

Entwicklung und Anwendung einer dynamischen Röntgenbeugungstheorie für Multischichten, Supergitter und gebogene Kristalle

Dissertation

**zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)**

**vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena**

von Dipl.Phys. Serguei Podorov

geboren am 01.10.1966 in Emwa (Rußland)

Gutachter

- 1. Prof. E. Förster (Univ. Jena)**
- 2. Prof. H.R. Höche (MLU Halle)**
- 3. Prof. U. Pietsch (Univ. Potsdam)**

Tag des Rigorosums: 06.06.2002

Tag der öffentlichen Verteidigung: 18.06.2002

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung	5
	1.1 Eine kurze Übersicht über die existierenden Röntgenbeugungstheorien	7
	1.2 Röntgenbeugung an elastisch gebogenen Kristallen	9
	1.3 Die Methoden zur Rekonstruktion der Deformation in dünnen Kristallschichten	11
2	Theorie der Röntgenbeugung	14
	2.1 Kinematische Reflexion von Röntgenstrahlen an Vielschichtsystemen	16
	2.2 Grundgleichungen im allgemeinen Fall der Beugung	17
	2.3 Modifizierte Takagi-Taupin Theorie der Röntgenbeugung an Kristallen	20
	2.4 Numerische Lösungen der Takagi-Taupin-Gleichungen	23
	2.5 Kinematische und semidynamische Näherung	25
3	Das Ray-Tracing Programm „X-Ray for Windows“	26
4	Dynamische Beugungstheorie und Theorie der Abbildungsfehler für asymmetrisch geschnittene und gebogene Kristalle	29
	4.1 Einführung	29
	4.2 Taupinische Gleichung für die Röntgenbeugung an asymmetrisch geschnittenen und gebogenen Kristallen	30
	4.3 Abbildungsfehler eines asymmetrisch geschnittenen und gebogenen Kristalls	34
	4.4 Experimentelle und theoretische Ergebnisse	38
	4.5 Zusammenfassung	41
5	Charakterisierung dünner Kristallschichten	43
	5.1 Kristallschichten mit einem Konzentrationsgefälle	43
	5.2 Supergitter	44

5.3	Rekonstruktion der Deformation und des statischen Debye-Waller Faktors in der kinematischen Näherung	44
5.4	Charakterisierung der Supergitter	51
5.5	Lösung in der semidynamischen Näherung	54
5.6	Lösung im dynamischen Fall	57
5.7	Zusammenfassung	61
	Thesen	62
	Danksagung	63
	Literaturverzeichnis	64
	Lebenslauf	76
	Ehrenwörtliche Erklärung	77

Kapitel 1

Einleitung

Die Röntgenbeugung an Kristallen wurde von Friedrich, Knipping und Laue entdeckt. Nach der Erklärung dieser Erscheinung wurde sie zuerst für die Kristallstrukturbestimmung verwendet. Unmittelbar nach der Entdeckung der Röntgenbeugung ergaben sich als weitere Fragestellungen: wie kann die Intensitätsverteilung der reflektierten oder durchgehenden Röntgenstrahlen für eine gegebene Kristallstruktur theoretisch beschrieben werden. Diese Aufgabe wird als das „Direkte Problem der Röntgenbeugung“ bezeichnet. Das umgekehrte Problem ist folgendes: für eine vorliegende Intensitätsverteilung der gebeugten Röntgenstrahlen ist eine passende Kristallstruktur zu rekonstruieren, für die die theoretisch berechneten Intensitäten genau mit den experimentellen Daten übereinstimmen. In der Regel muß man beide Probleme lösen können. Wenn man das direkte Problem löst und die Kristallstruktur kennt, kann man mittels Röntgenbeugung auch Informationen über die Röntgenquelle erhalten. Diese Fragestellung gehört zur Röntgenspektroskopie und der Röntgenmikroskopie.

Bei der Röntgendiagnose laserproduzierter Plasmen besteht die Schwierigkeit, daß refraktive Abbildungssysteme nicht praktikabel sind, da die Brechungsindizes aller Materialien in diesem Spektralbereich nahe bei eins liegen. Der Einsatz reflektiver Optiken ist zwar schwierig, da die Glanzwinkel für Totalreflexion in der Größenordnung von einigen Bogenminuten liegen, aber er ist möglich und findet in der Plasmadiagnostik auch statt. Am weitesten verbreitet sind Beugungsoptiken, wie Gitter, Wechselschichtsysteme (Multilayer) oder Kristalle. Im kurzwelligen Bereich unterhalb 1 nm gibt es zum Kristall praktisch keine Alternative. In der Abteilung Röntgenoptik des Instituts für Optik und Quantenelektronik der Friedrich-Schiller-Universität Jena, wo diese Arbeit entstanden ist, sind eine Reihe unterschiedlicher Techniken zum Biegen von Kristallen in zwei Dimensionen entwickelt worden. Die Einsatzmöglichkeiten sphärisch bzw. torisch gebogener Kristalle sind sehr vielfältig.

Sie sind z.B. als hochauflösendes Spektrometer mit eindimensionaler räumlicher Auflösung oder als Mikroskop mit zweidimensionaler räumlicher Auflösung einsetzbar.

Da die theoretische Grenze für die räumliche Auflösung der Röntgenmikroskopie noch nicht erreicht ist, ist es wichtig, Wege zu einer lichtstarken und hochauflösenden Röntgenoptik zu finden.

Nach der Entdeckung der Röntgenbeugung entstanden die ersten Varianten der Röntgenbeugungstheorie, welche die Röntgenbeugung in der sogenannten kinematischen Näherung beschrieben haben. Erste dynamische Röntgenbeugungstheorien, die die mehrfache Streuung der Röntgenstrahlen an den Kristallebenen betrachtet haben, wurden in den Artikeln von Darwin [1] und Ewald [2] beschrieben.

Die Anwendung der dynamischen Beugungstheorie der Röntgenstrahlen scheiterte lange Zeit an der Abwesenheit von perfekten Kristallen. Mit dem Erfolg der Halbleitertechnologie wurde dieser Mangel behoben. In der Folge erschienen viele experimentelle Studien. Für den Beweis der dynamischen Theorie war es notwendig, eine monochromatische und ebene Röntgenwelle zu bekommen. Das Problem wurde von Compton gelöst, indem er einen perfekten Kristall als Monochromator benutzt hat.

Die Theorie von Ewald und Darwin hat sich als ungeeignet für die Beschreibung der Röntgenbeugung an gestörten oder gekrümmten Kristallen erwiesen. Die modifizierte dynamische Theorie wurde von Takagi [6,8] und Taupin [7] entwickelt. Im Unterschied zur strahlenoptischen Theorie von Penning und Polder hat die Theorie von Takagi-Taupin eine umfassendere Gültigkeit. Eine kurze Übersicht der existierenden Theorien wird im folgenden Teil dieser Arbeit gegeben. Im Kapitel 2 wird die weitere Entwicklung der Röntgenbeugungstheorie behandelt, welche die Winkelverteilung der reflektierten Strahlung beschreiben kann.

Die Röntgenbeugung wird im großen Umfang für viele physikalische Fragestellungen eingesetzt. Mit Hilfe von perfekten Kristallen bekommt man monochromatische Röntgenstrahlung, die bei Röntgenbeugungsexperimenten von großem Nutzen ist. Der Einsatz von torisch und zylindrisch gebogenen Kristallen ermöglicht die Herstellung von verschiedenen röntgenoptischen Geräten, z.B. Spektrometern und Spiegeln. Diese Geräte sind in vielen Bereichen von Medizin, Chemie und Physik unersetzlich geworden. Eine solche wichtige Anwendung ist die

Plasmadiagnostik. Temperatur, Dichte und Größe der Plasmaquelle können experimentell mit Hilfe der Beugung von Röntgenstrahlung bestimmt werden. Um bessere röntgenoptische Elemente entwickeln zu können, muß man ein Programm haben, mit dem die Röntgenbeugung an gebogenen Kristallen simuliert werden kann. Die Prinzipien eines solchen Programms werden in den Kapitel 3 und 4 beschrieben.

Eine andere wichtige Anwendung der Röntgenbeugung ist die Diagnostik dünner Halbleiterkristallschichten mit einem Gradienten des Gitterabstandes. Bei dünnen epitaktischen Schichten, Supergittern, Multischichten und anderen Strukturen ändert sich der Netzebenenabstand in Abhängigkeit von der Tiefe. Das Problem ist, die Konzentration der Halbleiterelemente und die Störung der Schicht aus entsprechenden Rockingkurven zu bestimmen. Wie dieses Problem in verschiedenen Näherungen zu lösen ist, wird im Kapitel 5 beschrieben. Hierzu wird eine analytische Formel vorgeschlagen, die eine erste Abschätzung der Deformation des Gitters in der dünnen Multischicht ermöglicht. Mit Hilfe von weiteren Iterationsmethoden kann die Genauigkeit der Bestimmung der Parameter der Multischichten erhöht werden.

Das erste Ziel dieser Arbeit ist es, die dynamische Theorie der Röntgenbeugung auf praktisch wichtige Fälle anzuwenden und zu vervollkommen. Die Theorie wurde für einen allgemeinen Fall der Reflexion der Röntgenstrahlung an asymmetrisch geschnittenen und torisch gebogenen Kristallen weiterentwickelt, da diese wichtige Elemente für die Röntgenoptik sein können. Beim Variieren der Bragg- und der Asymmetriewinkel wurden die Abbildungsfehler durch Simulationen minimiert. Die Richtigkeit dieser theoretischen Untersuchungen wurde durch Experimente und Simulationen überprüft.

Das zweite Ziel der Arbeit ist es, Methoden, die das umgekehrte Problem der Röntgenbeugung an Vielfachschichten lösen, zu entwickeln. Um dieses Problem zu lösen, werden verschiedene iterative Algorithmen und eine analytische Lösung in der Arbeit entwickelt.

1.1 Eine kurze Übersicht der existierenden Röntgenbeugungstheorien

Die erste dynamische Röntgenbeugungstheorie, welche die Mehrfachstreuung der Röntgenstrahlen an den Atomebenen beschreibt, wird in den Artikeln von Darwin

und Ewald entwickelt [1-2]. Die einfache dynamische Theorie von Darwin, die eine rekursive Iteration verwendet, ist in vielen Monographien und Lehrbüchern dargestellt.

Die dynamische Beugungstheorie in Ewalds Deutung behandelt einen Kristall, der aus kleinen Dipolen besteht. Für den kompletten Aufbau der Theorie hat Ewald die Wellengleichung der klassischen Elektrodynamik benutzt. Das Gleichungssystem für die Felder E_h in Ewalds Interpretation sieht so aus:

$$(k_h^2 - K^2)E_h = \sum_g \chi_{h-g} k_g^2 E_g, \quad (1.1)$$

wobei die h -te Fourier-Komponente der Suszeptibilität

$$\chi_h = -\frac{\lambda^2 r_{el}}{\pi V_{el}} \sum_n f_n \exp(-i2\pi(\mathbf{h}, \mathbf{r}_n)) \quad (1.2)$$

ist, V_{el} ist das Volumen der Elementarzelle, f_n ist der atomare Formfaktor, r_{el} ist der klassische Elektronenradius.

Der Wellenvektor der gestreuten Welle \mathbf{k}_h ist mit dem Wellenvektor der durchgehenden Welle \mathbf{k}_0 verknüpft:

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}. \quad (1.3)$$

Laue [3] hat das Ewald-Model durch die Einführung einer kontinuierlichen periodischen Elektronendichte im Kristallmedium erweitert.

Der nächste Schritt in der Entwicklung der dynamischen Röntgenbeugungstheorie war die Berechnung der Beugung an schwach gestörten Kristallen. Penning und Polder haben in ihren Werken die strahlenoptische Theorie der Röntgenbeugung beschrieben.

Takagi [6,8] und Taupin [7] haben ein System von Gleichungen für die transmittierte und reflektierte Welle vorgeschlagen. Für den Zweistrahlfall (mit schwach veränderlichen Amplituden der durchgehenden D_0 und reflektierten D_h Wellen) sieht das System wie folgt aus:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_0}{\partial s_0} &= -ik(\chi_0 D_0 + \chi_{-h} C D_h) \\ \frac{\partial D_h}{\partial s_h} &= -ik(\chi_h C D_0 + (\chi_0 - \alpha_h) D_h) \end{aligned} \quad (1.4)$$

α_h ist proportional einer Winkelabweichung der Wellen von der genauen Laue-Bedingung (1.3) und der Deformation in der Kristallschicht.

Taupin [7] hat auch eine nützliche Differentialgleichung erster Ordnung eingeführt, die man einfach numerisch integrieren kann:

$$\frac{d}{dz}R = -i\sigma_g - i(\eta - f(z))R - i\sigma_g R^2. \quad (1.5)$$

R ist hier ein komplexer Reflexionskoeffizient, η ist ein Winkelparameter und $f(z)$ ist eine Deformation der Kristallschicht. In dieser Form benutzt man zur Zeit die Gleichung der dynamischen Theorie für die numerische Simulation der Röntgenbeugung an den gestörten Kristallen.

Es gibt auch andere Methoden zur Beschreibung der dynamischen Röntgenbeugung an gestörten Kristallen. Das Vorgehen basiert auf einem rekursiven Verfahren [5,20,60].

Für zwei starke Felder ergeben sich folgende rekursive Gleichungen:

$$R^g = \rho_1^g + \frac{\tau_1^g \tau_1^{-g} \rho_2^g}{1 - \rho_1^{-g} \rho_2^g}, \quad (1.6)$$

$$T = \frac{\tau_1^g \tau_2^g}{1 - \rho_1^{-g} \rho_2^g}. \quad (1.7)$$

R und T sind der Reflexionskoeffizient und der Transmissionskoeffizient des gesamten Kristalls, der aus zwei Schichten mit einem Reflexionskoeffizienten ρ und einem Transmissionskoeffizienten τ besteht. Die Nummer der Schicht ist durch den Index 1 bzw. 2 bezeichnet. Diese Methoden eignen sich gut für die Simulation der Röntgenbeugung an einem Kristall, der aus einer kleinen Zahl von Schichten besteht, weil die Simulationszeit im Vergleich zu anderen Verfahren merklich kürzer ist.

1.2 Röntgenbeugung an elastisch gebogenen Kristallen

Eine der ersten Arbeiten über Röntgenbeugung an elastisch gebogenen Kristallen wurde von White [4] (1950) geschrieben. Er hat festgestellt, daß deformierte Kristalle eine höhere integrale gebeugte Intensität der reflektierten Strahlung haben. White hat die integrale gebeugte Intensität in Abhängigkeit von der Kristalldeformation beschrieben und in einem Experiment bestimmt. Er hat auch Reflexionskurven für elastisch gebogene Quarz-Kristalle aufgenommen.

Eine dynamische Theorie der Röntgenbeugung an torisch gebogenen Kristallen wurde von Taupin [7] entwickelt. Er hat eine Differentialgleichung der ersten Ordnung gefunden, die man leicht numerisch integrieren kann und die die

Reflexionskurven von gebogenen Kristallen beschreibt. Brown und Fatemi [9] (1974) haben die integrale gebeugte Intensität für ebene und gebogene Kristalle in symmetrischer Bragggeometrie dargelegt. Sie haben gezeigt, daß die gemessene integrale Intensität der gebeugten Strahlung zwischen dem Wert für Mosaik-Kristalle und dem Wert für perfekte Kristalle liegt. Chukhovskii und Petrashen [13] (1977) haben die Gleichungen von Takagi und Taupin für gebogene Kristalle im Laue-Fall analytisch gelöst. Die Lösung wird mit Hilfe der hypergeometrischen Funktionen dargestellt. Berreman [14] (1979) hat die Reflexionskurven in Abhängigkeit von der Wellenlänge simuliert und für die integrale Intensität eine einfache Formel entwickelt. Brown und Fatemi [15] (1980) haben konvex gebogene KAP- und LiF-Kristalle als dispersive Elemente in einem Spektrographen für die Diagnostik von heißem Plasma vorgeschlagen. Gronkowski und Malgrange [23-24] (1984) beschrieben die Propagation der Röntgenstrahlen in Kristallen mit einem konstanten Deformationsgradienten. Die Theorie wurde mittels Ray-tracing auf Basis der Takagi-Gleichungen geprüft. Unter Anwendung von zylindrischen Funktionen entwickelten Chukhovskii und Malgrange [35] eine Röntgenbeugungstheorie an einem gebogenen Kristall im Bragg-Fall. Chang und Mitautoren [58] (1994) bestimmten die integrale gebeugte Intensität eines zylindrisch gebogenen PET Kristalls im Wellenlängenbereich von 0.3 bis 0.8nm im Experiment. Chukhovskii und Mitautoren [62] (1994) gaben eine theoretische Grenze für die Wellenoptik bei gebogenen Kristallen an. Chang und Förster [71] (1995) beschrieben die optischen Eigenschaften von Kristallen mit zweidimensionalen Modulationen der Oberfläche. Die zeitabhängige Röntgenbeugung im Bragg-Fall untersuchten Chukhovskii und Förster [63] (1995). Röntgenoptiken auf Basis der Bragg-Fresnel-Reflexion wurden von Chukhovskii u.a. [72] (1996) beschrieben. Der Einfluß der Anisotropie auf die Reflexionseigenschaften von gebogenen Kristallen wurde von Chukhovskii u.a. [74] (1996) analytisch dargestellt. Ein Beugungslimit für die Röntgenoptik wurde von Chang und Förster [83] (1997) angegeben. Absorption und primäre Extinktion in Zylindern und Sphären legten Thorkildsen und Larsen [99-100] (1998) und Chukhovskii u.a. [101] (1998) dar. Hölzer u.a. [111] (1998) entwickelten den PC-Code DIXI für die Simulation der Reflexionskurven für gebogene Kristalle.

1.3 Die Methoden zur Rekonstruktion der Deformation in dünnen Kristallschichten

Die hochauflösende Röntgendiffraktometrie ist eine geeignete Methode für die Untersuchung der strukturellen Deformation des Kristallgitters von Mischkristallen. Sie ist zerstörungsfrei und schnell [12-115]. Die Rekonstruktion der Deformation und der Störung des Kristalls aus der gemessenen Rockingkurve wird infolge des Phasenproblems kompliziert, da im allgemeinen die Lösung mehrdeutig sein kann [36,112]. Deshalb ist es notwendig, eine physikalisch korrekte Abschätzung der Anfangswerte der Deformationsverteilung in der Kristallschicht zu haben, die durch Anpassung genauer bestimmt werden kann.

Die Berechnung der durchschnittlichen Deformation und der Dicke der dünnen gestörten Kristallschichten wurde von Afanas'ev u.a. [12] anhand einfacher analytischer Methoden beschrieben. Das Integral der gemessenen Rockingkurve über den Winkel liefert eine gute Abschätzung der Dicke der gestörten Kristallschicht. Durch das Verhältnis des Integrals vom Produkt der Rockingkurve und der Winkelvariable zum Integral der Kurve ist ein Wert für die durchschnittliche Deformation der gestörten Kristallschicht gegeben.

Weil diese Ergebnisse nur von der gemessenen Rockingkurve abhängen, liefern sie modellunabhängige eindeutige Werte der wichtigsten Parameter der Kristallschicht. Eine weitere Entwicklung des Verfahrens der Integralcharakteristik wurde von S.Stepanov vorgeschlagen [30]. Indessen kann die Bestimmung der Deformations- und Störungsverteilungen mehrdeutige Lösungen haben. Zum Beispiel haben die Schichten mit dem Parameter $E(z)\exp(-iF(z))$ und $E(L-z)\exp(-iF(L-z))$ für den Fall kleiner Absorption die gleichen Reflexionseigenschaften [112] ($E(z)$ ist der statische Debye-Waller-Faktor, $F(z)$ ist ein Verschiebungsfeld der Atome von einer Position in einem perfekten Kristallgitter). Dieses Problem der Mehrdeutigkeit ist mit dem Phasenproblem verknüpft, weil die gemessenen Daten nur die Information über den Betrag der komplexen Reflexionskoeffizienten enthalten und die Phasenabhängigkeit verloren geht. Mittels der Fourier-Analyse wurde ein Anfangswert der Deformationsverteilung mit einer einfachen analytischen Formel in dieser Arbeit ermittelt. Allerdings hängt das Ergebnis dieser Formel stark von der

Absorption der Kristallschicht und der Form des Deformationsprofils ab [112].

Andere analytische Methoden beruhen auf analytischen Lösungen für das Reflexionsvermögen. Die Werte des Kristallschichtparameters ergeben sich aus der Analyse der Schwingungen der Reflexionskurve. Eine einfache Näherung wurde von Kolpakov und Punegov [31] vorgeschlagen. Die Deformation und Dicke einer Schicht werden von der Schwingungsstruktur der Rockingkurve für einen Kristall mit einem konstanten Kompositionsgefälle bestimmt. In der Regel bauen diese Analysen auf der kinematischen Theorie der Röntgenbeugung auf. Eine andere Berechnung von Deformationsprofilen wurde von Kohn vorgeschlagen. Sie baut auf der Methode der feststehenden Phase auf und ist für eine monotone Deformationsverteilung sehr geeignet. Aristov u.a. [52] beschrieben die Methode für die Bestimmung der zweidimensionalen Gitterverzerrung, die auf dem Algorithmus der Phasenerholung von Petrashen und Chukhovskii begründet ist.

Diese analytischen Methoden kann man jedoch nur als Anfangsnäherung verwenden. Die weitere Bestimmung der Deformation und Störung der Kristallschicht wird mit Hilfe verschiedener Fitprozeduren durchgeführt. Diese Algorithmen minimieren den Unterschied zwischen der gemessenen Rockingkurve und der simulierten Reflexionskurve. Um die willkürliche Deformations- und Störungsverteilungen in ionenimplantierten Kristallen zu bewerten, wurden in den frühen Artikeln [18] iterative "Trial & Error" Verfahren benutzt. Die Rolle des statischen Debye-Waller-Faktors wurde in der Analyse von Rockingkurven in [57,70] besprochen. Detailliertere Informationen über die Gitterverzerrung in den Kristallschichten werden mit Methoden, die auf einer statistischen Approximation der Röntgenbeugungstheorie für Kristalle mit Strukturfehlern [77-79] basieren, erhalten. Eine Methode, die auf der diskreten Fourier - Transformation aufgebaut ist, wurde in [56] vorgeschlagen. Es ist wohlbekannt, daß der komplexe kinematische Reflexionsfaktor eine Fourier-Transformation von Parametern der Kristallschicht ist. Die umgekehrte Fourier-Transformation kann benutzt werden, um die Deformation und den statischen Debye-Waller-Faktor mit Hilfe eines Iterationsverfahrens [57,78,79,112-113,130,135] festzustellen.

Im Kapitel 5 werden Methoden entwickelt, die das umgekehrte (inverse) Problem der Röntgenbeugung an Vielfachschichten lösen. Um dieses Problem zu lösen, wird eine einfache analytische Lösung für eine erste Abschätzung der Deformationsverteilung präsentiert, die mit einem iterativen Verfahren genauer

bestimmt werden kann. Die Lösungen beruhen auf der Fourier-Analyse der Reflexionskurve in kinematischer Näherung.

Kapitel 2

Theorie der Röntgenbeugung

Um experimentelle Ergebnisse zu analysieren, wird in diesem Kapitel Röntgenbeugungstheorie dargestellt. In Rahmen dieser Arbeit wurde die bekannte Theorie von Parratt in Form von Differentialgleichungen umgeschrieben. Die Taupin'sche Theorie für asymmetrisch geschnittene, torisch gebogene Kristalle wurde weiterentwickelt.

Im homogenen Medium mit einer konstanten Brechzahl propagieren die Strahlen ohne Ablenkung. Für die Beschreibung des Durchgangs der Strahlen in diesem Fall braucht man nur den Wert der Suszeptibilität des Mediums oder den Absorptionskoeffizienten zu kennen. Die Wellen im Medium beschreibt man mit der Helmholtz-Gleichung

$$\Delta E + k^2 n^2 E = 0,$$

wobei k die Wellenzahl und n der komplexe Brechungsindex ist. Wenn das Medium inhomogen ist, gibt es auch reflektierte Wellen. Die komplexe Amplitude der reflektierten Wellen und deren Intensität hängen von den Eigenschaften des Mediums und ihrem Inhomogenitätsgrad ab. Das Wellenfeld im Medium wird als eine Summe der durchgehenden und reflektierten Wellen beschrieben. Um Reflexion und Beugung der Röntgenstrahlen zu beschreiben, wird die Helmholtz-Gleichung mit dem ortsabhängigen Brechungsindex angewandt. Im allgemeinen Fall ist die Lösung der Wellengleichung mit willkürlicher Abhängigkeit des Brechungsindex vom Ort sehr schwierig. Die Lösung ist jedoch möglich, wenn verschiedene Vereinfachungen gemacht werden. Der einfachste Zugang zu diesem Problem ist die Vernachlässigung der Mehrfachstreuung. In diesem Falle spricht man von der sogenannten kinematischen Näherung. Dann ist die komplexe Amplitude der reflektierten Strahlen ein lineares Funktional (eine Fourier-Transformation vom Orts – in den Winkelraum) über das Produkt aus der Amplitude der durchgehenden Welle und einem Faktor, der von den Materialeigenschaften abhängt. Eine andere Vereinfachung ist eine

eindimensionale Abhängigkeit des Brechungsindex vom Ort des Mediums. Die Welle wird an der Grenze der parallelen Schichten mit verschiedenen Brechungsindices reflektiert. Die Reflexion der Wellen an der Grenze zweier Medien wird mit der Fresnel-Gleichung [132] beschrieben, die als eine Grundlage für eine allgemeinere Beugungstheorie genommen werden kann.

Ein sehr wichtiger Fall ist die Reflexion der Strahlen an einem Medium mit einer periodischen Abhängigkeit des Brechungsindex von der Tiefe. Die durchgehende Welle bekommt dann Fourier-Harmonische, die reflektierte Wellen sind. Die Grundgleichungen für die Amplituden der reflektierten und durchgehenden Wellen erhält man durch Fourier-Analyse (Takagi [6,8] und Taupin [7]), wobei die Mehrfachstreuung berücksichtigt wird. Man spricht dann von der dynamischen Theorie. Wenn man eine Stufenabhängigkeit (eine scharfe Grenze des Schichtsystems) des Brechungsindex betrachtet, wird die Reflexion und Transmission mit einem Parratt-Algorithmus [5] (1954) beschrieben. Die Simulationen mit beiden Methoden ergeben gleiche Ergebnisse, wobei das Medium mit kontinuierlicher Abhängigkeit des Brechungsindex von der Tiefe im Fall des Parratt-Algorithmus mit kleinen Schritten berechnet werden muß. Aus dem Parratt-Algorithmus wurde eine Gleichung entwickelt, die allgemeiner ist als die Taupin-Gleichung, weil die Reflexion für alle Einfallswinkel beschrieben werden kann.

Der nächste Schritt ist die Beschreibung der Reflexion an Schichten mit unebenen Grenzen [133]. In diesem Fall wird die Einfallsstrahlung in einem breiten Winkelintervall reflektiert. Die Winkelverteilung der reflektierten Wellen in der dynamischen Theorie wurde in Rahmen dieser Arbeit mit einer detaillierten Fourier-Analyse der Wellengleichung beschrieben [135].

In der Regel führt die Theorie nur eine Winkelabweichung ein, die mit der Änderung des Einfallswinkels verknüpft ist. Aber sehr oft haben die reflektierten Strahlen eine bestimmte Winkelverteilung der Intensität, die von dem Reflexionswinkel auch für konstante Einfallswinkel abhängig ist. Die Intensitätsverteilung der reflektierten Strahlen wird mit einem zusätzlichen Kristall-Analysator bestimmt. Um diese Verteilung zu beschreiben, muß die Interferenz der reflektierten Strahlen in Betracht gezogen werden. Die Winkelabhängigkeit der reflektierten Strahlen wird mit einem zusätzlichen Phasenfaktor im Reflexionskoeffizienten berücksichtigt. Die Integration der reflektierten Wellen über die Kristalloberfläche ergibt die Intensitätsverteilung, die vom Reflexionswinkel

abhängt. Die mit diesem Phasenfaktor korrigierte Theorie gibt die Möglichkeit, mehrere Phänomene der Röntgenbeugungsexperimente zu beschreiben. Die Theorie kann man auch für die Simulation der Röntgenbeugung an Kristallen mit unebenen Oberflächen benutzen. Die verbesserte Theorie führt auch einen neuen Ausdruck für die Winkelvariable ein.

2.1 Kinematische Reflexion von Röntgenstrahlen an Vielschichtsystemen

Im folgenden wird die kinematische Streuung von Röntgenstrahlen an Vielfachschichten betrachtet. Die Rückstreuung der reflektierten Strahlen wird in der Betrachtung vernachlässigt. Wenn die Strahlung durch die Grenzschicht zweier Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindices geht, gibt es an der Grenze Reflexion. In diesem Fall braucht man nur eine dünne Schicht an der Grenze zwischen den zwei Materialien zu berücksichtigen. Um die Reflexionseigenschaften der Vielfachschichten zu beschreiben, braucht man eine analytische Beschreibung der Streuung der Strahlung an den Vielfachschichten. Die Gleichung in der kinematischen Näherung für den Reflexionskoeffizienten wird aus der bekannten Fresnel-Gleichung bekommen. Die Fresnelsche Formel für den Reflexionskoeffizient der Strahlung mit σ -Polarisation lautet:

$$R = \frac{\cos \varphi - \sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi}}. \quad (2.1)$$

Wenn sich der Brechungsindex des Mediums mit der Tiefe z ändert, hängt der Winkel φ von dieser Koordinate ab:

$$\sin \varphi(z) = \frac{\sin \varphi_0}{n(z)}. \quad (2.2)$$

Dies ergibt dann den folgenden Ausdruck:

$$dR(z) = \frac{\sqrt{n^2(z) - n_0^2 \sin^2 \varphi_0} - \sqrt{(n(z) + dn)^2 - n_0^2 \sin^2 \varphi_0}}{\sqrt{n^2(z) - n_0^2 \sin^2 \varphi_0} + \sqrt{(n(z) + dn)^2 - n_0^2 \sin^2 \varphi_0}}, \quad (2.3)$$

oder im Limes $dz \rightarrow 0$

$$\frac{dR(z)}{dz} = -\frac{n(z)}{2(n^2(z) - n_0^2 \sin^2 \varphi_0)} \frac{dn(z)}{dz}. \quad (2.4)$$

Aus der Gleichung (2.4) ergibt sich die Lösung des Problems in kinematischer Näherung:

$$R_g(\theta, \lambda) = \frac{1}{2} \int_0^L \exp \left[-2 \int_0^z \mu(x) dx \right] \frac{n(z)}{n^2(z) - n_0^2 \cos^2 \theta} \frac{dn(z)}{dz} \exp(-2ikz \sin \theta) dz, \quad (2.5)$$

wobei θ der Einfallswinkel, μ der Absorptionskoeffizient, k der Wellenvektor ($k=2\pi/\lambda$), λ die Wellenlänge, und n der von z abhängige Brechungsindex des Materials ist.

Im Fall der periodischen Abhängigkeit des Brechungsindexes des Mediums von der Tiefe z wird das Maximum der Reflektivität erreicht, wenn die Dicke der Schichten, die Wellenlänge und der Einfallswinkel die Braggsche Gleichung erfüllen:

$$2d \sin \theta = \lambda, \quad (2.7)$$

wobei d die Periode der Multischichten ist.

2.2 Grundgleichungen im allgemeinen Fall der Beugung

In Kapitel 2.1 wurde gezeigt, daß die Inhomogenität des Mediums die Quelle der Brechung ist. Für die eindimensionale Ortsabhängigkeit des Brechungsindexes kann man den Reflexionskoeffizienten der Strahlung bestimmen. Um die Beugung für ein System mit beliebigen optischen Eigenschaften des bestrahlten Mediums zu beschreiben, wird der Parratt-Algorithmus [5,60,132] benutzt:

$$R(z-dz) = \exp(2i k_z(z) dz) \frac{dr(z) + R(z)}{1 + R(z)dr(z)}, \quad (2.8)$$

wobei $dr(z)$ der Reflexionskoeffizient der oberen dünnen Schicht ist (2.3). Aus den Gleichungen (2.3,2.8) resultiert folgende Differentialgleichung:

$$\frac{d}{dz} R_{\text{dyn}}(z) = -\frac{dr(z)}{dz} - 2i k_z R_{\text{dyn}}(z) + \frac{dr(z)}{dz} R_{\text{dyn}}^2(z) \quad (2.9)$$

wobei

$$k_z(z) = k \sqrt{n^2(z) - \cos^2 \theta}. \quad (2.10)$$

Da es sich um eine Schwingungsgleichung handelt, wird folgender Ansatz gemacht:

$$R_{\text{dyn}}(z) = R_g(z) \exp \left(-2i \int_0^z k_z(x) dx \right), \quad (2.11)$$

und man erhält eine einfache Gleichung, die man integrieren kann:

$$\frac{d}{dz} R_g(z) = -\exp\left(2i \int_0^z k_z(x) dx\right) \frac{dr(z)}{dz} + \exp\left(-2i \int_0^z k_z(x) dx\right) \frac{dr(z)}{dz} R_g^2(z). \quad (2.12)$$

mit der Randbedingung

$$R_g \Big|_{z=L} = 0. \quad (2.13)$$

Das erste Glied der Differentialgleichung (2.12) beschreibt die Reflektivität der Röntgenstrahlen in kinematischer Näherung (s. Kap.(2.1)).

Gleichung (2.12) ist ähnlich zur Taupin'schen Gleichung, hat aber ein breiteres Anwendungsfeld, da sie die Röntgenbeugung an Kristallen und amorphen Multischichten für beliebige Einfallswinkel beschreiben kann. Um das zu zeigen, wird der Brechungsindex in eine Fourier-Reihe entwickelt:

$$n(z) = 1 + \frac{\chi_{-g} \exp(-igr + igu(z)) + \chi_0 + \chi_g \exp(igr - igu(z))}{2}, \quad (2.14)$$

wobei \mathbf{g} ein Beugungsvektor, $\mathbf{u}(z)$ ein Verschiebungsfeld, χ_h die h-te Fourier-Komponente der Suszeptibilität sind und

$$\mathbf{gr} = -\frac{4\pi \sin \theta_B}{\lambda} z, \quad (2.15)$$

$$k\sqrt{n^2(z) - \cos^2 \theta} = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} + \eta. \quad (2.16)$$

Nach dem Einsetzen von (2.14-2.16) in (2.12) ergibt sich die gewöhnliche Taupin'sche Gleichung:

$$\frac{d}{dz} R_g(z) = -i\sigma_g \exp(i\eta z + igu(z)) - i\sigma_{-g} \exp(-i\eta z - igu(z)) R_g^2(z), \quad (2.17)$$

mit einer Winkelvariablen:

$$\eta = \frac{2\pi(\chi_0 + \sin(2\theta_B)\Delta\theta)}{\lambda \sin \theta_B}, \quad (2.18)$$

und

$$\sigma_g = \frac{\pi C \chi_g}{\lambda \sin \theta_B}, \quad \sigma_{-g} = \frac{\pi C \chi_{-g}}{\lambda \sin \theta_B}. \quad (2.19)$$

Die Gleichung (2.12) beschreibt den allgemeinen Fall der dynamischen Beugung der Strahlung in einem inhomogenen Medium.

Es folgt der Vergleich zwischen der numerischen Simulation mit dem Parratt'schen Algorithmus, der analytischen Gleichung (2.12) und dem Experiment. Beide Theorien (2.8 und 2.12) wurden in einer numerischen Simulation geprüft. Für Experiment und Simulationen wurde eine Cr/Sc Multischicht für $N K_\alpha$ Strahlung

(3.16nm) benutzt. Die Periode des Systems war 3.17nm und Periodenzahl war 150. Die Übergänge zwischen Schichten waren 0.4nm dick. In Abb. 2.1 sind die Ergebnisse der Simulation gezeigt. Beide Theorien geben das gleiche Resultat. Die Simulation wurde zur Vereinfachung für die Multischichten ohne Rauheit simuliert (statischer Debye-Waller Faktor gleich 1).

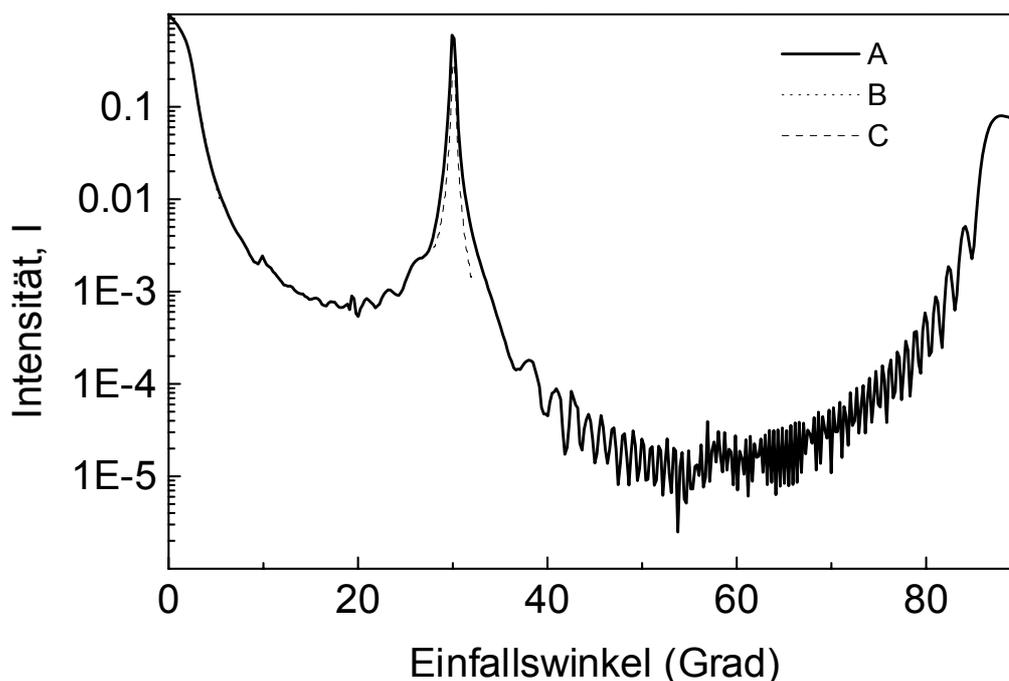


Abb.2.1 Die Reflexionskurven für Cr/Sc Multischichten. Parratt'sche Theorie (A), die entwickelte Theorie (B) (A und B stimmen perfekt überein) und experimentelle Daten (C).

Eine Cr/Sc Multischicht wurde am Fraunhofer Institut für angewandte Optik und Feinmechanik (Jena) hergestellt und am BESSY II untersucht. Die experimentellen Daten zeigen eine geringere Reflektivität als die theoretischen Werte. Dieser Unterschied ist mit Inhomogenitäten in den Multischichten verbunden. Die Rauheit der Schichten ist mit der atomaren Struktur der Materie verbunden und führt zu einer verringerten Reflektivität. Dieser Effekt kann mit Hilfe der statistischen Theorie beschrieben werden. Um eine bessere Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment zu bekommen, wurde die Rauheit von Cr/Sc Multischichten berücksichtigt. Der Wert von 0.4nm für die Rauheit der Multischichten paßt am besten. In Abb. 2.2 ist die Simulation im Vergleich mit dem Experiment gezeigt. Die

Abweichung der theoretischen Kurve von dem Experiment ist mit leichten Variationen der Schichtdicke verbunden.

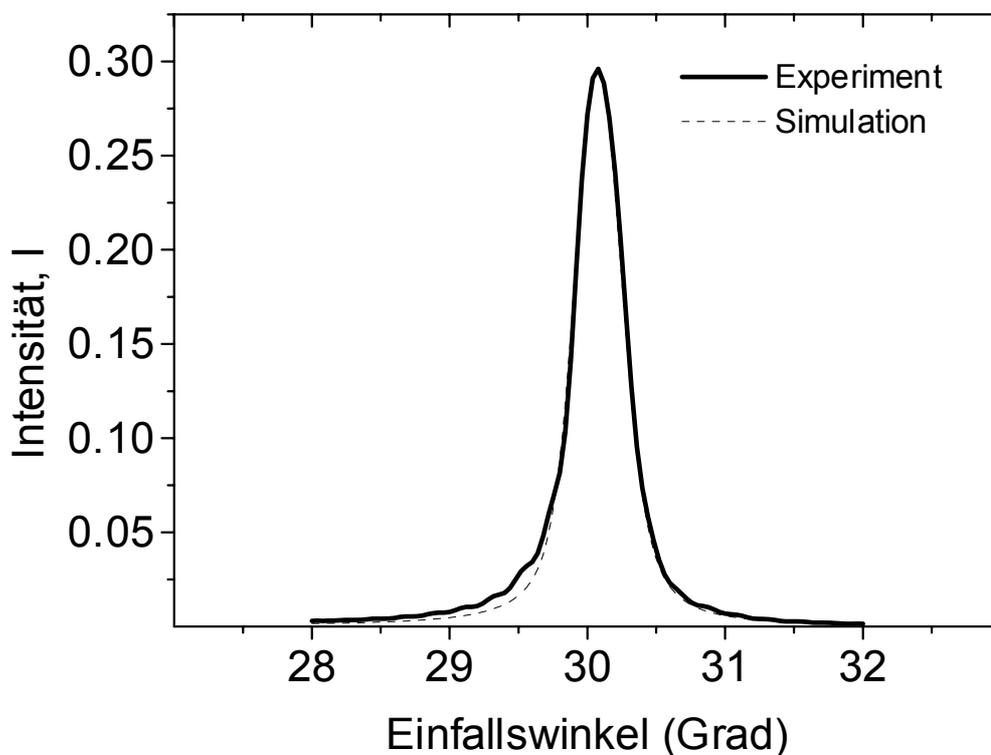


Abb.2.2 Theoretische und experimentelle Reflexionskurven von Cr/Sc Multischichten (3,17nm Periode und 150 Periodenzahl) bei $NK\alpha(3,16nm)$ Strahlung.

2.3 Modifizierte Takagi-Taupin Theorie der Röntgenbeugung an Kristallen

In diesem Kapitel wird die Braggsche Röntgenbeugung an gekrümmten Kristallen diskutiert. Der Ausgangspunkt dieser Theorie ist die Wellengleichung:

$$\Delta \mathbf{E} + k^2 \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} = 0, \quad (2.20)$$

mit

$$\varepsilon(\mathbf{r})=1+\chi(\mathbf{r}),$$

wobei $\chi(\mathbf{r})$ das Produkt aus 4π und der elektrischen Suszeptibilität des Kristalls ist. Weil die Suszeptibilität $\chi(\mathbf{r})$ eine quasiperiodische, koordinatenabhängige Funktion des Kristalls ist, kann man sie in eine Fourierreihe entwickeln:

$$\chi = \chi_{-g}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{r}} + \chi_0 + \chi_g(\mathbf{r})e^{i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{r}}, \quad (2.21)$$

wobei

$$\chi_g(\mathbf{r}) = \chi_g \exp(-W(\mathbf{r})) \exp(-i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r})), \quad \chi_{-g}(\mathbf{r}) = \chi_{-g} \exp(-W(\mathbf{r})) \exp(i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r})) \quad (2.22)$$

die Fourierkoeffizienten sind; $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ ist ein lokaler Beugungsvektor; $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ definiert den Verschiebungsvektor der Atome im Kristallgitter von ihrer Position im idealen Gitter. $\exp(-W(\mathbf{r}))$ ist der statische Debye-Waller-Faktor. Um die Reflexionseigenschaften des Kristalls zu beschreiben, wird die Approximation zweier starker Felder benutzt. Das gesamte elektrische Feld \mathbf{E} kann man durch die Superposition der Einfallswelle und der reflektierten Wellen mit den schwach veränderlichen Amplituden $\mathbf{E}_0(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g, \mathbf{r})$ und $\mathbf{E}_g(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g, \mathbf{r})$ beschreiben:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}_g} \{ \mathbf{E}_0(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g, \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + \mathbf{E}_g(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g, \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_g \mathbf{r}) \}, \quad (2.23)$$

wobei \mathbf{k}_0 und \mathbf{k}_g die Wellenvektoren der Einfallswelle und der reflektierten Wellen sind. Die Richtung des Wellenvektors \mathbf{k}_0 wird festgelegt und die Abhängigkeit der reflektierten Wellen von \mathbf{k}_g wird gesucht. In der Regel gibt es nicht nur eine Welle mit dem Vektor \mathbf{k}_g , die zu der einfallenden Welle mit dem Wellenvektor \mathbf{k}_0 gehört, sondern bestimmte Verteilungen der reflektierten Wellen, die von verschiedenen Parametern abhängen. Zur Vereinfachung wird im Folgenden das Summenzeichen nicht mehr notiert. Dabei wurde

$$|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}_g| = k = \frac{\omega}{c} \quad (2.24)$$

benutzt.

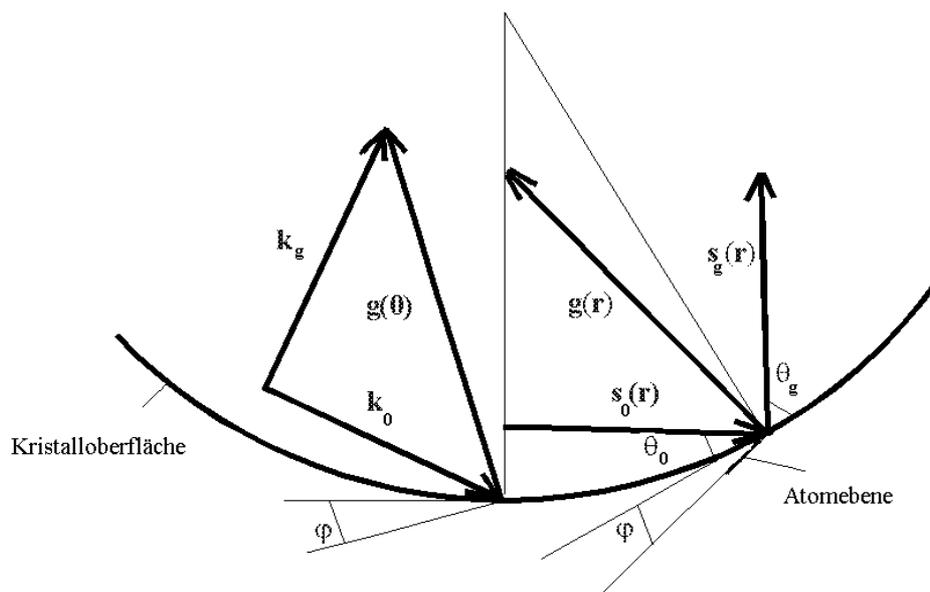


Abb. 2.3 Geometrie der Beugung

Nach dem Einsetzen des Ausdrucks (2.23) in die Gleichung (2.20) ergibt sich:

$$\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) (2i(\mathbf{k}_0, \nabla)\mathbf{E}_0 + \chi\mathbf{k}^2\mathbf{E}_0) + \exp(i\mathbf{k}_g\mathbf{r}) (2i(\mathbf{k}_g, \nabla)\mathbf{E}_g + \chi\mathbf{k}^2\mathbf{E}_g) = 0. \quad (2.25)$$

In perfekten Kristallen erfüllen die Wellenvektoren die Laue Gleichung:

$$\mathbf{k}_g^0 = \mathbf{k}_0^0 + \mathbf{g}.$$

Im weiteren werden kleine Abweichungen der Wellenvektoren \mathbf{k}_0 und \mathbf{k}_g von den idealen Wellenvektoren \mathbf{k}_0^0 und \mathbf{k}_g^0 betrachtet. Zusätzlich werden die lokalen Wellenvektoren $\mathbf{s}_g(\mathbf{r})$ und $\mathbf{s}_0(\mathbf{r})$ (Abb. 2.3) eingeführt, die die Laue Gleichung mit dem lokalen Beugungsvektor $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ erfüllen:

$$\mathbf{s}_g(\mathbf{r}) = \mathbf{s}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{g}(\mathbf{r}). \quad (|\mathbf{g}(\mathbf{r})| = |\mathbf{g}|) \quad (2.26)$$

Unter Inanspruchnahme dieser Beziehung und der quasiperiodischen Eigenschaften der Suszeptibilität und des elektrischen Feldes im Kristall kann man ein System von gekoppelten Gleichungen bekommen. Die erste Gleichung ergibt sich durch multiplizieren des Ausdrucks (2.25) mit $\exp(-i\mathbf{s}_0(\mathbf{r})\mathbf{r})$ und der Integration des Produkts über eine Elementarzelle in dem Punkt \mathbf{r} :

$$\exp(i\Delta\mathbf{k}_0(\mathbf{r})\mathbf{r}) (2i(\mathbf{k}_0, \nabla)\mathbf{E}_0 + \mathbf{k}^2\chi_0\mathbf{E}_0) + \mathbf{k}^2\chi_{-g} \exp(-W(\mathbf{r})) \exp(i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r})) C\mathbf{E}_g \exp(i\Delta\mathbf{k}_g(\mathbf{r})\mathbf{r}) = 0. \quad (2.27)$$

Der Polarisationsfaktor C ist gleich 1 für σ -Polarisation und $\frac{(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g)}{k^2}$ für π -Polarisation. E_0, E_g sind die skalaren Wellenamplituden. $\Delta\mathbf{k}_g(\mathbf{r})$ und $\Delta\mathbf{k}_0(\mathbf{r})$ sind kleine Abweichungen der Wellenvektoren von der lokalen Laue Bedingung (2.26):

$$\Delta\mathbf{k}_h(\mathbf{r}) = \mathbf{k}_h - \mathbf{s}_h(\mathbf{r}), \quad (h=0, g).$$

Um die zweite Gleichung zu bekommen, multipliziert man Gleichung (2.25) mit dem Faktor $\exp(-i\mathbf{s}_g(\mathbf{r})\mathbf{r})$ und führt die gleiche Integration durch:

$$\exp(i\Delta\mathbf{k}_g(\mathbf{r})\mathbf{r}) (2i(\mathbf{k}_g, \nabla)\mathbf{E}_g + \mathbf{k}^2\chi_0\mathbf{E}_g) + \mathbf{k}^2\chi_g \exp(-W(\mathbf{r})) \exp(-i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r})) C\mathbf{E}_0 \exp(i\Delta\mathbf{k}_0(\mathbf{r})\mathbf{r}) = 0. \quad (2.28)$$

Zur Vereinfachung substituiert man die Amplitude $E_g(\mathbf{r})$ durch $e_g(\mathbf{r})$ in den Gleichungen (2.27-2.28):

$$E_g = e_g \exp(i((\Delta\mathbf{k}_0(\mathbf{r}) - \Delta\mathbf{k}_g(\mathbf{r}))\mathbf{r})) = e_g \exp(i((\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}(\mathbf{r}) - \mathbf{k}_g)\mathbf{r})), \quad E_0 = e_0. \quad (2.29)$$

Daraus folgt ein System von Differentialgleichungen:

$$2i(\mathbf{k}_0, \nabla)e_0 + \mathbf{k}^2\chi_0 e_0 + \mathbf{k}^2\chi_{-g} \exp(-W(\mathbf{r})) \exp(i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r})) C e_g = 0, \quad (2.30)$$

$$2i(\mathbf{k}_g, \nabla)e_g + \mathbf{k}^2(\chi_0 - \alpha(\mathbf{r}))e_g + \mathbf{k}^2\chi_g \exp(-W(\mathbf{r})) \exp(-i\mathbf{g}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r})) C e_0 = 0, \quad (2.31)$$

Der Parameter α ist von der Abweichung der Wellenvektoren von der lokalen Laue-Bedingung (2.26) abhängig:

$$\alpha(\mathbf{r}) = 2 \frac{(\mathbf{k}_g, \nabla) \left((\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}(\mathbf{r}) - \mathbf{k}_g) \mathbf{r} \right)}{k^2} = 2 \frac{(\mathbf{k}_g, \nabla) \left((\Delta \mathbf{k}_0^0 - \Delta \mathbf{k}_g^0 + \Delta \mathbf{g}(\mathbf{r})) \mathbf{r} \right)}{k^2}, \quad (2.32)$$

$$\Delta \mathbf{k}_{0,g}^0 = \mathbf{k}_{0,g} - \mathbf{k}_{0,g}(0), \quad \Delta \mathbf{g}(\mathbf{r}) = \mathbf{g}(\mathbf{r}) - \mathbf{g}(0). \quad (2.33)$$

Ohne den Phasenfaktor in der Wellenamplitude $E_g(\mathbf{r})$ sind die Gleichungen (2.30-2.31) den Takagi-Taupin Gleichungen analog, wobei $\alpha(\mathbf{r})$ in den Gleichungen (11-12) anders als in den Takagi-Taupin Gleichungen definiert ist. In der Praxis wird die Formel

$$R_g(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g) = \int_S dS e_g(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}(\mathbf{r}) - \mathbf{k}_g) \mathbf{r}) \quad (2.34)$$

benutzt, um die Winkelverteilung der reflektierten Wellen zu beschreiben (S ist die Kristalloberfläche des Kristalls). In diesem Fall zieht man die Interferenz der gebeugten Wellen in Betracht. Für ebene Kristalle und symmetrische Geometrie (der Einfallswinkel ist gleich dem Ausfallswinkel) führt diese Gleichung (2.34) zu den Gesetzen der geometrischen Optik sowie zu den Abweichungen von der geometrischen Optik im Fall der asymmetrischen Geometrie. Mit dem System der Differentialgleichungen (2.30-2.31) und Formel (2.34) wurde die Winkelverteilung der reflektierten Wellen im allgemeinen Fall der Röntgenbeugung an einem Kristall mit dreidimensionaler Gitterverzerrung und beliebiger Oberflächenform beschrieben. Gleichung (2.34) erlaubt die Reflexion der Röntgenstrahlen an einem Kristall mit einer rauhen Oberfläche zu beschreiben.

2.4 Numerische Lösungen der Takagi-Taupin Gleichungen

Im allgemeinen Fall kann man die numerische Lösung der Differentialgleichung durch schrittweise Integration bekommen. Man durchzieht den Kristall mit einem feinmaschigen Netz, dessen Linien parallel zur einfallenden und gebeugten Strahlrichtung laufen. Die Größe der Maschen ist dabei so gewählt, daß die Knotenebenen parallel zur Kristalloberfläche liegen. Der numerische Algorithmus ergibt sich aus den folgenden Gleichungen:

$$e_0(x_0 + \Delta x_0, x_g) = e_0(x_0, x_g) + \Delta x_0 \frac{\partial e_0}{\partial x_0}(x_0, x_g),$$

$$\mathbf{e}_g(x_0, x_g + \Delta x_g) = \mathbf{e}_g(x_0, x_g) + \Delta x_g \frac{\partial \mathbf{e}_g}{\partial x_g}(x_0, x_g). \quad (2.35)$$

wobei Δx_0 und Δx_g die Schrittweite in Richtung der einfallenden bzw. reflektierten Welle beschreiben. Die Randbedingungen lauten für diese Prozedur:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0(\mathbf{r})|_{S(\mathbf{r})} &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}), \\ \mathbf{e}_g(\mathbf{r})|_{P(\mathbf{r})} &= \mathbf{E}_g(\mathbf{r}), \\ \mathbf{e}_g(\mathbf{r})|_{x_g=0} &= 0, \end{aligned} \quad (2.36)$$

wobei $S(\mathbf{r})$ die Kristallvorderseite ist, $P(\mathbf{r})$ die Kristallrückseite ist und die letzte Randbedingung bezeichnet, daß keine gebeugte Welle aus dem linken Rand des Kristalls fällt.

Man kann eine einfachere und schnellere numerische Methode im Fall der ebenen einfallenden Welle, dem ebenen Kristall und einem eindimensionalen Deformationsfeld (in Richtung der z-Achse) verwenden. Da das Wellenfeld nur von einer Koordinate z abhängt und man nur die gebeugte Welle an der Kristallvorderseite berücksichtigt, kann man die Systeme (2.30-2.31) für die durchgehenden und die gebeugten Wellen als eine eindimensionale nichtlineare Differentialgleichung für den Reflexionsfaktor umschreiben. Nach einer einfachen Umformung bekommt man für den Reflexionsfaktor $R_g[U(z), \eta]$:

$$\frac{d}{dz} D_g[U(z), \eta] = -i\sigma_g E(z) - i(\eta - f(z)) D_g[U(z), \eta] - i\sigma_{-g} E(z) D_g^2[U(z), \eta], \quad (2.37)$$

$$R_g[U(z), \eta] = D_g[U(z), \eta] \Big|_{z=0} \quad (2.37a)$$

mit der Randbedingung

$$D_g[U(z), \eta] \Big|_{z=L} = R_{\text{subst}}(\eta), \quad (2.37b)$$

wobei $R_{\text{subst}}(\eta)$ der Reflexionskoeffizient des Substrates ist. η ist die komplexe Winkelvariable

$$\eta = 2\pi[\chi_0 + \sin(2\theta_0)\Delta\theta]/(\lambda\gamma_g) \quad (2.38)$$

und es ist

$$\sigma_0 = \pi\chi_0 / (\lambda\gamma_0); \quad \sigma_{g,-g} = \pi\chi_{g,-g} C/(\lambda|\gamma_{g,0}|), \quad (2.39)$$

C ist der Polarisationsfaktor, \mathbf{g} ist der Beugungsvektor, $\Delta\theta$ ist die Winkelabweichung $\theta - \theta_B$. λ ist die Wellenlänge und χ_h sind die komplexen Fourier - Komponenten der Kristallsuszeptibilität. In diesem Fall bezeichnet $U(z)$ die Eigenschaften der Kristallschicht:

$$U(z)=E(z)\exp(-i\mathbf{g}\mathbf{u}(z)), \quad (2.40)$$

$$f(z)=\frac{d\mathbf{g}\mathbf{u}}{dz} = -\frac{2\pi n}{a^2}\Delta a(z), \quad (2.41)$$

wobei $\Delta a(z)$ die Änderung des Netzebenenabstandes im Punkt z , und $E(z)$ der statischer Debye-Waller Faktor ist.

Man löst diese Gleichung (2.37) mit einer Runge-Kutte-Methode 4. Ordnung. Diese Form der Takagi-Taupin-Gleichungen wird für die praktischen Anwendungen im nächsten Kapitel benutzt.

2.5 Kinematische und semidynamische Näherung

Die Röntgenbeugung an dünnen Kristallschichten kann mit der kinematischen Näherung beschrieben werden, wenn man die Mehrfachstreuung der reflektierten Wellen im Kristall vernachlässigen kann. Das gilt, wenn ein Kristall dünn ist ($E|\sigma_g|L \ll 1$, wobei L die Dicke der Kristallschicht und E der statische Debye-Waller-Faktor ist), oder wenn die Röntgenstrahlen in der Kristallschicht stark absorbiert werden. In diesem Fall setzt man in den Takagi-Taupin-Gleichungen

$$\sigma_{-g}=0 \quad (2.42)$$

ein und erhält eine analytische Lösung des Takagi-Taupin-Systems. Zum Beispiel ergibt sich für die eindimensionale Gleichung (2.57):

$$R_g(\eta)=i\sigma_g \int_0^L E(z)\exp(i\eta z - i\mathbf{g}\mathbf{u}(z))dz, \quad (2.43)$$

wobei L die Dicke der Kristallschicht ist. Der Reflexionsfaktor $R_g(\eta)$ ist eine Fourier Transformation des Kristallparameters ($E(z)\exp(-i\mathbf{g}\mathbf{u}(z))$). Dieser Ausdruck wird für die Bestimmung der Deformation ($u(z)$) und des Störungsgrades der Kristallschichten ($E(z)$) benutzt.

Die Reflexionseigenschaften der dünnen Kristallschichten in einem idealen Substrat kann man mit Hilfe des kinematischen Reflexionsfaktors der Schicht $R_{kin}(\eta)$ und des dynamischen Reflexionsfaktors des Substrats $R_g^{subst}(\eta)$ einfach beschreiben:

$$R_g(\eta) = R_{kin}(\eta) + R_g^{subst}(\eta)\exp(i\eta L - iF(L)), \quad (2.44)$$

wobei L die Dicke der Schicht ist und $F(L)$ ist $\mathbf{g}\mathbf{u}(L)$.

Kapitel 3

Das Ray-Tracing Programm „X-Ray for Windows“

Im zweiten Kapitel wurde die allgemeine Form der Takagi-Taupin-Gleichungen dargestellt. Aber die genaue numerische Lösung dieses Systems in der dreidimensionalen Form benötigt viel Rechenzeit. Zur Minimierung der Dauer der Berechnungen kann man einige Vereinfachungen machen. Da die Quelle und die Bildebene weit genug vom Kristall entfernt sind, kann man die Näherung der ebenen Wellen benutzen. Dann wird die Reflexionskurve mit Hilfe der modifizierten Taupin-Gleichung für einen Kristall ermittelt. Anhand dieser Kurve werden die Wege für jeden Strahl und die Intensitätsverteilung in der Detektorebene berechnet. Dafür wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Algorithmus und das Computerprogramm „X-Ray for Windows“ entwickelt.

In der Regel werden gebogene Kristalle für die Abbildung von Röntgenquellen meistens in der symmetrischen Bragg-Geometrie benutzt, weil man in diesem Fall das System optisch justieren kann und die Herstellung des röntgenoptischen Elements einfacher ist. In diesem Fall können die Gesetze der geometrischen Optik angewandt werden. Das Prinzip der geometrischen Optik ist im wesentlichen in der folgenden Gleichung enthalten:

$$\mathbf{k}_n = \mathbf{k}_0 - \frac{2(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0)}{(\mathbf{n}, \mathbf{n})} \mathbf{n}, \quad (3.1)$$

wobei \mathbf{k}_0 der Wellenvektor der einfallenden Welle, \mathbf{k}_n der Wellenvektor der reflektierten Welle und \mathbf{n} die Normale zur Oberfläche sind. Mit dieser einfachen Gleichung wird die Reflexion der Röntgenstrahlen an den gebogenen Kristallen im symmetrischen Bragg-Fall simuliert. Aber in einigen Fällen sind die asymmetrisch geschnittenen und gebogenen Kristalle besser für verschiedene Experimente mit Röntgenquellen geeignet, weil in gleicher Geometrie mit ihnen eine bessere räumliche oder spektrale Auflösung erreicht werden kann. Um die Röntgenbeugung an

gebogenen Kristallen im asymmetrischen Bragg-Fall zu simulieren, muß Gleichung (3.1) korrigiert werden, weil die reflektierten Wellen eine andere Divergenz haben. Für diese Geometrie wird das Reflexionsgesetz ausgedrückt durch:

$$\mathbf{k}_p = \mathbf{k}_0 - \mathbf{g}(\mathbf{r}) \frac{(\mathbf{k}_0, \mathbf{g}(\mathbf{r}))}{(\mathbf{g}, \mathbf{g})}, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_p + \mathbf{g}(\mathbf{r}) \xi(\Delta\theta_0) \sqrt{\frac{(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0)}{(\mathbf{g}, \mathbf{g})}}, \quad (3.3)$$

$$\xi(\Delta\theta_0) = \sin(\theta_B + \frac{\sin \theta_0}{\sin \theta_g} \Delta\theta_0), \quad (3.4)$$

wobei \mathbf{k}_0 ein Wellenvektor ist, der die Richtung der einfallenden Strahlen beschreibt. \mathbf{k}_g gibt die Richtung der reflektierten Welle an, $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ ist der lokale Beugungsvektor (das heißt die Normale zu der Kristallnetzebene) und \mathbf{k}_p ein zusätzlicher Vektor. Gleichung (3.1) beschreibt den Fall der geometrischen Optik und die Gleichungen (3.2-3.4) geben die Abweichung von dieser Gleichung für den asymmetrischen Fall an. Zur praktischen Anwendung der beschriebenen Methode (Gl. (3.2-3.4)) wurde ein Programm entwickelt. Zur Entwicklung des Ray-Tracing Programms, braucht man Prozeduren für die Berechnungen der Stoßpunkte der einfallenden Wellen mit der Oberfläche des Kristalls und der Bildebene. Diese Routine wurde mit Hilfe der Newtonschen Iterationsmethode programmiert. Das Programm „X-Ray for Windows“ bestimmt für jede Wellenlänge des Strahlungsspektrums die Einfallswinkel zur Kristalloberfläche, was es ermöglicht, den Reflexionskoeffizienten in lokalen Punkten des Kristalls festzustellen. Gleichzeitig wird die aktive Oberfläche des optischen Elements ermittelt und der Wellenlängenbereich der Strahlung, der den größten Anteil an der reflektierten Intensität liefert, ermittelt.

Das Programm wurde so geschrieben, daß die Reflexion an bis zu 5 beliebigen Kristallen hintereinander berechnet werden kann. Das Programm kann mit torischen, sphärischen zylindrischen und ebenen Kristallen, die konkav oder konvex gebogen sein können, umgehen. Bei Mehrkristallanordnungen kann das Programm die Geometrien $(n,+m)$ und $(n,-m)$ berechnen. Als Ergebnis bekommt man die Intensitätsverteilung in der Detektorebene in Form eines zweidimensionalen Falschfarbenbildes (die Farben geben die Intensitätsverteilung in der Bildebene an). Abbildung 3.1 zeigt eine Eingabemaske des Programms „X-Ray for Windows“.

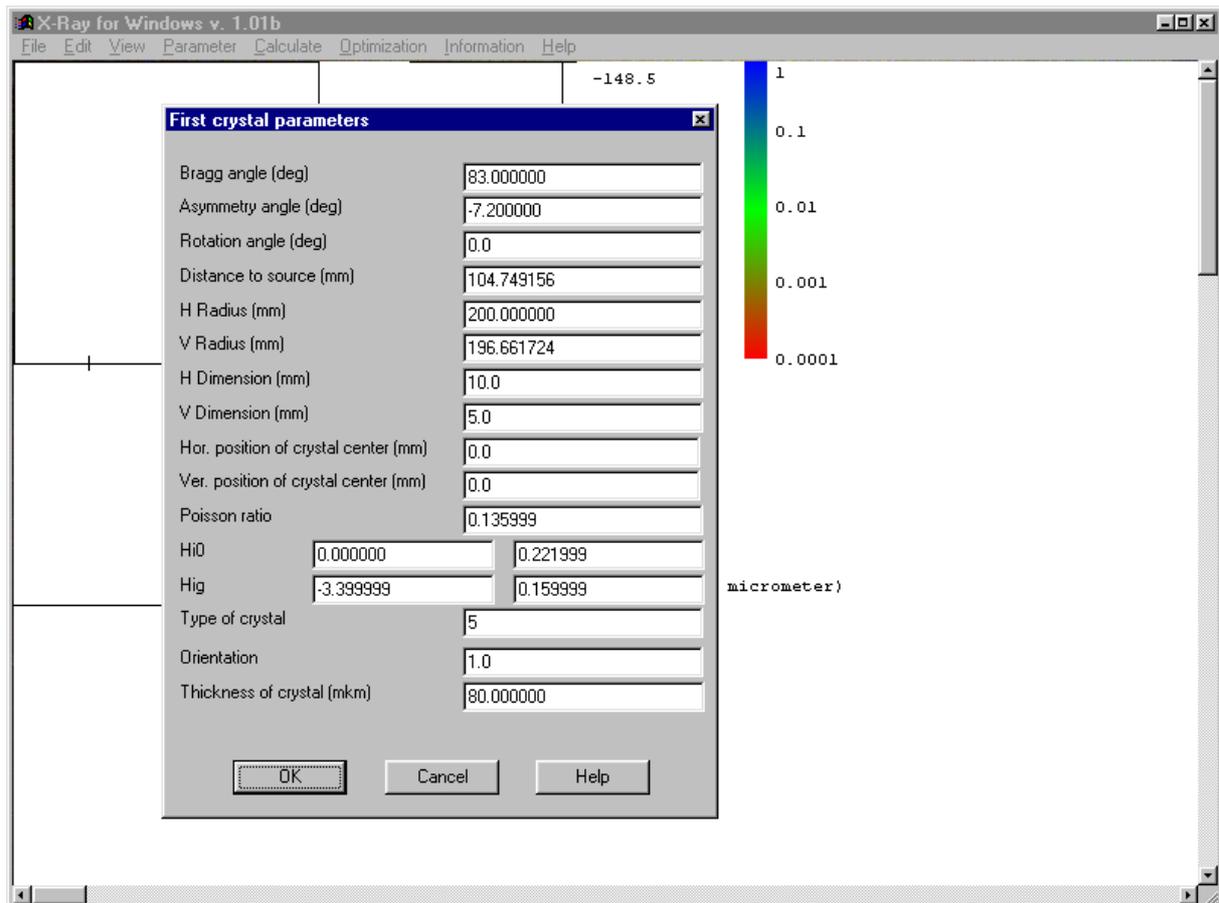


Abb. 3.1 Die Eingabemaske des Programms „X-Ray for Windows“

Kapitel 4

Dynamische Beugungstheorie und Theorie der Abbildungsfehler für asymmetrisch geschnittene und gebogene Kristalle

4.1 Einführung

Die Abbildungen von Röntgenquellen, Spektroskopie, Materialforschung und die Herstellung von Mikroelektronik erfordern Röntgenoptiken, mit denen eine Ortsauflösung im Mikrometer- oder Submikrometer-Bereich erreicht werden kann. Die Optiken basieren auf der Projektion, Reflexion, Beugung und Brechung von Röntgenstrahlen. Die optischen Elemente sind Zonenplatten, ebene und gekrümmte Spiegel, Vielfachschichten, Kapillaren und refraktive Linsen.

Röntgenmikroskope in keV-Bereich werden für die biologische Forschung und die Materialuntersuchung angewendet. Mit modernen Röntgenoptiken kann man eine Ortsauflösung zwischen 20 und 100 Nanometer erreichen. Solche extrem hohen Auflösungen können nur unter Anwendung einer sehr intensiven Röntgenquelle erreicht werden, weil in der Regel mehrere sehr lichtschwache optische Elemente für die Abbildung eingesetzt werden und jedes einzelne optische Element sehr stark die Intensität reduziert. Das bedeutet, daß für hohe Ortsauflösung parallel zur Optimierung der Optik auch Intensität in der Detektorebene optimiert werden muß.

Ein anderer Weg, um höhere Auflösung mit gleichzeitig mehr Intensität zu bekommen, ist das Einsetzen eines einzigen optimierten optischen Elements. Die gewöhnlichen diffraktiven Spiegel bringen Auflösungen zwischen 3 und 10 Mikrometer. In dieser Arbeit werden die Verfahren zur Verbesserung der Ortsauflösung untersucht. Als ein Optimierungsparameter wurde der

Asymmetriewinkel benutzt, da es möglich ist, für bestimmte Bragg-Winkel einen Asymmetriewinkel zu finden, der die optischen Abbildungsfehler minimiert.

4.2 Taupinsche Gleichung für die Röntgenbeugung an asymmetrisch geschnittenen und gebogenen Kristallen

Mit torisch gebogenen Kristallen kann man eine Abbildung der Röntgenquelle mit räumlicher Auflösung bis zu 3 μm im Röntgenbereich erreichen. Es ist interessant, die asymmetrische Geometrie der Beugung zu benutzen, um eine höhere Auflösung zu erzielen. In der Spektroskopie können asymmetrisch geschnittene Kristalle einen Vorzug haben. Um Experimente zu planen und konkrete Parameter (Reflex, Bragg'sche Winkel, Winkel der Asymmetrie, die Krümmungsradien und so weiter) zu wählen, muß man eine entsprechende Reflexionskurve simulieren können. Die Änderungen in der Form der Reflexionskurve führen zu den Änderungen der Intensitätsverteilung der reflektierten Strahlen in der Bildebene. Die reflektierte Integralintensität ist zu bestimmen, um die Durchführbarkeit des Experiments abzuschätzen, weil man eine bestimmte Photonendichte auf dem Detektor haben muß.

Um die Reflexion der Röntgenstrahlen an gebogenen Kristalle numerisch zu simulieren, wird in der Regel die Taupinsche Gleichung benutzt. Das ist eine Differentialgleichung erster Ordnung, die man schnell numerisch mit der Runge-Kutte-Methode lösen kann. Diese Gleichung beschreibt die Röntgenbeugung an einem torisch gebogenen Kristall in symmetrischer Geometrie (die Atomebenen sind parallel zu der Kristalloberfläche). Mit der dargestellten Theorie (s. Kap.2.3) ist es möglich, die Taupinsche Gleichung für asymmetrisch geschnittene und torisch gebogene Kristalle umzuschreiben. Um diese modifizierte Gleichung zu bekommen, wird ein zweidimensionales Koordinatensystem in der Beugungsebene eingeführt und folgende Substitution gemacht:

$$e_g(\mathbf{r}) = D_g(\mathbf{r}), \quad e_0(\mathbf{r}) = D_0(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{g}\mathbf{u}). \quad (4.1)$$

Nach dem Einsetzen des Ausdrucks (4.1) in dem System (2.30-2.31) ergibt sich ein neues System

$$2i(\mathbf{k}_0, \nabla)D_0(\mathbf{r}) + (\chi_0 - f(\mathbf{r})) k^2 D_0(\mathbf{r}) + C \exp(-W(\mathbf{r}))\chi_{-g} k^2 D_g(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.2)$$

$$2i(\mathbf{k}_g, \nabla)D_g(\mathbf{r}) + (\chi_0 - \alpha(\mathbf{r})) k^2 D_g(\mathbf{r}) + C \exp(-W(\mathbf{r}))\chi_g k^2 D_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.3)$$

wobei gilt

$$f(\mathbf{r}) = 2 \frac{(\mathbf{k}_0, \nabla)}{k^2} (\mathbf{g}u(\mathbf{r})). \quad (4.4)$$

α ist in Gleichung (2.32) definiert.

Unter der Voraussetzung, daß die Amplitude der einfallenden Welle eine schwach veränderliche Funktion parallel zur Kristalloberfläche ist, kann man schreiben:

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_g, \nabla) D_0(\mathbf{r}) &= (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}, \nabla) D_0(\mathbf{r}) = \left(1 - \frac{2 \sin(\theta_B) \cos(\varphi)}{\sin(\theta_0)} \right) (\mathbf{k}_0, \nabla) D_0(\mathbf{r}) = \\ &= -\frac{\sin(\theta_g)}{\sin(\theta_0)} (\mathbf{k}_0, \nabla) D_0(\mathbf{r}) = -b (\mathbf{k}_0, \nabla) D_0(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nach Taupin werden die Reflexionskoeffizienten

$$R(\mathbf{r}) = \frac{D_g(\mathbf{r})}{D_0(\mathbf{r})} \quad (4.6)$$

eingeführt und mit Gleichung (4.7) ergibt sich der Ausdruck:

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_g, \nabla) R(\mathbf{r}) &= (\mathbf{k}_g, \nabla) \frac{D_g(\mathbf{r})}{D_0(\mathbf{r})} = \frac{1}{D_0(\mathbf{r})} (\mathbf{k}_g, \nabla) D_g(\mathbf{r}) - \frac{D_g(\mathbf{r})}{D_0^2(\mathbf{r})} (\mathbf{k}_g, \nabla) D_0(\mathbf{r}) = \\ &= i \frac{C \exp(-W(\mathbf{r})) \chi_g k^2}{2} + i \frac{1}{2} (\chi_0 (1+b) - \alpha(\mathbf{r}) - b f(\mathbf{r})) k^2 R(\mathbf{r}) + \\ &+ i \frac{C \exp(-W(\mathbf{r})) \chi_{-g} k^2 b}{2} R^2(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

wobei b der Asymmetriefaktor ist:

$$b = \frac{\sin(\theta_g)}{\sin(\theta_0)}. \quad (4.8)$$

Für die folgende Darstellung werden zwei Variable ξ_0 und ξ_g in den Richtungen der einfallenden und reflektierten Welle eingeführt. Ferner sind dadurch die Koordinaten x (Tangente zu der Kristalloberfläche) und z (Tiefe) gegeben:

$$\begin{aligned} x &= \xi_0 \cos \theta_0 + \xi_g \cos \theta_g \\ z &= \xi_0 \sin \theta_0 - \xi_g \sin \theta_g \end{aligned} \quad (4.9)$$

Weil in Gleichung (4.7) nur eine Ableitung von der Variablen ξ_g auftritt, kann man $\xi_0=0$ setzen, weil eine Lösung in diesem Punkt gesucht ist.

Der Beugungsvektor $\mathbf{g}(0)$ im Punkt $\mathbf{r}=0$ wird beschrieben durch:

$$\mathbf{g}(0) = \frac{2\pi}{d} (-\sin \varphi, -\cos \varphi) \quad (4.10)$$

Weil die Krümmungsradien nicht klein sind (in der Regel sind sie größer als 100mm), ist es möglich einen konstanten Beugungsvektor $\mathbf{g}(0)$ einzuführen und die Kristallkrümmung mit einem Verschiebungsvektor $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ der Atome im gekrümmten Kristallgitter im Vergleich zu ihren Positionen im idealen Gitter zu beschreiben. Für die Winkelvariable (2.32) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{r}) &= 2 \frac{(\mathbf{k}_g, \nabla)}{k^2} ((\Delta \mathbf{k}_0 - \Delta \mathbf{k}_g) \mathbf{r}) = \\ &= -2 \sin(2\theta_B) \Delta \theta_0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

(die Winkelvariable hängt nur von $\Delta \theta_0$ ab, weil $\mathbf{k}_g \Delta \mathbf{k}_g \ll \mathbf{k}_g \Delta \mathbf{k}_0$).

Der Vektor $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ (Verschiebungsfeld der Atome von der Position in dem perfekten Kristallgitter) wird im isotropen Fall als:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \left(-\frac{xz}{R_H}, -\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{R_H} + Kz^2 \left(\frac{1}{R_H} + \frac{1}{R_V} \right) \right) \right) \quad (4.12)$$

dargestellt.

Daraus folgt ein Ausdruck:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) &= 2 \frac{g}{k} \frac{\partial}{\partial \xi_0} \left(\frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})}{g} \right) = \\ &= 2 \frac{g}{k} \left(\begin{aligned} &\sin \varphi \left(\sin(\theta_0 - \theta_g) \frac{1}{R_H} \right) + \\ &+ \cos \varphi \left(\frac{\cos \theta_0 \cos \theta_g}{R_H} - \sin \theta_0 \sin \theta_g K \left(\frac{1}{R_H} + \frac{1}{R_V} \right) \right) \end{aligned} \right) \xi_g \end{aligned} \quad (4.13)$$

Um die endgültige Gleichung zu bekommen, wird das Braggsche Gesetz verwendet:

$$\frac{g}{k} = \frac{\lambda}{d} = 2 \sin \theta_B. \quad (4.14)$$

Entsprechend des Ausdrucks (4.11-4.14) und nach der Rücktransformation von ξ_g in z ergibt sich die modifizierte Taupin'sche Gleichung für den Reflexionsfaktor der Röntgenstrahlen:

$$-\frac{d}{dz} R(z) = i\sigma_g \exp(-W(z)) + i(\eta - f(z))R(z) + i\sigma_{-g} \exp(-W(z))R^2(z), \quad (4.15)$$

wobei

$$\sigma_g = \frac{\pi C \chi_g}{\lambda \sin \theta_g}, \quad \sigma_{-g} = \frac{\pi C \chi_{-g}}{\lambda \sin \theta_0}, \quad (4.16)$$

$$\eta = \frac{\pi(\chi_0(1+b) + 2 \sin 2\theta_B \Delta\theta_0)}{\lambda \sin \theta_g}, \quad (4.17)$$

$$f(z) = -4 \frac{\pi \sin \theta_B}{\lambda \sin \theta_g \sin \theta_0} \left[\begin{array}{l} -\sin \varphi \left(\sin 2\varphi \frac{1}{R_H} \right) + \\ + \cos \varphi \left(\cos \theta_0 \cos \theta_g \frac{1}{R_H} - K \sin \theta_0 \sin \theta_g \left(\frac{1}{R_H} + \frac{1}{R_V} \right) \right) \end{array} \right] z. \quad (4.18)$$

Die Randbedingung im Fall der Bragg'schen Beugung ist

$$R(z)|_{z=L} = 0. \quad (4.19)$$

Der Wert

$$R(\eta) = R(\eta, z)|_{z=0} \quad (4.20)$$

beschreibt den Reflexionskoeffizienten. Die Gleichung (2.34) gibt die Richtung der reflektierten Wellen an. Im symmetrischen Fall sind die Gleichungen (4.15-4.20) gleich der Formel, die Taupin erhalten hat. In Abb.2.4 sind die theoretischen Reflexionskurven für einen sphärisch gebogenen Quarz-Kristall (400) (302.6mm Krümmungsradius) für verschiedene Asymmetriewinkel dargestellt. Man sieht, das der Gradient von Verschiebungsfeld (4.13) stark vom Asymmetriewinkel abhängt. Das kann man für eine Optimierung der Röntgenoptiken benutzen, um eine höhere Lichtstärke zu gewinnen.

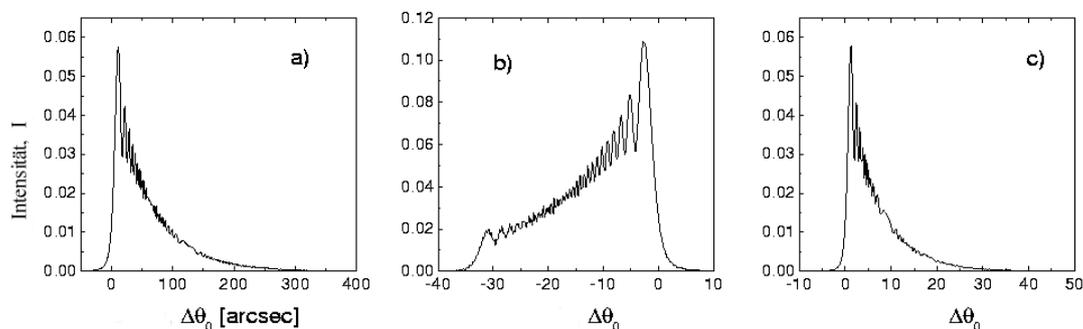


Abb. 4.1 Reflexionskurven für einen sphärisch gebogenen Quarz-Kristall (400) (302.6 mm Krümmungsradius) für verschiedenen Asymmetriewinkel a) 40° , b) 0° , c) -40° .

4.2 Abbildungsfehler eines asymmetrisch geschnittenen und gebogenen Kristalls

Die Abbildungseigenschaften des 2D gebogenen symmetrisch geschnittenen Kristalls sind gut bekannt. Asymmetrisch geschnittene und torisch gebogene Kristalle werden in der Praxis nicht häufig angewendet, weil die Beugungstheorie für diese Fälle recht kompliziert und die Herstellung solch optischer Systeme schwierig ist.

Die Bedingungen zur Fokussierung von Röntgenstrahlen mit asymmetrisch geschnittenen und torisch gebogenen Kristallen kann man mit Hilfe der Laue-Gleichung ableiten, wenn man eine kleine Abweichung der Einfallstrahlen vom Zentrum des Kristalls durch die Kristalloberfläche berücksichtigt. Die Fokussierungseigenschaften des Kristalls unterscheiden sich in der Beugungsebene und senkrecht zur Beugungsebene.

In folgenden sind p und q die Abstände des Zentrums des Kristalls zur Röntgenquelle und zur Detektorebene, R_M und R_S die Krümmungsradien in der horizontalen (Beugungsebene) und in der vertikalen Ebene. θ_B ist der Bragg'sche Winkel und φ ist der Asymmetriewinkel (so, daß der Einfallswinkel des Zentralstrahls $\theta_B - \varphi$ ist und der Winkel des reflektierten Zentralstrahls $\theta_B + \varphi$ ist). Das Reflexionsgesetz nimmt in diesem Fall für die sagittale Ebene folgende Form an:

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = \frac{\sin(\theta_B - \varphi) + \sin(\theta_B + \varphi)}{R_S}, \quad (4.21)$$

und für die Beugungsebene

$$\frac{\sin(\theta_B - \varphi)}{p} + \frac{\sin(\theta_B + \varphi)}{q} = \frac{2}{R_M}. \quad (4.22)$$

Die Vergrößerung M der Abbildung ist

$$M = \frac{q}{p}. \quad (4.23)$$

In der Regel gibt es verschiedene Arten von Abbildungsfehlern. Einige Fehler sind mit der Kristallqualität (Rauheit der Oberfläche, Krümmungsqualität) verknüpft. Nehmen wir an, daß der Kristall perfekt ist, und nur geometrische Fehler in Betracht kommen. Die Größe des Abbildungsflecks für eine Punktquelle hängt in diesem Fall von verschiedenen Parametern ab (wie der effektiven Oberfläche des Kristalls, der Breite

der Reflexionskurve, dem Spektrum der Quelle, der Größe des Bragg- und Asymmetriewinkels, den Krümmungsradien und der Vergrößerung). Im Fall der polychromatischen Fokussierung kann man die Abbildung optimieren. Man kann die Parameter so wählen, daß der Abbildungsfleck eine minimale Größe hat. Um die Bedingungen für diese Optimierung zu finden, wurden die Strahlenwege einer Punktquelle (Abb. 4.2) betrachtet.

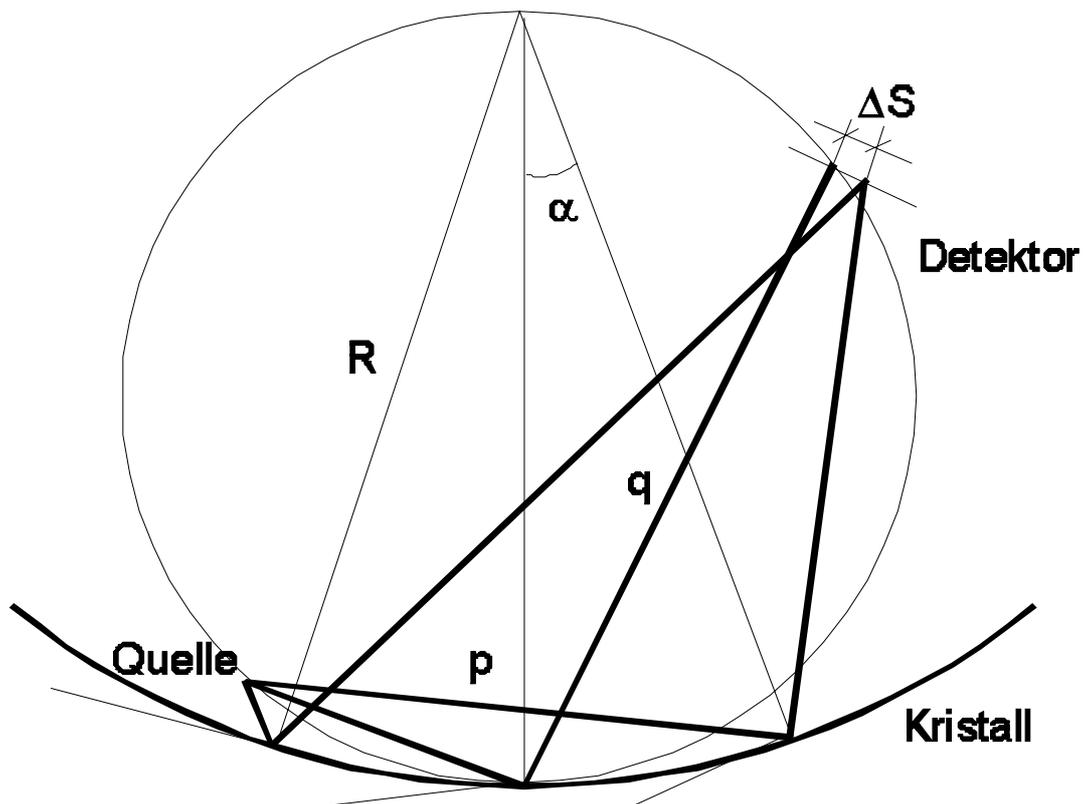


Abb. 4.2 Die Geometrie der Beugung in Guinier Bedingung.

Für einen Punkt z der Kristalloberfläche mit der Winkelkoordinate α werden die einfallenden und reflektierten Strahlen betrachtet. Der Schnittpunkt des reflektierten Zentralstrahls mit dem im Punkt $Z(\alpha)$ reflektierten Strahl ist $q(\alpha)$. Im Limes $\alpha \rightarrow 0$ bekommt man das Reflexionsgesetz (4.22). Für kleine α kann man näherungsweise für $q(\alpha)$ folgenden Ausdruck angeben:

$$q(\alpha) = \frac{pR_M \sin(\theta_B + \varphi)}{2p - R_M \sin(\theta_B - \varphi)} +$$

$$+ \alpha R_M \frac{R_M^2 (\cos(\theta_B - 3\varphi) - \cos(\theta_B + \varphi)) + pR_M (3 \sin(2\theta_B) - 4 \sin(2\varphi)) - 6p^2 \cos(\theta_B + \varphi)}{2(2p - R_M \sin(\theta_B - \varphi))^2}$$

(4.24)

Der Abbildungsfehler ΔS_M für die Punktquelle wird durch Gleichung (4.25) beschrieben:

$$\Delta S_M = \alpha^2 R_M \frac{3M^2 \sin[2(\theta_B - \varphi)] - 2M \sin(2\varphi) - 3 \sin[2(\theta_B + \varphi)]}{4(M \sin(\theta_B - \varphi) + \sin(\theta_B + \varphi))} \quad (4.25)$$

Wenn die Bedingung

$$3M^2 \sin[2(\theta_B - \varphi)] - 2M \sin(2\varphi) - 3 \sin[2(\theta_B + \varphi)] = 0 \quad (4.26)$$

erfüllt ist, wird der Fehler minimal.

Die Bedingung (4.26) gilt für das Zentrum der Quelle. Für die Punkte, die weit vom Zentrum der Quelle entfernt, gibt es einen zusätzlichen Abbildungsfehler ΔS_L , der durch die Gleichung

$$\Delta S_L = 2\alpha/M \frac{M \cos(\theta_B - \varphi) + \cos(\theta_B + \varphi)}{M \sin(\theta_B - \varphi) + \sin(\theta_B + \varphi)} \quad (4.27)$$

gegeben ist.

Ein anderer Fehler ist mit der Änderung der Bandbreite der reflektierten Strahlen verknüpft. Dieser Fehler ΔS_D kann mit Hilfe der Formel

$$\Delta S_D = \left(1 - \frac{\sin(\theta_B - \varphi)}{\sin(\theta_B + \varphi)}\right) \Delta \Omega q \quad (4.28)$$

berechnet werden. Dabei ist $\Delta \Omega$ die Winkelbreite der Reflexionskurve.

Die Summe von ΔS_M , ΔS_L und ΔS_D ergibt den gesamten Abbildungsfehler. Wie aus Gl. (4.25) und (4.27) ersichtlich ist, hängen die ersten zwei Fehler ΔS_M und ΔS_L von der Größe α ab. Der maximale Wert dieser Winkelvariable ist nicht immer gleich der Winkelgröße des Kristalls, sondern ist mit der effektiven Oberfläche des Kristalls verknüpft. Die Größe dieser effektiven Oberfläche beeinflusst die reflektierte Intensität wesentlich. Sie wird von der Divergenz der Reflexionskurve und durch die Breite des Spektrums $\Delta \lambda$ bestimmt. Um die effektive Kristallgröße abzuschätzen, muß man die Abweichung des Einfallswinkels vom Bragg- Winkel aufschreiben. Wenn nur die erste Ordnung von α in Betracht gezogen wird, bekommt man unter Vernachlässigung der höheren Ordnungen von α folgenden Ausdruck:

$$\Delta \theta_0 = \frac{\sin(\theta_B + \varphi) - M \sin(\theta_B - \varphi)}{\sin(\theta_B + \varphi) + M \sin(\theta_B - \varphi)} \alpha \quad (4.29)$$

Man setzt die Formel für die Größe $\Delta \theta_0$ aus der Bragg-Gleichung ein. Dann bekommt man für die effektive Kristallgröße α_M

$$\alpha_M = \frac{\sin(\theta_B + \varphi) + M \sin(\theta_B - \varphi)}{\sin(\theta_B + \varphi) - M \sin(\theta_B - \varphi)} \text{Max} \left[\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan \theta_B, \Delta\Omega \right]. \quad (4.30)$$

Wenn die Quelle und der Detektor auf dem Rowland-Kreis liegen, so daß die Guinier-Fokusbedingung

$$M = \frac{\sin(\theta_B + \varphi)}{\sin(\theta_B - \varphi)} \quad (4.31)$$

erfüllt ist, dann wird α_M von der wirklichen Größe des Kristalls begrenzt.

Oben wurde nur der Einfluß der Krümmung des Spiegels in der Beugungsebene diskutiert. Der Abbildungsfehler für die sagittalen Strahlen ist zweidimensional und hat die Form einer Koma. Der genaue Ausdruck für diesen Fehler ist kompliziert. In allgemeinen Fall wird der Fehler ΔS_{SM} in der meridionalen Ebene und der Fehler ΔS_{SS} in der sagittalen Ebene durch die folgenden Gleichungen beschrieben:

$$\Delta S_{SM} = \alpha_s^2 R_s \Phi_M(\theta_B, \varphi, M), \quad (4.32)$$

$$\Delta S_{SS} = \alpha_s^3 R_s \Phi_S(\theta_B, \varphi, M), \quad (4.33)$$

wobei α_s die Winkelvariable ist, welche die Position der Kristalloberfläche in der sagittalen Ebene definiert. Die Gleichung, die den Fehler für eine ausgedehnte Quelle beschreibt, ist auch recht kompliziert. In erster Näherung nimmt diese Gleichung folgende Form an:

$$\Delta S_{SL} \approx 2\alpha_s M \cos \theta_B \cos \varphi. \quad (4.34)$$

Man kann die Abbildungseigenschaften durch die Verkleinerung der effektiven Kristallgröße verbessern, da die Fehler stark von der Winkelgröße des Kristalls abhängig sind.

Eine Optimierung erweist sich für einen großen Bragg-Winkel als möglich, wenn man eine kleine Asymmetrie einführt. In diesem Fall muß der Einfallswinkel nahe bei 90° liegen. Die sagittalen Abbildungsfehler kann man durch die Wahl einer bestimmten vertikalen Kristallgröße verkleinern.

Um diese Möglichkeit zu demonstrieren, wird hier ein Ray-tracing für einen Quarz-Kristall durchgeführt. Für die Simulation wird der Reflex Q(110) und Röntgenstrahlung mit 0.2438nm Wellenlänge genommen. Der meridionale Krümmungsradius beträgt $R_M=200\text{mm}$ und die Vergrößerung ist 15-fach. Die Kristallgröße ist 10mm x 5mm. Die Abbildungen der Punktquelle werden in Abhängigkeit von dem Asymmetriewinkel simuliert. Der Bragg-Winkel beträgt 83° .

Die Simulation zeigt, daß das Minimum der Abbildungsfehler bei einem Asymmetriewinkel vom -7° (bei senkrechtem Einfall) erreicht wird (Abb.4.3).

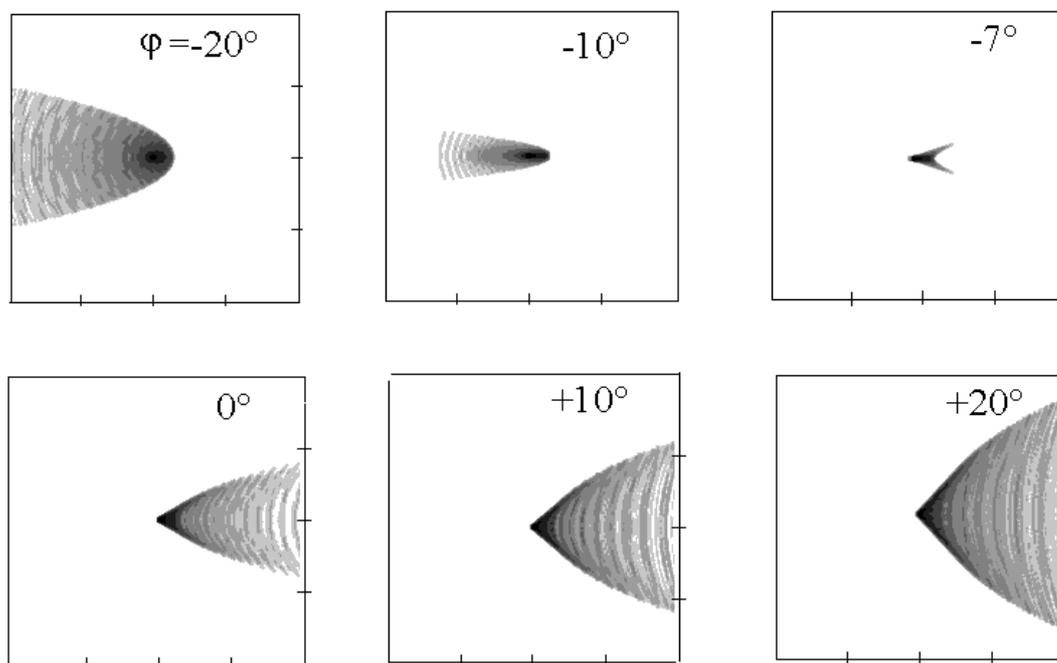


Abb. 4.3 Abbildungen einer Punktquelle für Kristalle mit unterschiedlichen Asymmetriewinkeln φ . Nicht geändert wurden der meridionale Krümmungsradius (200mm), der Bragg-Winkel (83°), die Kristallgröße ($10 \times 5 \text{ mm}^2$), die Detektorgröße ($400 \times 400 \text{ } \mu\text{m}^2$) und die Vergrößerung (15-fach).

4.3 Experimentelle und theoretische Ergebnisse

Die Optimierung der Abbildungseigenschaften gemäß der Gl. (4.26) wurde für einen sphärisch gebogenen Kristall experimentell getestet. Das Testobjekt, ein Goldgitter mit der Größe von $1 \times 0,16 \text{ mm}^2$, einem Spaltabstand von $12,5 \text{ } \mu\text{m}$ und einer Spaltbreite von $8,5 \text{ } \mu\text{m}$, wurde von hinten mit der Ti $K\alpha$ Strahlung ($0,275 \text{ nm}$) durchstrahlt. Ein $80 \text{ } \mu\text{m}$ dicker Quarzkristall mit der Größe von $80 \times 10 \times 0,08 \text{ mm}^3$ und der Oberflächenorientierung (100) wurde mit einem Radius von $888,8 \text{ mm}$ sphärisch gebogen und so orientiert, daß die kristallographische (110) Ebene und die Normale zur Kristalloberfläche in einer horizontalen Ebene liegen. Der aktive Bereich $A \times B$ der Kristalloberfläche wurde durch einen Kollimatorschlitz begrenzt. Der Einfallswinkel

wurde in diesem Fall nahe bei 4° gewählt, der Bragg-Winkel betrug $34,0154^\circ$ und der Asymmetriewinkel (der Winkel zwischen $Q(100)$ und $Q(110)$) war 30° . Die reflektierte Strahlung traf senkrecht auf den Detektor. Als Detektor wurde ein Film der Marke Agfa Structurix D7 benutzt. Die Parameter des Aufbaus erfüllten die Bedingung (4.26). Die Abstände Quelle-Kristall und Kristall-Detektor waren 108mm bzw. 562mm. Daraus ergab sich eine 5,2-fache Vergrößerung.



Abb. 4.4 Topogramm des sphärisch gebogenen Quarz Kristalls.

Die Realstruktur des gebogenen Kristalls wurde topographisch nach der von Hölzer beschriebenen Methode überprüft. Das Topogramm (Abb. 4.4) wurde mit $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung in symmetrischer Reflexion 400 mit einer Winkelempfindlichkeit von 2,5 Winkelminuten aufgenommen und zeigt an mehreren Kristallorten deutliche Kontrastunterschiede. Generell werden derartige Kontraste in Orientierungskontraste und Extinktionskontraste unterteilt. Orientierungskontraste entstehen durch lokale Orientierungsänderungen der Netzebenen, die größer als die Winkelempfindlichkeit der Methode sind. Extinktionskontraste entstehen an lokalen Störungen der Kristallstruktur, an denen das integrale Reflexionsvermögen sich dem kinematischen Limit annähert und dort deutlich höher als das integrale Reflexionsvermögen des Idealkristalls ist. Rechnungen zum integralen Reflexionsvermögen nach PC-Code DIXI (Hölzer) unter den oben genannten experimentellen Bedingungen der Topographie zeigen allerdings, daß das integrale Reflexionsvermögen des perfekten gebogenen Kristalls $8,8 \mu\text{rad}$ beträgt und damit nur unwesentlich kleiner als das kinematische Limit von $10,3 \mu\text{rad}$ ist. Daraus kann abgeschätzt werden, daß das Topogramm in Abbildung 4.4 keinen Extinktionskontrast zeigt. Die Kontraste sind lokalen Orientierungsänderungen in der Größenordnung einiger Winkelminuten zuzuordnen. Solche Orientierungsänderungen können bei der Präparation der

gebogenen Kristalle entstehen. Erfahrungsgemäß durchziehen sie die gesamte Kristalldicke, so daß die Aussagen aus dem Topogramm auch relevant für Experimente mit asymmetrischen Kristallreflexionen sind, bei denen die Eindringtiefe der Röntgenstrahlen in den Kristall sich im Vergleich zur symmetrischen Kristallreflexion ändert.

In Auswertung der Ergebnisse der Topographie wurden die Abbildungsexperimente, bei denen nur eine kleine Kristallfläche ausgenutzt wird, durch geeignetes Ausblenden eines Kristallgebiets optimiert.

Mittels des Kristalls wurde die eindimensionale Abbildung von einem Goldgitter auf Detektor (Röntgenfilm Agfa Structurix D7) erfolgreich aufgenommen (Abb. 4.5). Das Goldgitter bestand aus $4\ \mu\text{m}$ dicken Stäben und hatte eine $12,5\ \mu\text{m}$ Periode. Für die Experimente wurde die TiK_α Strahlung gewählt, die gut das Gold absorbiert. Der Asymmetriewinkel war in diesem Schema 30° und der Braggwinkel war 34° , das entspricht der kristallografischen Ebene (110) von Quarz. Der Einfallswinkel war also 4° .

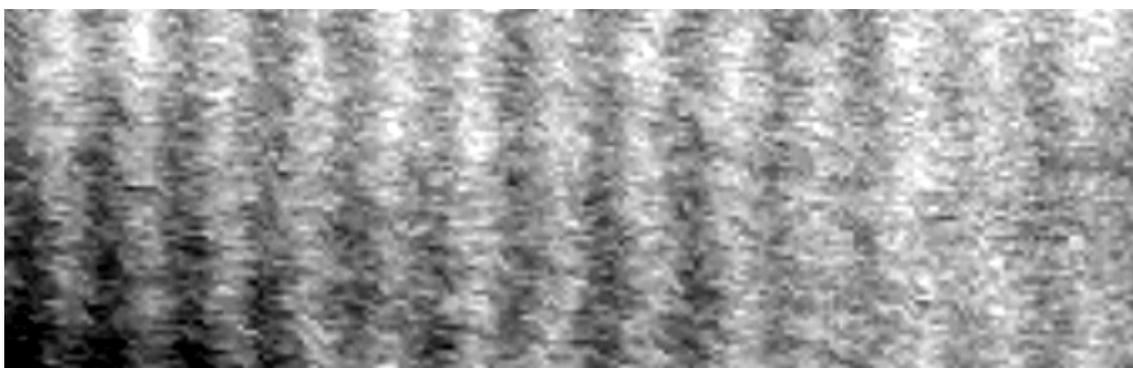


Abb. 4.5 Abbildung der Goldgitter mit Periode $12,5\ \mu\text{m}$ (stark vergrößert).

Wie aus der Abb.4.5-4.6 ersichtlich ist, kann man die Stäbe des Gitters gut auflösen. Die mittlere Halbwertsbreite der Maxima beträgt bei der gegebenen Vergrößerung ca. $7,1\ \mu\text{m}$ und ist damit kleiner als die Breite der Spalte ($8,5\ \mu\text{m}$). Dies kann man verstehen, wenn man einen Fehler (4.28) in Betracht nimmt. Die Schwankungen der Intensität werden durch die Emissionscharakteristik der Röntgenquelle verursacht.

Der experimentelle Aufbau wurde mit dem Ray-tracing Programm "X-Ray for Windows" simuliert. Die Reflexionskurve für den gebogenen Kristall wurde für die gegebene Asymmetrie berechnet. Für jede Wellenlänge des Profils der $\text{Ti K}\alpha$ Linie wurde für eine Reihe von Punktquellen mit einem bestimmten Abstand die Ray-tracing

Prozedur durchgeführt. Die theoretische Intensitätsverteilung in der Detektorebene ist in Abb.4.5 mit einer gestrichelten Linie eingezeichnet. Auf Grund der Asymmetrie, hat die simulierte Abbildung bestimmte Abbildungsfehler, die Fehler ΔS_M wurden dennoch minimiert. Eine gute Übereinstimmung wurde zwischen der Theorie und dem Experiment erreicht.

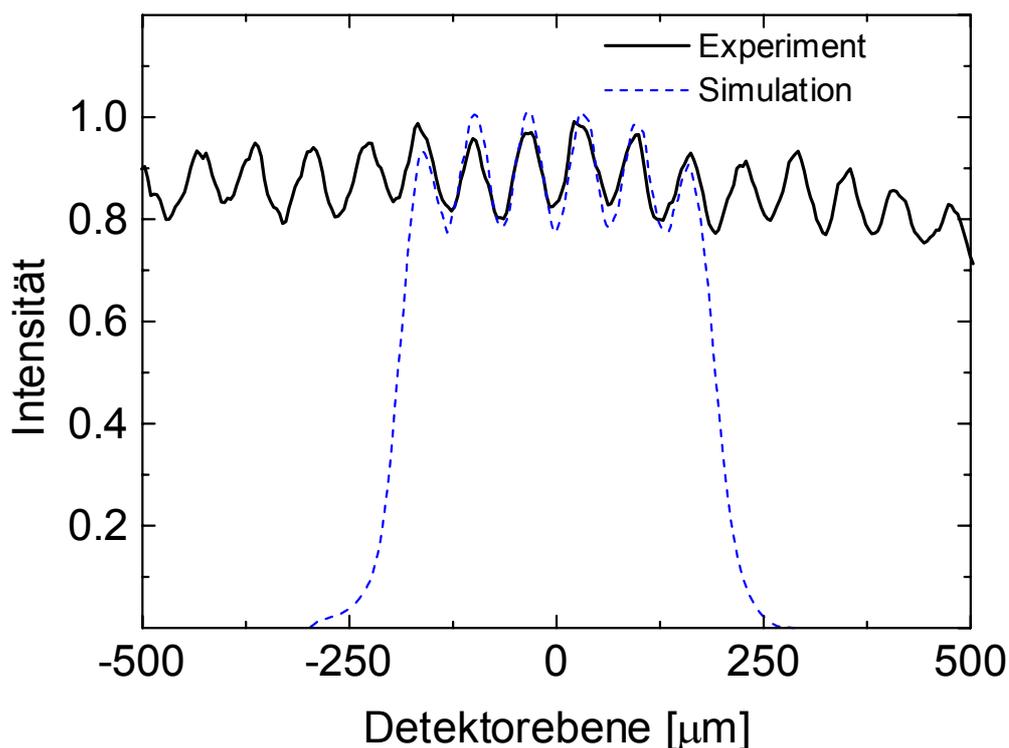


Abb. 4.6 Eindimensionale Abbildung des Goldgitters mit Periode $12,5 \mu\text{m}$. Gemessene Intensitätsverteilung in der Detektorebene (durchgezogene Linie) in Vergleich mit einer Ray-tracing Rechnung (gestrichelte Linie, nur 6 zentrale Spalten sind simuliert).

4.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die modifizierte Taupin-Gleichung für die dynamische Beugungstheorie der Röntgenstrahlen für gebogene Kristalle entwickelt. Die erforderlichen Bedingungen wurden zur Optimierung der Abbildungen mit asymmetrisch geschnittenen und torisch gebogenen Kristallen angegeben. Mit dem optimierten Schema kann man theoretisch die Auflösung in den Submikrometer-Bereich steigern. In diesem Fall muß der Einfallswinkel ungefähr 90° betragen und

der Krümmungsradius groß genug sein, um eine enge Reflexionskurve zu bekommen. Die theoretischen Aussagen wurden im Experiment überprüft. Die gute Übereinstimmung zwischen der Theorie und dem Experiment wurde gezeigt.

Kapitel 5

Diagnostik dünner Kristallschichten

Die folgenden Methoden, die auf einer kinematischen, semidynamischen und dynamischen Näherung der Röntgenbeugungstheorie basieren, werden für die Bestimmung der strukturellen Eigenschaften von Vielschichtsystemen aus experimentellen Daten der Röntgendiffraktometrie im Rahmen dieser Arbeit vorgeschlagen [57,112,113,130]. Die Methoden benutzen die Fourier- Transformation der komplexen Reflexionsamplitude der gebeugten Röntgenstrahlen. Um tiefenabhängige Verteilungen von Deformationen und Störungen in dünnen Kristallschichten zu bestimmen, wurden im Rahmen dieser Arbeit einige Iterationsalgorithmen verwendet. Eine analytische Lösung wird für die anfängliche Bewertung des Deformationprofiles der gestörten Kristallschichten vorgeschlagen [112,130]. Die Möglichkeiten dieser Methode werden für die Analysen der experimentellen Daten von epitaktischen Strukturen auf GaAs Substraten demonstriert.

5.1 Kristallschichten mit einem Konzentrationsgefälle

Epitaktische Schichten, Heterostrukturen und Halbleitersupergitter, die Heterostrukturen mit Stufenprofilen und Multischichten mit Strukturgefälle darstellen, sind interessante Forschungsobjekte.

Diese Strukturen haben eine breite Anwendung in der modernen Elektronik als Bauteile, wie z.B. Laser-Diode, gefunden. Die Effektivität und die Zuverlässigkeit dieser Geräte hängt stark von der Vollkommenheit der Heterostrukturen ab. Diese

Vollkommenheit wird durch das Vorhandensein von Defekten in der Kristallstruktur beeinträchtigt.

Zur Zeit werden die Kristallschichten größtenteils mit MBE (Molekularstrahlepitaxie) hergestellt. Die Objekte haben eine ebene Struktur und eine eindimensionale Abhängigkeit der Netzebenenabstände von der Kristalltiefe. Oft gibt es in diesen Kristallschichten eine lineare Veränderung der Konzentrationsgradienten über die Kristalltiefe, welche die Versetzungsdichte verändert.

5.2 Supergitter

Festkörperstrukturen mit einer zusätzlichen Periode, die größer als der Netzebenenabstand ist, heißen Supergitter und werden in der Optoelektronik eingesetzt. In Abhängigkeit von den benutzten Halbleitermaterialien, der Dicke der Subschichten und der Zahl der Perioden bekommt man Supergitter mit gewünschten Eigenschaften. Dabei wird die Methode der MBE (molecular beam epitaxie) für die Herstellung der Supergitter benutzt. Die relativ niedrige Herstellungstemperatur bei der Produktion senkt bei dieser Methode die Diffusion zwischen den Subschichten. In dem Herstellungsprozeß ist die Struktur und die Intensität der Molekularstrahlen mit einem Computer zu kontrollieren möglich. Für die Herstellung von Supergittern benutzt man verschiedene Kombinationen von Halbleiterelementen, z.B. GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs, InAs-GaSb. Die Weiterentwicklung der Produktion von Supergittern ist eng mit der zerstörungsfreien Parameterkontrolle der Supergitter im Herstellungsprozeß verknüpft. Eine vielversprechende Methode ist die Röntgenbeugung an diesen Kristallschichten.

5.3 Rekonstruktion der Deformation und des statischen Debye-Waller Faktors in der kinematischen Näherung

Die kinematische Näherung benutzt man für die Beschreibung der Röntgenbeugung an dünnen Kristallschichten. Weil der komplexe Reflexionskoeffizient die einfachste analytische Form hat, ist diese Näherung gut für die Analyse der Struktur von dünnen Multischichten geeignet.

Der komplexe Koeffizient der Reflektivität für dünne Kristallschichten wurde in Kapitel 2 für die symmetrische Geometrie der Röntgenbeugung im Braggfall

diskutiert. Die analytische Formel für den Reflexionskoeffizienten ist die Fourier-Transformation der Kristallschichtsuszeptibilität über die Tiefe des Kristalls. Mit der Rücktransformation des komplexen Reflexionskoeffizienten wird die Deformations- und Störungsverteilung bestimmt. Allerdings beschreiben die experimentellen Daten nur die Intensität der gebeugten Wellen. Aus diesem Grund kann die Lösung des Problems in einigen Fällen mehrdeutig sein, da Information über die Phase der Welle verloren geht. Aber wenn es in der Kristallschicht eine hohe Absorption gibt, ist es möglich mit Hilfe der Fourier-Analyse eine gute Anfangsannäherung der Lösung zu bekommen. Im folgenden werden die Grundgleichungen für die Lösung des Problems in der kinematischen Näherung angegeben.

Die Rücktransformation der Reflexionskoeffizienten wird so geschrieben:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\Delta\Omega} R_g(\eta) \exp(-i\eta z) dz = i\sigma_g E(z) \exp(-iF(z)) (\mathfrak{G}(z) \mathfrak{G}(L-z)), \quad (5.1)$$

wobei \mathfrak{G} eine Schrittfunktion ist ($\mathfrak{G}(z) = 0$, wenn $z < 0$ und $\mathfrak{G}(z) = 1$, wenn $z > 0$).

Für die erste Ableitung nach z bekommt man folgende Formel (im Intervall $0 < z < L$):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{\Delta\Omega} -i\eta R_g(\eta) \exp(-i\eta z) dz = \\ = i\sigma_g E(z) \exp(-iF(z)) \left(-i \frac{d}{dz} F(z) + \frac{1}{E(z)} \frac{d}{dz} E(z) \right) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Anhand der Formeln (5.1-5.2) ergeben sich für die bekannte Funktion $R_g(\eta)$ die entsprechende Deformation und der statische Debye-Waller Faktor:

$$E(z) = \left| \frac{1}{2\pi\sigma_g} \int_{\Delta\Omega} R_g(\eta) \exp(-i\eta z) dz \right|, \quad (5.3)$$

$$f(z) = \frac{d}{dz} F(z) = -\frac{2\pi n}{a^2} \Delta a(z) = \operatorname{Re} \left[\frac{\int_{\Delta\Omega} \eta R_g(\eta) \exp(-i\eta z) dz}{\int_{\Delta\Omega} R_g(\eta) \exp(-i\eta z) dz} \right]. \quad (5.4)$$

Die Tiefe der gestörten Kristallschicht wird aus der Fourier-Transformation der Intensität bestimmt. Man fügt die zusätzliche Funktion ein:

$$R_G(\eta) = R_g(\eta) \exp(i\eta z') = i\sigma_g \int_{z'}^{L+z'} E(z-z') \exp(i\eta z - iF(z-z')) dz. \quad (5.5)$$

Dann ergibt die Fourier-Transformation der Intensität folgenden Ausdruck:

$$\int_{\Delta\Omega} I_g(\eta) \exp(-i\eta * z') d\eta = \int_{\Delta\Omega} R_g(\eta) R_G^*(\eta) d\eta =$$

$$= 2\pi |\sigma_g|^2 \int_{z'}^L E(z) E(z-z') \exp(-iF(z) + iF(z-z')) \exp(-2 \operatorname{Im}(\eta)z) dz$$
(5.6)

Zur Abkürzung setzt man

$$A(x, z) = E(x) E(x-z) \exp(-iF(x) + iF(x-z))$$
(5.7)

Für die erste Ableitung der Fourier-Transformation gilt folgendes:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\Delta\Omega} -i\eta * I_g(\eta) \exp(-i\eta * z) d\eta = -|\sigma_g|^2 E(0) E(z) \exp(-iF(z)) +$$

$$-|\sigma_g|^2 \int_z^L A(x, z) \exp(-2 \operatorname{Im}(\eta)x) \left(\frac{d}{dx} \log(E(x-z)) + i f(x-z) \right) dx$$
(5.8)

Man nimmt an, daß das letzte Integral die folgende Bedingung erfüllt:

$$\left| \int_z^L A(x, z) \exp(-2 \operatorname{Im}(\eta)x) \left(\frac{d}{dx} \log(E(x-z)) + i f(x-z) \right) dx \right| \ll 1.$$
(5.9)

Das gilt für eine stark oszillierende Funktion $A(x, z)$ oder im Fall eines kleinen Verschiebungsfeldes $g_u(z)$. Die Beeinflussung des Koeffizienten der Absorption $\operatorname{Im}(\eta)$ muß auch in Betracht gezogen werden.

Aus der Formel (5.8) folgen die erste Ableitung der Fourier-Transformation:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\Delta\Omega} i\eta * I_g(\eta) \exp(-i\eta * z) d\eta = |\sigma_g|^2 E(0) E(z) \exp(-iF(z)) \exp(-2 \operatorname{Im}(\eta)z),$$
(5.10)

und die zweite Ableitung:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\Delta\Omega} (\eta^*)^2 I_g(\eta) \exp(-i\eta * z) d\eta =$$

$$= |\sigma_g|^2 A(z, z) \left(\frac{d}{dz} \log(E(z)) - i f(z) - 2 \operatorname{Im}(\eta) \right) \exp(-2 \operatorname{Im}(\eta)z)$$
(5.11)

Aus den zwei letzten Formeln (5.10-5.11) ergeben sich:

$$-\frac{2\pi n}{a^2} \Delta a(z) = f(z) = \operatorname{Re} \left[\frac{\int (\eta^*)^2 I_g(\eta) \exp(-i\eta^* z) d\eta}{\int \eta^* I_g(\eta) \exp(-i\eta^* z) d\eta} \right]. \quad (5.12)$$

Nach Einsetzen von $z=0$ in die Gleichung (5.8) benutzt man nur den imaginären Teil der Formel und findet die mittlere Deformation in der Kristallschicht:

$$\overline{f(z)} = \operatorname{Re} \left[\frac{\int \eta^* I_g(\eta) d\eta}{\int I_g(\eta) d\eta} \right]. \quad (5.13)$$

Nach Einsetzen von $z'=0$ in die Gleichung (5.6) ergibt sich die Dicke der Schicht:

$$L \approx \frac{1}{2\pi |\sigma_g|^2 E^2 \Delta\Omega} \int I_g(\eta) d\eta. \quad (5.14)$$

Die Genauigkeit des Resultats von Gleichung (5.12) hängt stark von der Absorption und der Form der Funktion $f(z)$ ab. Die Gültigkeitsgrenze von Gleichung (5.12) wurde anhand von numerischen Experimenten geprüft (siehe Abb.5.1). Dies wurde für den GaAs Kristall (Reflex 004) mit den verschiedenen Absorptionskoeffizienten und für eine lineare Abhängigkeit des Deformationsprofils $f(z)$ gemacht. Die Dicke der gestörten Schichten war $2\mu\text{m}$ und der statische Debye-Waller-Faktor war eins. Die Reflexionskurven wurden für diese Schichten simuliert und die Profile der Deformation mit der Gleichung (5.12) bestimmt. Es ist zu sehen, daß man die Originalfunktion $f(z)$ (punktierte Linie) für einen großen Absorptionskoeffizienten mit guter Präzision (siehe Abb.1c,f) bestimmen kann. Bei kleinen Werten des Absorptionskoeffizienten wird die Übereinstimmung zwischen den originalen und berechneten Funktionen schlechter, aber die wachsende Funktion $f(x)$ wird besser bestimmt (siehe Abb.5.1 a,b). Es wurde durch numerische Experimente gefunden, daß man die Deformation mit der Gleichung (5.12) aus Reflexionskurven gut bestimmen kann, wenn die Bedingung

$$\operatorname{Im}(\eta) \cdot L = \frac{2\pi \operatorname{Im}(\chi_0) L}{\lambda \gamma_0} \geq 2 \quad (5.15)$$

erfüllt ist. Man darf nicht vergessen, daß Gleichung (5.12) nur für $z < L$ gilt (man kann die Dicke L der Kristallschicht aus der Gleichung (5.14) berechnen).

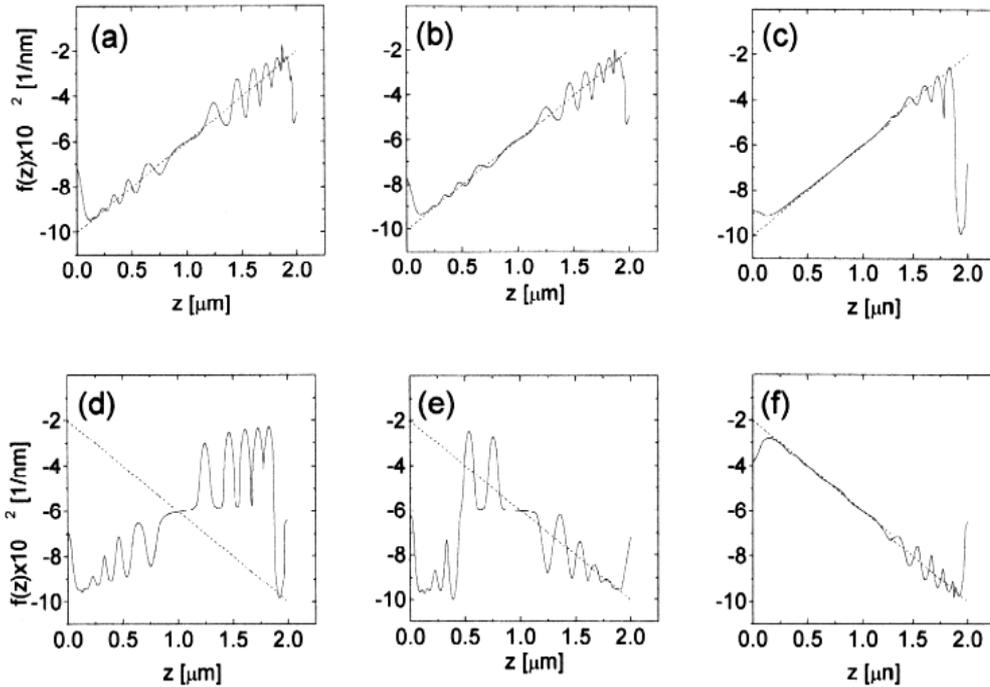


Abb.5.1 Die Bestimmung der Deformation mit der analytischen Formel (5.12) für verschiedene Koeffizienten der Absorption: a,d) $\text{Im}(\eta)L=0.1$; b,e) $\text{Im}(\eta)L=0.5$; c,f) $\text{Im}(\eta)L=2.5$.

Das Resultat (5.12) ist mit der iterativen Prozedur zu verbessern. Die Lösung $U^{(n+1)}(z)$ für den $(n+1)$ -ten Schritt kann man mit Hilfe des Resultates $U^{(n)}(z)$ des n -ten Schrittes finden:

$$U^{(n+1)}(z) = \frac{1}{2\pi i \sigma_g} \int_{\Delta\Omega} \left\{ R_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta] + \frac{\sqrt{I_g^{\text{exper}}(\eta) - \sqrt{I_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta]}}}{\sqrt{I_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta]}} R_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta] \right\} e^{-i\eta z} d\eta. \quad (5.16)$$

Der statische Debye-Waller-Faktor und die Deformation sind gegeben durch:

$$E^{(n+1)}(z) = \left| \frac{1}{2\pi \sigma_g} \int_{\Delta\Omega} \left\{ R_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta] + \frac{\sqrt{I_g^{\text{exper}}(\eta) - \sqrt{I_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta]}}}{\sqrt{I_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta]}} R_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta] \right\} e^{-i\eta z} d\eta \right|, \quad (5.17)$$

$$f^{(n+1)}(z) = -2\pi n \Delta a(z)/a^2 = \frac{d}{dz} F^{(n+1)}(z) = \text{Re} \left\{ i \left(\frac{d}{dz} U^{(n+1)} \right) / U^{(n+1)} \right\}, \quad (5.18)$$

mit

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} U^{(n+1)} = \\ & = \frac{1}{2\pi i \sigma_g} \int_{\Delta\Omega} -i\eta \{ R_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta] + \frac{\sqrt{I_g^{\text{exper}}(\eta)} - \sqrt{I_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta]}}{\sqrt{I_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta]}} R_{\text{kin}}[U^{(n)}, \eta] \} e^{-i\eta z} d\eta. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Die Iterationsprozedur wird mit einer bekannten ersten Approximation gestartet. Als Startwert setzt man den statischen Debye-Waller-Faktor zu $E = 1$.

Wenn die Reflexionskurven nur über ein kleines Winkelintervall gemessen sind, treten durch die Fouriertransformation die Oszillationen (im Raum z) auf, die durch Faltung mit einer Gauß-Funktion $E(z)$ und $f(z)$ geglättet werden sollen:

$$\langle E(z) \rangle = \frac{\Delta x \int \exp\left(-\frac{(z-x)^2}{\gamma}\right) E(x) dx}{\int_{\Delta x} \exp\left(-\frac{(z-x)^2}{\gamma}\right) dx}, \quad (5.20)$$

$$\langle f(z) \rangle = \frac{\Delta x \int \exp\left(-\frac{(z-x)^2}{\gamma}\right) f(x) dx}{\int_{\Delta x} \exp\left(-\frac{(z-x)^2}{\gamma}\right) dx}. \quad (5.21)$$

Der Iterationsprozeß ist stabil, wenn der Parameter γ richtig gewählt ist.

Die oben beschriebene Theorie wurde für die Bestimmung der Profile der Deformation und Störung der unvollkommenen epitaktischen dünnen Schicht $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.05}\text{Sb}_{0.95}$ benutzt [57]. Diese Schicht wurde aus der flüssigen Phase auf einem (100) GaSb Substrat bei einer Temperatur um 600° abgeschieden. Die Dicke der Schicht, gemessen mit einem optischen Mikroskop, war ungefähr $0.9 \mu\text{m}$. Die experimentelle Kurve wurde auf dem Doppelkristalldiffraktometer TOPO gemessen. Die primäre $\text{CuK}\alpha$ Strahlung wurde bei dem (440) Reflex vom perfekten (100) Ge Kristall kollimiert. Der Asymmetriefaktor war 0.095 und die Winkeldivergenz kleiner als 1 Winkelsekunde. Ein symmetrischer (600) Reflex wurde für die Untersuchungen der epitaktischen Struktur benutzt.

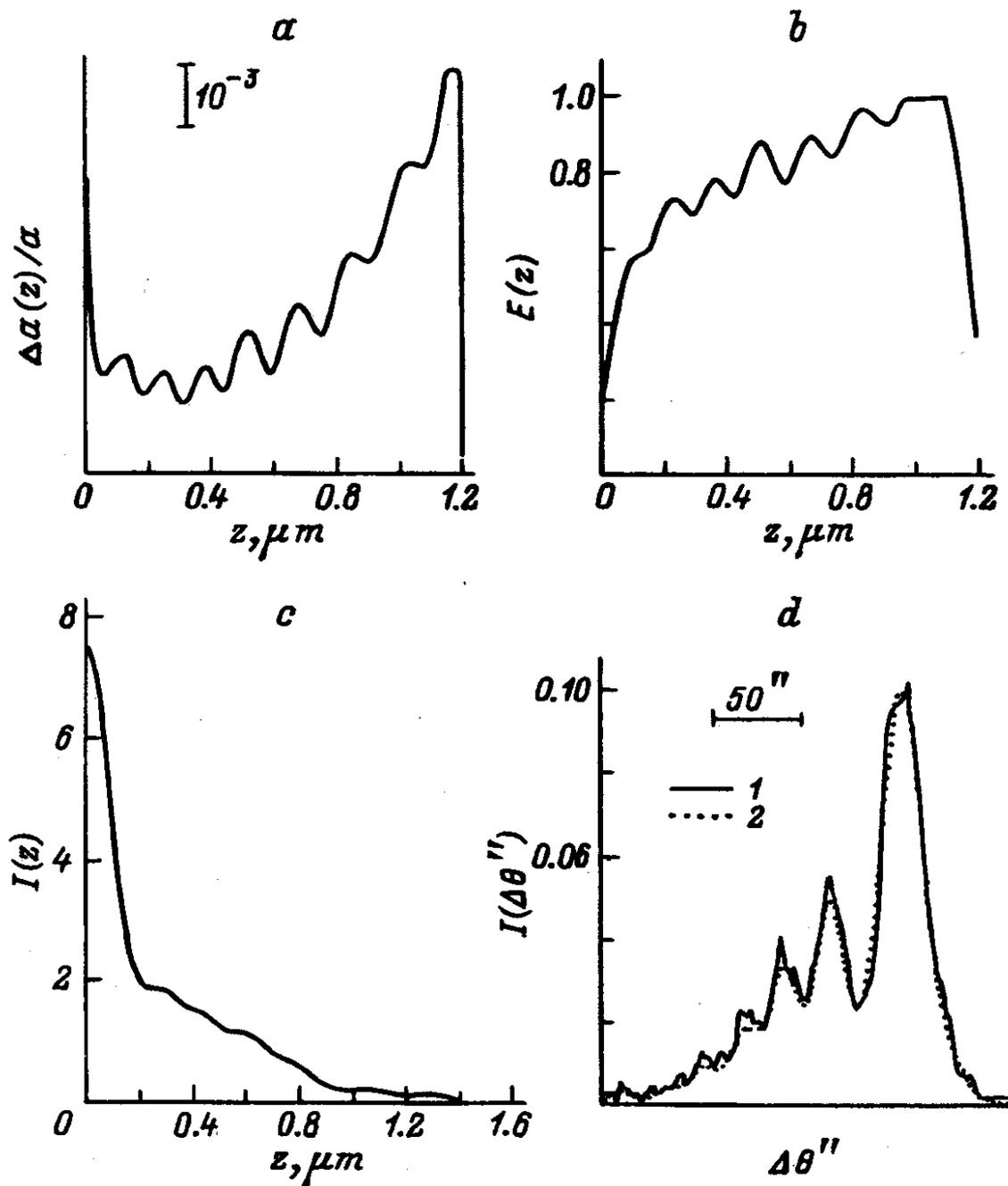


Abb.5.2. Die Bestimmung der Deformation (a), des statischen Debye-Waller-Faktors (b) von $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.05}\text{Sb}_{0.95}$ Schicht und der Betrag der Fouriertransformation der experimentellen Kurve (c). (d): (1)-Die experimentelle Kurve, (2)- Simulation für den Parameter aus 5.2 a-b [57].

Die experimentellen und theoretischen Kurven für die epitaktische Schicht sind in Abb.5.2 d) gezeigt. In Abb.5.2 c) werden die Resultate der numerischen Bestimmung der Schichtdicke gezeigt. Durch die Simulation bekommt man bessere Resultate für die Dicke der Schicht 1.2 μm . Die Differenz zur optischen Untersuchung ist mit der Meßgenauigkeit des Lichtmikroskopes verknüpft. Das Profil der Deformation und des

statischen Debye-Waller Faktoren wurden durch die oben beschriebene Methode bestimmt (Abb.5.2 a-b).

5.4 Charakterisierung der Supergitter

Die strukturellen Eigenschaften der Supergitter werden mit der analytischen Formel (5.12) bestimmt. Die Werte für die Dicke und die Periode der Supergitter erhält man anhand dieser Formeln. Um die Möglichkeiten des analytischen Ausdrucks zu demonstrieren, wurden Gitter mit verschiedener Periode verwendet und entsprechende Reflexionskurven simuliert. Die Deformationprofile für die angegebenen Supergitter wurden mit Hilfe des analytischen Ausdrucks erfolgreich rekonstruiert (siehe Abb.5.3).

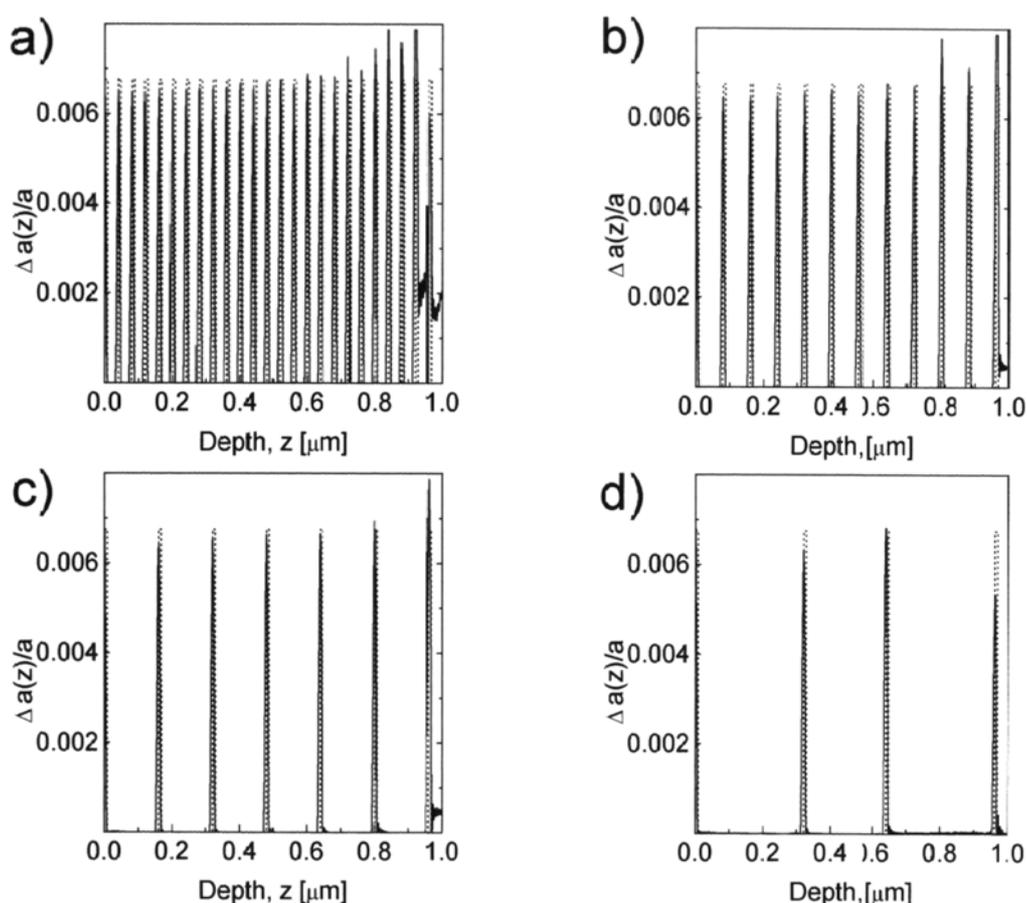


Abb.5.3 Die Rekonstruktion der Deformation für Supergitter mit verschiedenen Perioden: a) $0.04\mu\text{m}$, b) $0.08\mu\text{m}$, c) $0.16\mu\text{m}$, d) $0.32\mu\text{m}$. Die ursprüngliche Deformation (gestrichelte Linie) und die rekonstruierte Deformation (dünne Linie) [130].

Man verwendet auch andere Methoden für die Berechnung der Deformation in den Supergittern. Diese Methoden basieren auf dem analytischen Ausdruck für die komplexe Amplitude der von der Kristallschicht reflektierten Wellen. Die Reflexionskurve für die Supergitter hat eine oszillierende Struktur. Aus der Analyse dieser Struktur sind wichtige strukturelle Eigenschaften zu bestimmen.

Den Ausdruck des Reflexionskoeffizienten für die Supergitter ist zu vereinfachen, weil das Deformationsfeld in diesem Fall eine periodische Funktion ist. Die Verschiebung $F(z)$ erhält man wie folgt:

$$F(z + T) = F(z) + F(T), \quad (5.22)$$

T ist die Periode der Supergitter. Mit der Gleichung (5.22) ist der kinematische Reflexionskoeffizient mit Hilfe des Integrals über eine Periode des Schichtsystems um- zuschreiben:

$$\begin{aligned} R_{\text{kin}}(\eta) &= i\sigma_g \sum_{n=1}^N \exp[(i\eta T - iF(T)) \cdot (n-1)] \int_0^T E(z) \exp(i\eta z - iF(z)) dz = \\ &= i\sigma_g \int_0^T E(z) \exp(i\eta z - iF(z)) dz \frac{\sin\left(\frac{\eta T - F(T)}{2} N\right) \exp\left(i \frac{\eta T - F(T)}{2} N\right)}{\sin\left(\frac{\eta T - F(T)}{2}\right) \exp\left(i \frac{\eta T - F(T)}{2}\right)} \end{aligned} \quad (5.23)$$

N ist die Zahl der Perioden im Supergitter.

Weil die Lösung der Gleichung (5.23) oszilliert, folgt, daß die Periode der Supergitter T und die durchschnittliche Deformation $\langle f(z) \rangle$ aus der oszillierenden Struktur der Reflexionskurve berechnet wird:

$$T = \frac{2\pi n}{\eta_n - \eta_0}, \quad (5.24)$$

$$\langle f(z) \rangle = \frac{F(T)}{T} = \text{Re}(\eta_0), \quad (5.25)$$

η_n ist das n -te Maximum der Reflexionskurve.

Somit gibt es zwei unabhängige Methoden für die Analyse der Struktur von Supergittern. Die Methode der Integralcharakteristik und die analytische Lösung liefern mehr Information über die Kristallschichtparameter, aber die Methode der Analyse der Oszillationsstruktur ist weniger empfindlich bezüglich Ungenauigkeiten in den experimentellen Daten. Eine Kombination der beiden Methoden ist gut geeignet für die Analyse der Supergitterstruktur.

Die experimentelle Kurve der Supergitterstruktur $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ ($0.5\mu\text{m}$ Bufferschicht)- $[\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{As}(8.8\text{nm})-\text{GaAs}(82\text{nm})] \times 10$ - $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ ($0.5\mu\text{m}$ Bufferschicht) wurde analysiert. Die Supergitter wurden mit MBE auf perfekten Substraten hergestellt. Für die hochaufgelöste Doppelkristallröntgenbeugung wurde der (004) Reflex für die Untersuchungen benutzt.

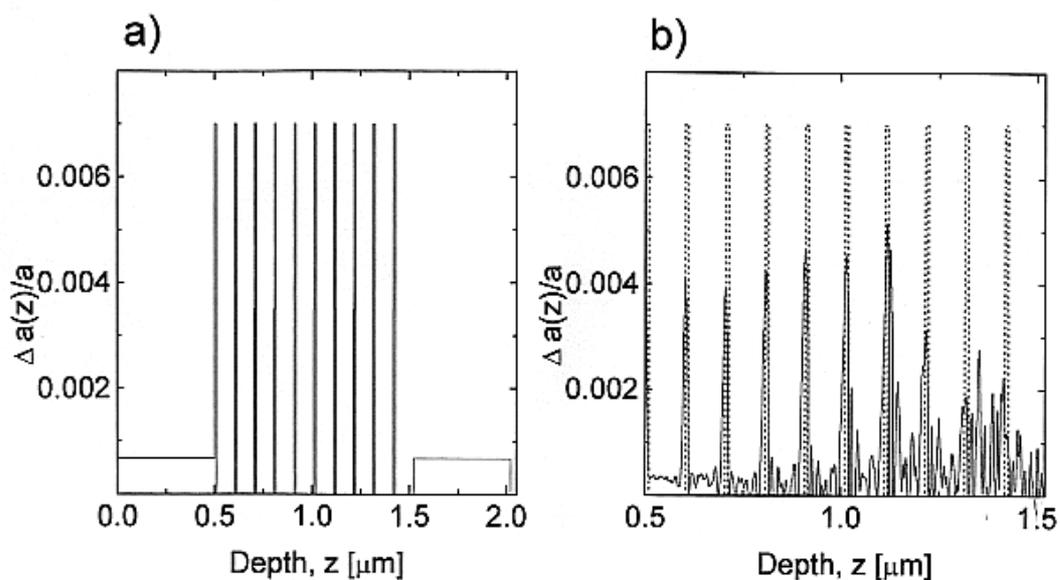


Abb. 5.4 a)- rekonstruierte Deformation in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Supergitter aus der Analyse der Oszillationsstruktur b) analytisch rekonstruierte Deformation in Vergleich mit Profil a) [130]

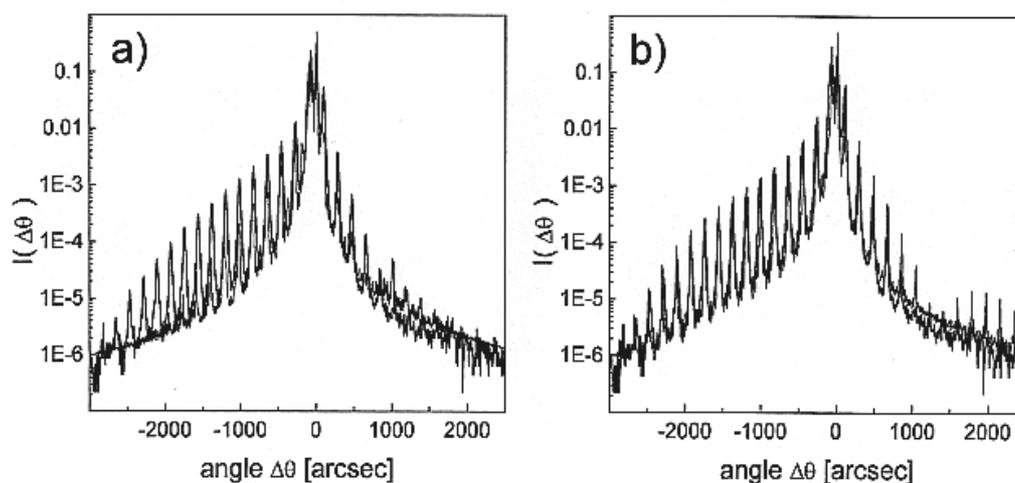


Abb. 5.5 Experimentelle (durchgezogene Linie) und simulierte (gestrichelte Linie) Reflexionskurven für die Deformationsverteilung Abb. 5.4 b) und a) [130]

Die Analyse der Oszillationsstruktur der experimentellen Kurve gibt für die Periode den Wert 102nm. Die durchschnittliche Deformation ist $\langle f(z) \rangle = -0,026 \text{nm}^{-1}$. Das ergibt eine Indiumkonzentration $x=0,094$ in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Schichten. Diese Methode bestimmt die Dicke der $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Schichten nicht, und deshalb wurde der technologisch vorgegebene Wert von 8,8nm benutzt.

Die analytische Lösung gibt den gleichen Wert für die Periode und beschreibt ungefähr den Verlauf des Deformationsprofils. Mit der Methode der Integralcharakteristik bekommt man für die durchschnittliche Deformation den Wert $\langle f(z) \rangle = -0,02 \text{nm}^{-1}$. Diese Zahl ist kleiner als bei anderen Methoden, aber sie ist näher am technologisch vorgegebene Wert. Die Resultate der beiden Methoden sind in Abb.(5.4) gezeigt. Die Dicke der Kristallschicht nach der Methode der Integralcharakteristik ist 2,1 μm und stimmt mit den technologischen Angaben überein. Die entsprechende theoretische Reflexionskurve und die experimentelle Kurve sind in Abb.5.5 gezeigt. Die Übereinstimmung des Experiments mit der Theorie ist gut.

Beide Methoden geben gleiche Resultate für die Periode der Supergitter. So wurde eine neue einfache Methode für die Analyse der Supergitter direkt aus der experimentellen Kurve entwickelt. In der Kombination mit anderen Methoden gibt die analytische Lösung gute Übereinstimmung für die Rekonstruktion der Supergitterstruktur.

5.5 Lösung in der semidynamischen Näherung

Wenn die Dicke der gestörten Kristallschichten kleiner als die Extinktionstiefe ist, wird die komplexe Reflexionsamplitude $R_g[U(z),\eta]$ als einfacher Ausdruck anhand des kinematischen Reflexionskoeffizienten $R_{\text{kin}}[U(z),\eta]$ aufgeschrieben:

$$R_g[U(z),\eta] = R_{\text{kin}}[U(z),\eta] + R_{\text{subst}}(\eta)\exp(i\eta L - iF(L)). \quad (5.26)$$

Die Formel (5.16) wird in diesem Fall in folgender Form dargestellt:

$$U^{(n+1)}(z) = \frac{1}{2\pi i\sigma_g} \int_{\Delta\Omega} \{R_{\text{kin}}[U^{(n)},\eta] + \frac{\sqrt{I_g^{\text{exper}}(\eta)} - \sqrt{I_g[U^{(n)},\eta]}}{\sqrt{I_g[U^{(n)},\eta]}} R_g[U^{(n)},\eta]\} e^{-i\eta z} d\eta. \quad (5.27)$$

Die Ausdrücke für den statischen Debye-Waller-Faktor und die Deformation werden analog umgeschrieben. Die Formel (5.27) löst das Problem im Prinzip in einem Iterationsschritt (für fixierte $F(L)$):

$$\begin{aligned} R_g[U^{(1)}(z), \eta] &= R_g[U^{(0)}(z), \eta] + \frac{\sqrt{I_g^{\text{exper}}} - \sqrt{I_g[U^{(0)}(z), \eta]}}{\sqrt{I_g[U^{(0)}(z), \eta]}} R_g[U^{(0)}(z), \eta] = \\ &= \sqrt{\frac{I_g^{\text{exper}}(\eta)}{I_g[U^{(0)}(z), \eta]}} R_g[U^{(0)}(z), \eta], \end{aligned}$$

oder

$$I_g^{(1)}(\eta) = |R_g[U^{(1)}(z), \eta]|^2 = I_g^{\text{exper}}(\eta).$$

In der Praxis muß man mehrere Schritte benutzen, weil sich im Iterationsprozeß die Größe $F(L)$ ändern kann. Als erster Schritt für das Profil der Deformation wird das Resultat der Fourier-Analyse angewendet:

$$-\frac{2\pi n}{a^2} \Delta a(z) = f(z) \approx \text{Re} \left[\frac{\int_{\Delta\Omega} (\eta^*)^2 (I^{\text{exper}}(\eta) - I_{\text{sub}}(\eta)) \exp(i\eta^* z) d\eta}{\int_{\Delta\Omega} \eta^* (I^{\text{exper}}(\eta) - I_{\text{sub}}(\eta)) \exp(i\eta^* z) d\eta} \right]. \quad (5.28)$$

Als erste Näherung für den statischen Debye-Waller-Faktor nimmt man

$$E=1. \quad (5.29)$$

Die oben angeführte Theorie wurde für die Bestimmung der Profile der Deformation und Störung der Multischicht mit der Struktur GaAs(1 μ m-buffer-Schicht)-ZnSe(20-30nm)-ZnSSe(20-50nm)-ZnMgSSe(1 μ m) benutzt [112]. Diese Schicht wurde mit MBE auf perfekten GaAs Substraten mit der Oberflächenorientierung (001) hergestellt. Die hochauflösende Doppelkristallröntgenbeugung wurde für die Messung der Kurve verwendet. Die einfallende CuK_α Strahlung wurde mit einem perfekten, asymmetrisch geschnittenen Ge-Kristall (Reflex 004) kollimiert. Die Multischichtstruktur wurde mit dem symmetrischen 004 Reflex untersucht.

Die Dicke der Struktur bestimmt man nach Formel (5.14) zu 2,2 mm. Der durchschnittliche statische Debye-Waller-Faktor ist näherungsweise 0,9, d.h. die Störung der Kristallgitter ist klein. Die erste Näherung der Deformation ergibt sich aus dem analytischen Ausdruck (5.28). Es ist zu sehen, daß schon die erste Näherung der Deformation in guter Übereinstimmung mit dem technologisch vorgegebenen Wert ist. Die Übereinstimmung der theoretischen und gemessenen Kurven verbessert sich,

wenn man 20 Iterationen durchführt. Die finale Deformation und der statische Debye-Waller-Faktor werden im Abb.5.6 im Vergleich zur ersten Näherung gezeigt.

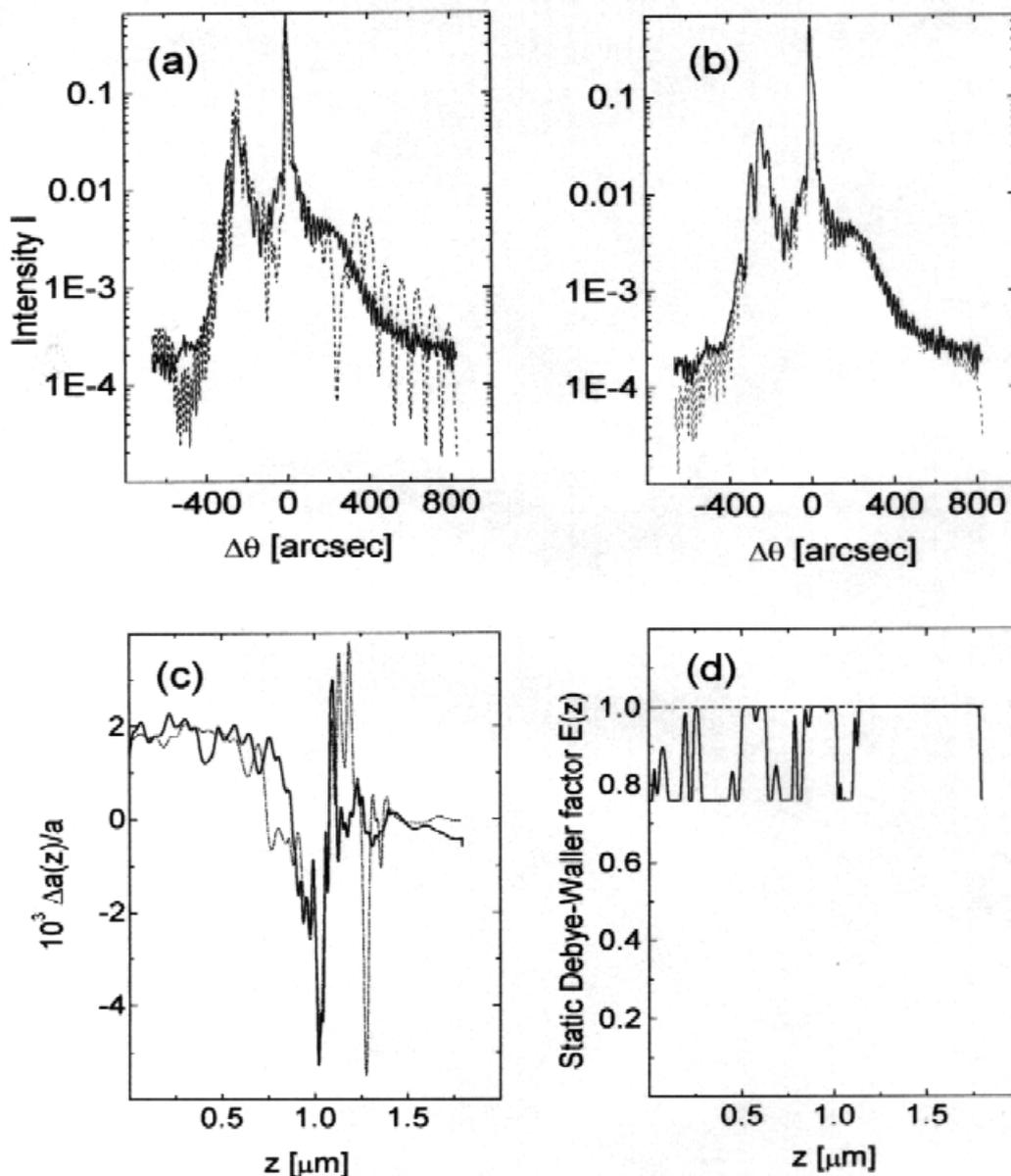


Abb.5.6 Die Bestimmung der Parameter der Kristallschicht GaAs(1 μm -buffer-Schicht)-ZnSe(20-30nm)-ZnSSe(20-50nm)-ZnMgSSe(1 μm) in semidynamischer Näherung. a) Die experimentelle Kurve (durchgezogene Linie) im Vergleich zu erster Näherung (gestrichelte Linie), b) experimentelle Kurve und simulierte Kurve nach 20 Iterationsschritten. c) Erste Näherung der Deformation nach der analytischen Formel (gestrichelte Linie) und die rekonstruierte Deformation nach 20 Iterationsschritten (durchgezogene Linie). d) Rekonstruierter statischer Debye-Waller-Faktor nach 20 Schritten (durchgezogene Linie) und erste Näherung (gestrichelte Linie). [112]

5.6 Lösung im dynamischen Fall

Um das Problem der Rekonstruktion von Deformation und Störung einer dicken Kristallschicht (d.h. die Kristallschicht ist dicker als die Extinktionlänge) aus den gemessenen Reflexionskurven zu lösen, betrachtet man eine nichtlineare Funktionalgleichung

$$\left(\mathbf{R}_g[\mathbf{U}](\eta)\right)^* \left(\mathbf{R}_g[\mathbf{U}](\eta)\right) = \mathbf{I}_g(\eta). \quad (5.30)$$

Die Funktion $U(z)$ ist ein unbekannter Parameter, den man finden muß. Man definiert einen Operator $A(U)V$:

$$A(U)V = \left\{\mathbf{R}_g[\mathbf{U}]\right\}^* \left\{\alpha(\mathbf{R}_k[\mathbf{V}] - \mathbf{R}_k[\mathbf{U}]) + \mathbf{R}_g[\mathbf{U}]\right\}, \quad (5.31)$$

wobei α ein Parameter ist.

Die Funktionalgleichung (5.30) wird dann in folgende Form umgeschrieben:

$$A(U)U = \mathbf{I}_g(\eta), \quad (5.32)$$

eine Lösung für diese Gleichung ist die Lösung des Problems (5.30). Es wurde folgende iterative Lösungsmethode vorgeschlagen:

$$A(U^{(n)})U^{(n+1)} = \mathbf{I}_g(\eta). \quad (5.33)$$

Dann folgt die Lösungsprozedur:

$$U^{(n+1)}(z) = A^{-1}(U^{(n)})\mathbf{I}_g(\eta), \quad (5.34)$$

oder in einer ausführlicheren Form:

$$U^{(n+1)}(z) = U^{(n)}(z) + \frac{1}{2\pi\alpha} \frac{1}{i\sigma_g} \int_{\Delta\Omega} \frac{\mathbf{I}_g(\eta) - \mathbf{I}_g[U^{(n)}](\eta)}{\mathbf{I}_g[U^{(n)}](\eta)} \mathbf{R}_g[U^{(n)}](\eta) e^{-i\eta z} d\eta. \quad (5.35)$$

Mit einer ähnlichen Formel aus den oben genannten Teilen dieses Kapitels werden der statische Debye-Waller-Faktor und das Deformationsfeld berechnet, indem man diese Gleichung (5.35) benutzt. Um die schnellen Oszillationen zu beseitigen, muß man wieder den bereits erwähnten Glättungsmechanismus benutzen, d.h. die Faltungen des Debye-Waller-Faktors und der Deformation mit einer Gaußfunktion verwenden.

Die iterative Rechenmethode wurde für die strukturelle Charakterisierung einer heterogenen heteroepitaxialen Kristallschicht $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}/\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}/(001)\text{GaSb}$ verwendet [113]. Diese Struktur wurde mit der Methode der Flüssigphasenepitaxie hergestellt. Die Schicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ mit einer Dicke von etwa $3,3\ \mu\text{m}$ wurde auf eine saubere Oberfläche eines $(001)\text{GaSb}$ -Substrates bei einer Temperatur von 600°C epitaxial aufgetragen. Auf diese Struktur wurde eine Schicht mit der Zusammensetzung $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}$ und einer Dicke um etwa $1\ \mu\text{m}$ aufgetragen.

Die Vermessung der Winkelverteilung der gebeugten Strahlung wurde mit dem hochauflösenden Doppelkristalldiffraktometer „Topo“ der japanischen Firma „Rigaku“ durchgeführt. Das Diffraktometer war mit einem Generator RU-200 kombiniert. Für die Kollimierung und Monochromatisierung der $\text{Cu}\ \text{K}\alpha_1$ Strahlung wurde der (440) Reflex eines perfekten (001) Ge-Kristall benutzt. Der Asymmetriefaktor b war $0,095$, so daß eine Winkeldivergenz der Strahlung unter 1 Winkelsekunde sichergestellt war. Die Messungen wurden mit dem symmetrischen (006) Reflex gemacht, und der Braggwinkel war $49,46^\circ$.

Die Reflexionskurve hat eine Form, die für heterogene heteroepitaxiale Kristallschichten mit positivem Deformationsgradient des Kristallgitters charakteristisch ist. Das Verhalten der Oszillationen der experimentellen Kurve weist auf einen konstanten Deformationsgradienten der Kristallschicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ hin. Während des epitaktischen Wachstums ergibt sich offenbar eine lineare Verteilung der Komponenten des Mischkristalls in der Dicke der Schicht. Der durchschnittliche Gitterabstand der Kristallschicht $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}$ ist kleiner als der Wert für das Substrat GaSb , deshalb befindet sich der Reflex für die Schicht $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}$ im Bereich großer Winkel mit einem Abstand von 200 Winkelsekunden von dem Substratreflex.

Der Startwert für die Analyse wurde nach dem Modell des Kristalls mit konstantem Deformationsgradienten ermittelt. Die erste Näherung für den statischen Debye-Waller-Faktor war Eins.

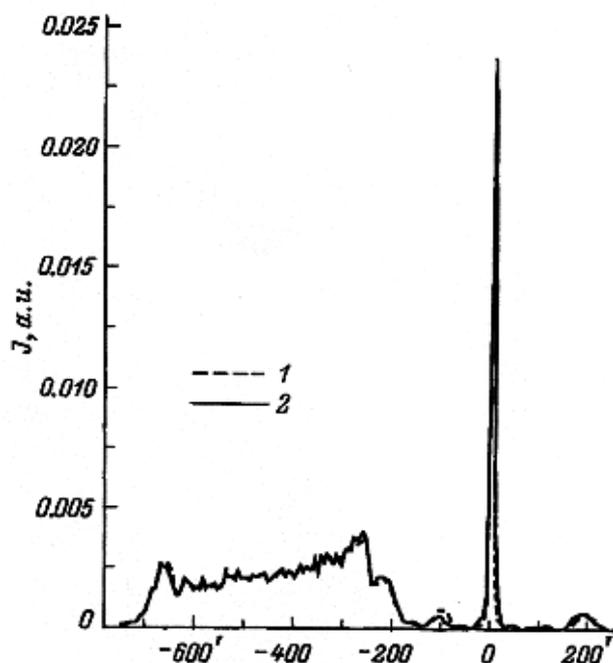


Abb. 5.7 Experimentelle (durchgezogene Linie) und simulierte (gestrichelte Linie) Reflexionskurven für die Multischichten $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}/\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}/(001)\text{GaSb}$ [113].

Das Berechnungsergebnis der beschriebenen Methode wird in Abb. (5.7-5.8) gezeigt. In Abb. (5.7) ist die theoretische Reflexionskurve als Strichlinie eingezeichnet. Wie zu erwarten war, hat die epitaktische Schicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ annähernd einen konstanten Deformationsgradienten des Kristallgitters (Abb.(5.8)). Die obere Schicht $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}$ ist auch heterogen. Die Dicke der Schicht ist dünner als $1\mu\text{m}$. Ferner ist zu bemerken, daß es zwischen der oberen Schicht und der Gradientenschicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ einen Übergangsbereich mit einer Dicke von etwa $0,3\mu\text{m}$ gibt, die während der Herstellung oder durch Selbstdiffusion erzeugt wurde. Die Grenze zwischen der Schicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ und dem Substrat ist scharf.

Die Berechnungsergebnisse für den statischen Debye-Waller-Faktor deuten an, daß der Grenzbereich zwischen der Heterostruktur und der Oberfläche des Kristalls meist defekt ist (Abb.(5.9)). Ähnliche strukturelle Besonderheiten wurden auch bei

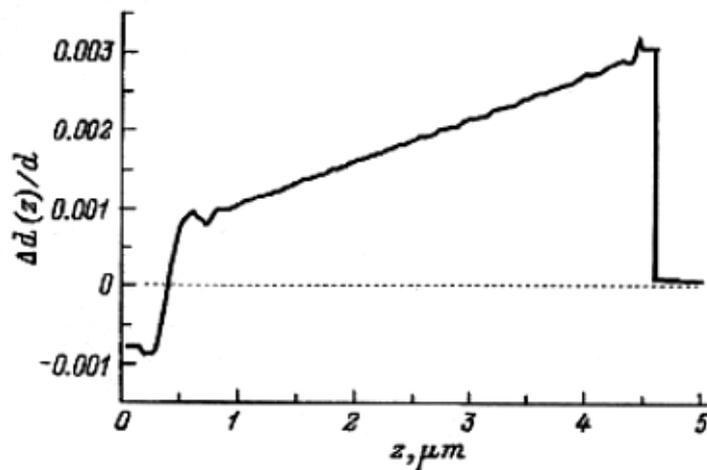


Abb.5.8 Rekonstruierte Deformationsverteilung im Schichtsystem
 $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}/\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}/(001)\text{GaSb}$ [113]

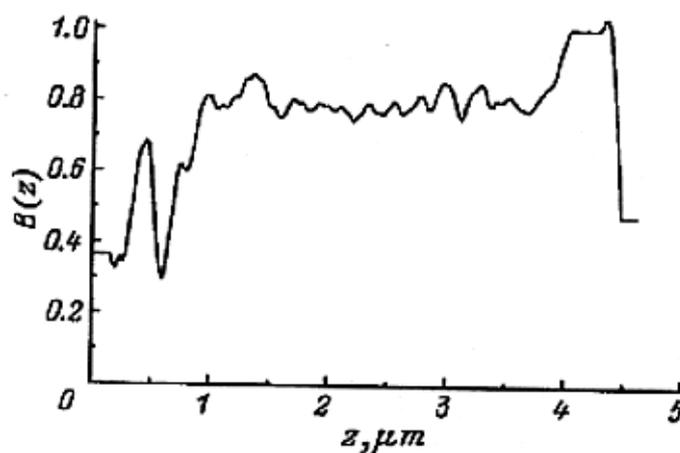


Abb.5.9 Rekonstruierte statische Debye-Waller-Faktor Verteilung im
 Schichtsystem $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}/\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}/(001)\text{GaSb}$ [113]

anderen Multischichten beobachtet, die mit anderen Methoden untersucht wurden. Der durchschnittliche Wert des statischen Debye-Waller-Faktors der Schicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ ist ungefähr 0,8. Die gleiche Kristallperfektion haben auch andere Gradientenschichten aus AlGaAs gehabt. Die obere Schicht $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}$ weist mehr defekte Strukturen auf. Der starke Sprung des statischen Debye-Waller-Faktors an der Grenze dieser Schicht und der Schicht $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$ ist mit einer großen Differenz der Gitterabstände dieser zwei Schichten verbunden.

5.7 Zusammenfassung

Es wurden elegante Methoden für die Bestimmung der Deformation und des statischen Debye-Waller-Faktors von Vielschichtsystemen aus den Reflexionskurven entwickelt. Die iterativen Methoden wurden für alle Fälle der Beugung (kinematische, semidynamische und dynamische) beschrieben. Mit diesen Prozeduren wurden mit geringem Rechenaufwand Informationen über die Verteilungen der Deformation des Kristallgitters und des statischen Debye-Waller-Faktors der epitaktischen Schichten erhalten. Weil diese strukturellen Eigenschaften mit der Zusammensetzung der halbleitenden Mischkristalle verknüpft sind, eröffnet diese Methode zusätzliche Möglichkeiten für die Untersuchung der Relaxation und der Defektbildung in epitaktischen Multischichten in Abhängigkeit von der Herstellungstechnologie.

Alle Lösungen sind kontinuierliche Funktionen. Weil die Methoden iterativ sind, kann man mit guten ersten Näherungen die Berechnungszeit deutlich reduzieren. Für die kinematischen und semidynamischen Fälle der Röntgenbeugung wurde die direkte Methode für die Bestimmung der ersten Näherung der Deformationsverteilung entwickelt. Man muß auch das Problem der Uneindeutigkeit der Lösung wegen des Phasenproblems in Betracht ziehen. Deshalb sind A priori Informationen über die Herstellungstechnologie sehr wichtig, um eine gute Wahl des Startwertes für das iterative Verfahren zu treffen.

Der entwickelte Algorithmus ist einfach und schnell. Die Berechnungszeit zur Rekonstruktion der Deformationsverteilung in Vielschichtsystem mit Hilfe eines 90 MHz Pentium Computers beträgt für zehn Iterationsschritte etwa 10 Minuten. Dabei wurde eine Deformationsverteilung mit 1200 Punkten und eine Reflexionskurve mit 400 Punkten zu Grunde gelegt.

Thesen zur Dissertation

Entwicklung und Anwendung einer dynamischen Röntgenbeugungstheorie für Multischichten, Supergitter und gebogene Kristalle

Vorgelegt von Dipl.-Phys. Serguei Podorov

1. Die dynamische Beugungstheorie der Röntgenwellen an Multischichten kann mit Hilfe der Fresnelschen Formeln der Metalloptik und dem Parratt'schen Algorithmus beschrieben werden. Im Limes der unendlich dünnen Schichten ist die Gleichung der dynamischen Beugungstheorie ähnlich der bekannten Taupinischen Gleichung.
2. Aus der Helmholtz-Gleichung werden modifizierte Takagi-Taupin-Gleichungen der dynamischen Beugungstheorie abgeleitet. Im allgemeinen Fall wird die Beugung der Röntgenstrahlen an Kristallen mit einem zusätzlichen Phasenfaktor ergänzt. Mit Hilfe dieser modifizierten Theorie wird speziell die Beugung der Röntgenstrahlen an asymmetrisch geschnittenen, torisch gebogenen Kristallen behandelt.
3. Die hochauflösende Röntgenoptik hat sich als nützliches Werkzeug für die Charakterisierung von heißen Plasmen gezeigt. Torisch gebogene Kristalle sind eines der wichtigsten Elemente in der Röntgenoptik. Die optischen Eigenschaften von gebogenen Kristallen in verschiedenen Geometrie können mit einem PC Programm simuliert werden. Der Abbildungsfehler von gebogenen Kristallen in Johann-Geometrie hat ein Minimum für fast senkrechten Einfall der Röntgenstrahlen. Der Abbildungstest zeigt gute Übereinstimmung mit der Simulation. Eine eindimensionale räumliche Auflösung von $7\mu\text{m}$ wurde im Experiment für eine stark asymmetrische Johann-Geometrie erreicht.
4. Die Diagnostik von epitaktischen Kristallschichten kann mit Hilfe der Fourier-Analyse gemacht werden. Die Struktur der Supergitter ($[\text{In}_{0,08}\text{Ga}_{0,92}\text{As}(8,8\text{nm})\text{-GaAs}(82\text{nm})] \times 10$ Perioden) wird mittels einer analytischen Formel aus experimentellen Rockingkurven bestimmt. Die Deformationverteilung von Kristallgittern in Multischichten ($\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$, $\text{ZnSe-ZnSSe-ZnMgSSe}$, und $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}_{0,19}\text{Sb}_{0,81}\text{-Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}/\text{GaSb}$) wurde mit Hilfe verschiedener iterativer Methoden rekonstruiert.

Danksagung

Ich bedanke mich bei Prof. Dr. E. Förster und dem Fakultätsrat der FSU Jena für die Zulassung zur Promotion.

Über viele Jahre habe ich mit Prof. Dr. V.I. Punegov, Herrn Dr. K.M. Pavlov gut zusammen gearbeitet. Ihnen bin ich zu Dank verpflichtet. Aber einen besonderen Dank möchte ich Prof. Dr. E. Förster für seine detaillierte Einführung in die Röntgenoptik und Betreuung sagen.

Einige Artikel habe ich zusammen mit Herrn Dr. G. Hölzer und Herrn Dr. N.N. Faleev geschrieben, dafür danke ich Ihnen.

Für viele gute Ratschläge, insbesondere bei der Durchführung der Experimente, danke ich Frau Dr. O. Wehrhan, Herrn Dr. I. Uschmann, Herrn Dr. O. Renner, Herrn D. Klöpfel.

Ich möchte mich auch bei Herrn Dr. P. Gibbon, Herrn U. Wagner, Herrn Dr. U. Teubner und meiner Schwiegermutter Frau K. Keck für viel Mühe beim Lesen und Korrigieren dieser Arbeit bedanken.

Besonders dankbar bin ich meinen Eltern Herrn G.V. Podorov, Frau A. Ya. Podorova, meiner Frau V. Keck und meinem lieben Sohn Alexander für die Hilfe und Freude bei der Arbeit.

Literaturverzeichnis

- [1] Darwin C.G., *Phil. Mag.*, v. **27**, 315, 675 (1914)
- [2] P.P. Ewald, *Ann. Phys.* **49**, 1 (1916)
- [3] M. von Laue, *Röntgenstrahleninterferenzen*, Akademische Verlagsges. Leipzig 1948
- [4] J.E. White, *X-ray Diffraction by Elastically Deformed Crystals*, *J. Appl. Phys.* **21**, 855 (1950)
- [5] L.G. Parratt, *Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays*, *Phys. Rev.* **95**,N2 359 (1954)
- [6] S.Takagi, *Acta Crystollogr.* **15**, 1131 (1962)
- [7] D. Taupin, *Bull. Soc. Fr. Mineral. Crystallogr.* **87**, 469 (1964)
- [8] S. Takagi, *J. Phys.Jpn.* **26**, 1239 (1969)
- [9] D.B. Brown and M. Fatemi, *X-ray Diffraction in Crystals of Intermediate Perfection. I. Calculation of the Integral Diffracted Power for Flat and Curved Crystals in Symmetrical Bragg Geometry*, *J. Appl. Phys.* **45** (4), 1544 (1974)
- [10] Von J. Otto, *Spaltbeugung von Röntgenstrahlen im Doppel-Diffraktometer*, *Annalen der Physik* 7.Folge, **32** (1), 5 (1975)
- [11] P.V. Petrashen', *Sov. Fiz. Tverdogo Tela (USSR)* v.**17**, 2814 (1975)
- [12] A.M. Afanas'ev, M.V. Koval'chuk, E.K. Kov'ev, V.G. Kohn, *Phys. Stat. Sol.* (a) **42**, 415 (1977)
- [13] F.N. Chukhovskii and P.V. Petrashen', *A General Dynamical Theory of the X-ray Laue Diffraction from a Homogeneously Bent Crystal*, *Acta Cryst.* **A33**, 311 (1977)
- [14] D.W. Berreman, *Curved-Crystal X-ray Monochromator Efficiency*, *Phys. Rev. B* **19** (2), 560 (1979)

- [15] D.B. Brown and M. Fatemi, *Diffraction Efficiency of the Curved-Crystal Spectrograph*, J. Appl. Phys. **51** (5), 2540 (1980)
- [16] R.M. Fleming, D.B. McWhan, A.C. Gossard, W. Wiegmann, and R.A. Logan, J.Appl.Phys. **51** (1), 357 (1980)
- [17] R.N. Kyutt, P.V. Petrashen, and L.M. Sorokin, Phys. Stat. Sol. (a) **60**, 381 (1980)
- [18] V.S. Speriosu, J.Appl.Phys. **52** (10), 6094 (1981)
- [19] R. Güther, *Maßstabändernde Quasimonochromatische Abbildung im Röntgenbereich*, Exp. Tech. Phys. **30** (5), 377 (1982)
- [20] Yu.N. Belyaev and A.V. Kolpakov, phys. stat. sol. (a) **76**, 641 (1983)
- [21] Z.G. Pinsker, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals*, Springer-Verlag, Heidelberg (1984)
- [22] V.S. Speriosu and T. Vreeland, Jr., J.Appl.Phys. **56** (6), 1591 (1984)
- [23] J. Gronkowski and C. Malgrange, *Propagation of X-ray Beams in Distorted Crystals (Bragg Case). I. The Case of Weak Deformations*, Acta Cryst. **A40**, 507 (1984)
- [24] J. Gronkowski and C. Malgrange, *Propagation of X-ray Beams in Distorted Crystals (Bragg Case). I. The Case of Strong Deformations*, Acta Cryst. **A40**, 515 (1984)
- [25] L. Tapfer and K. Ploog, Phys. Rev. B vol. **33**, N8, 5565 (1986)
- [26] F. Cembali, E. Gabilli, R. Lotti, M. Servidory, and A. Zani, Phys. Stat. Sol. (a) **96**, K31 (1986)
- [27] W.J. Bartels, J. Hornstra and D.J.W. Lobeek, *X-ray Diffraction of Multilayers and Superlattices*, Acta Cryst. **A42**, 539 (1986)
- [28] A.V. Goncharsky, A.A. Stepanov, Dokl. Akad. Nauk SSSR, v.**287**, N2, 309 (1986) (In Russian)
- [29] A.V. Goncharsky, A.A. Stepanov, Dokl. Akad. Nauk SSSR, v.**292**, N1, 60 (1987) (In Russian)
- [30] S.A. Stepanov, et al., Poverkhn., Fiz. Khim. Mekh. (USSR) N9, 112 (1988)
- [31] A.V. Kolpakov and V.I. Punegov, Poverkhnost', **3**, 82 (1988)

- [32] G.T. Baumbach, H. Rhan, and U. Pietsch, *Detection of the Active Layer of $A^{III}B^{IV}$ Semiconductor Quantum-Well Structures by High Resolution X-ray Diffractometry*, Phys. Stat. Sol. (a) **109**, K7 (1988)
- [33] J.H. Underwood, A.C. Thompson, Y. Wu and R.D. Giauque, *X-ray Microprobe Using Multilayer Mirrors*, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. **A266**, 296 (1988)
- [34] L. Tapfer, *High-Resolution X-ray Diffraction in Multilayered Semiconductor Structures and Superlattices*, Physica Scripta, vol. T25, 45, (1989)
- [35] F.N. Chukhowskii and C. Malgrange, *Theoretical Study of X-ray Diffraction in Homogeneously Bent Crystals – the Bragg Case*, Acta Cryst. **A45**, 732 (1989)
- [36] A.M. Afanasev, S.S. Fanchenko, A.V. Maslov, Phys. Stat. Sol. (a), **117**, 341 (1990)
- [37] S.M. Nikol'skii, *Course in Mathematical Analysis* [in Russian], Nauka, Moscow (1991)
- [38] J.C.P. Chang, T.P. Chin, K.L. Kavanagh, and C.W. Tu, *High-Resolution X-ray Diffraction of InAlAs/InP Superlattices Grown by Gas Source Molecular Beam Epitaxy*, Appl. Phys. Lett. **58** (14), 1530 (1991)
- [39] E. Förster, K. Gäbel, and I. Uschmann, *X-ray Microscopy of Laser-Produced Plasmas with the Use of Bent Crystals*, Laser and Particle Beams **9** (1), 135 (1991)
- [40] F.N. Chukhowskii, M. Krish and A.K. Freund, *Nondispersive Bragg Diffraction in the General Case of two Cylindrically Bent Crystals*, Rev. Sci. Instrum. **63** (1), 920 (1992)
- [41] M. Sanchez del Rio, F. Cerrina, *Asymmetrically Cut Crystals for Synchrotron Radiation Monochromators*, Rev. Sci. Instrum. **63** (1), 936 (1992)
- [42] P. Suortti, *Focusing Monochromators for High Energy Synchrotron Radiation*, Rev. Sci. Instrum. **63** (1), 942 (1992)
- [43] G.C. La Rocca, L. Tapfer, R. Cingolani, K. Ploog, *X-ray Diffraction Spectra of Deterministic Nonperiodic Structures: Dynamical Versus Kinematical Theory*, Phys. Rev. B, vol. **45**, N21, 12198 (1992)

- [44] E. Förster and I. Uschmann, *Monochromatic X-ray Imaging of Laser Produced Plasma*, SPIE **1980**, 95 (1992)
- [45] I. Uschmann, E. Förster, K. Gäbel and G. Hölzer and M. Ensslen, *X-ray Reflection Properties of Elastically Bent Perfect Crystals in Bragg Geometry*, J. Appl. Cryst. **26**, 405 (1993)
- [46] J. Härtwig, G. Hölzer, J. Wolf and E. Förster, *Remeasurement of the Profile of the Characteristic Cu K α Emission Line with High Precision and Accuracy*, J. Appl. Cryst. **26**, 539 (1993)
- [47] Xiaoguang He and Manijeh Razeghi, *Investigation of the Heteroepitaxial Interfaces in the GaInP/GaAs Superlattices by High-Resolution X-ray Diffractions and Dynamical Simulations*, J. Appl. Phys., **73** (7), 3284 (1993)
- [48] W.-Y. Choi and C.G. Fonstad, *Determination of the Layer Structure of Embedded Strained InGaAs Multiple Quantum Wells by High Resolution X-ray Diffraction*, Appl. Phys. Lett. **62** (22), 2815 (1993)
- [49] H. Rhan, U. Pietsch, S. Rugel, H. Metzger, and J. Peisl, *Investigation of Semiconductor Superlattices by Depth-Sensitive X-ray Methods*, J. Appl. Phys. **74** (1), 146 (1993)
- [50] R.P. Leavitt, F.J. Towner, *Determination of the Lattice Parameter and Poisson Ratio for ALAs via High-Resolution X-ray Diffraction Studies of Epitaxial Films*, Phys. Rev. B, vol.48, N12, 9154 (1993)
- [51] M. Servidori and R. Fabbri, *Analysis of (n,-n) and (n,-n,n) X-ray rocking Curves of Processed Silicon*, J. Phys. D: Appl. Phys., **26**, A22 (1993)
- [52] V.V. Aristov, T.E. Goureev, A. Yu. Nikulin, P.V. Petrashen and A.A. Snigirev, *Possibilities of X-ray Interference Diffractometry for the Reconstruction of Two-Dimensional Lattice Deformation Profiles in Crystals*, J. Phys. D: Appl. Phys., **26**, A29 (1993)
- [53] P. F. Fewster, *Characterization of Quantum Wells by X-ray diffraction*, J. Phys. D: Appl. Phys., **26**, A142 (1993)
- [54] A. Pesekt, P. Kastler, L. Palmeshofer, F. Hauzenbergert, P. Juta, W. Fashinger and K. Lischka, *Simulation of X-ray Diffraction Curves from Ion-Implanted Wafers and Relaxed II-VI Superlattices*, J. Phys. D: Appl. Phys., **26**, A177 (1993)

- [55] P. van der Sluis, *Determination of Strain in Epitaxial Semiconductor Layers by High-Resolution X-ray Diffraction*, J. Phys. D: Appl. Phys., **26**, A188 (1993)
- [56] A.A. Stepanov, *Fourier-Coefficient Method of X-ray Rocking-Curve Interpretation*, J. Appl. Cryst., **27**, 7 (1993)
- [57] S.G. Podorov, V.I. Punegov, and V.A. Kusikov, Phys. Solid State, **36** (3), 454 (1994)
- [58] W.Z. Chang, O. Wehrhan, E. Förster, and F.N. Chukhovskii, *Characterization of Concave-Curved Diffractors for Spectrometers in 2-D X-ray Optical Instrumentations*, SPIE **2279**, 44 (1994)
- [59] F.N. Chukhovskii, W.Z. Chang, and E. Förster, *Two-Dimensionally Focusing X-ray Optics: Application of Anisotropic Elasticity Theory for Characterization of Bent Crystals*, J. Appl. Cryst. **27**, 971 (1994)
- [60] V.G. Kohn, *On the Theory of Reflectivity by an X-Ray Multilayer Mirror*, phys. stat. sol. (b) **187**, 61 (1995)
- [61] P. Suortti and C. Schulze, *Fixed-Exit Monochromators for High-Energy Synchrotron Radiation*, J. Synchrotron Rad. **2**, 6 (1995)
- [62] F.N. Chukhovskii, W.Z. Chang, and E. Förster, *X-ray Focusing Optics. I. Applications of Wave Optics to Doubly Curved Crystals with a Point X-ray Source*, J. Appl. Phys. **77** (5), 1843 (1995)
- [63] F.N. Chukhovskii and E. Förster, *Time-Dependent X-ray Bragg Diffraction*, Acta Cryst. **A51**, 668 (1995)
- [64] E. Förster, W.Z. Chang, M. Dirksmöller, *Two-Bent-Crystal Schemes for Monochromatic X-ray Imaging*, SPIE **2523**, 140 (1995)
- [65] M. Dirksmöller, O. Rancu, I. Uschmann, P. Renaudin, C. Chenais-Popovics, J.C. Gauthier, E. Förster, *Time resolved X-ray Monochromatic Imaging of a Laser-Produced Plasma at 0.6635 nm Wavelength*, Optics Comm. **118**, 379 (1995)
- [66] J. Kräußlich, A. Fissel, U. Kaiser, K. Goetz and L. Dressler, *X-ray, Transmission Electron microscopy characterization of SiC Thin Films on Si(111)*, J. Phys. D: Appl. Phys., **28**, 759 (1995)
- [67] G.G. Fischer and P. Zaumseil, *In Situ X-ray Investigation of the High-*

- Temperature Behaviour of Strained $Si_{1-x}Ge_x/Si$ and $Si_{1-y}C_y/Si$ Heterostructures*, J. Phys. D: Appl. Phys., **28**, A109 (1995)
- [68] K. Wolf, S. Jilka, A. Rosenauer, G. Schütz, H. Stanzl, T. Reisinger and W. Gebhardt, *High-Resolution X-ray Diffraction Investigation of Epitaxial Grown ZnSe/GaAs Layers*, J. Phys. D: Appl. Phys. **28**, A120 (1995)
- [69] S. Milita and M. Servidori, *X-ray Rocking-Curve Analysis of Crystals with Buried Amorphous Layers. Case of Ion-Implanted Silicon*, J. Appl. Cryst., **28**, 666 (1995)
- [70] R. Balboni, S. Milita, and M. Servidori, *On the role of the Static Debye-Waller Factor in X-ray Rocking Curve Analysis*, Phys. Stat. Sol. (a) **148**, 95 (1995)
- [71] W.Z. Chang and E. Förster, *X-ray Focusing Optics Using Flat or Bent Crystals with Two-Dimensionally Modulated Surfaces*, J. Appl. Phys. **78** (8), 4823 (1995)
- [72] F.N. Chukhovskii, W.Z. Chang, and E. Förster, *X-ray Crystal Optics Based on the Bragg-Fresnel Scattering*, Optics Comm. **124**, 23 (1996)
- [73] W.Z. Chang, I. Uschmann, and E. Förster, *Application of an InSb Flat Crystal with Elliptically Shaped Modulated Structures to X-ray Point Focusing*, Appl. Phys. Lett. **69** (7), 872 (1996)
- [74] F.N. Chukhovskii, G. Hölzer, O. Wehrhan and E. Förster, *Anisotropic Elasticity Corrections for Reflection Efficiency and X-ray Standing-Wave Patterns using Bent Crystals*, J. Appl. Cryst. **29**, 438 (1996)
- [75] F.N. Chukhovskii, C. Malgrange and J. Gronkowski, *X-ray Standing Waves in Crystals Distorted by a Constant Strain Gradient. A Theoretical Study*, Acta Cryst. **A52**, 47 (1996)
- [76] C. Schulze and U. Lienert, *Focusing of High Energy X-rays by Bent Crystal Optics*, ESRF-March 1996, 38
- [77] V.I. Punegov and N.N. Faleev, Phys. Solid. State, **38** (1), 143 (1996)
- [78] V.I. Punegov, K.M. Pavlov, S.G. Podorov and N.N. Faleev, Phys. Solid. State, **38** (1), 148 (1996)
- [79] V.I. Punegov, Doctoral thesis B, Moscow, MSU (1996)

- [80] B. Jenichen, S.A. Stepanov, B. Brar and H. Kroemer, *Interface Roughness of InAs/AlSb Superlattices Investigated by X-ray Scattering*, J. Appl. Phys., **79** (1), 120 (1996)
- [81] K. N. Trueblood, H.B. Bürgli, H. Burzlaff, J.D. Dunitz, C.M. Gramaccioli, H.H. Schulz, U. Schmueli and S.C. Abrahams, *Atomic Displacement Parameter Nomenclature. Report of a Subcommittee on Atomic Displacement Nomenclature*, Acta Cryst., **A52**, 770 (1996)
- [82] H.F. Beyer, *Characterisation of Transmission-Type Curved-Crystal X-ray Optics for fast Ion-Beam Spectroscopy*, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **400**, 137 (1997)
- [83] W.Z. Chang and E. Förster, *X-ray Diffractive Optics of Curved Crystals: Focusing Properties on a Diffraction-Limited Basis*, J. Opt. Soc. Am. A **14** (7), 1647 (1997)
- [84] S. Flescher, C.D. Beling, and S. Fung, W.R. Nieveen, J.E. Squire, and J.Q. Zheng, M. Missous, *Structural and Defect Characterization of GaAs and Al_xGa_{1-x}As Grown at Low Temperature by Molecular Beam Epitaxy*, J. Appl. Phys., **81**, 190 (1997)
- [85] C. Giannini, L. Tapfer, Y. Zhuang, and L. De Caro, T. Marschner and W. Stolz, *Structural Ordering and Interface Morphology in Symmetrically Strained (GaIn)As/Ga(PAs) Superlattices Grown on off-Oriented GaAs(100)*, Phys. Rev. B, vol. **55**, N8, 5276 (1997)
- [86] O. Renner, T. Missala and P. Sondhaus, E. Krousky, E. Förster, C. Chenais-Popovics and O. Rancu, *High-Luminosity, High-Resolution, X-ray Spectroscopy of Laser-Produced Plasma by Vertical-Geometry Johann Spectrometer*, Rev. Sci. Instrum. **68** (6), 2393 (1997)
- [87] T.W. Staley and R.J. Matyi, *A Statistical Method for Fitting of Double-Crystal X-ray Rocking Curves*, J. Appl. Cryst., **30**, 368 (1997)
- [88] T. Nittono and F. Hyuga, *X-ray Diffraction Analysis of InGaP/GaAs Heterointerfaces Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition*, J. Appl. Phys. **81** (6), 2607 (1997)
- [89] M. de Naurois, J. Stangi, W. Faschinger, and G. Bauer, S. Ferriera, *High Resolution X-ray Diffraction Studies of Short-Period CdTe/MnTe Superlattices*,

- J. Appl. Phys. **81** (9), 6120 (1997)
- [90] Q. Shen and S. Kycia, *Determination of Interfacial Strain Distribution in Quantum-Wire Structures by Synchrotron X-ray Scattering*, Phys. Rev. B, vol. **55**, N23,15791 (1997)
- [91] N. Boudet, J. Eymery, and N. Magnea, *X-ray Diffraction Study of the Lattice Distortions Induced by a Fractional Monolayer: ZnTe Embedded in Vicinal CdTe(001)*, Phys. Rev. B, vol. **55**, N23, 15804 (1997)
- [92] K. Reimann and R. Würschum, *Distribution of Internal Strains in Nanocrystalline Pd Studied by X-ray Diffraction*, J. Appl. Phys. **81** (11), 7186 (1997)
- [93] I. Kim and B.-D. Choe, S.K. Park and W.G. Jeong, *Analysis of Abnormal X-ray Diffraction Peak Broadening from InGaAs/GaAs Multiple Quantum Wells*, J. Appl. Phys. **82** (10), 4865 (1997)
- [94] G. Hölzer, M. Fritsch, M. Deutsch, J. Härtwig, and E. Förster, *$K\alpha_{1,2}$ and $K\beta_{1,3}$ X-ray Emission Lines of the 3-d Transition Metals*, Phys. Rev. A **56** (6), 4554 (1997)
- [95] I. Uschmann, C. Malgrange and E. Förster, *Measurement of a Bent-Crystal Rocking Curve with Oscillations*, J. Appl. Cryst. **30**, 1150 (1997)
- [96] O. Renner, D. Salzmann, P. Sondhaus, A. Djaoui, E. Krousky and E. Förster, *Experimental Evidence for Plasma Shifts in Lyman Series of Aluminium*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31**, 1379 (1998)
- [97] C. Schulze, U. Lienert, M. Hanfland, M. Lorenzen and F. Zontone, *Microfocusing of Hard X-rays with Cylindrically Bent Crystal Monochromators*, J. Synchrotron Rad. **5**, 77 (1998)
- [98] H. Yamaoka, K. Ohtomo and T. Ishikawa, *Focusing and Reflection by a Bent Crystal for High-Energy Synchrotron Radiation*, J. Synchrotron Rad. **5**, 687 (1998)
- [99] G. Thorkildsen and H.B. Larsen, *Primary Extinction in Cylinders and Spheres*, Acta Cryst. **A54**, 172 (1998)
- [100] G. Thorkildsen and H.B. Larsen, *Absorption and Weighted Path Length in Cylinders and Spheres*, Acta Cryst. **A54**, 186 (1998)

- [101] F.N. Chukhovskii, A. Hupe, E. Rossmanith and H. Schmidt, *Primary Extinction and Absorption: a Theoretical Approach Based on the Takagi-Taupin Equations. Application to Spherical Crystals*, Acta Cryst. **A54**, 191 (1998)
- [102] I. Kim, S.-W. Ryu, and B.-D. Choe, H.-D. Kim and W.G. Jeong, *Matrix Method for the X-ray Rocking Curve Simulation*, J. Appl. Phys. **83** (7) (1998)
- [103] A.M. Afanas'ev, A.A. Zaitsev, R.M. Imamov, E.M. Pashaev, and M.A. Chuev, *Potentialities of X-ray Diffractometry for Studying δ -Layers on Example of the $Al_{0.27}Ga_{0.73}As-In_{0.13}Ga_{0.87}As/GaAs$ Heterostructure*, Cryst. Rep. Vol. **43** (4), 629 (1998)
- [104] P. Yashar, M.R. Pillai, J. Mieciki-Millunchick, and S.A. Barnett, *X-ray Diffraction Measurement of Segregation-Induced Interface Broadening in $InxGa1-xAs/GaAs$ Superlattices*, J. Appl. Phys. **83** (4), 2010 (1998)
- [105] T. Marschner, J. Brübach, C.A. Verschuren, M.R. Leys, and J.H. Wolter, *X-ray Interference Effect as a Tool for the Structural Investigation of $GaInAs/InP$ Multiple Quantum Wells*, J. Appl. Phys. **83** (7), 3630 (1998)
- [106] J.M. Fatah, P. Harrison, T. Stirner, J.H.C. Hogg, and W.E. Hagston, *Double Crystal X-ray Diffraction Simulations of Diffusion in Semiconductor Mirostructures*, J. Appl. Phys. **83** (8), 4037 (1998)
- [107] Q. Yang, A. Li, and J. Chen, *High Resolution X-ray Diffraction Study of Bragg Peak Width in Strained $InGaAs/InAlAs/InP$ Heterostructures*, J. Appl. Phys. **83** (11), 5792 (1998)
- [108] R. Rettig, T. Marschner, and W. Stolz, L. Tapfer, *X-ray Diffraction Study of Intentionally Disordered $(GaIn)As/Ga(PAs)$ Heterostructures*, J. Appl. Phys. **84** (1), 237 (1998)
- [109] A. de Bernabe, M.J. Capitan, H.E. Fischer, C. Prieto, *Study of Interfaces in Co/Cu Multilayers by Low-Angle Anomalous X-ray Diffraction*, J. Appl. Phys. **84** (4), 1881 (1998)
- [110] P. Zaumseil, *High Resolution Determination of the Ge Depth Profile in $SiGe$ Heterobipolar Transistor Structures by X-ray Diffractometry*, Phys. Stat. Sol. (a) **165**, 195 (1998)
- [111] G. Hölzer, O. Wehrhan, E. Förster, *Characterization of Flat and Bent*

- Crystals for X-ray Spectroscopy and Imaging*, Cryst. Res. Technol. **33** (4), 555 (1998)
- [112] S.G. Podorov, G. Hölzer, E. Förster and N.N. Faleev, "Semidynamical solution of the inverse problem of X-ray Bragg diffraction on multilayered crystals", Phys. Stat. Sol. (a) **169**, 9 (1998)
- [113] S.G. Podorov and V.I. Punegov, *Iterative solution of the inverse problem of dynamic diffraction in inhomogeneous crystals*, Technical Physics **44** (3), 299 (1999)
- [114] T. Missala, I. Uschmann, and E. Förster, G. Jenke and D. von der Linde, *Monochromatic Focusing of Subpicosecond X-ray Pulses in the keV Range*, Rev. Sci. Instr. **70** (2), 1288 (1999)
- [115] A. Ulyanekov, T. Baumbach, N. Darowski and U. Pietsch, K.H. Wang and A. Forchel, T. Wiebach, *In-plane Strain Distribution in Free-Standing GaAs/InGaAs/GaAs Single Quantum Well Surface Nanostructures on GaAs[001]*, J. Appl. Phys. **85** (3), 1524 (1999)
- [116] R.D. Deslattes, E. G. Kessler Jr., S. Owens, D. Black and A. Hennins, *Just How Perfect Can a Perfect Crystal Be?* J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A3 (1999)
- [117] F. Germini, C. Bocchi, C. Ferrary, S. Franchi, A. Baraldi, R. Magnanini, D. De Salvador, M. Berti and A.V. Drigo, *Assessment of Vegard's Law Validity in the Ga_{1-x}Al_xSb/GaSb Epitaxial System*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A12 (1999)
- [118] R.R. Hess, C.D. Moore and M.S. Goorsky, *Lattice Tilt and Relaxation in InGaP/GaAs/Ge Solar Cells on Miscut Substrates*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A16 (1999)
- [119] D. Lübbert, B. Jenichen, T. Baumbach, H.T. Grahn, G. Paris, A. Mazuelas, T. Kojima and S. Arai, *Elastic Stress Relaxation in GaInAsP Quantum Wires on InP*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A21 (1999)
- [120] T. Passow, K. Leonardy, A. Stockmann, H. Selke, H. Heinke and D. Hommel, *High-Resolution X-ray Diffraction Investigations of Highly Mismatched II-IV Quantum Wells*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A42 (1999)
- [121] V. Großmann, H. Heinke, H. Wensch, M. Behringer and D. Hommel, *Investigations of ZnSe Based Laser Structures on ZnSe Substrates by High Resolution X-ray Diffraction*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A47 (1999)

- [122] C. Giannini, E. Carlino, P. Sciacovelli, L. Tapfer, M. Sauvage-Simkin, Y. Garreau, N. Jedrecy, M.B. Veron and R. Pinchaux, *Influence of the Interface Layer on the Strain Relaxation of ZnSe Epitaxial Layer Grown by MBE on (001)GaAs*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A51 (1999)
- [123] M. Schuster, P.O. Gervais, B. Jobst, W. Hösler, R. Averbek, H. Riechert, A. Ilberl and R. Stömmer, *Determination of the Chemical Composition of Distorted InGaN/GaN Heterostructures from X-ray Diffraction Data*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A56 (1999)
- [124] R.J. Matyi, W.A. Doolittle and A.S. Brown, *High Resolution X-ray Diffraction Analyses of GaN/LiGaO₂*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A61 (1999)
- [125] P. Zaumseil, *The Influence of Substitutional Carbon on the Si/Ge Interdiffusion Studied by X-ray Diffractometry at Superlattice Structures*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A75 (1999)
- [126] V. Mocella, J.P. Guigay, Y. Epelboin, J. Härtwig, J. Baruchel, and A. Mazuelas, *Influence of the Transverse and Longitudinal Coherence in the Dynamical Theory of X-ray Diffraction*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A88 (1999)
- [127] M.E. Constantino, H. Navarro-Contreras, M.A. Vidal, B. Salazar-Hernandez, A. Lastras-Martinez, I. Hernandez- Calderon and M. Lopez-Lopez, *Strain in GaAs at the Heterointerface of ZnSe/GaAs/GaAs*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, 1293 (1999)
- [128] A.D. Andreev, J.R. Downes, D.A. Faux, and E.P. O'Reilly, *Strain Distribution in Quantum Dots of Arbitrary Shape*, J. Appl. Phys **86** (1), 297 (1999)
- [129] C. Bocchi, S. Franchi, and F. Germini, A. Baraldi and R. Magnanni, D. De Salvador, M. Berti, And A.V. Drigo, *Measurement of Aluminium Concentration in the Ga_{1-x}Al_xSb/GaSb Epitaxial System*, J. Appl. Phys. **86** (3), 1298 (1999)
- [130] S.G. Podorov, G. Hölzer, E. Förster, and N.N. Faleev, *"Fourier analysis of X-ray rocking curves from superlattices"*, Phys. Stat. Sol. (b) **213**, 317 (1999)
- [131] A.L. Gray, T.C. Newell, and L.F. Lester, H. Lee, *High-Resolution X-ray and Transmission Electron Microscopic Analysis of a GaInAsSb/AlGaAsSb Multiple Quantum Well Laser Structure*, J. Appl. Phys. **85** (11) 7664 (1999)

- [132] M. Tolan, „*X-Ray Scattering from Soft-Matter Thin Films*“, Springer, Berlin (1999)
- [133] V. Holy, U. Pietsch, T. Baumbach, „*High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers*“, Springer, Berlin (1999)
- [134] Ya.I. Nesterets, V.I. Punegov, I.V. Pirshin, A.G. Touryanski, A.V. Vinogradov, E. Förster and S.G. Podorov, "*Application of the statistical dynamical theory of X-ray diffraction to calculation of the HOPG echelon-monochromator parameters*", phys. stat. sol. (a) **179**, 311 (2000)
- [135] S.G. Podorov and E. Förster, "*Theory of X-ray diffraction on asymmetrically cut and bent crystals*", phys. stat. sol. (b) **220**, 829 (2000)
- [136] S.G. Podorov, O Renner, O Wehrhan and E Forster, "*Optimized polychromatic x-ray imaging with asymmetrically cut bent crystals*", J. Phys. D: Appl.Phys. **34**, 2363-2368 (2001)

LEBENS LAUF**Serguei Podorov**

1. Oktober 1966

Geboren in Emwa, Republik der Komi

Schulbesuch

1973-1983

Mittelschule N2, Emwa

Tätigkeit vor dem Studium

1983 bis 1984

Bohrdreher, Werk, Emwa

Studium

1984 bis 1987

Studium im Fach Physik an dem
Physikalisch- Technischem Institut Moskau

1987 bis 1992

Studium im Fach Physik an der Staatlichen
Universität Syktywkar, Rußland

Juni 1992

Abschluß des Physikstudiums als Diplom-
Physiker mit der Gesamtnote: **sehr gut****Titel der Diplomarbeit:**„Iterative solution of inverse problem of X-
ray kinematical diffraction“**Berufliche Tätigkeit**

1992 bis 1993

Assistent des Lehrstuhls „Mathematische
Analyse“ an der Syktywkarer Universität

1994 bis 1995

Programmierer bei Komi Sparbank,
Syktywkar

1996 bis 1997

Freier Dozent bei der DEKRA-Akademie,
Stendal, Deutschland

Seit 1997

Wissenschaftlicher Mitarbeiter (Doktorand)
im Institut für Optik und Quantenelektronik/
Abteilung Röntgenoptik an der Friedrich-
Schiller-Universität Jena, Deutschland**Familienstand:**verheiratet seit 1994, Vater eines vierjährigen
Sohnes

Jena, den 01. Februar 2002

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise unentgeltlich geholfen:

1. Dr. N.N. Faleev
2. Prof. E. Förster
3. Dr. O. Wehrhan
4. Dr. O. Renner
5. Dr. I. Uschmann
6. Dipl. Phys. U. Wagner

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Jena, 01.02.2002

Serguei Podorov