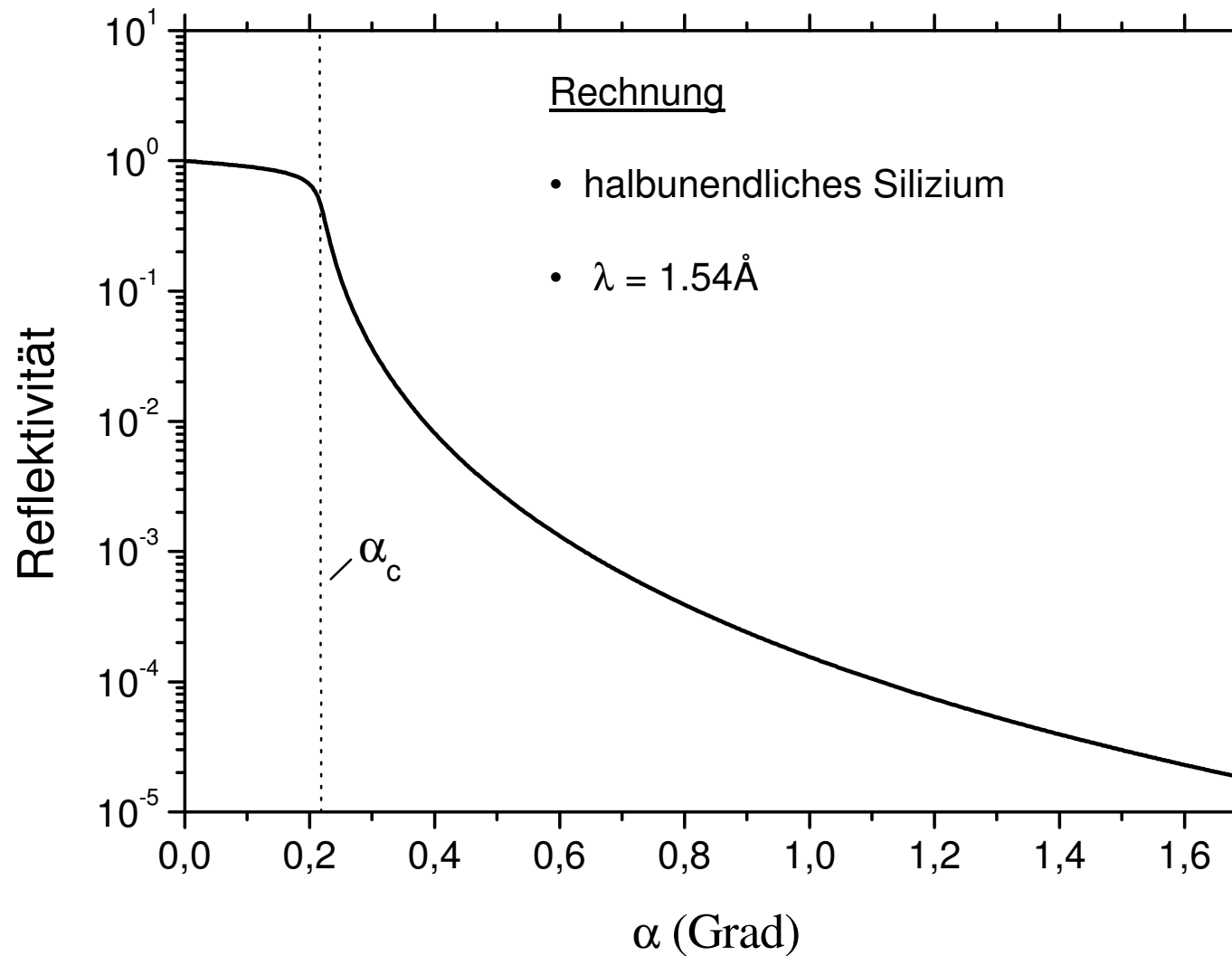


Für **Intensitäten**:

$$R_F := \left| \frac{E_1'}{E_1} \right|^2 \quad T_F := \left| \frac{E_2}{E_1} \right|^2 \quad (8.11)$$

**Übungsaufgabe:** Leiten Sie die Fresnel'schen Gleichungen für p-Polarisation her und zeigen Sie, dass im Falle von kleinen Einfallswinkeln nicht mehr zwischen s- und p-Polarisation unterschieden werden muss.

# Grundlagen der Reflektometrie: Lösung der Wellengleichung



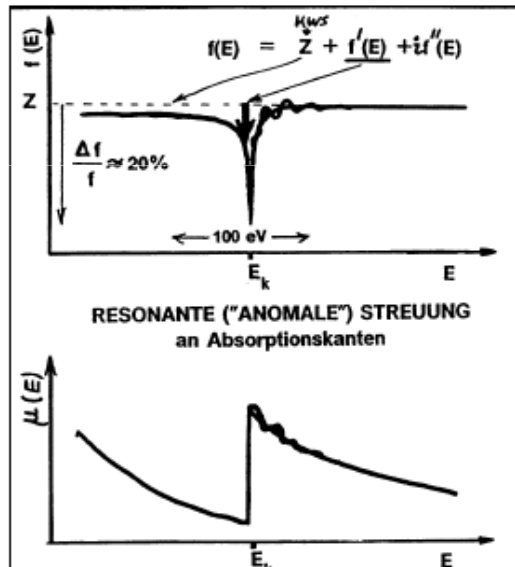
# Brechung und Absorption

Harmonische Oszillatoren:

$$\chi(\omega) = \frac{\rho_e e^2}{\epsilon_0 m} \sum_j \frac{g_j}{\omega_j^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_j} \quad (8.12)$$

Chemisches Element:

$$\chi(\vec{r}, \omega) = -\frac{r_0 N_A}{\pi A} \rho_m(\vec{r}) \lambda^2 [f_0 + f'(\omega) + i(f''(\omega))] \quad (8.13)$$



$$r_0 = e^2 / (4\pi\epsilon_0 mc^2) = 2.818 \times 10^{-5} \text{ \AA} \quad (\text{klass. Elektronenradius})$$

$N_A$ : Avogadrozahl

$A$ : molare Atommasse

$\rho_m(\vec{r})$ : Massendichte

$f_0$  Atomformfaktor  $f_0 = f_0(\vec{q}) = \int \rho_A(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} dV$

$f'(\omega), f''(\omega)$ : Hönl-Korrekturen

Absorption

$$\begin{aligned} f'(\omega) &= \frac{2}{\pi} \cdot P \int_0^\infty \frac{\omega' f''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \\ f''(\omega) &= \frac{2\omega}{\pi} \cdot P \int_0^\infty \frac{f'(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \end{aligned} \quad (8.14)$$

Kramers-Kronig-Relationen

$$\begin{aligned} f''(E) &= (mc/4\pi e^2 h) E \mu(E) \\ f'(E) &= 2/\pi \int E' f''(E') / (E'^2 - E^2) dE' \end{aligned}$$

# Brechung und Absorption

---

Abseits der Absorptionskante:  $f'(\omega) = 0$

Streuung in Vorwärtsrichtung:  $f_0(\omega) = Z$

Chemisches Element

$$\operatorname{Re}(\chi(\omega)) = -\frac{r_0}{\pi} \rho_e(\vec{r}) \lambda^2 = -\frac{r_0 N_A Z}{\pi A} \rho_m(\vec{r}) \lambda^2 \quad (8.15)$$

$$\operatorname{Im}(\chi(\omega)) = \frac{r_0}{\pi Z} \rho_e(\vec{r}) \lambda^2 f'' = \frac{\mu \lambda}{2\pi} \quad (8.16)$$

$$n = \sqrt{1 + \chi} \approx 1 + \chi/2 \quad \text{Brechungsindex}$$

$$\operatorname{Re}(\chi) < 0 \quad \Downarrow$$

$$n = 1 - \delta + i\beta \quad (8.17)$$

# Brechung und Absorption

---

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

$$\delta = \frac{r_0}{2\pi} \rho_e(\vec{r}) \lambda^2 = \frac{r_0 N_A Z}{2\pi A} \rho_m(\vec{r}) \lambda^2 \quad (8.18)$$

$$\beta = \frac{r_0}{2\pi} \frac{\rho_e(\vec{r})}{Z} \lambda^2 f'' \quad (8.19)$$

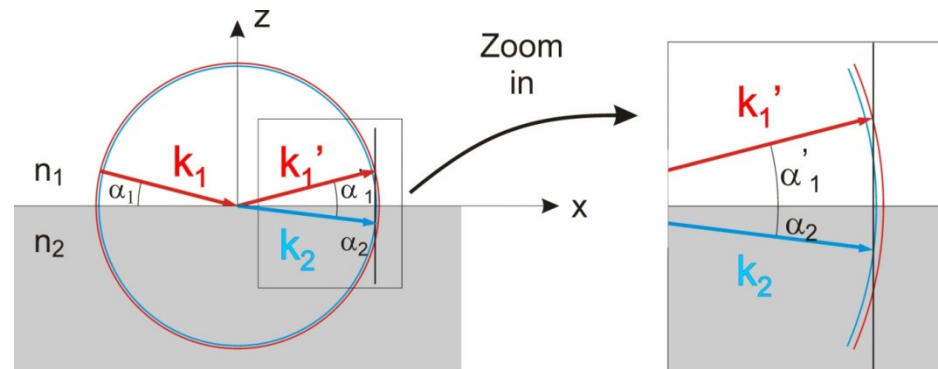
- $n$  ist **komplexe** Größe,
- Realteil beschreibt **Brechung**,
- Imaginärteil beschreibt **Absorption**.
- $\text{Re}(n) < 1$
- $Z/A \approx \text{const} \rightarrow \delta$  hängt im wesentlichen ab von  $\rho_m$  und  $\lambda$
- Reflektometrie ist empfindlich auf **(Massen-)Dichteänderungen**

Größenordnungen:  $\rho_e \approx 1 \text{ Elektron}/\text{\AA}^3$ ,  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$  (Cu  $K\alpha_1$ ),  $r_0 = 2.818 \times 10^{-5} \text{ \AA}$



$$\delta \approx 10^{-5} \quad \beta = 10^{-7} \dots 10^{-6}$$

# Streifender Einfall



Normalkomponenten der Wellenvektoren:

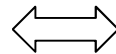
Außenraum

$$K_{ez} = K_{0z}^{(t)} = -K_{0z}^{(r)} = K \sin \alpha$$

$\alpha$ : Einfallswinkel

Innenraum

$$k_{2,z} = \sqrt{K^2(1+\chi) - K_{ex}^2} = K\sqrt{\sin^2 \alpha + \chi} \stackrel{!}{=} 0$$



$$\alpha_c \approx \sqrt{-\text{Re}(\chi_0)} = \sqrt{2\delta} = \lambda \sqrt{\frac{r_0}{\pi}} \rho_e$$

Kritischer Winkel der Totalreflexion

Material	Z	$\delta [10^{-5}]$	$\beta [10^{-7}]$	$\beta / \delta$	$\rho_m [\text{g/cm}^3]$	$\rho_e [\text{e}/\text{\AA}^3]$	$\alpha_c$
<b>Si</b>	14	0,756	1,748	0,023	2,33	0,699	0,22°
<b>C</b>	6	0,732	0,158	0,0021	2,26	0,680	0,22°
<b>Ge</b>	32	1,444	4,200	0,029	5,32	1,412	0,31°
<b>Au</b>	79	4,646	41,601	0,090	19,32	4,666	0,55°

Cu K $\alpha$  ( $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$ )

# Totalreflexion: Evaneszente Welle

---

Snellius'sches Brechungsgesetz für kleine Winkel:

$$\alpha_2 = \begin{cases} i\sqrt{\alpha_c^2 - \alpha_1^2} & \alpha_1 < \alpha_c \\ \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2} & \alpha_1 \geq \alpha_c \end{cases} \quad (8.20)$$

⇒ Einfallswinkel  $\alpha_1$  **unterhalb des kritischen Winkels** führen zu einem **rein imaginären**  $\alpha_2$

Was bedeutet das?

# Totalreflexion: Evaneszente Welle

Wir nähern für kleine Winkel:

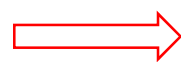
$$\mathbf{k}_2 \approx k (1, 0, \alpha_2) \quad (8.21)$$

dann folgt für die analytische Fortsetzung des elektrischen Feldes für Winkel unterhalb des kritischen Winkels:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_2 \exp[i \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}] = \\ &= \mathbf{E}_2 \exp[i(kx - \omega t)] \exp(-ik\alpha_2 z) = \\ &= \mathbf{E}_2 \exp[i(kx - \omega t)] \exp\left(-\frac{z}{\Lambda}\right) \end{aligned} \quad \begin{aligned} \Lambda &= \frac{1}{\sqrt{\alpha_c^2 - \alpha_1^2} k} \\ (8.22) \end{aligned}$$

Wellenausbreitung entlang  
der Grenzfläche

Exponentielle Dämpfung in  
das Medium hinein



Evaneszente Welle



# Totalreflexion: Evaneszente Welle

---

- Wir haben bisher Absorption vernachlässigt.
- Sie lässt sich mathematisch elegant durch einen **komplexen** Winkel  $\alpha_2$  einführen
- Verwende Snellius'sches Brechungsgesetz und  $n = 1 - \delta + i\beta$

$$\alpha_2 = \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta} = p_2 + iq_2 \quad (8.23)$$

$$\begin{aligned} p_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{(\alpha_1^2 - \alpha_c^2)^2 + 4\beta^2} + \alpha_1^2 - \alpha_c^2 \right]^{1/2} \\ q_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{(\alpha_1^2 - \alpha_c^2)^2 + 4\beta^2} - \alpha_1^2 + \alpha_c^2 \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (8.24)$$

**Eindringtiefe**

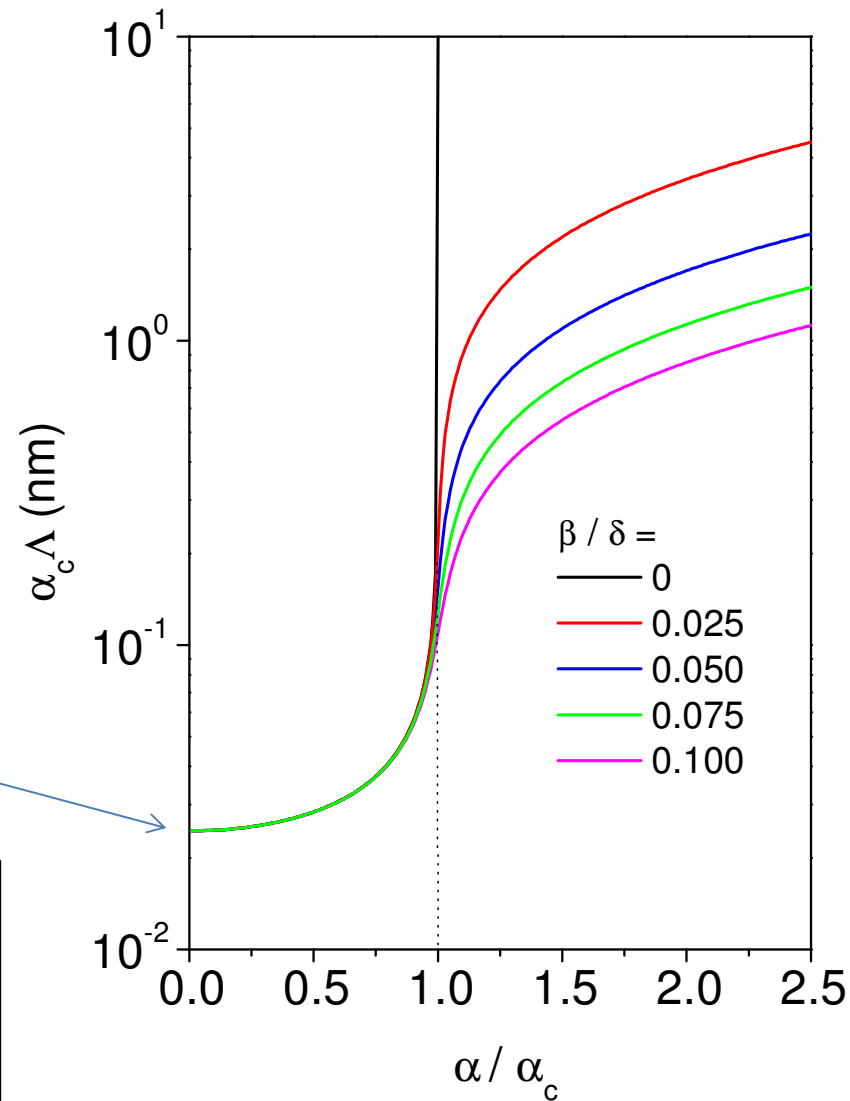
$$\Lambda = \frac{1}{kq_2} = \frac{\lambda}{2\pi \cdot q_2} \quad (8.25)$$

# Totalreflexion: Evaneszente Welle

Wenige  
Nanometer

Si:  $\Lambda = 4.5 \text{ nm}$   
Ge:  $\Lambda = 6.4 \text{ nm}$

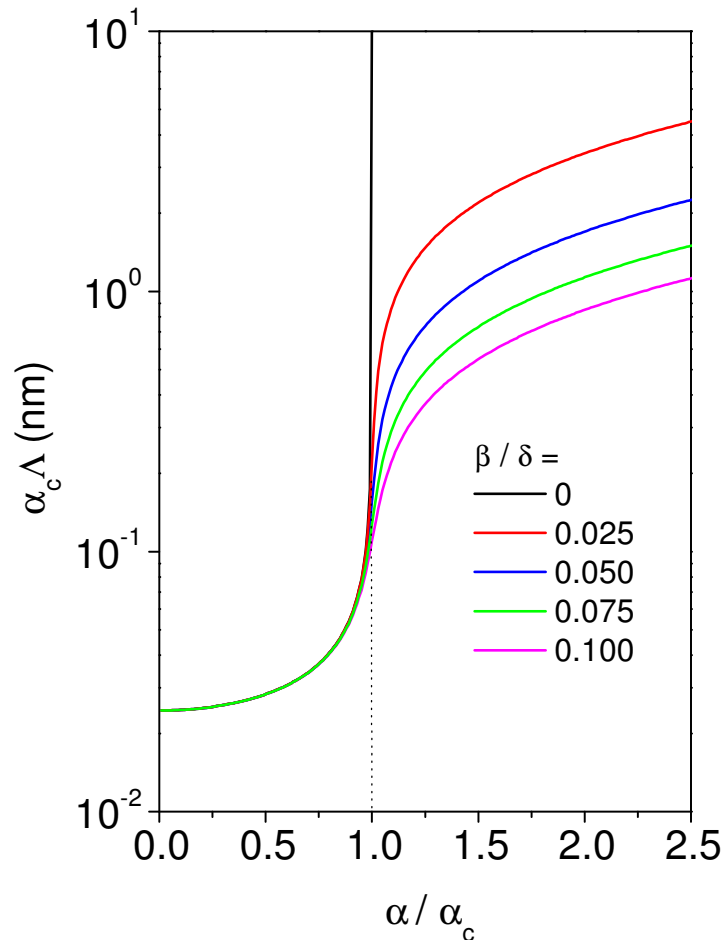
( $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ )



Eindringtiefe

$$\Lambda = \frac{\lambda}{2\pi \cdot q_2}$$

# Totalreflexion: Evaneszente Welle



## Merke:

- Unterhalb des kritischen Winkels ist die Eindringtiefe praktisch unabhängig von  $\beta$  und hängt nur von  $\delta$  ab. Typische Werte bei etwa 10 keV sind wenige 10 Å. Oberhalb des kritischen Winkels hängt die Eindringtiefe von dem Verhältnis  $\beta/\delta$  sowie vom Einfallswinkel  $\alpha$  ab.
- Im Bereich der Totalreflexion werden alle Röntgentechniken **oberflächenempfindlich**; die Tiefe, aus der noch Beiträge zum Signal kommen, lässt sich durch den Einfallswinkel  $\alpha$  einstellen.

# Fresnel'sche Reflektivität und Transmittivität

aus (8.10)

$$\begin{aligned} r(\alpha_1) &:= \frac{E_1'}{E_1} = \frac{n_1 \sin \alpha_1 - n_2 \sin \alpha_2}{n_1 \sin \alpha_1 + n_2 \sin \alpha_2} = \frac{\sin(\alpha_1 - \alpha_2)}{\sin(\alpha_1 + \alpha_2)} \\ t(\alpha_1) &:= \frac{E_2}{E_1} = \frac{2n_1 \sin \alpha_1}{n_1 \sin \alpha_1 + n_2 \sin \alpha_2} = \frac{2n_1 \sin \alpha_1 \cos \alpha_2}{\sin(\alpha_1 + \alpha_2)} \end{aligned}$$

s-Polarisation

Wir nähern für kleine Winkel:  $\sin(x) \approx x$ ;  $\cos(x) \approx 1 - \frac{1}{2}x^2$ ;  $n \approx 1$

$$\begin{aligned} r(\alpha_1) &= \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = \frac{\alpha_1 - \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}}{\alpha_1 + \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}} \\ t(\alpha_1) &= \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}} \end{aligned} \quad (8.26)$$

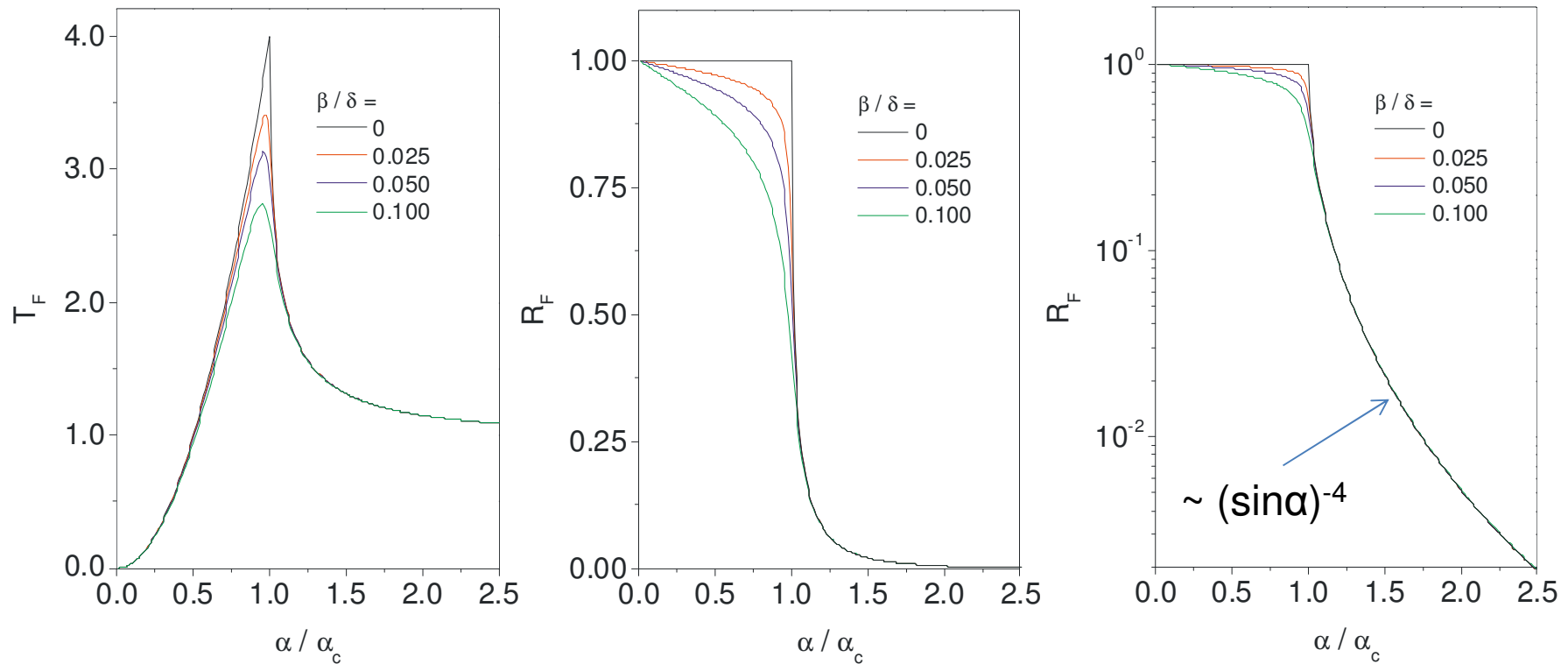
# Fresnel'sche Reflektivität und Transmittivität

$$t(\alpha_1) = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}}$$

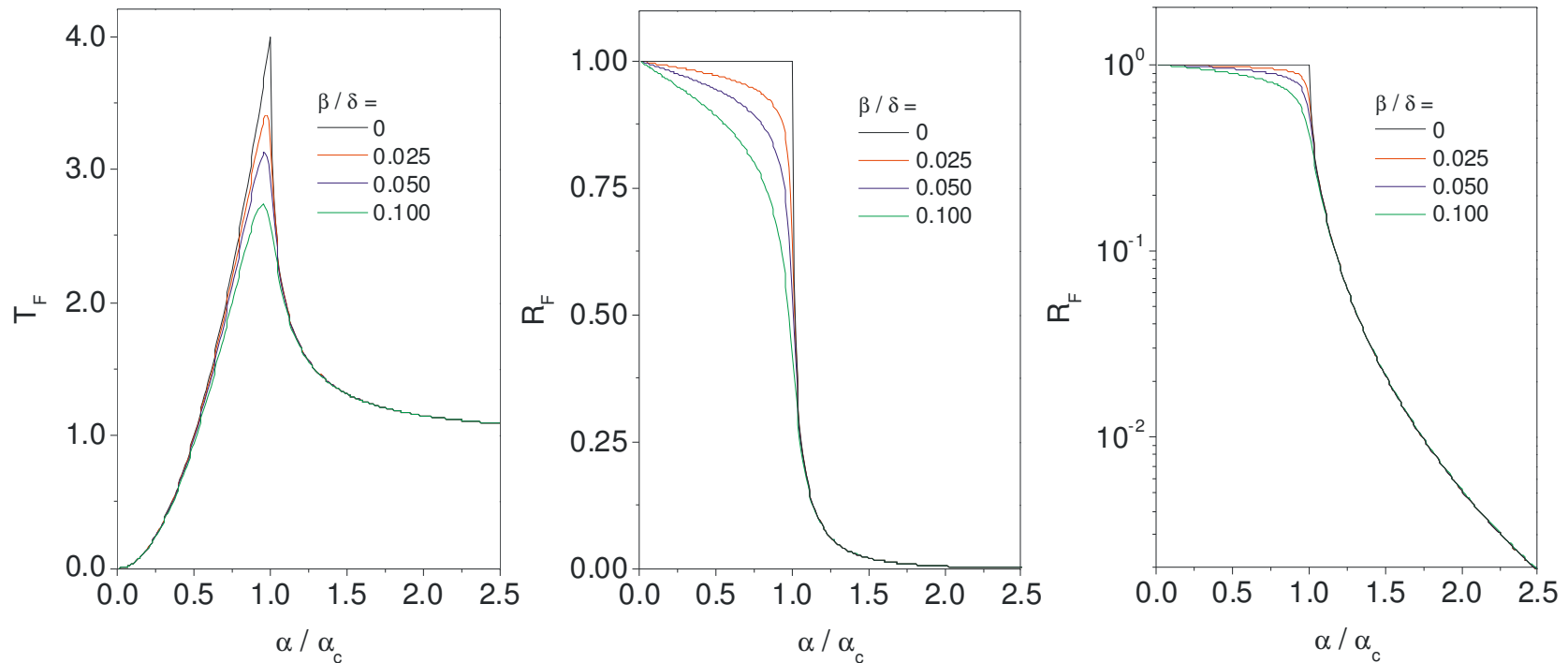
$$r(\alpha_1) = \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = \frac{\alpha_1 - \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}}{\alpha_1 + \sqrt{\alpha_1^2 - \alpha_c^2 + 2i\beta}}$$

$$T_F = |t(\alpha)|^2$$

$$R_F = |r(\alpha)|^2$$



# Fresnel'sche Reflektivität und Transmittivität



## Merke:

- Bei Vernachlässigung der Absorption ( $\beta/\delta = 0$ ) ist die Transmission am kritischen Winkel um den **Faktor vier** erhöht.
- Am kritischen Winkel überlagern sich einfallende und reflektierte Welle zu einem **stehenden Wellenfeld** mit einem Wellenbauch an der Grenzfläche. Wegen der Stetigkeit der Tangentialkomponenten ist die Amplitude des elektrischen Feldes im Medium doppelt so groß wie die Amplitude des einfallenden Feldes, die Intensität also viermal so hoch.

# Einfluss der Oberflächenrauigkeit

---

Experimentelle Beobachtung:

- Die Anpassung von gemessenen Reflektivitätskurven durch die reine Fresnel-Reflektivität  $R_F$  gelingt in der Regel nicht.
- Die gemessene Intensität ist immer **kleiner als die theoretisch berechnete!**
- Diese Diskrepanz ist zwar bei kleinen Einfallswinkeln  $\alpha$  noch sehr klein, nimmt aber für größere  $\alpha$  stark zu.

Was ist der Grund für diese Abweichung?

# Einfluss der Oberflächenrauigkeit

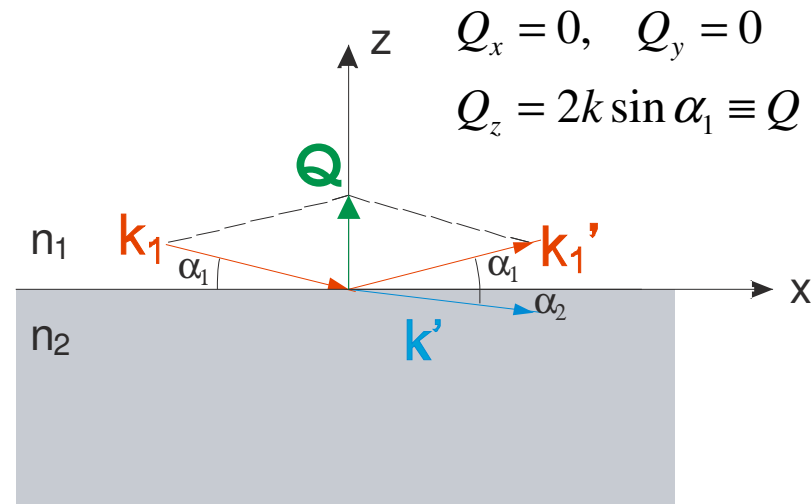
---

Was ist der Grund für diese Abweichung?

- Bisherige Überlegungen: **homogene Medien mit idealisierten, glatten Grenzflächen**
- Reale Ober- und Grenzflächen zeigen **mikroskopische Unebenheiten** (Rauigkeit)  
(typische Größenordnung : bis zu wenigen Nanometern)
- Rauigkeit der Oberfläche führt zu
  - **Fluktuationen** der Elektronendichte (des Brechungsindex)
  - **Verminderung** der spiegelnd (spekular) reflektierten Intensität
  - Zusätzliche **diffuse Intensität** in der Umgebung des spiegelnd reflektierten Strahls.



# Einfluss der Oberflächenrauigkeit



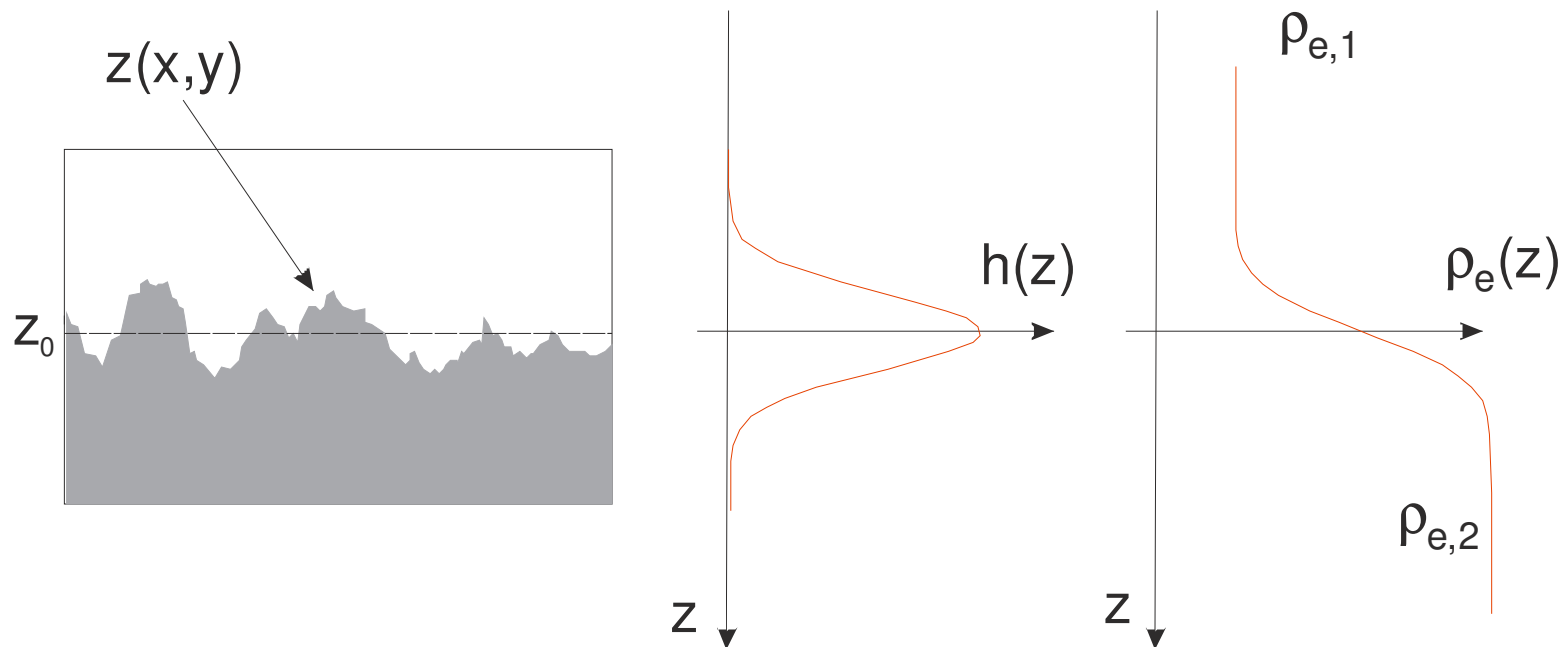
Streuvektor  $\mathbf{Q}$  steht senkrecht zu Oberfläche



Laterale Mittelung über das Elektronendichteprofil

$$\rho_e(z) = \frac{1}{F} \iint \rho_e(x, y, z) dx dy \quad (8.27)$$

# Einfluss der Oberflächenrauigkeit



- Rauigkeit → “Verschmierung” des Elektronendichteprofiles in z-Richtung

$$\rho_e(z) = \rho_{e,1}(z) + f(z) \cdot (\rho_{e,2}(z) - \rho_{e,1}(z)) \quad (8.28)$$

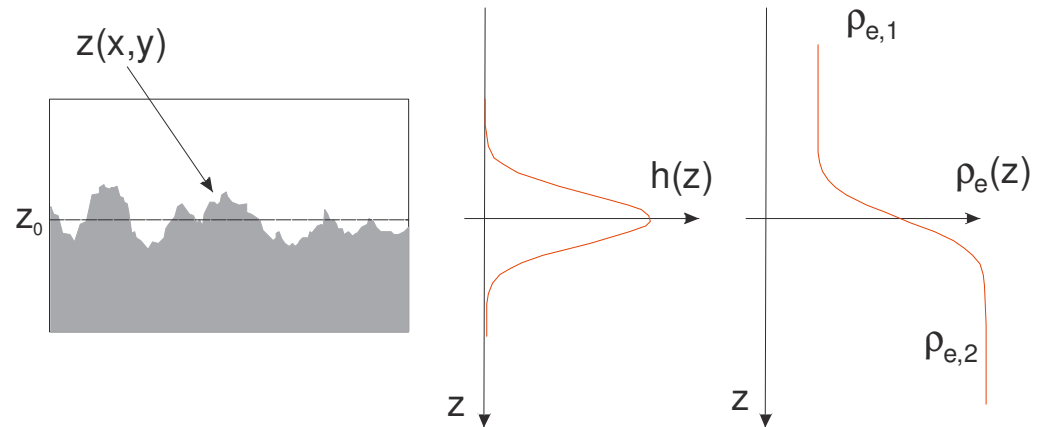
- Verteilungsfunktion  $h(z)$  des Höhenprofils

$$h(z) = \frac{df}{dz}(z) \quad (8.29)$$

# Einfluss der Oberflächenrauigkeit

$$h(z) = \frac{df}{dz}(z)$$

Verteilungsfunktion  $h(z)$



- Glatte Oberfläche:

$$f(z) = \theta(z-z_0)$$

$$h(z) = \delta(z-z_0)$$

Stufenfunktion  
Delta-Funktion

- Raue Oberfläche:

$$f(z) = \frac{1}{2} \cdot \text{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2} \sigma}\right)$$

Fehlerfunktion

$$h(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right)$$

Gaußverteilung

Oft gute Übereinstimmung  
mit "realen Profilen"

# Einfluss der Oberflächenrauigkeit

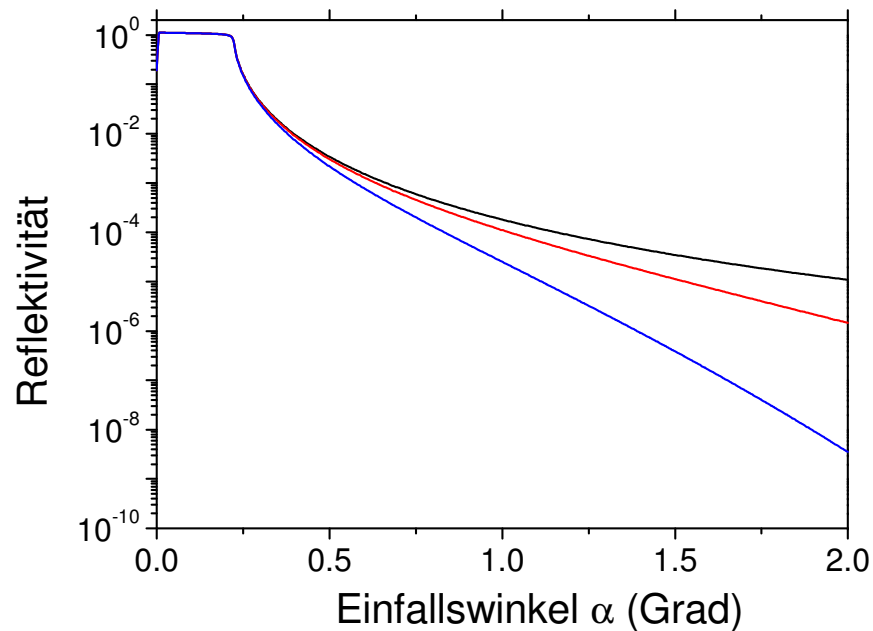
$$\langle e^{iQz} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} h(z) e^{iQz} dz = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2/2\sigma^2} e^{iQz} dz = e^{-Q^2\sigma^2/2} \quad (8.30)$$

Phasengerechte  
Mittelung **über die  
Amplituden**

$$\frac{R(Q)}{R_F(Q)} = \left| \int_0^\infty h(z) e^{-iQz} dz \right|^2 = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \left| \int_0^\infty e^{-z^2/2\sigma^2} e^{-iQz} dz \right|^2 = e^{-Q^2\sigma^2} \quad (8.31)$$

Intensitäten

$\sigma$ : rms Rauheit



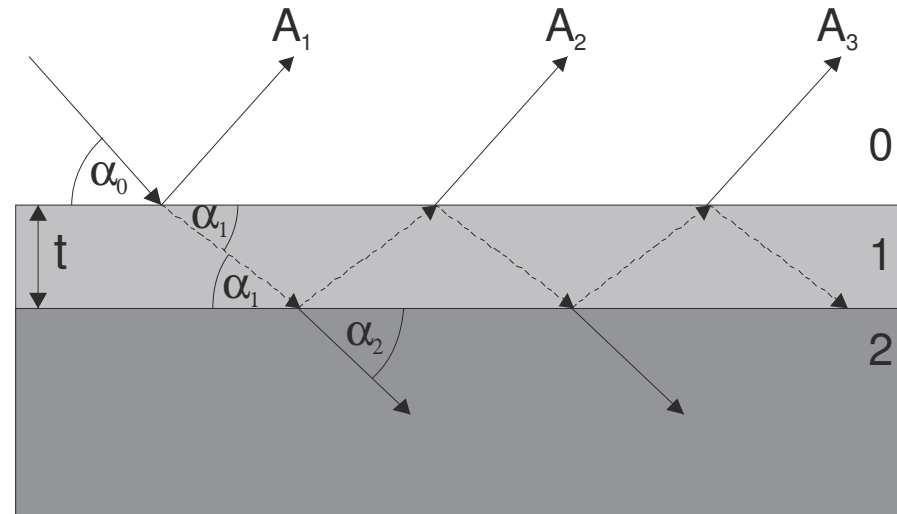
Berechnete Reflektivität einer Si-Oberfläche  
(Röntgenenergie 8 keV) bei unterschiedlichen  
Oberflächenrauigkeiten:

**Schwarz:**  $\sigma_{OF} = 0$

**Rot:**  $\sigma_{OF} = 5 \text{ \AA}$

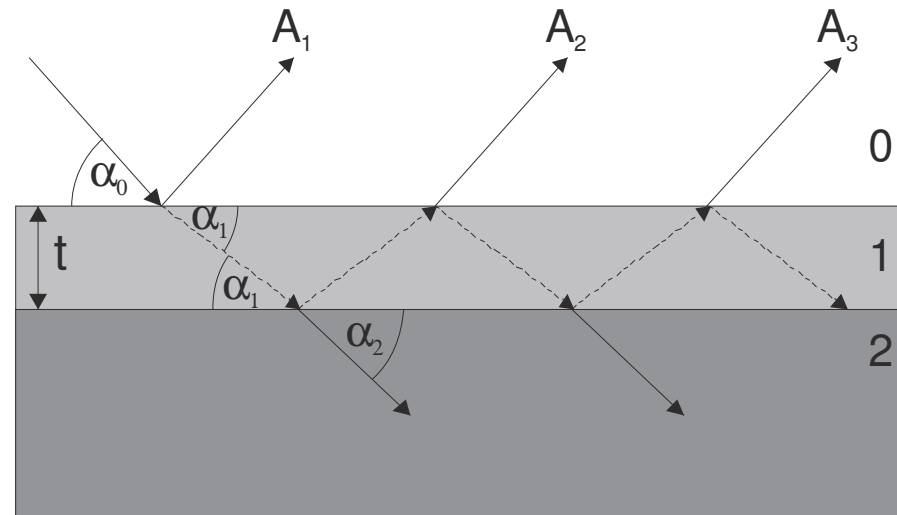
**Blau:**  $\sigma_{OF} = 10 \text{ \AA}$

# Reflexion an einer dünnen Einzelschicht



- Reflexion und Transmission an einer dünnen Schicht
- die auf einem **unendlich dicken Substrat** aufgebracht ist
- Der einfallende Strahl wird innerhalb der Schicht **mehrfach reflektiert**
- Die totale Reflektivität berechnet sich aus der **phasengerechten Summe** der einzelnen (unendlich vielen) reflektierten Amplituden  $A_1, A_2, \dots$

# Reflexion an einer dünnen Einzelschicht



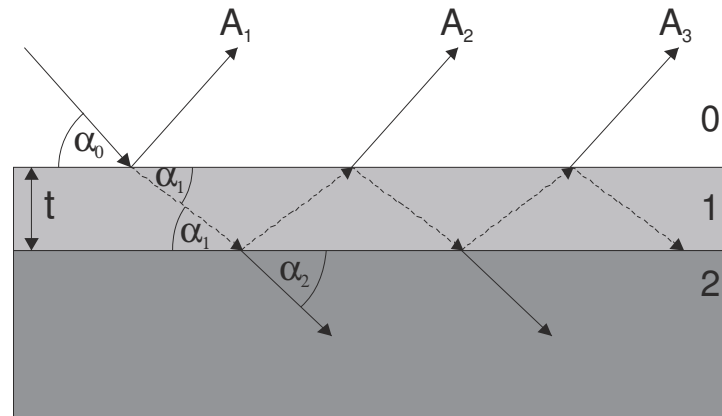
Fresnel'sche Transmissions- und Reflexionskoeffizienten an den beiden Grenzflächen

Übergang Luft  $\rightarrow$  Schicht:  $(r_{01}, t_{01})$   
Übergang Schicht  $\rightarrow$  Substrat:  $(r_{12}, t_{12})$

Setzt man  $n_0 = 1$  (Luft) berechnen sich die Winkel  $\alpha_j$  innerhalb der Schicht und Substrat nach dem Snellius'schen Brechungsgesetz gemäß:

$$\cos \alpha_0 = n_j \cos \alpha_j \quad j = 1, 2 \quad (8.32)$$

# Reflexion an einer dünnen Einzelschicht



- Der unter dem Winkel  $\alpha_0$  einfallende Strahl wird an der Oberfläche teilweise reflektiert:

Amplitude:  $A_1 = r_{01}$

- Der mit  $t_{01}$  in die Schicht transmittierte Strahl wird am Substrat teilweise reflektiert und kann teilweise wieder an die Luft austreten:

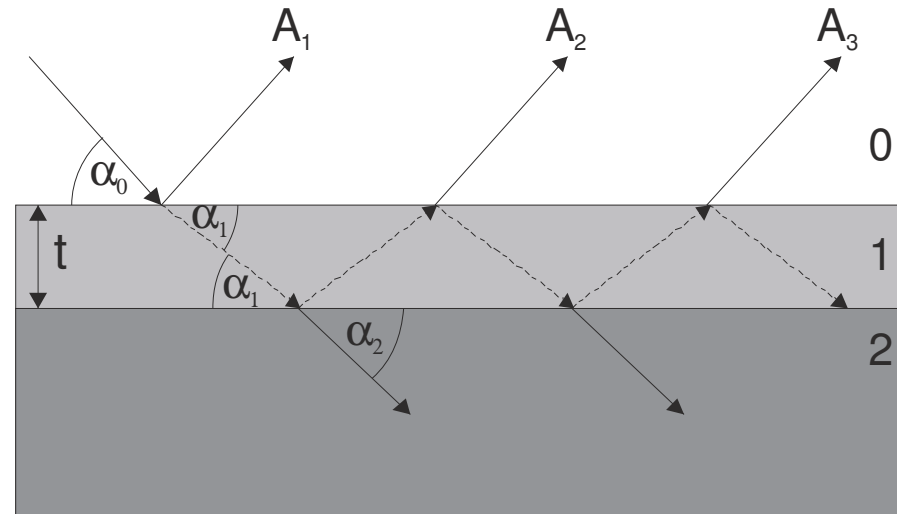
Amplitude:  $A_2 = t_{01}r_{12}t_{10}$ , Phasenverschiebung bzgl. Strahl 1:  $p^2 = e^{iQ_1 \cdot t} = e^{i2k_1 \sin \alpha_1 \cdot t}$

- Nochmalige Reflexion an Ober- und Unterseite der Schicht:

Amplitude:  $A_3 = t_{01}r_{12}r_{10}r_{12}t_{10}$ , Phasenverschiebung bzgl. Strahl 1:  $p^4$

- usw.

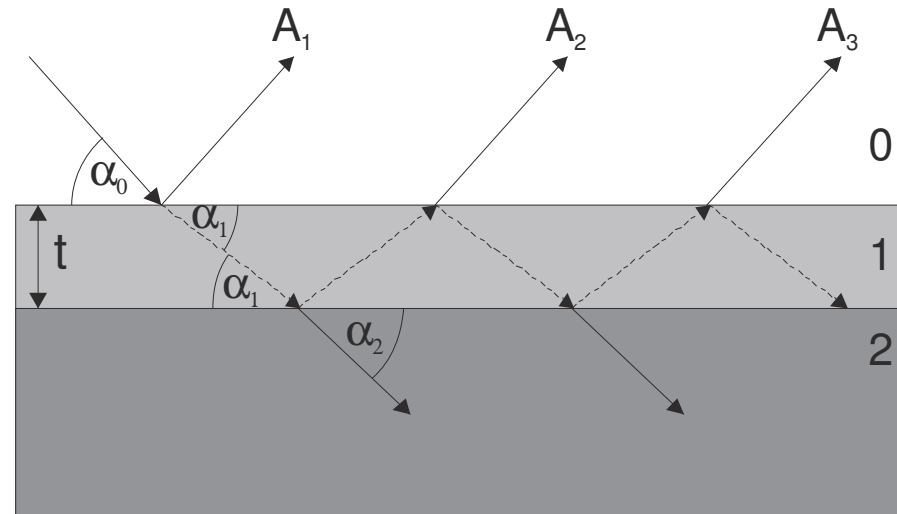
# Reflexion an einer dünnen Einzelschicht



$$\begin{aligned} r_{\text{Schicht}} &= r_{01} + t_{01}r_{12}t_{10}p^2 + t_{01}r_{12}^2t_{10}r_{10}p^4 + \dots = \\ &= r_{01} + t_{01}r_{12}t_{10}p^2 \sum_{m=0}^{\infty} (r_{10}r_{12}p^2)^m = \\ &= r_{01} + t_{01}r_{12}t_{10}p^2 \frac{1}{1 - r_{10}r_{12}p^2} \end{aligned} \quad (8.33)$$



# Reflexion an einer dünnen Einzelschicht

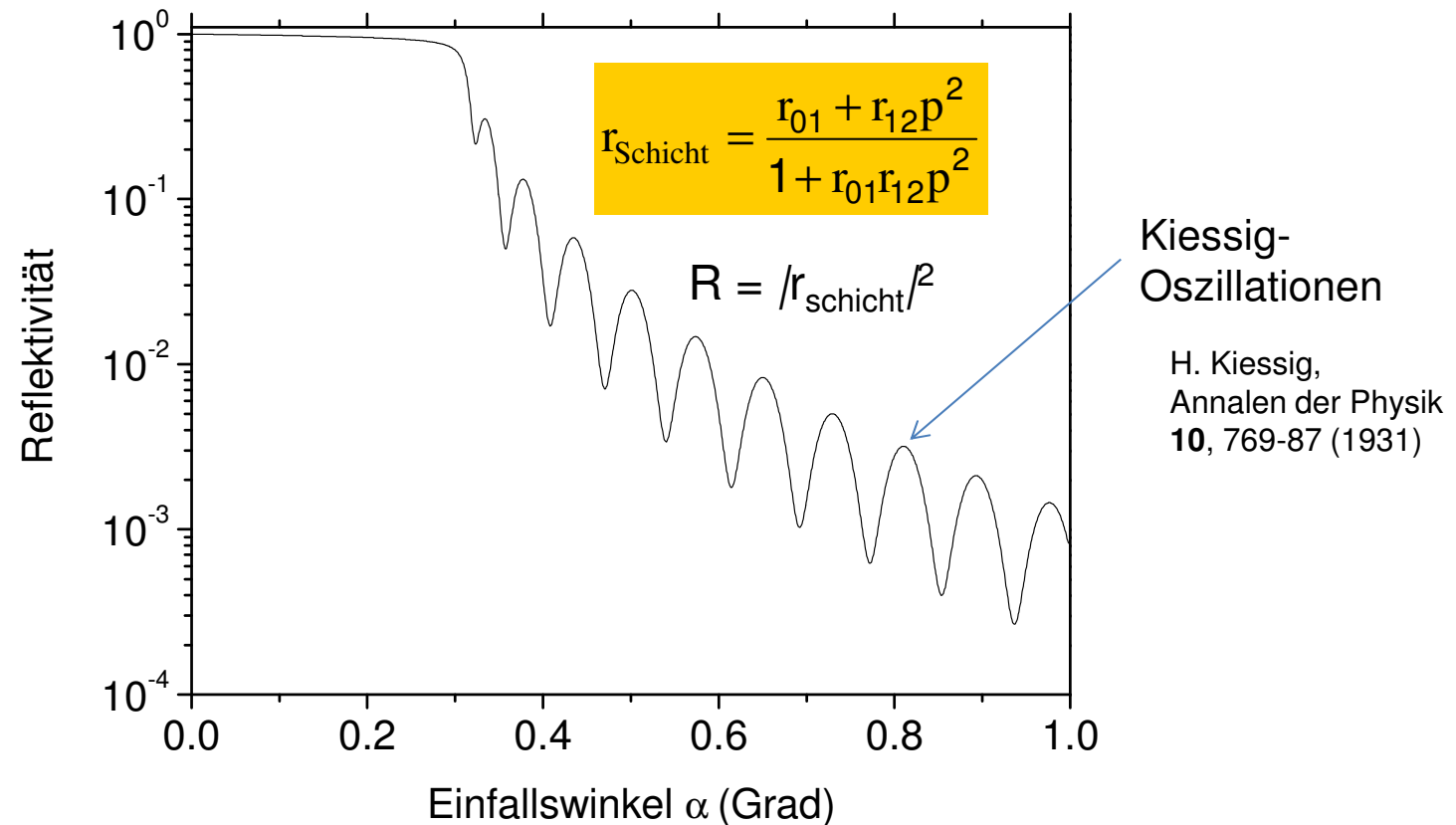


Aus Fresnel'schen Formeln folgt:  $r_{01} = -r_{10}$  und  $r_{01}^2 + t_{01}t_{10} = 1$

$$r_{\text{Schicht}} = \frac{r_{01} + r_{12}p^2}{1 + r_{01}r_{12}p^2} \quad R = |r_{\text{schicht}}|^2 \quad (8.34)$$

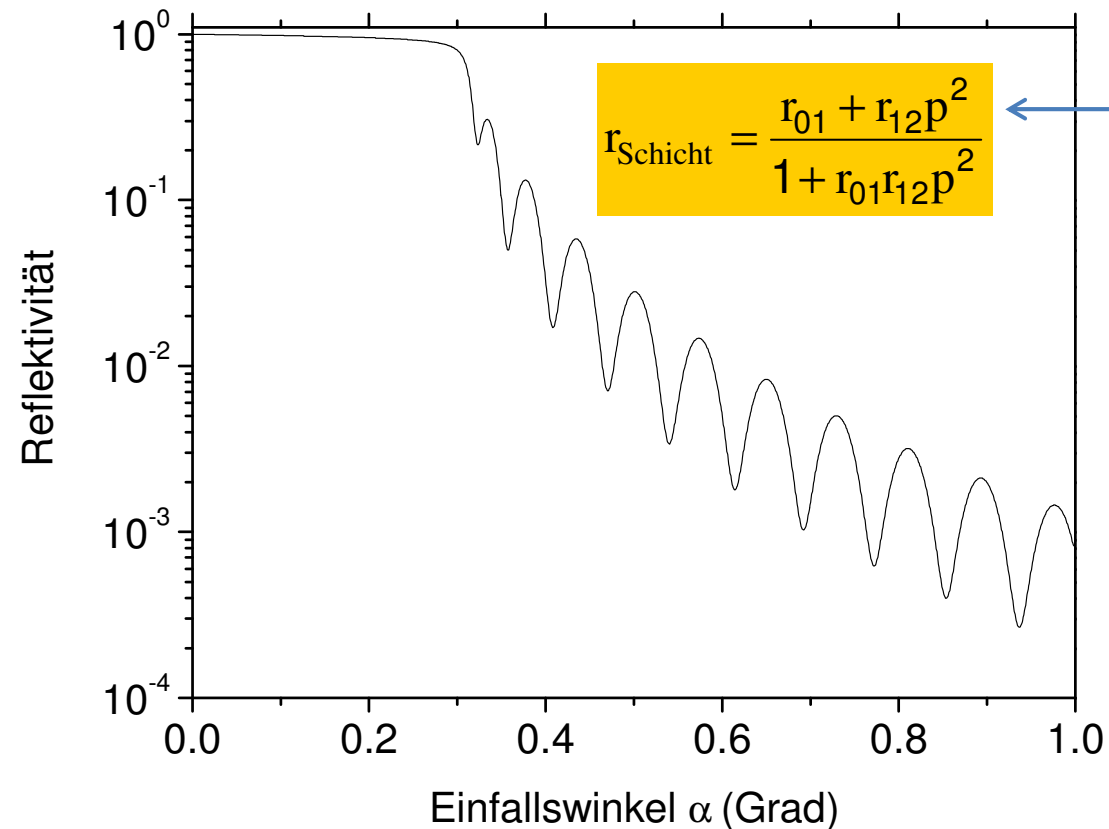
mit  $p^2 = e^{iQ_1 t} = e^{i2k_1 \sin \alpha_1 t}$  und  $k_1 = n_1 k$

# Reflexion an einer dünnen Einzelschicht



Berechnete Reflektivität einer 50 nm dicken Ge Schicht auf einem Si Substrat bei einer Photonenenergie von 8 keV.

# Kiessig-Oszillationen



- Abstand der Kiessig-Oszillationen ist bestimmt durch **Interferenzterm  $p^2$**
- Anders ausgedrückt lautet die Bedingung:  $\Delta Q_1 = 2\pi/t \Leftrightarrow$  **Zähler wird extremal**

$$\Rightarrow 2t\sqrt{\sin^2 \alpha_m - \sin^2 \alpha_c} = m \cdot \lambda \quad (8.35)$$

# Kiessig-Oszillationen

---

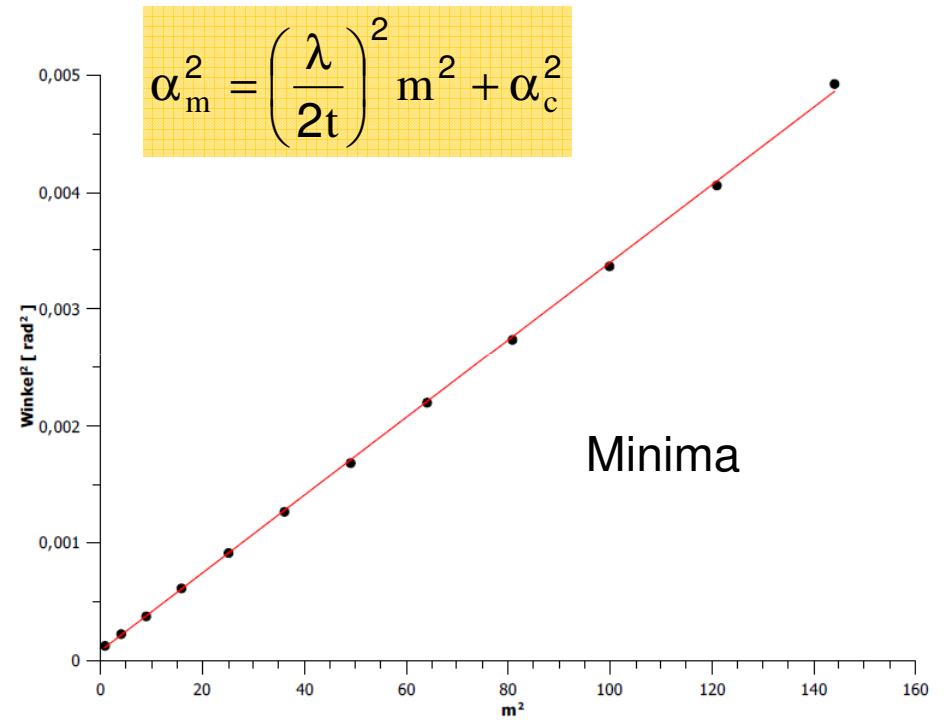
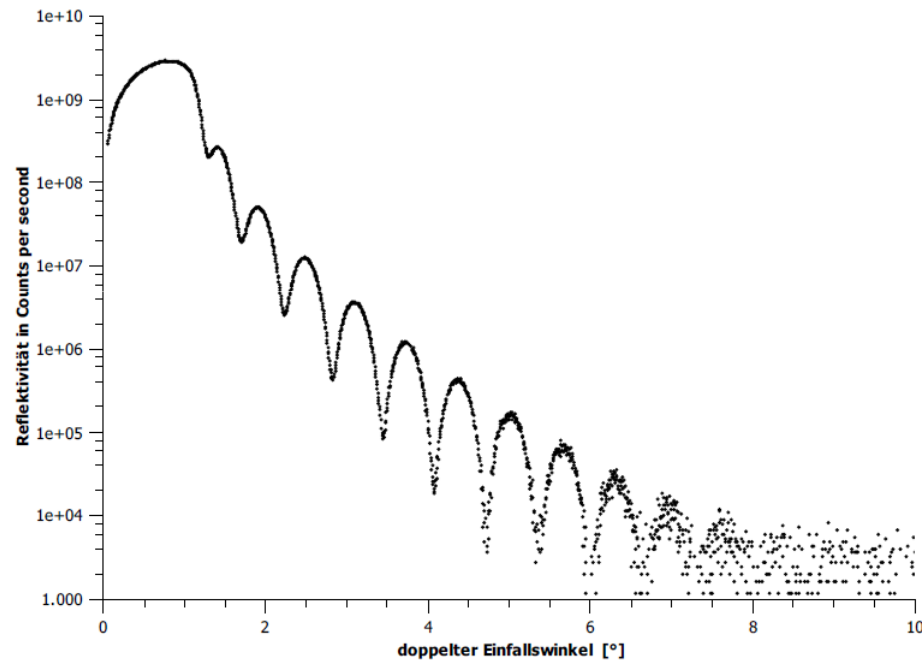
- Bedingung für Extremum:  $2t\sqrt{\sin^2 \alpha_m - \sin^2 \alpha_c} = m \cdot \lambda$

- Für kleine Winkel: 
$$\alpha_m^2 = \left(\frac{\lambda}{2t}\right)^2 m^2 + \alpha_c^2 \quad (8.36)$$

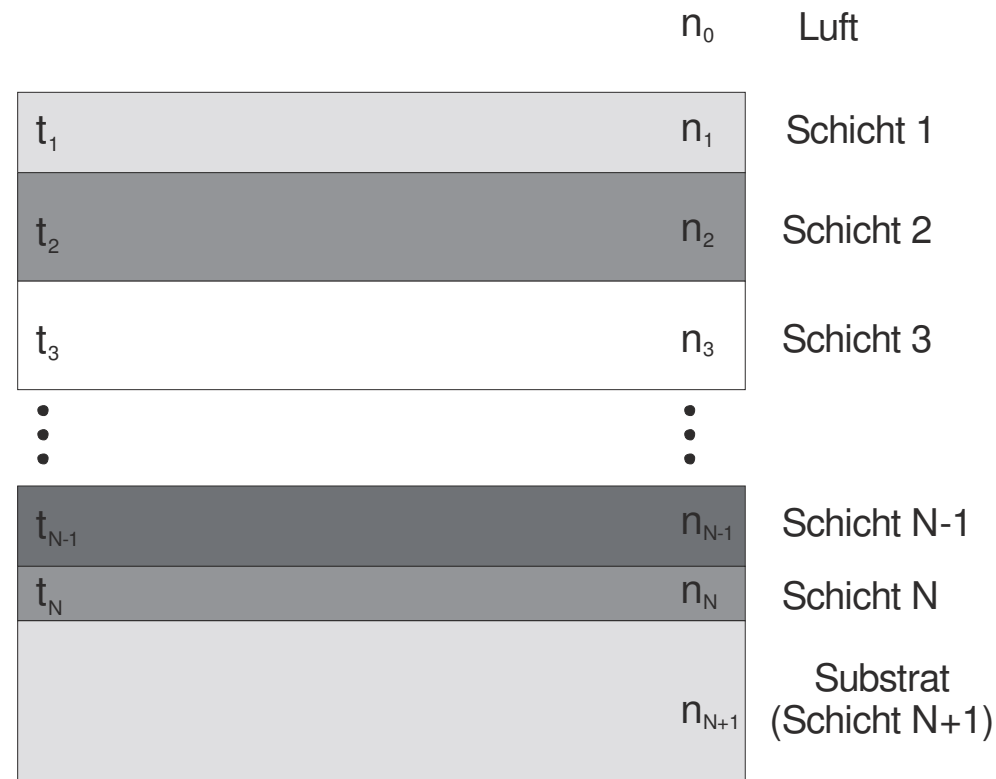
- $n_2 < n_1$  ( $\delta_2 > \delta_1$ , z.B. Si auf Ge) → **Maxima**
- $n_2 > n_1$  ( $\delta_2 < \delta_1$ , z.B. Au auf Si) → **Minima**
- Die **Amplitude** der Kiessig-Oszillationen hängt ab vom Verhältnis  $\delta_1/\delta_2$  – also dem **Dichteunterschied** zwischen Schicht und Substrat
- Der **Abstand** der Kiessig-Oszillationen hängt reziprok von der **Schichtdicke** ab

# Kiessig-Oszillationen

Beispiel: 13.5 nm Au (amorph) auf Si

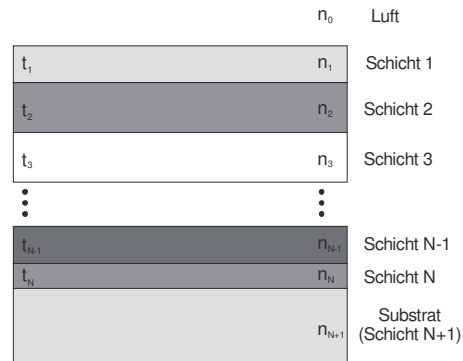


# Reflektivität von Multischichtsystemen – Parratt-Formalismus



- **N Schichten** mit Brechungsindizes  $n_j = 1 - \delta_j + i\beta_j$
- **Brechungsgesetz** an Grenzfläche  $j-1/j$ :  $\cos\alpha_0 = n_j \cos\alpha_j \quad j = 1, 2, \dots, N, N+1$   
(8.37)

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Parratt-Formalismus



➤ Vertikalkomponente der Wellenvektoren in Schicht j:

$$k_{z,j}^2 = (n_j k)^2 - k_x^2 = (1 - \delta_j + i\beta_j)^2 k^2 - k_x^2 \approx k_z^2 - 2\delta_j k^2 + 2i\beta_j k^2 \quad (8.38)$$

➤ Fresnelscher Reflexionskoeffizient der Schicht j

$$r_{j,j+1} = \frac{k_{z,j} - k_{z,j+1}}{k_{z,j} + k_{z,j+1}} \quad (8.39)$$

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Parratt-Formalismus

1. Reflexionskoeffizient zwischen  
**Substrat und unterster Schicht N**  
(hier keine Mehrfachreflexionen):

$$r_{N,N+1} = \frac{k_{z,N} - k_{z,N+1}}{k_{z,N} + k_{z,N+1}} \quad (8.40)$$

2. Reflexionskoeffizient zwischen den  
**Schichten N und N-1**:

$$R_{N-1,N} = \frac{r_{N-1,N} + r_{N,N+1}p_N^2}{1 + r_{N-1,N}r_{N,N+1}p_N^2} \quad (8.41)$$

3. Reflexionskoeffizient zwischen den  
**Schichten N und N-1**:

$$R_{N-2,N-1} = \frac{r_{N-2,N-1} + R_{N-1,N}p_{N-1}^2}{1 + r_{N-2,N-1}R_{N-1,N}p_{N-1}^2} \quad (8.42)$$



4. **Reflexionskoeffizient an der Oberfläche**

$$R_{0,1} = \frac{r_{0,1} + R_{1,2}p_1^2}{1 + r_{0,1}R_{1,2}p_1^2} \quad (8.43)$$

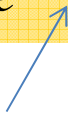
Rekursionsverfahren:  
L.G. Parratt, Phys. Rev. **95**, 359 (1954)



# Reflektivität von Multischichtsystemen – Grenzflächenrauigkeit

---

Berücksichtigung von Grenzflächenrauigkeit:

$$\tilde{r}_{j,j+1} = r_{j,j+1} e^{-2k_{z,j}k_{z,j+1}\sigma_j^2}$$


Modifizierte Fresnel-Koeffizienten

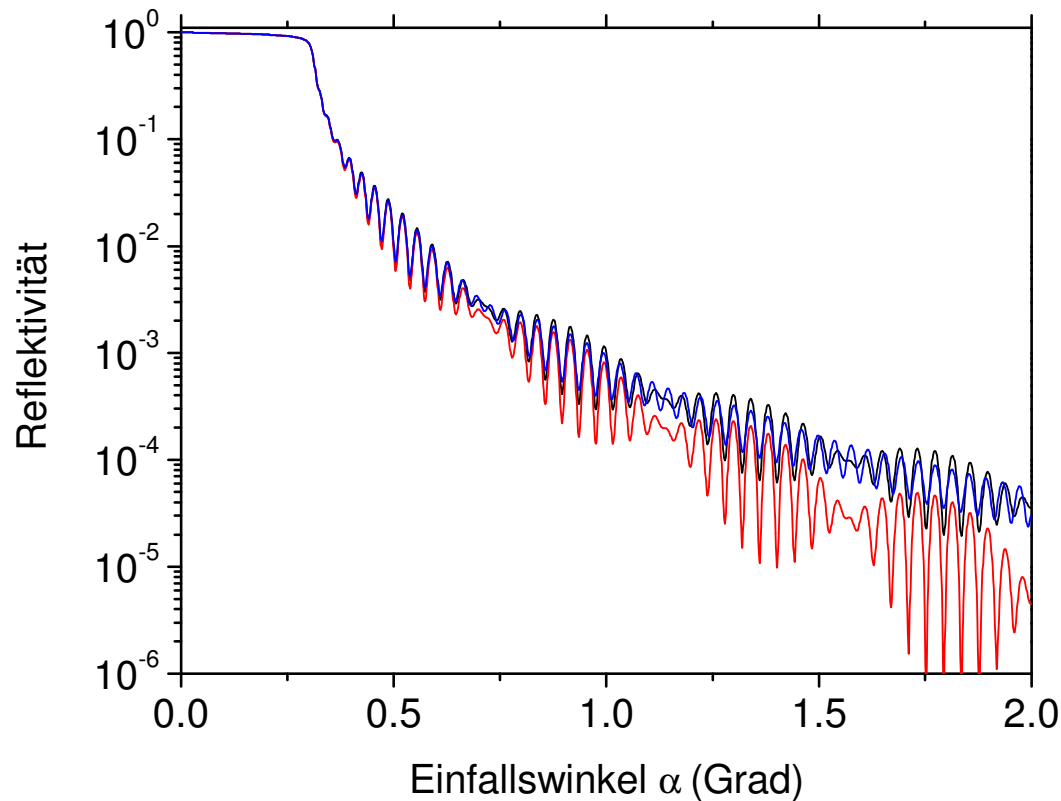
(8.44)

Ausdruck ist **symmetrisch** bzgl. der **k**-Vektoren an der Grenzfläche

- hohe Ortsfrequenzen zerstören die Kohärenz zwischen der einfallenden und der reflektierten Welle
- feste Phasenrelation zwischen den beiden Wellen gestört
- Gauß'sche Mittelung über das Rauigkeitsprofil muss für beide Wellen separat durchgeführt werden
- selbstkonsistente Lösung gegeben durch Gl. (8.44)

L. Nevot und P. Croce, Rev. Phys. Appl. <b>15</b> ,761 (1980) B. Vidal und P. Vincent, Appl. Optics <b>23</b> , 1794 (1984)
--

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Grenzflächenrauigkeit



Berechnete Reflektivität von 100 nm Ge / 10 nm Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub> / Si-Substrat (Röntgenenergie 8 keV) bei unterschiedlichen Oberflächen und Grenzflächenrauigkeiten:

**Schwarz:**  $\sigma_{\text{OF}} = 0$ ,  $\sigma_{\text{GF}} = 0$

**Blau:**  $\sigma_{\text{OF}} = 0$ ,  $\sigma_{\text{GF}} = 10 \text{ \AA}$ .

**Rot:**  $\sigma_{\text{OF}} = 5 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_{\text{GF}} = 0$

- Oberflächenrauigkeit führt zu stärkerem Abfall der Intensität mit dem Einfallswinkel
- Grenzflächenrauigkeit führt zu winkelabhängiger Dämpfung der Kiessig-Oszillationen

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Matrixformalismus

F. Abeles (Ann. Physic **3**, 504(1948), **5**, 596(1950))

	$n_0$	Luft
$t_1$	$n_1$	Schicht 1
$t_2$	$n_2$	Schicht 2
$t_3$	$n_3$	Schicht 3
$\vdots$	$\vdots$	
$t_{N-1}$	$n_{N-1}$	Schicht N-1
$t_N$	$n_N$	Schicht N
	$n_{N+1}$	Substrat (Schicht N+1)

Wir verwenden Ausdruck (8.24) für  
**komplexe Winkel:**

$$p_j^2 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(\alpha_1^2 - 2\delta_j)^2 + 4\beta_j^2} + \alpha_1^2 - 2\delta_j \right] \quad (8.45)$$

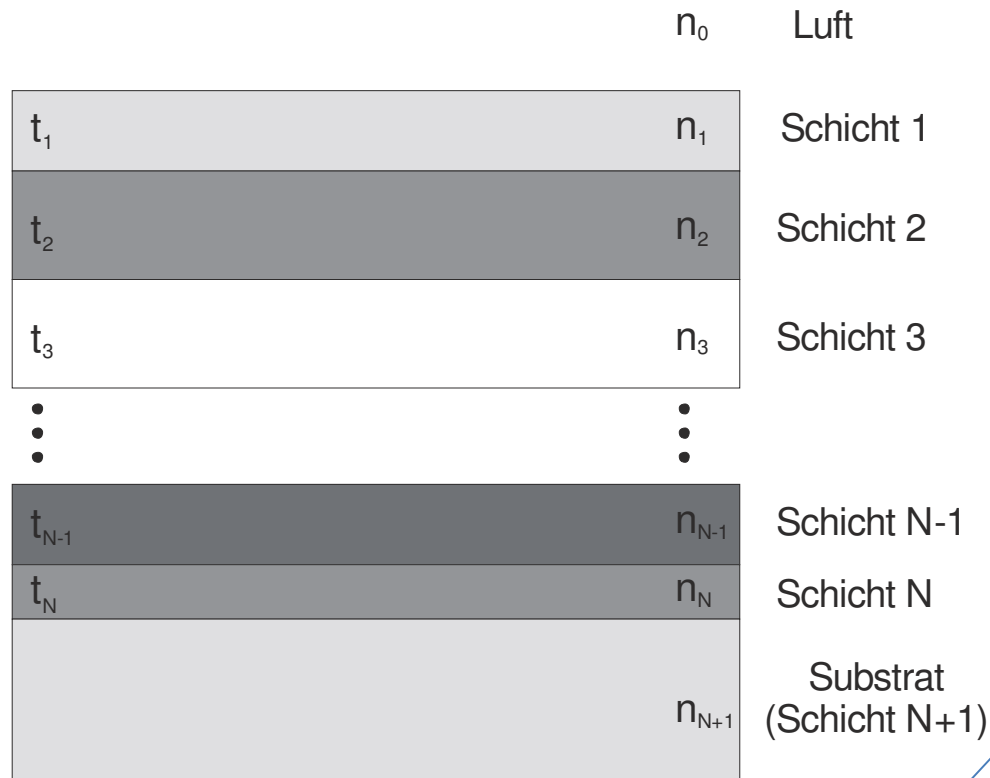
$$q_j^2 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(\alpha_1^2 - 2\delta_j)^2 + 4\beta_j^2} - \alpha_1^2 + 2\delta_j \right]$$

und **Wellenvektoren** an den  
Grenzflächen:

$$\mathbf{k}_j = k_j \begin{pmatrix} \cos \alpha_j \\ 0 \\ \sin \alpha_j \end{pmatrix}, \quad \mathbf{k}'_j = k_j \begin{pmatrix} \cos \alpha_j \\ 0 \\ -\sin \alpha_j \end{pmatrix} \quad (8.46)$$

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Matrixformalismus

F. Abeles (Ann. Physic **3**, 504(1948), **5**, 596(1950))



Einfallende/durchlaufende  
Welle

## Näherungen:

- aufgrund der *geringen Dispersion* werden **alle Beträge** der  $k_j$  gleichgesetzt.
- aufgrund der **kleinen Winkel**  $\alpha_j$ , werden die trigonometrischen Funktionen bis zur ersten Ordnung in  $\alpha_j$  entwickelt.

## Ansatz:

$$\mathbf{E}_j(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_j \\ 0 \end{pmatrix} \exp[i(kx + k\alpha_j z_j - \omega t)] \quad (8.47)$$

$$\mathbf{E}'_j(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ A'_j \\ 0 \end{pmatrix} \exp[i(kx - k\alpha_j z_j - \omega t)]$$

Reflektierte Welle

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Matrixformalismus

F. Abeles (Ann. Physic **3**, 504(1948), **5**, 596(1950))

	$n_0$	Luft
$t_1$	$n_1$	Schicht 1
$t_2$	$n_2$	Schicht 2
$t_3$	$n_3$	Schicht 3
$\vdots$	$\vdots$	
$t_{N-1}$	$n_{N-1}$	Schicht N-1
$t_N$	$n_N$	Schicht N
	$n_{N+1}$	Substrat (Schicht N+1)

Zusammenhang der Amplituden  
benachbarter Grenzflächen

$$\begin{pmatrix} A_j \\ A'_j \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{(j,j+1)} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ A'_{j+1} \end{pmatrix} \quad (8.48)$$

mit den Matrixelementen

$$\begin{aligned} R_{11}^{j,j+1} &= \frac{\alpha_j + \alpha_{j+1}}{2\alpha_j} \exp\left[-\frac{i}{2}k(\alpha_j t_j + \alpha_{j+1} t_{j+1})\right] \\ R_{12}^{j,j+1} &= \frac{\alpha_j - \alpha_{j+1}}{2\alpha_j} \exp\left[-\frac{i}{2}k(\alpha_j t_j - \alpha_{j+1} t_{j+1})\right] \\ R_{21}^{j,j+1} &= \frac{\alpha_j - \alpha_{j+1}}{2\alpha_j} \exp\left[+\frac{i}{2}k(\alpha_j t_j - \alpha_{j+1} t_{j+1})\right] \\ R_{22}^{j,j+1} &= \frac{\alpha_j + \alpha_{j+1}}{2\alpha_j} \exp\left[+\frac{i}{2}k(\alpha_j t_j + \alpha_{j+1} t_{j+1})\right] \end{aligned} \quad (8.49)$$

# Reflektivität von Multischichtsystemen – Matrixformalismus

F. Abeles (Ann. Physic **3**, 504(1948), **5**, 596(1950))

	$n_0$	Luft
$t_1$	$n_1$	Schicht 1
$t_2$	$n_2$	Schicht 2
$t_3$	$n_3$	Schicht 3
$\vdots$	$\vdots$	
$t_{N-1}$	$n_{N-1}$	Schicht N-1
$t_N$	$n_N$	Schicht N
	$n_{N+1}$	Substrat (Schicht N+1)

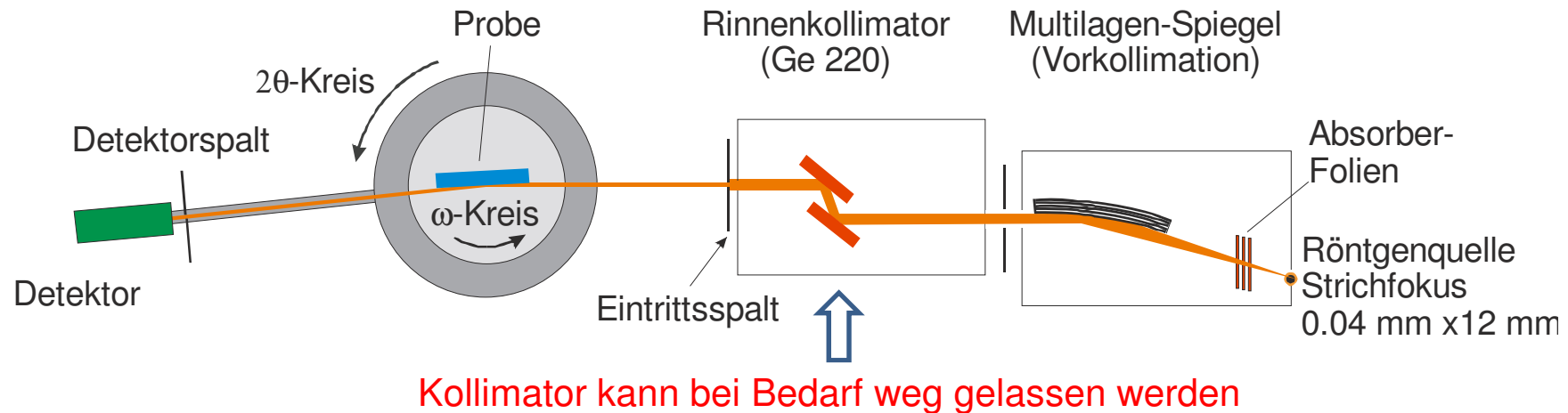
Die Amplitude der Wellen an der Schichtoberseite ergibt sich durch sukzessive Anwendung von (8.40)

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_0' \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{(0,1)} \mathbf{R}^{(1,2)} \dots \mathbf{R}^{(N,N+1)} \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} \\ =: \mathbf{T} \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.50)$$

Mit  $A_0 = T_{11} A_{N+1}$  und  $A_0' = T_{21} A_{N+1}$  ergibt sich schließlich für die Reflektivität:

$$R = \left| \frac{A_0'}{A_0} \right|^2 = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2$$

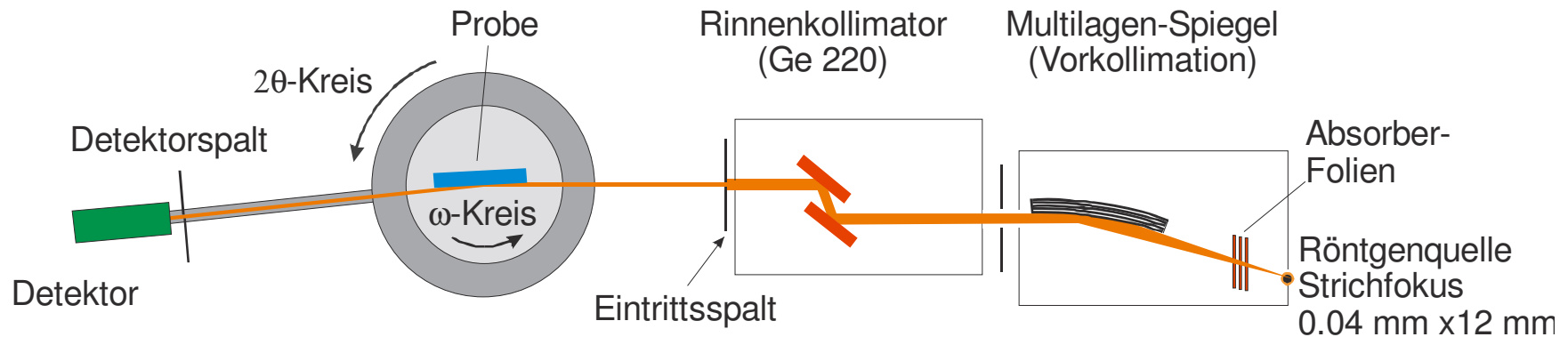
# Experimenteller Aufbau



## Experimentelle Anforderungen

- monochromatischer, kollimierter Nutzstrahl
- kleine Strahlabmessungen:  $\sim 0.10 \dots 0.50 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$  (hängt von Probenlänge ab)
- Strichfokus einer Feinfokusröhre geeignet
- kleine Detektorblende von ebenfalls  $\sim 0.10 \dots 0.50 \text{ mm}$
- die experimentelle Winkelauflösung muss an die zu messenden Systeme angepasst werden können
- ebene Probenoberfläche (keine Krümmung)
- glatte Grenzflächen müssen (Rauigkeit typischerweise kleiner als ca 1..4 nm)
- hoher Dynamikbereich nötig (Reflektivität fällt rasch mit dem Einfallswinkel ab)

# Experimenteller Aufbau



$$\Delta Q_z = \Delta k_z + \Delta k'_z \approx \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \left( \Delta \theta_{koll} + \frac{b}{L} \right) \quad (8.51)$$

$\Delta \theta_{koll}$ : Winkelkollimation des Nutzstrahls  
 $b$ : Detektorblende  
 $L$ : Abstand Detektorblende zu Probe  
 $\lambda$ : Wellenlänge

Auflösung im reziproken Raum

- Übungsaufgabe:**
- (i) Überlegen Sie sich, wie weit die Detektorblende  $b$  geöffnet werden darf, damit die Kiessig-Oszillationen einer 50 nm dicken Schicht noch auflösen sind.
  - (ii) Welche maximale Schichtdicke kann man mit dem skizzierten Aufbau noch bestimmen?