

# Optische Kohärenztomografie mit kurzen Wellenlängen

— DIPLOMARBEIT —

zur Erlangung des akademischen Grades

*Diplom-Physiker*



Friedrich-Schiller-Universität Jena

Physikalisch-Astronomische Fakultät

Institut für Optik und Quantenelektronik

eingereicht von Silvio Fuchs,

geboren am 07.04.1987 in Mühlhausen

1. Gutachter:

Prof. Dr. G. G. Paulus  
Institut für Optik und Quantenelektronik  
Friedrich-Schiller-Universität Jena

2. Gutachter:

Prof. Dr. E. Förster  
Institut für Optik und Quantenelektronik  
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Tag der Abgabe: 30.04.2012

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Theoretische Grundlagen</b>	<b>2</b>
1.1 Grundlagen der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen im Medium . . . . .	2
1.1.1 Verallgemeinerte Fresnel'sche Formeln und Matrixformalismus . . . . .	3
1.2 Statistische Optik . . . . .	6
1.2.1 Optische Intensität . . . . .	6
1.2.2 Autokorrelation . . . . .	6
1.2.3 Zeitliche Kohärenz . . . . .	6
1.2.4 Spektrale Leistungsdichte . . . . .	7
1.2.5 Spektrale Breite . . . . .	7
1.2.6 Wiener-Khinchin-Theorem . . . . .	8
1.2.7 Interferenz mit partiell kohärenten Lichtwellen . . . . .	8
1.2.8 Michelson-Interferometer . . . . .	9
1.3 Optische Kohärenztomografie . . . . .	9
1.3.1 Optische Kohärenztomografie im Zeitbereich . . . . .	11
1.3.2 Optische Kohärenztomografie im Frequenzbereich . . . . .	11
1.3.3 Auflösung . . . . .	13
1.3.4 Eindringtiefe . . . . .	14
1.4 Extreme Ultraviolett- und weiche Röntgenstrahlung . . . . .	14
1.5 Das Synchrotron als Strahlungsquelle . . . . .	15
1.5.1 Abstrahlung einer beschleunigten Ladung . . . . .	15
1.5.2 Bending-Magnet Strahlung . . . . .	16
1.5.3 Wiggler- und Undulatorstrahlung . . . . .	17
<b>2 OCT mit extremer Ultraviolett- und weicher Röntgenstrahlung</b>	<b>19</b>
2.1 Motivation und Idee . . . . .	19
2.1.1 Transmissionsfenster . . . . .	19
2.2 Anpassung des OCT-Aufbaus auf kurze Wellenlängen . . . . .	20
2.2.1 Signalausbeute und Probenbeschaffenheit . . . . .	20
2.2.2 Optiken . . . . .	21
2.2.3 Strahlungsquelle . . . . .	21
2.2.4 Interferometrie mit kurzen Wellenlängen . . . . .	21
2.2.5 Vorgeschlagener XCT-Aufbau . . . . .	21
2.3 Tiefenrekonstruktion und Auflösung . . . . .	22
2.3.1 Mehrdeutigkeit des Autokorrelationssignals . . . . .	22
2.3.2 Rekonstruktion der Tiefe . . . . .	23
2.3.3 Auflösung . . . . .	24

<b>3</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>26</b>
3.1	Proben . . . . .	26
3.1.1	Simulation des reflektierten Spektrums . . . . .	26
3.1.2	Optimierungsprozess . . . . .	26
3.1.3	Probenherstellung und Übersicht . . . . .	27
3.2	Optische Abbildung . . . . .	28
3.2.1	Spektrometer . . . . .	28
3.2.2	Optisches Design . . . . .	29
3.3	Synchrotron-Strahlungsquellen . . . . .	29
3.3.1	DESY: DORIS III - BW3 . . . . .	30
3.3.2	HZB: BESSY II - UE112-PGM-1 . . . . .	31
3.4	Aufbau . . . . .	31
3.4.1	Vakuumkammer . . . . .	31
3.4.2	Motorisierung und Justage . . . . .	31
3.4.3	Detektoren . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>35</b>
4.1	Diskrete Fourier-Transformation des Spektrums . . . . .	35
4.1.1	Anzahl der Diskretisierungsschritte . . . . .	35
4.1.2	„Zero-Padding“ . . . . .	36
4.1.3	Fensterfunktionen . . . . .	36
4.2	XCT mit dispersiven Proben . . . . .	36
4.2.1	Einfluss der Dispersion auf die Auflösung . . . . .	37
4.2.2	Korrektur- und Verbesserungsmöglichkeiten . . . . .	37
4.2.3	Verbleibende auflösungsvermindernde Effekte . . . . .	39
4.3	Messung des reflektierten Spektrums . . . . .	40
4.3.1	„Swept-Source“-XCT . . . . .	40
4.3.2	„Spectrometer-based“-XCT . . . . .	41
4.3.3	Normierung auf Ringstrom . . . . .	42
4.3.4	Aufnahme eines Referenzspektrums . . . . .	42
4.4	Signalverarbeitung und Auswertungsroutine . . . . .	43
4.4.1	Messsignal . . . . .	43
4.4.2	Referenzsignal . . . . .	44
4.4.3	Korrekturen . . . . .	44
4.4.4	Fourier-Transformation . . . . .	46
4.5	Auflösung, Genauigkeit und der Einfluss von Messfehlern . . . . .	48
4.5.1	Systematische Messfehler und Genauigkeit . . . . .	48
4.5.2	Statistische Messfehler . . . . .	49
4.5.3	Einfluss des Übergitters bei Messung mit dem Spektrometer . . . . .	49
4.6	Silizium-Transmissionsfenster . . . . .	49
4.6.1	Auflösung . . . . .	49
4.6.2	Einfluss der hochreflektierenden Deckschicht . . . . .	51
4.6.3	Probe aus B <sub>4</sub> C im Silizium-Transmissionsfenster . . . . .	53
4.7	Wasserfenster . . . . .	53
4.7.1	Auflösung . . . . .	54
4.7.2	Einfluss der hochreflektierenden Deckschicht . . . . .	57
4.7.3	Einfluss des Einfallswinkels . . . . .	57
4.8	Genauigkeit und Abweichung der gemessenen Tiefen . . . . .	58
4.8.1	Unabhängige Vermessung der Schichtsysteme mit einem Röntgendiffraktometer . . . . .	58
4.9	3D-Tomografie . . . . .	59
4.10	Sonstiges . . . . .	62



4.10.1 Ablagerung von Kohlenstoff . . . . .	62
4.10.2 Weitere Proben und Messungen mit Streulicht . . . . .	62
<b>Zusammenfassung</b>	<b>64</b>
<b>Ausblick</b>	<b>65</b>
<b>Danksagung</b>	<b>67</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>68</b>
<b>Anhang</b>	<b>70</b>
<b>A Rechnungen und Beweise</b>	<b>70</b>
A.1 Intensität an Interferometerausgang eines OCT Gerätes . . . . .	70
A.2 Kohärenzfunktion des Feldes am Interferometerausgang eines OCT Gerätes . . . . .	71
A.3 Spektrum am Interferometerausgang eines OCT Gerätes . . . . .	71
A.4 Betrag des OCT Signals . . . . .	72
A.5 Reflektiertes Spektrum einer dispersiven Schicht . . . . .	72
A.5.1 Näherung . . . . .	73
A.6 Beweis Wiener-Kchinchin Theorem . . . . .	73
<b>B Zusätzliche Abbildungen</b>	<b>76</b>
B.1 Auswirkungen der Dispersionskorrekturen auf das XCT Signal . . . . .	76
<b>C Sonstiges</b>	<b>78</b>
C.1 Spektrale Funktion des Spektrometers . . . . .	78
C.2 Filtertransmissionen . . . . .	78

# Einleitung

Mit der Erfindung des Mikroskops im frühen 17. Jahrhundert konnten erstmals Objekte untersucht werden, die mit bloßem Auge nicht erkennbar sind. Die Möglichkeit Strukturen und Prozesse des Mikrokosmos direkt zu beobachten, veränderte die Biologie, die Medizin und das physikalische Weltbild grundlegend. Seither wurden stetig neue Mikroskopieverfahren mit immer besser werdender Auflösung entwickelt, um immer weiter in den Mikrokosmos vorzudringen.

Tomografie ist ein weit verbreitetes mikroskopisches Verfahren, mit dem die innere Struktur von Objekten mittels eindringender Felder zerstörungsfrei abgebildet werden kann. Mit der so genannten Magnet-Resonanz-Tomografie, einem Standardverfahren in der medizinischen Diagnostik, können mit magnetischen Wechselfeldern und dem Spinrelaxations-Kontrast dreidimensionale Strukturinformationen erfasst werden. Die Computertomografie, ebenfalls ein etabliertes Diagnoseverfahren, nutzt die Schattenbilder von Röntgenstrahlen beim Durchdringen von Gewebe aus unterschiedlichen Winkeln und rekonstruiert so dreidimensionale Strukturinformationen.

Die optische Kohärenztomografie („Optical Coherence Tomography“ - OCT) ist eine Methode, die 1991 von Huang vorgestellt wurde [1]. Das Verfahren basiert auf der Verwendung von Licht im sichtbaren bis infraroten Spektralbereich, um Tiefeninformationen zu gewinnen. Die Auflösung in der Ausbreitungsrichtung der Strahlung (axiale Richtung) hängt nur von der Kohärenzlänge der Lichtquelle und nicht von der numerischen Apertur der abbildenden Optik ab. Je größer die Bandbreite der Lichtquelle ist, desto kürzer ist die Kohärenzlänge. Die meisten kommerziell erhältlichen OCT-Geräte arbeiten mit Lichtquellen im nahen infraroten Spektralbereich. Diese Wellenlängen eignen sich besonders gut, um tief in organisches Gewebe einzudringen. Mit breitbandigen Quellen können Eindringtiefen von einigen  $100\ \mu\text{m}$  bei einer axialen Auflösung von wenigen Mikrometern erreicht werden [2]. Die verbreitetste Anwendung der OCT ist die Diagnostik in der Ophthalmologie (Augenheilkunde). Hier ermöglicht die Unabhängigkeit der Auflösung von der numerischen Apertur die tomografische Untersuchung tiefliegender Schichten der Netzhaut durch die Pupille des Auges. Die OCT erreicht in etwa die selbe Auflösung wie histologische Gewebeschnitte, ist jedoch nicht invasiv. Daher wird sie auch zur Diagnose von Tumorerkrankungen eingesetzt und ersetzt teilweise eine risikoreiche Gewebentnahme [2].

Die Auflösung von OCT kann erhöht werden, indem die Bandbreite der verwendeten Strahlung vergrößert oder die mittlere Wellenlänge verringert wird (Gl. (1.67)). Bisherige Verbesserungen der Auflösung wurden stets durch Vergrößerung der Bandbreite und nur marginalen Änderungen der mittleren Wellenlänge der Lichtquelle erzielt [3]. Die grundlegende Idee dieser Diplomarbeit ist es, die Auflösung von OCT durch eine signifikante Verkürzung der Wellenlänge in den extremen Ultraviolett-(XUV) und weichen Röntgenbereich (soft X-Ray) von Mikrometern auf wenige Nanometer zu erhöhen. Erste theoretische Überlegungen, Simulationen des Messsignals und eine prinzipielle Idee zur Anpassung des OCT-Aufbaus für XUV Strahlung wurden bereits veröffentlicht [4], [5]. Wir nennen diese hochauflösende OCT-Methode: „XUV and soft X-ray Coherence Tomography“ oder auch kurz XCT. Das Ziel des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten und durchgeführten Experimentes ist die erstmalige Demonstration von XCT und der Nachweis, dass die erwartete Auflösung erreicht werden kann. Die starke Absorption von XUV Strahlung in den meisten Materialien begrenzt jedoch die erreichbaren Eindringtiefen drastisch. Daher ist die Bandbreite von XCT auf spektrale Transmissionsfenster der zu untersuchenden Proben beschränkt. Mit breitbandiger XUV-Strahlung im Energiebereich zwischen  $30\ \text{eV}$  und  $99\ \text{eV}$  können siliziumbasierte Festkörper untersucht werden. Bei einer Eindringtiefe von einigen  $100\ \text{nm}$  [6], wird eine theoretische Auflösung von ca.  $11\ \text{nm}$  erreicht. Dies liegt in der Größenordnung der Strukturen in der Halbleiterindustrie und stellt damit ein mögliches Anwendungspotential für die XCT als eine zerstörungsfreie Tiefenanalyse von siliziumbasierten Bauelementen dar. Weiche Röntgenstrahlung im Energiebereich zwischen  $280\ \text{eV}$  und  $550\ \text{eV}$  dringt in organischem Gewebe ebenfalls einige  $100\ \text{nm}$  tief ein [6]. Die in diesem Spektralbereich mögliche Auflösung liegt bei nur  $3\ \text{nm}$ . Dies offenbart ein weiteres Anwendungspotential der XCT in den Lebenswissenschaften.

# Kapitel 1

## Theoretische Grundlagen

### 1.1 Grundlagen der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen im Medium

Die Eigenschaften von elektromagnetischer Strahlung werden durch die Maxwell'schen Gleichungen beschrieben [7]. Das reale elektrische Feld  $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$  einer elektromagnetischen Welle kann in den komplexen Zahlenraum erweitert werden. Dabei gilt:

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \Re \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t)] \quad (1.1)$$

Die Fourier-Transformation des Feldes in den Frequenzraum und deren Umkehrung ist:

$$\bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} dt \quad (1.2)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (1.3)$$

Die Ausbreitung einer elektromagnetischen Welle in einem isotropen, linearen und dispersiven Medium wird durch die Wellengleichung beschrieben. Für transversale Wellen  $\text{div} \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0$  gilt im Frequenzraum [8]:

$$\Delta \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \underbrace{\left[ 1 + \chi(\omega) + \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma(\omega) \right]}_{n^2(\omega)} \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (1.4)$$

Dabei ist  $\chi(\omega)$  die elektrische Suszeptibilität bzw.  $\varepsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega)$  die relative Permittivität und  $\sigma(\omega)$  die elektrische Leitfähigkeit des Mediums. Ein Standardmodell zur Berechnung dieser materialabhängigen Funktionen, ist das Drude-Modell. Die Ladungsträger im Medium werden als gedämpfte, harmonische und durch das Feld getriebene Oszillatoren behandelt:

$$\ddot{\mathbf{x}}(\mathbf{r}, t) + g\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{r}, t) + \omega_0^2 \mathbf{x}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{m} \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \quad (1.5)$$

Mit der Polarisation  $\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = -N \cdot q \cdot \mathbf{x}(\mathbf{r}, t)$  und der Lösung von Gleichung (1.5) im Fourier-Raum erhält man  $\chi(\omega)$  (siehe Gl. (1.6)). Die Resonanzfrequenzen der mikroskopischen Ladungsträger bestimmen das makroskopische Verhalten des Mediums.

$$\chi(\omega) = \sum_j \frac{f}{(\omega_{0j}^2 - \omega^2) - ig_j \omega} \quad \text{mit} \quad f = \frac{q^2 N}{\varepsilon_0 m} \quad (1.6)$$

Analoge Überlegungen lassen sich auch für die Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$  anstellen ( $\omega_0 = 0$ ):

$$\sigma(\omega) = \frac{\varepsilon_0 f f}{g - i\omega} \quad (1.7)$$

Setzt man das Ergebnis in die Wellengleichung (1.4) ein, erhält man die komplexe Brechzahl des Mediums:

$$n^2(\omega) = 1 + \sum_j \left[ \frac{f}{(\omega_{0j}^2 - \omega^2) - ig_j \omega} \right] + \frac{f f}{-\omega^2 - ig \omega} \quad (1.8)$$

$$n(\omega) = n' + in'' \quad (1.9)$$

Der reelle und imaginäre Teil der komplexen Brechzahl  $n$  hängen über die Kramers-Kronig Relation miteinander zusammen. Wenn einer der beiden Teile für alle Frequenzen bekannt ist, kann der andere berechnet werden.

Mit Hilfe der Brechzahl lässt sich die Ausbreitung der Strahlung im Medium einfach beschreiben. Mit dem Ansatz der ebenen Welle  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}(\omega)\mathbf{r}}$ , lässt sich die Wellengleichung (1.4) lösen. Für eine monochromatische Welle der Frequenz  $\omega$  gilt:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}(\omega)\mathbf{r} - \omega t)} \quad \text{und} \quad \mathbf{k} = \frac{n(\omega)\omega}{c} \mathbf{k}_0 \quad (1.10)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \underbrace{e^{-i\omega(t - \frac{1}{c}\mathbf{k}_0\mathbf{r})}}_{\text{Vakuum Propagation}} \cdot \underbrace{e^{-i\frac{2\pi}{\lambda_0}(1-n')\mathbf{k}_0\mathbf{r}}}_{\text{Phasenverschiebung}} \cdot \underbrace{e^{-\frac{2\pi n''}{\lambda}\mathbf{k}_0\mathbf{r}}}_{\text{Absorption}} \quad (1.11)$$

Die Änderung der Phase bei Ausbreitung der Welle im Medium wird Dispersion genannt und durch  $n'$  quantifiziert. Die Absorption ist durch  $n''$  bestimmt.

### 1.1.1 Verallgemeinerte Fresnel'sche Formeln und Matrixformalismus

Mit den Übergangsbedingungen der elektrischen und magnetischen Felder an der Grenzschicht zweier Medien mit unterschiedlicher Brechzahl ist es möglich, die Ausbreitung des Lichtfeldes auch in stückweise homogenen Medien zu beschreiben [9].

#### Polarisation

Die Polarisationszustand einer elektromagnetischen Welle kann durch zwei senkrecht aufeinander und damit linear unabhängige Komponenten beschrieben werden. Die Polarisationskomponenten sind abhängig von der Geometrie des Einfalls auf das stückweise homogene Medium und werden transversal-elektrisch (TE- oder s-Polarisation) und transversal-magnetisch (TM- oder p-Polarisation) genannt. Bei TE-Polarisation schwingt das elektrische Feld und bei TM-Polarisation das magnetische Feld rein transversal zur Einfallsebene. Für ein eindimensionales Schichtsystem bestehend aus den homogenen Schichten  $f$ , welche parallel zur  $(x, y)$ -Ebene angeordnet sind und Licht, welches in der  $(x, z)$ -Ebene einfällt, berechnen sich die Polarisationskomponenten zu:

$$\mathbf{E}_{\text{TE}} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ E \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\text{TE}} = \begin{pmatrix} H_x \\ 0 \\ H_z \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

$$\mathbf{E}_{\text{TM}} = \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \\ E_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\text{TM}} = \begin{pmatrix} 0 \\ H_y \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ H \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

Aufgrund der Symmetrie hängen die Felder nicht von  $y$  ab und es gilt:

$$\mathbf{kE}_{\text{TE}} = \mathbf{kE}_{\text{TM}} = 0 \quad (1.14)$$

$$k_f^2 = k_{fz}^2 + k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} n_f(\omega) \quad (1.15)$$

### Übergangsbedingungen

Für den Übergang der Felder an den Grenzflächen gilt, dass die Transversalkomponenten  $\mathbf{E}_t$  und  $\mathbf{H}_t$ , also bei TE-Polarisation  $E$  und  $H_x$  und bei TM-Polarisation  $H$  und  $E_x$  stetig übergehen. Damit ergibt sich der Ansatz zu

$$\mathbf{E}(x, z) = \mathbf{E}(z)e^{ik_x x}, \quad \mathbf{H}(x, z) = \mathbf{H}(z)e^{ik_x x}. \quad (1.16)$$

Mit der Wellengleichung (1.4) (Argument  $\omega$  im Folgenden weggelassen) gilt dann für die Feldamplituden im Fourierraum in einer homogenen Schicht  $f$  [9]:

$$\begin{array}{ll} \text{TE-Polarisation} & \text{TM-Polarisation} \\ 0 = \left( \frac{d^2}{dz^2} + k_{fz}^2 \right) \bar{E}_\perp(z) & 0 = \left( \frac{d^2}{dz^2} + k_{fz}^2 \right) \bar{H}_\perp(z) \end{array} \quad (1.17)$$

$$\bar{H}_z(z) = -\frac{i}{\omega\mu_0} \frac{\partial}{\partial z} \bar{E}_\perp(z) \quad \bar{E}_z(z) = \frac{i}{\omega\varepsilon_0\varepsilon} \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_\perp(z) \quad (1.18)$$

Beide Polarisationsrichtungen können simultan behandeln werden, indem die Substitutionen (1.19) und (1.20) eingeführt werden.

$$\bar{E}_\perp, \bar{H}_\perp \rightarrow F \quad (1.19)$$

$$i\omega\mu_0\bar{H}_x, -i\omega\varepsilon_0\bar{E}_x \rightarrow G \quad (1.20)$$

Mit  $\alpha_f^{\text{TM}} = \frac{1}{n_f^2}$  und  $\alpha_f^{\text{TE}} = 1$  ergeben sich damit die Differentialgleichungen

$$0 = \left( \frac{d^2}{dz^2} + k_{fz}^2 \right) F(z) \quad (1.21)$$

$$G = \alpha_f \frac{\partial}{\partial z} F(z). \quad (1.22)$$

### Matrixformalismus

Diese Differentialgleichungen besitzen mit den Anfangswerten  $F(0) = F_0$  und  $G(0) = G_0$  die Lösung

$$\begin{pmatrix} F(z) \\ G(z) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(k_{fz}z) & \frac{1}{k_{fz}\alpha_f} \sin(k_{fz}z) \\ -k_{fz}\alpha_f \sin(k_{fz}z) & \cos(k_{fz}z) \end{pmatrix}}_{\mathbf{m}_f(z)} \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix}.$$

Mit Hilfe der Matrix  $\mathbf{m}_f = \mathbf{m}_f(d_f)$  lassen sich demnach bei Kenntnis von  $F_0$  und  $G_0$  die Felder  $F$  und  $G$  berechnen, die durch die Schicht  $f$  mit der Dicke  $d_f$  propagiert sind. Die Propagation durch einen Stapel von  $n$  Schichten  $f$ , und damit bei  $D = \sum_{f=1}^n d_f$  kann dann durch die Hintereinanderausführung der einzelnen Propagationen beschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} F(D) \\ G(D) \end{pmatrix} = \underbrace{\prod_{f=1}^n \mathbf{m}_f}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix} = \mathbf{m}_n \cdots \mathbf{m}_1 \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

### Fresnel'sche Formeln

Das Medium oberhalb des Schichtsystems wird „Cladding“ genannt und hat den Brechungsindex  $n_c(\omega)$ . Fällt aus dem „Cladding“ Licht mit der Photonenenergie  $E = \hbar\omega$  unter einem Winkel  $\varphi$  zur Oberfläche ein, folgt für die Komponenten des Wellenvektors:

$$k_0 = \frac{E}{\hbar c} \quad (1.24)$$

$$k_x = k_0 n_c \cos(\varphi) \quad (1.25)$$

$$k_{fz} = \sqrt{(k_0 n_f)^2 - k_x^2} \quad (1.26)$$

Für die Komponenten des Wellenvektors des einfallenden ( $\mathbf{k}_I$ ), reflektierten ( $\mathbf{k}_R$ ) und in das unter den Schichten liegende Substrat ( $n_s$ ) transmittierten ( $\mathbf{k}_T$ ) Lichtes gilt dann:

$$\mathbf{k}_I = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_{cz} \end{pmatrix} \quad \mathbf{k}_R = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ -k_{cz} \end{pmatrix} \quad \mathbf{k}_T = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_{sz} \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

Für das einfallende Licht gilt dann

$$F_c(z) = \left( F_I e^{ik_{cz}z} + F_R e^{-ik_{cz}z} \right) \quad \Rightarrow F_0 = F_I + F_R \quad (1.28)$$

$$G_c(z) = i\alpha_c k_{cz} \left( F_I e^{ik_{cz}z} - F_R e^{-ik_{cz}z} \right) \quad \Rightarrow G_0 = i\alpha_c k_{cz} (F_I - F_R) \quad (1.29)$$

und für das transmittierte Licht gilt

$$F_s(z) = F_T e^{ik_{sz}z} \quad \Rightarrow F(D) = F_T \quad (1.30)$$

$$G_s(z) = i\alpha_s k_{sz} F_T e^{ik_{sz}z} \quad \Rightarrow G(D) = i\alpha_s k_{sz} F_T. \quad (1.31)$$

Mit Gleichung (1.23) ergibt sich für die Felder

$$\begin{pmatrix} F_T \\ i\alpha_s k_{sz} F_T \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} F_I + F_R \\ i\alpha_c k_{cz} (F_I - F_R) \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

und daraus die verallgemeinerten Fresnel'schen Formeln (1.33) und (1.34).

$$F_R = \frac{(\alpha_c k_{cz} M_{22} - \alpha_s k_{sz} M_{11}) - i(M_{21} + \alpha_s \alpha_c k_{sz} k_{cz} M_{12})}{(\alpha_c k_{cz} M_{22} + \alpha_s k_{sz} M_{11}) + i(M_{21} - \alpha_s \alpha_c k_{sz} k_{cz} M_{12})} F_I \quad (1.33)$$

$$F_T = \frac{2\alpha_c k_{cz} (M_{11} M_{22} - M_{12} M_{21})}{(\alpha_c k_{cz} M_{22} + \alpha_s k_{sz} M_{11}) + i(M_{21} - \alpha_s \alpha_c k_{sz} k_{cz} M_{12})} F_I, \quad (1.34)$$

Gleichung (1.33) und (1.34) müssen nun wieder auf die beiden Polarisationsrichtungen TE und TM spezifiziert werden. Für TE-Polarisation ergibt sich:

$$r^{\text{TE}} = \frac{F_R^{\text{TE}}}{F_I^{\text{TE}}} = \frac{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} - k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) - i(M_{21}^{\text{TE}} + k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})}{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} + k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) + i(M_{21}^{\text{TE}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})} \quad (1.35)$$

Im Fall der TM-Polarisation ist die Reflektivität des elektrischen Feldes

$$r^{\text{TM}} = \frac{E_{\perp R}^{\text{TM}}}{E_{\perp I}^{\text{TM}}} = \frac{n_c H_{\perp R}^{\text{TM}}}{n_c H_{\perp I}^{\text{TM}}} \quad (1.36)$$

$$= \frac{(n_s^2 k_{cz} M_{22}^{\text{TM}} - n_c^2 k_{sz} M_{11}^{\text{TM}}) - i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} + k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TM}})}{(n_s^2 k_{cz} M_{22}^{\text{TM}} + n_c^2 k_{sz} M_{11}^{\text{TM}}) + i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TM}})}. \quad (1.37)$$

Da die Brechzahlen komplex sind, wird mit dem Matrixformalismus sowohl die Dispersion der Schichten, als auch die Absorption berücksichtigt.

## Brechung

Aus Gleichung (1.26) folgt sofort das Brechungsgesetz.

$$n_1(\omega) \cos \alpha = n_2(\omega) \cos \beta \quad (1.38)$$

Dabei ist  $\alpha$  der Einfallswinkel zur Grenzfläche im Medium mit der Brechzahl  $n_1(\omega)$  und  $\beta$  der Winkel zur Grenzfläche des gebrochenen Strahles im Medium mit der Brechzahl  $n_2(\omega)$ .

## 1.2 Statistische Optik

Eine Lösung der Wellengleichung (1.4) ist die ebene monochromatische Welle (siehe auch Gl. (1.11)). Die Phase der ebenen Welle  $\mathbf{k}(\omega)\mathbf{r} - \omega t$  ist für alle Zeiten  $t$  deterministisch festgelegt. Deshalb lässt sich bei Kenntnis des Funktionswertes zu einer Zeit  $\tau$  der Funktionswert für jede beliebige Zeit  $t$  vorhersagen. Die Welle wird dann als vollständig mit sich selbst korreliert bezeichnet.

Natürliches Licht kann, schon allein aufgrund der nicht unendlichen zeitlichen Ausdehnung, nicht vollständig mit sich selbst korreliert sein. Daher ist es sinnvoll neben der momentanen Feldstärke, die statistisch schwanken kann, den Ensemblemittelwert des Betrages der Feldstärke als Messgröße einzuführen [8].

### 1.2.1 Optische Intensität

Die optische Intensität  $I(\mathbf{r}, t)$  ist als Ensemblemittelwert  $\langle \cdot \rangle$  über den Betrag des Pointingvektors  $\mathcal{S}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$  definiert. Für transversale zueinander elektromagnetische Felder in nicht dispersiven Medien ( $n = n' = \text{konst.}$ ) gilt:

$$I(\mathbf{r}, t) = \langle |\mathcal{S}(\mathbf{r}, t)| \rangle = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \langle |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle \quad (1.39)$$

Der Ensemblemittelwert wird durch die Mittelung über viele stochastisch verteilten instantanen Intensitäten  $|\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2$  gebildet. Für den Fall einer stationären optischen Welle, deren statistische Mittelwerte zeitinvariant sind, ergibt sich der Ensemblemittelwert durch eine zeitliche Mittelung [8]:

$$I(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 dt \quad (1.40)$$

### 1.2.2 Autokorrelation

Da  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  nun zufällig schwankt, ist es nicht mehr möglich, bei Kenntnis des Funktionswertes zu einer Zeit  $t$  den Funktionswert zur Zeit  $t + \tau$  vorherzusagen. Ein Maß für diese Vorhersagbarkeit ist die Autokorrelationsfunktion (1.41), welche vom Abstand  $\tau$  der beiden Zeitpunkte abhängt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird im folgenden das Argument  $\mathbf{r}$  weggelassen.

$$\begin{aligned} \Gamma(\tau) &= \langle \mathbf{E}^*(t) \mathbf{E}(t + \tau) \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \mathbf{E}^*(t) \mathbf{E}(t + \tau) dt \end{aligned} \quad (1.41)$$

### 1.2.3 Zeitliche Kohärenz

$\Gamma(\tau)$  wird auch als zeitliche Kohärenzfunktion bezeichnet. Die Kohärenz gibt demnach den Grad der Korrelation der Lichtwelle mit sich selbst an. Aus Gleichung (1.41) und (1.40) folgt, dass die zeitliche

Kohärenzfunktion zur Zeit  $\tau = 0$  proportional zur Intensität des Lichtes ist:

$$I = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \Gamma(0) \quad (1.42)$$

Daher ist es sinnvoll, den dimensionslosen zeitlichen Kohärenzgrad  $\gamma(\tau)$  (1.43) einzuführen, der die zeitlichen Kohärenzfunktion auf die Intensität normiert.

$$\gamma(\tau) = \frac{\langle \mathbf{E}^*(t) \mathbf{E}(t + \tau) \rangle}{\langle \mathbf{E}^*(t) \mathbf{E}(t) \rangle} \quad (1.43)$$

Der Betrag des Kohärenzgrades kann Werte von 0 (vollständig inkohärent) bis 1 (vollständig kohärent) annehmen. Wenn  $|\gamma(\tau)|$  monoton mit der Zeitdifferenz abnimmt, kann eine Kohärenzzeit  $\Delta\tau_K$  eingeführt werden, deren Breite durch  $\gamma(\tau)$  definiert ist. In vielen Fällen wird die volle Halbwertsbreite („Full Width at Half Maximum“ kurz: FWHM) als Maß genutzt. Sie gibt an, bei welchem doppelten Abstand zum Maximum die Funktion auf die Hälfte ihres Maximalwertes gefallen ist. Oftmals ist es sinnvoll, den Verlauf des Betrages des Kohärenzgrades durch eine Gaußfunktion mit einer Kohärenzzeit von  $\Delta\tau_K$  darzustellen:

$$|\gamma(\tau)| = C \cdot e^{-4 \ln 2 \frac{\tau^2}{\Delta\tau_K^2}} \quad (1.44)$$

Zusätzlich zur Kohärenzzeit, kann auch eine Kohärenzlänge

$$\Delta l_K = \frac{c \Delta\tau_K}{n} \quad (1.45)$$

definiert werden.

#### 1.2.4 Spektrale Leistungsdichte

Für die Beschreibung der spektralen Eigenschaften von stochastischem Licht ist es sinnvoll, eine Fourier-Transformation (siehe Gl. (1.2)) der komplexen Felder durchzuführen. Der Ensemblemittelwert über den Betrag der Fourier-Komponente  $\pi \varepsilon_0 n c \langle |\bar{\mathbf{E}}(\omega)|^2 \rangle$  wird als spektrale Energiedichte bezeichnet. Sie gibt an wie groß die mittlere Energie pro Flächeninhalt im Intervall zwischen  $\omega$  und  $\omega + d\omega$  ist. Da für eine stationäre Welle die enthaltene Energie unendlich ist, definiert man eine spektrale Leistungsdichte  $S(\omega)$  (Gl. (1.46)). Sie gibt die mittlere Leistung pro Flächeninhalt im Frequenzintervall zwischen  $\omega$  und  $\omega + d\omega$  an. Häufig wird sie auch einfach als Spektrum bezeichnet. Sie ist nur für positive Frequenzen ungleich null.

$$S(\omega) = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \left\langle \left| \int_{-T/2}^{T/2} \mathbf{E}(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \right\rangle \quad (1.46)$$

Damit ergibt sich die Intensität zu:

$$I = \int_0^{\infty} S(\omega) d\omega \quad (1.47)$$

#### 1.2.5 Spektrale Breite

Genau wie die Breite der zeitlichen Kohärenzfunktion als Kohärenzzeit definiert wurde (siehe Gl. (1.44)), kann über die Halbwertsbreite vom Spektrum die spektrale Breite  $\Delta\omega$  angegeben werden. Ein typisches gaußförmiges Spektrum der Mittenfrequenz  $\omega_0$  mit der Halbwertsbreite  $\Delta\omega_G$  ist in Gleichung (1.48) beschrieben.

$$S(\omega) = I \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi \Delta\omega_G^2}} \cdot e^{-4 \ln 2 \frac{(\omega - \omega_0)^2}{\Delta\omega_G^2}} \quad (1.48)$$



### 1.2.6 Wiener-Khinchin-Theorem

Es lässt sich zeigen, dass die Kohärenzfunktion (1.41) über eine Fourier-Transformation mit der spektralen Leistungsdichte (1.46) zusammenhängt. Dieser Zusammenhang wird Wiener-Khinchin-Theorem genannt und ist im Anhang A.6 bewiesen:

$$S(\omega) = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (1.49)$$

Demnach ergibt sich aus der umgekehrten Fourier-Transformation des gaußförmigen Spektrums (1.48) die Kohärenzfunktion:

$$\begin{aligned} \Gamma(\tau) &= \frac{2}{\varepsilon_0 n c} \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \\ &= \frac{2}{\varepsilon_0 n c} \int_{-\infty}^{\infty} I \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi \Delta\omega_G^2}} \cdot e^{-4 \ln 2 \frac{(\omega-\omega_0)^2}{\Delta\omega_G^2}} e^{-i\omega\tau} d\omega \\ &= \frac{2I}{\varepsilon_0 n c} e^{-\frac{\tau^2 \Delta\omega_G^2}{16 \ln 2}} e^{-i\omega_0\tau} = \frac{2I}{\varepsilon_0 n c} \gamma_G(\tau) e^{-i\omega_0\tau} \end{aligned} \quad (1.50)$$

Damit ergibt sich Betrag des zeitlichen Kohärenzgrades zu  $|\gamma(\tau)| = \gamma_G(\tau) = e^{-\frac{\tau^2 \Delta\omega_G^2}{16 \ln 2}}$ , welcher beim Vergleich mit Gleichung (1.44) die Kohärenzzeit festlegt:

$$\Delta\tau_K = \frac{8 \ln 2}{\Delta\omega_G} \quad (1.51)$$

Ein breites Spektrum führt also zu einer kurzen Kohärenzzeit.

### 1.2.7 Interferenz mit partiell kohärenten Lichtwellen

Überlagern sich zwei optische Wellen  $\mathbf{E}_1(t)$  und  $\mathbf{E}_2(t)$ , so ergibt sich die Gesamtintensität  $I_{\text{ges}}$  mit Gleichung (1.39) aus dem Ensemblemittelwert des Betragsquadrates der Summe beider Felder.

$$\begin{aligned} I_{\text{ges}} &= \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \left\langle |\mathbf{E}_1(t) + \mathbf{E}_2(t)|^2 \right\rangle \\ &= \underbrace{\frac{\varepsilon_0 n c}{2} \left\langle |\mathbf{E}_1(t)|^2 \right\rangle}_{I_1} + \underbrace{\frac{\varepsilon_0 n c}{2} \left\langle |\mathbf{E}_2(t)|^2 \right\rangle}_{I_2} + \frac{\varepsilon_0 n c}{2} [\langle \mathbf{E}_1^*(t) \mathbf{E}_2(t) \rangle + \langle \mathbf{E}_1(t) \mathbf{E}_2^*(t) \rangle] \end{aligned} \quad (1.52)$$

Mit der Kreuzkorrelation (1.53) der beiden Wellen

$$\Gamma_{12} = \frac{2}{\varepsilon_0 n c} \sqrt{I_1 I_2} \gamma_{12} = \langle \mathbf{E}_1^*(t) \mathbf{E}_2(t) \rangle, \quad (1.53)$$

lässt sich die Intensität als Funktion des Betrages und der Phase von  $\gamma_{12}$  aufschreiben.

$$\begin{aligned} I_{\text{ges}} &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \Re(\gamma_{12}) \\ &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} |\gamma_{12}| \cos[\arg(\gamma_{12})] \end{aligned} \quad (1.54)$$

Gleichung (1.54) beschreibt den Verlauf der Intensität in Abhängigkeit der Phasenbeziehung der beiden Wellen. Dieser Effekt wird Interferenz genannt. Die Stärke der Intensitätsmodulationen hängt vom Betrag der Kreuzkorrelation ab und beschreibt somit die Sichtbarkeit der Interferenzerscheinung. Die Sichtbarkeit, auch Modulationstiefe oder Kontrast genannt, ist in Gleichung (1.55) definiert.

$$\mathcal{V} = \frac{I_{\text{max}} - I_{\text{min}}}{I_{\text{max}} + I_{\text{min}}} = \frac{2\sqrt{I_1 I_2}}{I_1 + I_2} |\gamma_{12}| \quad (1.55)$$

### 1.2.8 Michelson-Interferometer

Ein Interferometer ist ein optisches Instrument, welches eine Lichtwelle mit einer Kopie ihrer selbst überlagert und die Intensität der Summe beider Teilwellen misst. Durch die Veränderung des optischen Weges einer Teilwelle ist es möglich, die Autokorrelationsfunktion bzw. Kohärenzfunktion (1.41) einer Welle direkt zu messen. Sehr einfach aufgebaut ist das Michelson-Interferometer (siehe Abb. 1.1), welches nach seinem Erfinder dem Nobelpreisträger Albert Abraham Michelson [10] benannt wurde. Die eingehende Lichtwelle wird durch einen Strahlteiler in zwei Replika aufgespaltet, die jeweils den einstellbaren optischen Weg in den Armen durchlaufen und schließlich am Ausgang überlagert werden. Dabei wird die Intensität am Interferometerausgang in Abhängigkeit des Gangunterschiedes beider Teilwellen gemessen. Mit einem Strahlteiler, der das einfallende Feld in gleiche Teile aufspaltet, den Armlängen  $l_1$  und  $l_2$ , einer Eingangsintensität von  $I_0$  und der Laufzeitdifferenz  $\tau = 2n(l_2 - l_1)/c$  ergibt sich die am Ausgang gemessene Intensität nach Gleichung (1.52) zu:

$$I_A = \frac{I_0}{2} [1 + \Re(\gamma(\tau))] = \frac{I_0}{2} \{1 + |\gamma(\tau)| \cos [\arg(\gamma(\tau))]\} \quad (1.56)$$

Mit dem Wiener-Kchinchin-Theorem (1.49) lässt sich die Intensität am Interferometerausgang auch in Abhängigkeit des Spektrums der einfallenden Lichtwelle schreiben.

$$I_A = \frac{I_0}{\varepsilon_0 n c} \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) [1 + \cos(-\omega\tau)] d\omega \quad (1.57)$$

Gleichung (1.57) bildet die Grundlage für die Fourier-Transformations-Spektroskopie. Das Spektrum der Lichtquelle lässt sich bestimmen, indem man die Autokorrelationsfunktion mittels eines Interferometers misst und dann eine Fourier-Transformation durchführt.

## 1.3 Optische Kohärenztomografie

Die optischen Kohärenztomografie (OCT) ist ein Verfahren, dass die Kohärenzeigenschaften der Lichtquelle ausnutzt, um die Tiefenstruktur einer Probe zerstörungsfrei zu messen. Die Auflösung in Richtung des einfallenden Lichtes (axial) hängt dabei nicht von der numerischen Apertur der abbildenden Optik, sondern nur von der Kohärenzlänge der Strahlungsquelle ab.

Ein prinzipieller OCT-Aufbau besteht aus einem Michelson-Interferometer (siehe Kap. 1.2.8), bei dem einer der beiden Spiegel durch die zu untersuchende Probe ersetzt wurde (Abb. 1.1) [2]. Das rückgestreute Licht aus dem Inneren der Probe überlagert sich mit dem Licht des Referenzspiegels und interferiert am Ausgang des Interferometers, wenn die Laufzeitdifferenz beider Teilwellen im Bereich der Kohärenzzeit der Lichtquelle liegt. Der Bildkontrast entsteht durch unterschiedlich starke Reflexion in Abhängigkeit des Brechzahlunterschiedes an Grenzflächen von Strukturen innerhalb der Probe.

Für die theoretische Herleitung des Signals am Interferometerausgang in Abhängigkeit der Tiefenstruktur der Probe und der Kohärenzeigenschaften der Lichtquelle ist es sinnvoll, die Probe zunächst als nicht dispersiv mit  $n = 1$ , nicht absorbierend und als eindimensionale diskrete Schichtstruktur zu betrachten (siehe Abb. 1.1). Die komplexen Reflektivitäten in Bezug auf die elektrischen Felder der einzelnen Grenzflächen, im Folgenden mit  $r_i$  bezeichnet, werden zunächst als konstant angenommen. Die Reflektivität des Referenzspiegels wird mit  $r_R$  bezeichnet. Mehrfachreflexionen innerhalb der Probe werden nicht berücksichtigt. Analog zu Gleichung (1.52) ergibt sich die Intensität am Interferometerausgang (1.58) in Abhängigkeit der Summe der elektrischen Felder. Wie auch in Kapitel 1.2.8 wird ein 1:1 Strahlteiler angenommen.

$$I(\delta) = \frac{\varepsilon_0 c}{8} \left\langle \left| r_R \mathbf{E}(t + \delta) + \sum_{i=1}^N r_i \mathbf{E}(t + \delta_i) \right|^2 \right\rangle \quad (1.58)$$

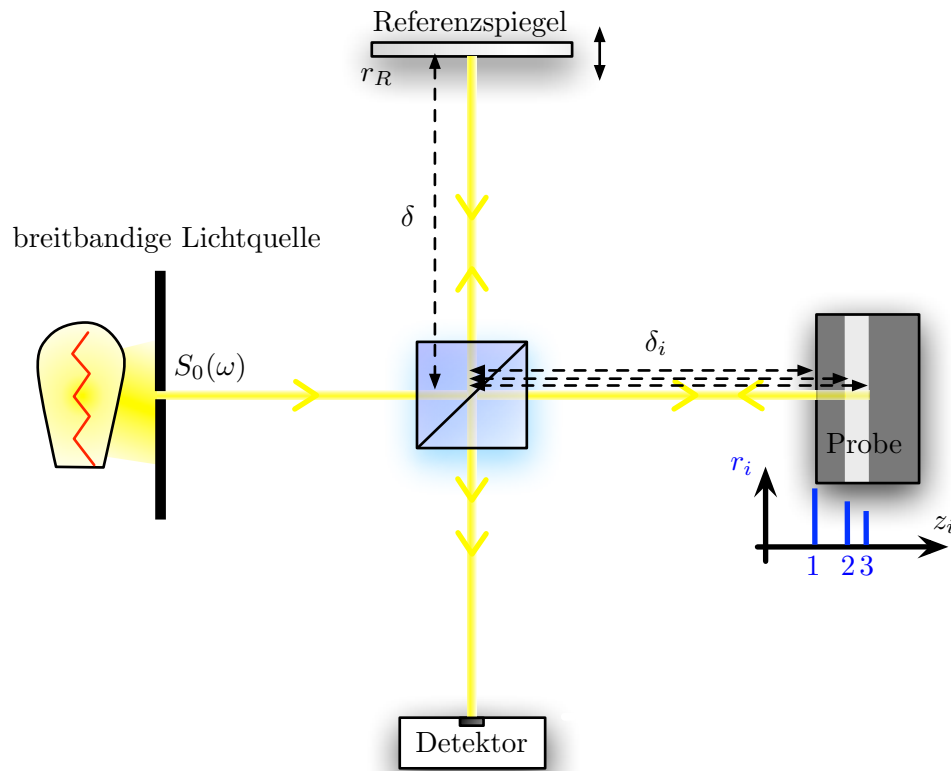


Abbildung 1.1: Prinzipieller Aufbau eines OCT Gerätes: Ein Spiegel eines Michelson-Interferometers wurde durch die zu untersuchende Probe ersetzt. Die Probe wird hier als eindimensional strukturiertes Schichtsystem mit den Reflektivitäten  $r_1$ ,  $r_2$  und  $r_3$  angenommen (blau). Die Länge des Referenzarms kann geändert werden. Die Lichtquelle ist breitbandig und hat eine kurze Kohärenzlänge. Interferenzen treten nur auf, wenn die Differenz der Laufzeiten  $\delta - \delta_i$  im Bereich der Kohärenzzeit liegt.

$\delta$  ist die Laufzeit des Lichtes vom Strahlteiler bis zum Referenzspiegel und wieder zurück.  $\delta_i$  ist analog dazu die Laufzeit des an der  $i$ -ten Grenzschicht reflektierten Lichtes. Für eine Entfernung der reflektierenden Schicht zum Strahlteiler von  $z_i$  bzw.  $z$  für den Referenzspiegel ergeben sich die Laufzeiten zu:

$$\delta = \frac{2z}{c} \quad \text{und} \quad \delta_i = \frac{2z_i}{c} \quad (1.59)$$

### 1.3.1 Optische Kohärenztomografie im Zeitbereich

Mit der Definition der Kohärenzfunktion  $\Gamma(\tau)$  (1.41) und des Kohärenzgrades  $\gamma(\tau) = \gamma_G e^{i\omega_0\tau}$ , mit  $\gamma_G$  reell,  $\omega_0$  der Mittenfrequenz des Spektrums  $\omega_0$  (siehe Kap. 1.2.5 und 1.2.6) und der Bedingung, dass  $r_R = \sqrt{R_R}$  und  $r_i = \sqrt{R_i}$  reell sind, ergibt sich für die Intensität am Interferometerausgang in Abhängigkeit der Laufzeit im Referenzarm  $\delta$  (siehe Anhang A.1):

$$I(\delta) = \frac{I_0}{4} \left\{ \underbrace{R_R + \sum_{i=1}^N R_i}_{\text{konstante Terme}} + 2 \underbrace{\sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \gamma_G(\delta - \delta_i) \cos[\omega_0(\delta - \delta_i)]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} + \underbrace{\sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \gamma_G(\delta_i - \delta_j) \cos[\omega_0(\delta_i - \delta_j)]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\} \quad (1.60)$$

Offensichtlich ist die Information über die Tiefen der Grenzflächen  $\delta - \delta_i$  und deren Reflektivitäten in den Kreuzkorrelationstermen in Gleichung (1.60) enthalten. Die konstanten Terme und die Autokorrelationsterme der Reflexionen an den Schichten untereinander tragen lediglich einen konstanten Anteil zur Intensität bei und sind nicht von Interesse. Die Intensität ist durch die phasenverschobenen Kosinusfunktionen der Frequenz  $\omega_0$  mit dem Betrag der Kohärenzfunktion  $\gamma_G(\tau)$  als Einhüllende moduliert. Für partiell kohärentes Licht, fällt der Kohärenzgrad  $\gamma_G(\tau)$  mit zunehmendem  $\tau$  ab und hat sein Maximum bei  $\tau = 0$ . Wird also partiell kohärentes Licht mit einer endlichen Kohärenzzeit genutzt, kann aus der Messung der Intensität in Abhängigkeit der Referenzarmlaufzeit, die durchgeföhren werden muss, die Tiefenstruktur der Probe rekonstruiert werden, solange das Auflösungskriterium (siehe Kap. 1.3.3) erfüllt ist. Diese Methode wird „Time-Domain“-OCT (TD-OCT) genannt [2]. Ein typisches Messsignal für eine gaußartige Kohärenzfunktion (vgl. Gl. (1.50)) ist in Abbildung 1.2 dargestellt.

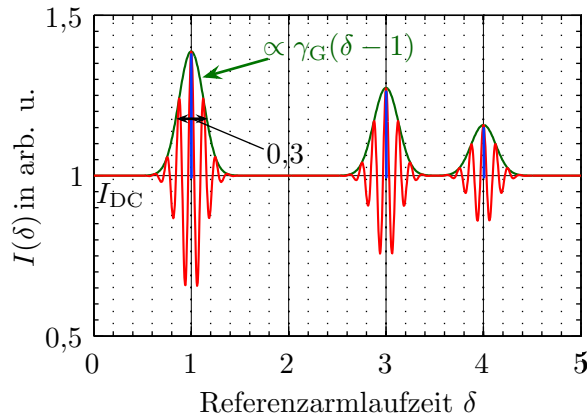


Abbildung 1.2: Simuliertes Signal einer OCT Messung im Zeitbereich mit dimensionslosen Größen (rot): Anhand der Positionen der Maxima der Einhüllenden (grün) lassen sich die Tiefenstrukturinformationen der Probe rekonstruieren (blau). Als Beispiel wurde ein 3-fach Schichtsystem mit den Laufzeiten 1, 3 und 4 und den Reflektivitäten 60%, 30% und 10% ausgewählt. Die Kohärenzzeit beträgt hier  $\Delta\tau_K=0.3$  und die Mittenfrequenz ist  $\omega_0 = 50$ .

### 1.3.2 Optische Kohärenztomografie im Frequenzbereich

Eine andere Möglichkeit die Tiefenstruktur der Probe zu bestimmen besteht darin, die spektrale Intensitätsdichte, sprich das Spektrum, anstelle der Gesamtintensität zu messen. Diese Methode wird

als „Fourier-Domain“-OCT (FD-OCT) bezeichnet [2]. Das Spektrum  $S_0(\omega)$  und die Kohärenzfunktion  $\Gamma(\tau)$  der verwendeten Lichtquelle hängen über das Wiener-Khinchin-Theorem (1.49) miteinander zusammen. Dies gilt natürlich auch für das am Interferometerausgang ankommende Licht. Demnach ist das Spektrum am Interferometerausgang  $S_A(\omega)$  die Fourier-Transformation der Kohärenzfunktion des Feldes am Ausgang  $\Gamma_A(\tau)$ :

$$S_A(\omega) = \frac{\varepsilon_0 c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_A(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (1.61)$$

Wie in Anhang A.2 und A.3 gezeigt, errechnet sich das Spektrum am Interferometerausgang zu:

$$S_A(\omega) = \frac{S_0(\omega)}{4} \left\{ \underbrace{R_R + \sum_{i=1}^N R_i}_{\text{konstante Terme}} + 2 \underbrace{\sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \cos[\omega(\delta - \delta_i)]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} + \underbrace{\sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \cos[\omega(\delta_i - \delta_j)]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\} \quad (1.62)$$

Das gemessene Spektrum ist also im Wesentlichen das durch mehrere Kosinusfunktionen modulierte ursprüngliche Spektrum der Lichtquelle. Die Modulationsfrequenzen entsprechen dabei den Laufzeitdifferenzen der Strahlen in beiden Interferometerarmen zueinander (Kreuzkorrelationsterme) und im Probenarm untereinander (Autokorrelationsterme). Die Amplituden der Modulationen sind durch die Reflektivitäten der Probe bestimmt. Die komplette Information über die Tiefenstruktur ist demnach im modulierten Spektrum enthalten. Um sie zu extrahieren, ist lediglich eine Fourier-Transformation nötig. Nach dem Wiener-Khinchin-Theorem ist die Fourier-Transformation des Spektrums die Kohärenzfunktion des Feldes am Interferometerausgang, also die Umkehrtransformation zu Gleichung (1.61). Wie in Anhang A.2 gezeigt, ergibt sich für die Fourier-Transformation des Spektrums:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega &= \frac{\varepsilon_0 c}{2} \Gamma_A(\tau) \\ &= \frac{I_0}{4} \left\{ \underbrace{\left[ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right] \gamma_G(\tau) e^{-i\omega_0 \tau}}_{\text{„konstante“ Terme}} \right. \\ &\quad + \underbrace{\sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \left[ \gamma_G[\tau - (\delta - \delta_i)] e^{-i\omega_0[\tau - (\delta - \delta_i)]} + \gamma_G[\tau + (\delta - \delta_i)] e^{-i\omega_0[\tau + (\delta - \delta_i)]} \right]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \left[ \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] e^{-i\omega_0[\tau - (\delta_i - \delta_j)]} + \gamma_G[\tau + (\delta_i - \delta_j)] e^{-i\omega_0[\tau + (\delta_i - \delta_j)]} \right] \right\} \quad (1.63) \\ &\quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Autokorrelationsterme}} \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist dem Intensitätssignal in der TD-OCT (siehe Gl. (1.60)) sehr ähnlich. Der Betrag des Kohärenzgrades  $\gamma_G$  ist wieder die Einhüllende mehrerer phasenverschobener Schwingungen der Frequenz  $\omega_0$ . Die Unterschiede bestehen in der Komplexwertigkeit von  $\Gamma_A(\tau)$  im Gegensatz zum reellen  $I(\delta)$ , den Argumenten des Kohärenzgrades, die bei  $\Gamma_A(\tau)$  nur noch von den Laufzeitdifferenzen und nicht mehr von den Laufzeiten selber abhängen, und der Spiegelsymmetrie an der Achse  $\tau = 0$

(Symmetrie von  $\gamma_G(\tau)$  vorausgesetzt). Sowohl die vormalig konstanten Terme als auch die Autokorrelationsterme sind nun Funktionen von  $\tau$ . Bei der Interpretation der Funktion muss das beachtet werden, um die Tiefenstruktur fehlerfrei und eindeutig innerhalb der Auflösungsgrenzen (siehe Kap. 1.3.3) zu rekonstruieren. In Abbildung 1.3 ist ein typisches FD-OCT Signal dargestellt. Neben den Kreuzkorrelationstermen, die ihr Maximum bei  $\tau = \pm(\delta - \delta_i)$  haben und die Struktur Tiefen bei Kenntnis von  $\delta$  direkt anzeigen, tragen hier auch die Autokorrelationsterme die Information über die Tiefenstruktur der Probe. Die Maxima der Autokorrelationsterme befinden sich bei  $\tau = \pm(\delta_i - \delta_j)$ . Die Tiefe einer Grenzschicht ergibt sich jedoch immer aus der Entfernung zur obersten Grenzschicht der Probe ( $\delta_i - \delta_1$ ). Die Maxima der Autokorrelationsterme zeigen also nicht direkt die Struktur Tiefen, sondern sämtliche Differenzen der vorkommenden Schichttiefen an. Ist die oberste Schicht gegenüber allen anderen nicht ausgezeichnet, beispielsweise durch eine sehr hohe Reflektivität, ist die Tiefeninformation nicht eindeutig rekonstruierbar. Aus diesem Grund werden in der FD-OCT nur die Kreuzkorrelationsmaxima betrachtet [2]. Um sie von den Autokorrelationsmaxima zu trennen, reicht es aus, den Referenzspiegel so einzustellen, dass  $\delta$  größer ist als alle  $\delta_i - \delta_j$ . Dadurch wird nach Gleichung (1.62) die Modulationsfrequenz des Spektrums mit wachsendem  $\delta$  größer. Der maximal mögliche Wert von  $\delta$  ist dann durch das spektrale Auflösungsvermögen des Detektors bestimmt. Der große Vorteil der FD-OCT gegenüber der TD-OCT ist, dass die Position des Referenzspiegel, einmal eingestellt, nicht mehr verändert werden muss.

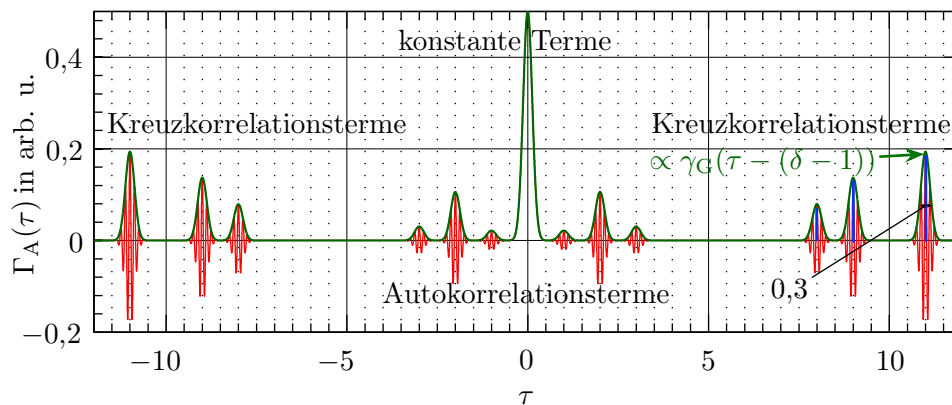


Abbildung 1.3: Realteil eines simulierten Signals einer FD-OCT Messung im Frequenzbereich (rot). Anhand der Position der Maxima der Einhüllenden (grün) der Kreuzkorrelationsterme lassen sich die Tiefenstrukturinformationen der Probe rekonstruieren. Als Beispiel wurde ein 3-fach Schichtsystem mit den Laufzeiten 1, 3 und 4 und den Reflektivitäten 60%, 30% und 10% ausgewählt (blau). Die Kohärenzzeit beträgt hier  $\Delta\tau_K = 0.3$ . Weiterhin gilt  $\omega_0 = 50$  und  $\delta = 12$ . Die Autokorrelationsterme tragen ebenfalls die Strukturinformationen, sind aber nicht eindeutig rekonstruierbar. Der Verlauf um  $\tau = 0$  zeigt direkt den Kohärenzgrad an.

### 1.3.3 Auflösung

Die Auflösung eines abbildenden Systems gibt an, wie groß die Distanz zweier einzelner Punkten minimal sein darf, damit noch beide Punkte unterschieden werden können. Im allgemeinen Sprachgebrauch ist von einer hohen bzw. guten Auflösung die Rede, wenn der nominelle Wert, also die Strukturgröße die aufgelöst werden kann, gering ist. Umgekehrt entspricht ein hoher nomineller Wert einer geringen bzw. schlechten Auflösung.

Wie in Kapitel 1.3.1 und 1.3.2 diskutiert, ist bei beiden OCT Methoden die Position der Schichten durch den Betrag des Kohärenzgrades verbreitert. Für die gesamte weitere Betrachtung gilt die Definition, dass 2 Schichten gerade noch voneinander getrennt werden können, wenn ihre Laufzeitunterschiede um die FWHM-Breite des Kohärenzgrades voneinander abweichen. Nach Kap. 1.2.3 entspricht das der Kohärenzzeit der Lichtquelle und es ergibt sich eine Bedingung für die auflösbaren

Laufzeitunterschiede:

$$\Delta\delta = \delta_i - \delta_j \geq \Delta\tau_K \quad (1.64)$$

Über das Wiener-Khinchin-Theorem lässt sich die Auflösungsbedingung auch über die spektrale Breite der Lichtquelle definieren. Für ein gaußförmiges Spektrum (siehe Gl. (1.48)) gilt dann:

$$\Delta\delta \geq \frac{8 \ln 2}{\Delta\omega_G} \approx \frac{5.55}{\Delta\omega_G} \quad (1.65)$$

Für den minimal auflösbaren Abstand der Schichten, ergibt sich mit Gleichung (1.59):

$$\Delta z = z_i - z_j \geq \frac{4c \ln 2}{\Delta\omega_G} \approx 2.77 \frac{c}{\Delta\omega_G} \quad (1.66)$$

Das Auflösungskriterium der OCT wird häufig auch in Abhängigkeit der Wellenlänge  $\lambda$  angegeben [2]. Dabei ist  $\lambda = 2\pi c/\omega$  und  $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ .

$$\Delta z \geq \frac{2 \ln 2}{\pi} \frac{\lambda_0^2}{\Delta\lambda_G} \approx 0.44 \frac{\lambda_0^2}{\Delta\lambda_G} \quad \text{für } \lambda_0 \gg \Delta\lambda_G \quad (1.67)$$

Die Auflösung in der Tiefenkoordinate ist also nur von den spektralen Eigenschaften der verwendeten Lichtquelle abhängig. Das unterscheidet die OCT von anderen mikroskopischen Verfahren wie z. B. der konfokalen Mikroskopie. Die numerische Apertur der fokussierenden Optik ist bei der OCT nur für die laterale Auflösung wichtig, nicht jedoch für die Tiefenauflösung.

### 1.3.4 Eindringtiefe

Bisher wurde angenommen, dass die Probe nicht absorbiert. Um die Absorption der Probe in das hier verwendete Modell zu integrieren, ist es möglich, die Reflektivitäten der Grenzflächen so zu modellieren, dass sie mit zunehmender Tiefe fallen. Außerdem muss beachtet werden, dass die Reflektivitäten im Modell immer auf das gesamte einfallende Licht bezogen sind. Die Reflektivität einer Schicht kann demnach nicht größer sein als das Produkt der Transmissionen der darüber liegenden Schichten. Für die Modellierung der Reflektivitäten einer Probe unter Einbeziehung der Absorption gilt somit:

$$R_{i+1} = R_{i+1}^a \prod_{j=1}^i (1 - R_j^a)^2 \cdot e^{-2n_j''(z_{j+1}-z_j)}, \quad R_1 = R_1^a \quad (1.68)$$

Dabei ist  $R_i^a$  die absolute Reflektivität der isolierten  $i$ -ten Grenzfläche. Die Amplituden der Signale in beiden OCT Methoden ( $\sqrt{R_R R_i}$  bzw.  $\sqrt{R_i R_j}$ ) fallen also mit zunehmender Tiefe der zugehörigen Schicht exponentiell ab, sodass die maximal noch messbare Tiefe durch die Detektorempfindlichkeit begrenzt ist. Die Tiefe in der die Intensität auf den  $1/e$ -ten Anteil der Eingangsintensität gefallen ist, wird im folgenden als Eindringtiefe bezeichnet.

## 1.4 Extreme Ultraviolett- und weiche Röntgenstrahlung

Strahlung im Energiebereich von etwa 30 eV bis 250 eV bzw. im Wellenlängenbereich von 5 nm bis 40 nm wird als extrem ultraviolette (XUV) Strahlung bezeichnet. Der Bereich der weichen Röntgenstrahlung schließt sich an den XUV Bereich an und geht bei einigen tausend eV bzw. ca. 0.3 nm in den Bereich der mittleren bis harten Röntgenstrahlung über [11]. Charakteristisch für den XUV- und den weichen Röntgenbereich sind die in den meisten Medien sehr kleinen Brechzahlen  $n' \approx 1$ . Deshalb ist es nützlich, die Brechzahl in diesem Spektralbereich als

$$n(\omega) = 1 - \zeta + i\xi = n' + in'' \quad (1.69)$$

anzugeben.  $\zeta$  und  $\xi$  sind hierbei reelle Größen und berechnen sich aus Gleichung (1.8).  $\xi$  beschreibt die Absorption in diesem Spektralbereich, die in den meisten Medien sehr stark ist. Selbst Luft unter Atmosphärendruck absorbiert das XUV Licht innerhalb weniger  $\mu\text{m}$  Propagationslänge [6]. Es ist deswegen notwendig, die Experimente mit dieser Strahlung im Vakuum durchzuführen, was den Aufwand im Vergleich zu Experimenten im sichtbaren Spektralbereich beträchtlich erhöht. Ein weiterer praktischer Nachteil ist, dass keine herkömmlichen Optiken aus Glas verwendet werden können. Glas hat im XUV Bereich elektronische Resonanzen, sodass die Dispersion zu gering und die Absorption zu groß ist, um transmittive Optiken zu nutzen [11]. Folglich können fokussierende Elemente nur über reflektive oder diffraktive Optiken wie Fresnel'schen Zonenplatten realisiert werden. Ein weiteres praktisches Problem sind die sehr geringen Reflektivität an Metalloberflächen unter steilen Einfallswinkeln. Daher ist es üblich, Optiken unter streifendem Einfall zu betreiben. Dies führt zu langen Fokussierstrecken und insgesamt groß skalierten Aufbauten.

## 1.5 Das Synchrotron als Strahlungsquelle

Zur Erzeugung von Strahlung im XUV- und weichen Röntgenbereich kann, neben charakteristischer Strahlung, thermischer Strahlung und hoher harmonischer Strahlung, ein Synchrotron genutzt werden. In einem Synchrotron werden Elektronen mittels Teilchenbeschleunigern in einen Speicherring injiziert. Dort werden sie mit Hilfe von Magnetfeldern auf eine Kreisbahn gelenkt und stabil gehalten. Diese bis nahezu auf Lichtgeschwindigkeit beschleunigten Elektronen geben elektromagnetische Strahlung ab, sobald sie beschleunigt werden. Zu diesem Zweck können die Bahnlenkmagneten selbst (Bending-Magnet Strahlung), Undulatoren oder Wiggler verwendet werden [11]. Die grundlegende Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen und einem Feld wird durch die Lorentzkraft (1.70) beschrieben.

$$\mathbf{F}_L = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1.70)$$

Ein Synchrotron ist eine Strahlungsquelle hoher Brillanz. Die Brillanz  $B$  ist im Wesentlichen ein Maß für die Photonenzahl und Strahlqualität von elektromagnetischer Strahlung. In der Brillanz werden die Strahlparameter Photonenzahl  $N$ , Pulsdauer  $\tau$ , Raumwinkel  $\Omega$ , effektive Quellgröße  $Q$  und relative Bandbreite  $\frac{\Delta\nu}{\nu}$  berücksichtigt.

$$B = \frac{N}{\tau \cdot \Omega \cdot Q \cdot \frac{\Delta\nu}{\nu}} \quad \text{in} \quad \left[ \frac{\text{Photonen}}{\text{s} \cdot \text{mrad}^2 \cdot \text{mm}^2 \cdot 0,1\% \text{BW}} \right] \quad (1.71)$$

### 1.5.1 Abstrahlung einer beschleunigten Ladung

Werden die Maxwell-Gleichungen mit einer beschleunigten Punktladung (Beschleunigung  $\mathbf{a}$ ) im ansonsten leeren Raum gelöst, ergibt sich mit Hilfe der transversal auf der Beobachtungsrichtung  $\mathbf{k}_0$  stehenden Beschleunigungskomponente  $\mathbf{a}_t$  das abgestrahlte Feld zu [11]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^2 r} \mathbf{a}_t \left( t - \frac{r}{c} \right) \quad (1.72)$$

Mit dem Pointingvektor  $\mathcal{S} = \mathbf{E} \times \mathcal{H}$  und dem zusätzlich berechneten  $\mathcal{H}$ -Feld folgt der richtungsabhängige Energiefluss der Strahlung (1.73) und damit die abgestrahlte Leistung pro Raumwinkelement (1.74) die in Abbildung 1.4 links dargestellt ist. Mit  $|\mathbf{a}_t| = |\mathbf{a}| \sin \Theta$  gilt:

$$\mathcal{S}(\mathbf{r}, t) = \frac{q^2 |\mathbf{a}|^2 \sin^2 \Theta}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3 r^2} \mathbf{k}_0 \quad (1.73)$$

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2 |\mathbf{a}|^2 \sin^2 \Theta}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3} \quad (1.74)$$



## Lorentz-Transformation

Beträgt die Geschwindigkeit eines Teilchen mehr als ein Zehntel der Lichtgeschwindigkeit, so sind die Effekte der speziellen Relativitätstheorie zunehmend bedeutend. Mit

$$\beta = \frac{v}{c} \quad (1.75)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (1.76)$$

ergibt sich für die abgestrahlte Leistung einer senkrecht zur Beschleunigungsrichtung relativistisch bewegten Ladung im Laborsystem [11]:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2 |\mathbf{a}|^2}{16\pi^2 \epsilon_0^2 c^3} \frac{1}{\gamma^4 (1 - \beta \cos \vartheta)^3} \left[ 1 - \frac{\sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi}{\gamma^2 (1 - \beta \cos \vartheta)^2} \right] \quad (1.77)$$

Wie in Abbildung 1.4 rechts dargestellt, entsteht ein Strahlungskegel mit einem vollen Öffnungswinkel von  $\psi \approx \frac{1}{\gamma}$  in Bewegungsrichtung. Die Strahlung ist durch den relativistischen Dopplereffekt

$$\omega = \omega' \gamma (1 + \beta \cos \vartheta') \quad (1.78)$$

auf der z-Achse am energetischsten.

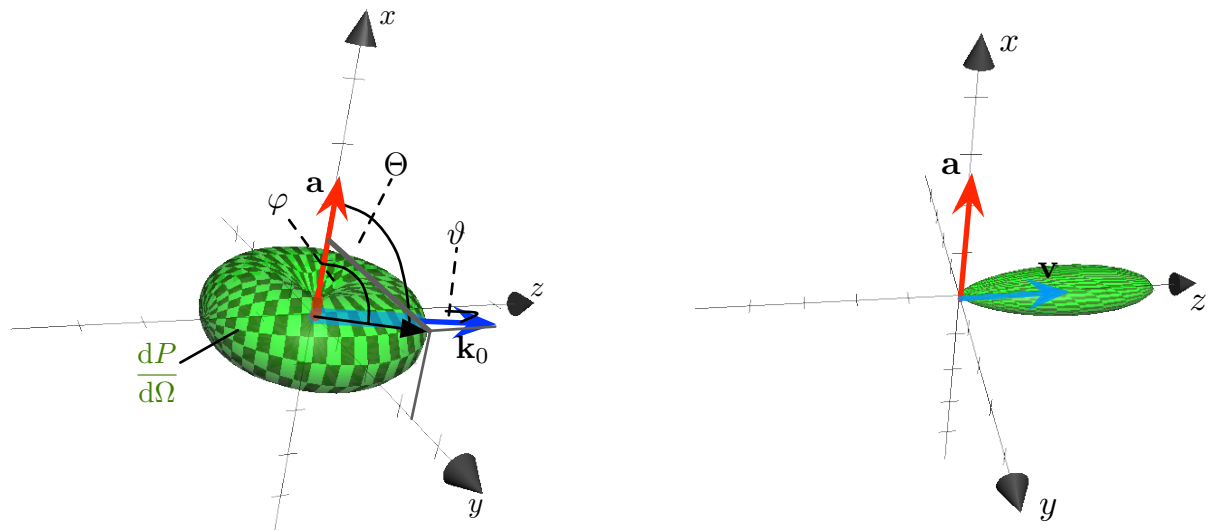


Abbildung 1.4: Abstrahlcharakteristik einer auf der x-Achse beschleunigten Punktladung: **(Links)** Keine transversale Geschwindigkeit; Abstrahlung ist isotrop in (y, z)-Ebene und torusförmig. **(Rechts)** Relativistische Bewegung in Richtung der z-Achse; Die Abstrahlung ist in einen Kegel in Bewegungsrichtung verschoben.

### 1.5.2 Bending-Magnet Strahlung

Bending-Magnet Strahlung entsteht, wenn Ladungsträger im Synchrotron tangential zur Bewegungsrichtung beschleunigt werden. Der große Vorteil dieser Strahlungserzeugung ist, dass die Umlenkmagneten für den Betrieb des Synchrotrons sowieso unerlässlich sind und damit die Bending-Magnet Strahlung ein Nebenprodukt des normalen Betriebs ist. Die Strahlung ist breitbandig, kann aber durch Monochromatoren, mit entsprechenden Flussverlusten, durchgestimmt werden. Die Mittenfrequenz der Strahlung (50% der Gesamtintensität liegen darunter) beträgt [11]:

$$\hbar\omega_c = \frac{3q\hbar B\gamma^2}{2m_q} \quad (1.79)$$

Im Vergleich zu Wiggler- und Undulatorquellen ist die Bending-Magnet Strahlung wenig brillant, was einerseits an der großen Divergenz  $\psi \approx \frac{1}{\gamma}$  und Quellgröße und andererseits am geringen Photonfluss pro Energieintervall liegt.

### 1.5.3 Wiggler- und Undulatorstrahlung

Wiggler und Undulatoren sind Magnetstrukturen, welche die vom Synchrotron beschleunigten Ladungsträger periodisch ablenken. Durch die tangentielle Beschleunigung der Ladungsträger in jeder Schwingungsperiode wird Strahlung emittiert. Das Gesamtstrahlungsfeld ergibt sich aus der Überlagerung der abgegebenen Strahlung aller beteiligten Ladungsträger.

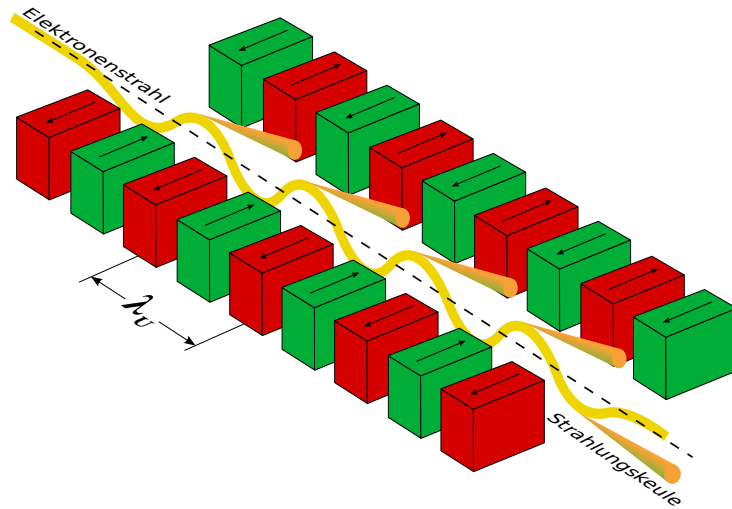


Abbildung 1.5: Prinzipskizze eines Undulators: Die Magnete erzeugen ein homogenes periodisches Magnetfeld  $B_0$  im Zwischenraum mit der Magnetperiode von  $\lambda_u$ . Die Ladungsträger, in diesem Fall Elektronen, folgen einer gekrümmten Flugbahn, führen also eine beschleunigte Bewegung aus und geben Strahlung ab. [Autor: Arpad Horvath; Quelle: <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Undulator.png>]

Mit Hilfe des Undulatorparameters  $K$  lassen sich die baulichen Eigenschaften wie Magnetfeld  $B_0$  und Undulatorperiode  $\lambda_u$  von Wigglern und Undulatoren zusammenfassen:

$$K = \frac{qB_0\lambda_u}{2\pi mc} \quad (1.80)$$

Man bezeichnet die periodische Anordnung als Wiggler wenn  $K \gg 1$  und als Undulator wenn  $K \lesssim 1$ . Mit Hilfe von Gleichung (1.77) lässt sich zeigen [11], dass die Strahlung eines Undulators in schmalbandigen Harmonischen liegt, deren Photonfluss sehr schnell mit der Harmonischen-Ordnung fällt. Beim Wiggler hingegen sind die Harmonischen eng nebeneinander und weniger stark gedämpft. Damit geht die Wigglerstrahlung, ähnlich wie die Bending-Magnet Strahlung in ein Kontinuum über. Die Wellenlängen der Harmonischen lassen sich, wie in Gleichung (1.81) gezeigt, angeben.  $n$  ist die Ordnung der Harmonischen.

$$\lambda_n = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2 n} \left( 1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \vartheta^2 \right) \quad (1.81)$$

Der Divergenzwinkel von Undulator- bzw. Wigglerstrahlung lässt sich als Funktion von  $\gamma$ ,  $K$  und  $N$  (Anzahl der Magnetperioden) berechnen.

$$\psi = \frac{\sqrt{2 + K^2}}{4\gamma\sqrt{N}} \quad (1.82)$$

Je mehr Magnetperioden durchlaufen werden, desto enger wird der Strahlungskegel und desto höher die Brillanz der Strahlung. Die kurzwelligste Strahlung ist dabei auf das Zentrum des Kegels konzentriert. Die Wellenlänge der emittierten Strahlung steigt mit zunehmenden Winkel zum Zentrum. Daher ist es möglich, die Strahlung von Undulatoren und Wigglern mit einer Blende räumlich zu filtern und so die Bandbreite der Harmonischen auf Kosten des Flusses zu verringern.

Die Intensität der emittierten Strahlung ist beim Wiggler proportional zu  $N$  und beim Undulator proportional zu  $N^2$ . Die Intensität beider Quellen ist außerdem proportional zum Strom im Synchrotron. Durch die kleinen Auslenkungsamplituden im Undulator ist die Quellgröße der Undulatorstrahlung kleiner. Die kleine Bandbreite, die Intensitätsabhängigkeit von  $N^2$  und die kleine Quellgröße machen den Undulator im Vergleich zum Wiggler und zum Bending-Magnet zur Strahlungsquelle mit der höchsten Brillanz und dem größten Photonenfluss pro Energieintervall.

# Kapitel 2

## OCT mit extremer Ultraviolett- und weicher Röntgenstrahlung

### 2.1 Motivation und Idee

Die Grundidee und das Hauptziel der hier vorgestellten Forschungsarbeit ist es, durch eine drastische Verkürzung der Wellenlänge in den extremen Ultraviolett- bzw. weichen Röntgenbereich die Auflösung der OCT von wenigen Mikrometern auf wenige Nanometer zu erhöhen. Wir nennen diese neue extrem hochauflösende Methode: „XUV and soft X-ray Coherence Tomography“ oder auch XCT.

#### 2.1.1 Transmissionsfenster

Wie in Kapitel 1.4 und 1.3.4 beschrieben, ist die Absorption der meisten Medien in diesen Wellenlängenbereichen sehr hoch. Daher kann die XCT nur oberflächennahe Strukturen oder Strukturen von Objekten in der Größenordnung der Absorptionslänge abbilden. Um dennoch eine möglichst große Eindringtiefe zu gewährleisten, ist es somit notwendig, Spektralbereiche geringer Absorption - sogenannten Transmissionsfenster - der zu untersuchenden Materialien auszunutzen.

#### Silizium-Transmissionsfenster

Silizium besitzt ein Transmissionsfenster von 30 eV bis 99 eV. Die Eindringtiefe in Silizium ist in Abbildung 2.1 dargestellt und beträgt im energetischen Mittel des Fensters etwa  $350 \mu\text{m}$ . Die theoretisch erreichbare Auflösung in dispersionsfreien Materialien mit  $n = 1$  für ein rechteckförmiges Spektrum der Transmissionsfensterbreite liegt somit bei 10.7 nm (siehe Kap. 2.3). Dies liegt in der Größenordnung der Strukturen in der Halbleiterindustrie, sodass XCT ein Anwendungspotential als eine zerstörungsfreie Tiefenanalyse von siliziumbasierten Bauelementen besitzen könnte.

#### Wasser-Transmissionsfenster

Das Wassertransmissionsfenster oder auch Wasserfenster wird durch eine Kohlenstoff-Absorptionskante bei 284 eV und eine Sauerstoff-Absorptionskante bei 543 eV begrenzt. Der Name entstand aufgrund der Häufigkeit von Kohlen- und Sauerstoff in wässrigen organischen Substanzen. Die Eindringtiefe hängt stark von der Dichte der zu untersuchenden Substanzen ab. Für das diamantartige Borkarbid ( $\text{B}_4\text{C}$ ) beispielsweise beträgt die Eindringtiefe im energetischen Mittel des Fensters etwa  $250 \mu\text{m}$  (siehe Abb. 2.1). Die theoretisch erreichbare Auflösung in dispersionsfreien Materialien mit  $n = 1$  für ein rechteckförmiges Spektrum der Wasserfensterbreite liegt bei 3 nm (siehe Kap. 2.3). Diese enorme Auflösung in Verbindung mit der großen Eindringtiefe in organische Materialien zeigt ein weiteres Anwendungspotential der XCT in den Lebenswissenschaften auf.

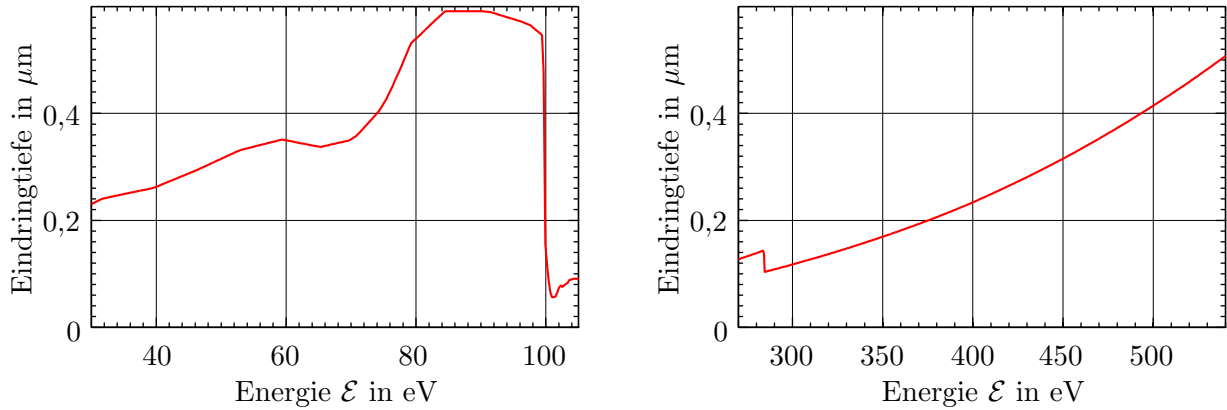


Abbildung 2.1: **(Links)** Eindringtiefe in Silizium als Funktion der Energie im Transmissionsfenster von 30 eV bis 99 eV **(Rechts)** Eindringtiefe in  $B_4C$  als Funktion der Energie im Wasserfenster von 284 eV bis 543 eV [6]

## 2.2 Anpassung des OCT-Aufbaus auf kurze Wellenlängen

Aufgrund der Eigenschaften der XUV- und weichen Röntgenstrahlung (Kap. 1.4) kann der aus dem optischen bekannte OCT-Aufbau nicht ohne Weiteres auf kurze Wellenlängen übertragen werden. In Luft unter Atmosphärendruck würde die Strahlung innerhalb weniger Mikrometer komplett absorbiert werden. Daher ist XCT nur unter Hochvakuumbedingungen ( $p < 10^{-5}$  mbar) möglich. Dies stellt besondere Anforderungen an die Materialien, Mechaniken und die Vakuumperipherie eines möglichen XCT-Aufbaus.

### 2.2.1 Signalausbeute und Probenbeschaffenheit

Bedingt durch den geringen Brechzahlkontrast der Materialien im XUV- und weichen Röntgenbereich, ist die Ausbeute an von der Probe rückgestreutem Licht wesentlich geringer als im nahen Infrarotbereich. Obgleich zukünftige Versionen des XCT-Aufbaus für die Detektierung eben dieses kleinen Streusignals konstruiert sein müssen, ist das Ziel der in dieser Arbeit dargestellten Forschung der experimentelle Nachweis dafür, dass OCT mit kurzen Wellenlängen möglich ist und die erwarteten hohen Auflösungen erreicht. Daher entschieden wir uns dafür, die ersten Proben für die XCT als eindimensional strukturierte, glatte Schichtsysteme von Materialien mit möglichst hohem Brechzahlkontrast herstellen zu lassen. In diesem Fall kommt es an den glatten Grenzflächen zur Reflexion des einfallenden Lichtes. Durch diese speziellen Bedingungen an die Probenbeschaffenheit ergeben sich mehrere Vorteile:

- Die rückgestreute bzw. in diesem Fall reflektierte Intensität ist maximiert.
- Die axiale Auflösung ist von der lateralen Position und Fokussierung der Strahlung auf der Probe unabhängig.
- Die Reflektivität in Abhängigkeit der Wellenlänge jedes beliebigen Schichtsystems kann mit Hilfe der Matrixmethode (siehe Kap. 1.1.1) berechnet werden.
- Die Proben können durch etablierte Beschichtungsverfahren gezielt hergestellt werden.

Weiterhin zeigt sich in der Untersuchung und Charakterisierung von Schichtsystemen ein drittes Anwendungspotential der XCT in der Dünnschichttechnologie.

### 2.2.2 Optiken

Da die XCT möglichst breitbandiges Licht benötigt, sind hochreflektive Multilayer-Optiken aufgrund der geringen reflektierten Bandbreite ungeeignet. Sämtliche fokussierenden Elemente müssen daher reflektive, metallbeschichtete Optiken unter streifendem Einfall sein.

### 2.2.3 Strahlungsquelle

Zur Messung der reflektierten Signale der Proben, speziell im Wasserfenster (siehe Kap. 3.1.1), bedarf es einer breitbandigen Strahlungsquelle hoher Intensität. Daher ist das Synchrotron als intensive, breitbandige und kontrollierbare Strahlungsquelle im XUV und weichen Röntgenbereich (siehe Kap. 3.3) die geeignetste Lichtquelle für die experimentelle Demonstration von XCT. Für anwendungsorientierte XCT-Aufbauten müssen jedoch kompaktere Lichtquellen wie Laserplasmen oder die Erzeugung von hoher harmonischer Strahlung evaluiert werden (siehe Kap. Ausblick).

### 2.2.4 Interferometrie mit kurzen Wellenlängen

Die Wellenlänge der Strahlung von wenigen Nanometern stellt hohe Anforderungen an die Positioniergenauigkeit und die mechanische Stabilität der Interferometerspiegel. Des Weiteren müssen die Oberflächenrauigkeiten aller Optiken inklusive des Strahlteilers unterhalb der Wellenlänge liegen. Einen effizienten, ausreichend glatten Strahlteiler herzustellen, der zudem die erforderliche Bandbreite liefert, ist, wenn überhaupt, nur mit extremen Aufwand und durch das Eingehen vieler Kompromisse hinsichtlich der Rauheit und der Bandbreite möglich [12].

### 2.2.5 Vorgeschlagener XCT-Aufbau

Die in Kapitel 2.2.4 dargestellten Probleme können umgangen werden, indem auf die Nutzung eines Michelson-Interferometer verzichtet und stattdessen ein sogenanntes „Common Path“-Interferometer verwendet wird. Die damit verbundene Methode der OCT heißt „Common-Path-Fourier-Domain-OCT“ oder CFPD-OCT [13]. Hier ersetzt der Oberflächenreflex der zu untersuchenden Probe den Referenzstrahl im Michelson-Interferometer. So gesehen ist die Probe selbst das Interferometer, was das System unanfällig gegen mechanische Instabilität macht. Ein Strahlteiler ist bei diesem Aufbau nicht mehr notwendig. Mit dieser Methode ist es allerdings nicht möglich, XCT im Zeitbereich (siehe Kap. 1.3.1) durchzuführen, weil kein verfahrbarer Referenzspiegel existiert. Es sind allein die „konstanten“ Anteile und die Autokorrelationsterme des reflektierten Spektrums (siehe Kap. 1.3.2) messbar, sodass eine spektral aufgelöste Messung nötig ist. Aufgrund dessen, dass die spektralen Komponenten in Gleichung (1.62) voneinander unabhängig sind, ist es einerseits möglich, das Spektrum simultan mittels breitbandiger Quelle und Spektrometer oder andererseits sukzessiv mit monochromatischer Quelle und einem Leistungsmessgerät aufzunehmen. Erstere Methode heißt „Spectrometer-based“-OCT bzw. „Spectral-Domain“-OCT oder auch SD-OCT, letztere wird „Swept-Source“-OCT oder auch SS-OCT genannt. Die Dauer des Messvorgangs ist bei SS-OCT dabei wesentlich länger als bei SD-OCT, da jede Wellenlänge einzeln eingestellt und gemessen werden muss. Der Vorteil der SS-OCT Methode liegt in der einfacheren Detektierung des Signals z. B. mit einer Photodiode.

Damit Strahlungsquelle und Detektor räumlich voneinander getrennt sind, muss die Probe gegenüber dem einfallenden Strahl verkippt werden, sodass die Strahlung nicht mehr senkrecht auf die Probe einfällt. Die Skizze eines möglichen XCT-Aufbaus ist in Abbildung 2.2 dargestellt.

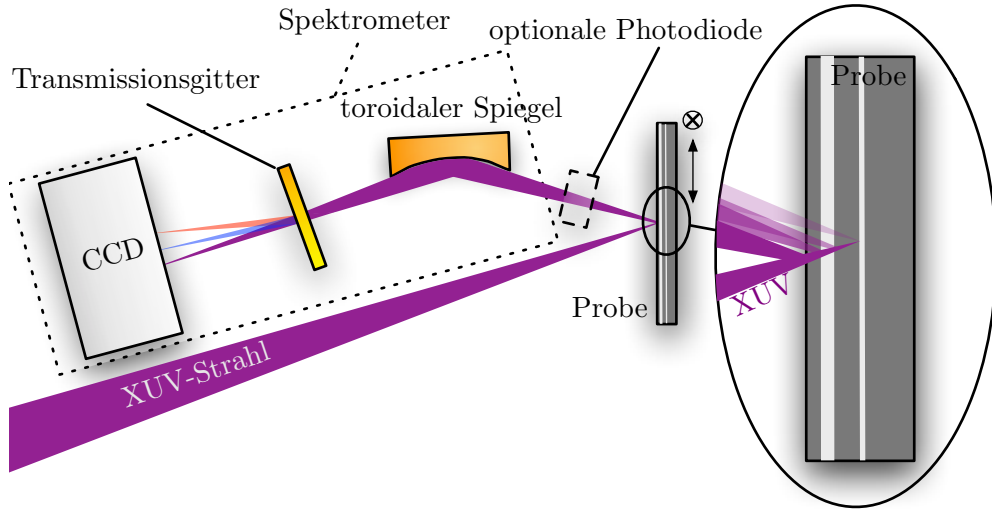


Abbildung 2.2: Skizze eines möglichen XCT-Aufbaus: Die XUV-Strahlung wird auf die Probenoberfläche fokussiert. Der Einfallswinkel auf die Probe muss so eingestellt werden, dass die reflektierte Strahlung für SD-OCT mit einem Spektrometer untersucht werden kann. Anstatt eines Spektrometers kann alternativ eine Photodiode verwendet werden, sodass SS-OCT mit einem sehr einfachen Aufbau realisiert werden kann. Der an der Probenoberfläche reflektierte Strahl kann als Referenzstrahl betrachtet werden, mit dem alle aus tieferen Regionen stammenden Reflexe zum Gesamtsignal interferieren.

## 2.3 Tiefenrekonstruktion und Auflösung

### 2.3.1 Mehrdeutigkeit des Autokorrelationssignals

Beim verwendeten XCT-Aufbau tragen nur konstante Anteile und Autokorrelationsterme zum Gesamtspektrum bei (siehe Kap. 2.2.5). Damit gilt für das reflektierte Spektrum:

$$S_A(\omega) = S_0(\omega) \left\{ \underbrace{\sum_{i=1}^N R_i}_{R_{\text{ges}}} + \underbrace{\sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \cos[\omega(\delta_i - \delta_j)]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\} \quad (2.1)$$

Für die Fourier-Transformation des Spektrums und damit des FD-XCT-Signals gilt dann:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega &= \frac{\varepsilon_0 c}{2} \Gamma_A(\tau) \\ &= I_0 \left\{ \underbrace{R_{\text{ges}} \gamma_G(\tau) e^{-i\omega_0 \tau}}_{\text{„konstante“ Terme}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \underbrace{\sqrt{R_i R_j} \left[ \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] e^{-i\omega_0[\tau - (\delta_i - \delta_j)]} + \gamma_G[\tau + (\delta_i - \delta_j)] e^{-i\omega_0[\tau + (\delta_i - \delta_j)]} \right]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\} \quad (2.2) \end{aligned}$$

Dabei ist  $R_1$  der Reflektivität der Oberfläche. Wie schon in Kapitel 1.3.2 angemerkt, ist die Tiefenstruktur der Probe mit den Autokorrelationstermen nicht eindeutig rekonstruierbar, weil sämtliche

Laufzeitdifferenzen im FD-XCT Signal auftauchen. Die Information über die Tiefenstruktur ist bereits vollständig in den Summanden mit

$$(i = 1 \wedge j = k \neq 1) \quad \text{mit} \quad k \dots \text{beliebig} \quad (2.3)$$

enthalten. Alle anderen Summanden mit  $i \neq j \neq 1$  tauchen an Positionen im FD-XCT Signal auf, die nicht die Tiefe, sondern bloß eine Differenz zweier Tiefen anzeigt. Ohne weitere Vorkehrungen lassen sich diese „Scheintiefen“ also nicht von den realen unterscheiden.

Um den Oberflächenreflex stärker auszuzeichnen, ist es nötig, auf die zu untersuchende Probe eine Deckschicht aufzubringen, die sich durch eine sehr hohe Reflektivität gegenüber den anderen Grenzflächen unterscheidet ( $R_1 \gg R_{j \neq 1}$ ). Damit sind die Amplituden der realen Tiefen im FD-XCT Signal viel größer als die der Scheintiefen. Grundsätzlich wäre es auch denkbar, die Dicke der Deckschicht so zu wählen, dass die realen Tiefen erst bei wesentlich größeren Werten von  $\tau$  detektiert werden als die Scheintiefen. Dazu müsste die Dicke der Deckschicht allerdings größer sein als die maximal zu untersuchende Tiefe der ursprünglichen Probe. Das so geschaffene Signal wäre absolut gleichwertig mit dem Kreuzkorrelationssignal der FD-OCT, wenn die Dicke der Deckschicht exakt bekannt ist. Die aufgebrachte Deckschicht würde damit den Referenzspiegel des OCT Aufbaus mit Michelson-Interferometer - bis auf die Beweglichkeit - vollständig ersetzen. Allerdings würde eine derart dicke Deckschicht aufgrund der Absorption die ohnehin geringe Eindringtiefe der XUV-Strahlung in die Probe drastisch verringern. Somit ist das Erzeugen eines vollwertigen Kreuzkorrelationssignals mit diesem XCT Aufbau nahezu unmöglich. Damit die Unterscheidbarkeit zwischen realen Tiefen und Scheintiefen dennoch gewährleistet werden kann, muss durch die Wahl des Materials und der Dicke der Deckschicht ein Kompromiss gefunden werden, um eine maximale Reflektivität bei zugleich niedriger Absorption zu erhalten.

### 2.3.2 Rekonstruktion der Tiefe

Bisher wurden alle OCT bzw. XCT Signale in Abhängigkeit der Laufzeiten der sich überlagernden Felder angegeben (siehe Kap. 1.3.2 und 2.3.1). Dies war von Vorteil, weil das modulierte Spektrum und dessen Fourier-Transformation damit unabhängig von der Geometrie des Aufbaus formuliert werden konnten. Um jedoch den jeweiligen Laufzeitdifferenzen unter schrägem Einfall reale Tiefen zuzuordnen, müssen nun Einfallswinkel und Brechung berücksichtigt werden. Deshalb wird das bisherige, auf  $n = 1$  beschränkte Modell (Kap. 1.3), um die Möglichkeit beliebiger Brechzahlen in jeder Schicht  $n_i$  erweitert. Dabei gilt weiterhin, dass die Schichten vorerst als dispersionsfrei angenommen werden, also die Brechzahlen nicht von  $\omega$  abhängen.

Der Gangunterschied der Reflexionen einer auf ein Schichtsystem mit zwei Grenzflächen einfallenden Lichtwelle ist in Abbildung 2.3 dargestellt.

Der Phasenunterschied der beiden Wellen beträgt

$$\Delta\varphi_{i+1,i} = \omega(\delta_{i+1} - \delta_i) = \frac{2n_i\omega(z_{i+1} - z_i)}{c \sin \alpha_i} - \frac{n_{i-1}\omega l_0}{c}. \quad (2.4)$$

Dabei ist  $n_{i-1}$  der Realteil der Brechzahl des „Claddings“,  $n_i$  der Realteil der Brechzahl der Schicht zwischen den Grenzflächen  $z_i$  und  $z_{i+1}$ ,  $z_{i+1} - z_i$  die Schichtdicke der  $i$ -ten Schicht und  $\alpha_i$  der Winkel des gebrochenen einfallenden Strahles im Schichtmedium zur Grenzfläche. Mit

$$l_0 = 2(z_{i+1} - z_i) \cot \alpha_i \cos \alpha_{i-1}, \quad (2.5)$$

$\alpha_{i-1}$  als Einfallswinkel zur Grenzfläche und dem Brechungsgesetz  $n_{i-1} \cos \alpha_{i-1} = n_i \cos \alpha_i$  ergibt sich damit

$$\Delta\varphi_{i+1,i} = \omega(\delta_{i+1} - \delta_i) = \frac{2n_i\omega(z_{i+1} - z_i) \sin \alpha_i}{c}. \quad (2.6)$$



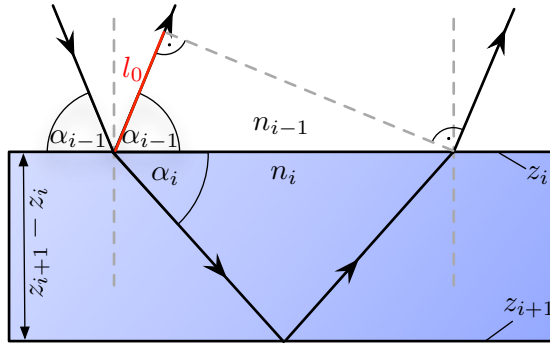


Abbildung 2.3: Skizze zur Berechnung des Gangunterschiedes der Reflexionen einer schräg auf ein Schichtsystem mit zwei Grenzflächen einfallenden Lichtwelle:  $n_{i-1}$  ist der Realteil der Brechzahl des „Claddings“ und  $n_i$  der Realteil der Brechzahl der Schicht zwischen den Grenzflächen. Für die Brechung in diesem Beispiel gilt außerdem  $n_{i-1} > n_i$  und damit  $\alpha_{i-1} > \alpha_i$

Für mehrere durchlaufene Schichten ist der Gangunterschied die Summe der Gangunterschiede zwischen den einzelnen Schichten. Für  $i > j \geq 1$  gilt:

$$\Delta\varphi_{i,j} = \omega(\delta_i - \delta_j) = \sum_{m=j}^{i-1} \frac{2n_m\omega(z_{m+1} - z_m) \sin \alpha_m}{c} = \sum_{m=j}^{i-1} k_m(z_{m+1} - z_m) \quad (2.7)$$

Über die der Geometrie angepassten Wellenzahlen  $k_m$  lässt sich nun das reflektierte Spektrum (2.1) statt in Abhängigkeit der Laufzeiten, in Abhängigkeit der Schichtabstände  $z_{m+1} - z_m$  angeben:

$$S_A(\omega) = S_0(\omega) \left\{ R_{\text{ges}} + 2 \sum_{i>j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \cos \left[ \omega \sum_{m=j}^{i-1} \frac{2n_m(z_{m+1} - z_m) \sin \alpha_m}{c} \right] \right\} \quad (2.8)$$

Wenn sich die Brechzahlen der einzelnen Schichten nur geringfügig voneinander unterscheiden, ist es möglich, die Wellenzahlen  $k_m$  durch die Wellenzahl des im Schichtsystem dominanten Materials  $k_D$  anzunähern. Mit der Brechzahl des „Claddings“  $n_0$  und dem Einfallswinkel aus dem „Cladding“ auf das Schichtsystem  $\alpha_0$  ergibt sich mit  $n_0 \cos(\alpha_0) = n_D \cos(\alpha_D)$  für das Spektrum:

$$S_A(\omega) = S_0(\omega) \left\{ R_{\text{ges}} + \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \cos \left[ \omega \frac{2n_D \sin \alpha_D}{c} (z_i - z_j) \right] \right\} \quad (2.9)$$

### 2.3.3 Auflösung

Analog zu Kapitel 1.3.3 ergibt sich mit Gleichung (2.9) für die Distanz zweier Schichten, die getrennt voneinander aufgelöst werden können, die Bedingung

$$\Delta z = (z_i - z_j) \geq \frac{c}{2n_D \sin \alpha_D} \Delta\tau_K \quad (2.10)$$

$$\text{und} \quad \sin \alpha_D = \sqrt{1 - \frac{n_0^2}{n_D^2} \cos^2 \alpha_0}. \quad (2.11)$$

Für ein gaußförmiges Spektrum gilt dann

$$\Delta z \geq \frac{4c \ln 2}{n_D \sin \alpha_D \Delta\omega_G} \quad \text{bzw.} \quad (2.12)$$

$$\Delta z \geq \frac{2 \ln 2}{\pi n_D \sin \alpha_D} \frac{\lambda_0^2}{\Delta\lambda_G}. \quad (2.13)$$

Für Brechzahlen  $n_D > 1$  verbessert sich sogar die Auflösung des Verfahrens, weil die optischen Wege dadurch länger werden. Im XUV und weichen Röntgenbereich gilt für die Brechzahlen allerdings meist  $n_D \lesssim 1$ . Deshalb verschlechtert sich die XCT-Auflösung geringfügig im Vergleich zur Vakuumauflösung. Mit abnehmendem Einfallswinkel zur Oberfläche sinkt die Auflösung des Verfahrens, während die Reflektivität, also die Signalstärke steigt. Es muss daher ein Kompromiss zwischen hoher Signalausbeute und hoher Auflösung eingegangen werden. Der minimal mögliche Einfallswinkel, ist durch den Totalreflexionswinkel an optisch dünneren Medien gegeben. Bei noch flacherem Einfall, dringen nur noch evaneszente Felder in die Probe ein, was die Eindringtiefe drastisch verringert. Dann ist eine Tiefenauflösung nicht mehr möglich.

# Kapitel 3

## Experimenteller Aufbau

### 3.1 Proben

Das Ziel des im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimentes war es, die XCT und deren Auflösung von wenigen Nanometern zu demonstrieren. Die Auswahl und die Beschaffenheit der zu untersuchenden Proben spielte dabei eine entscheidende Rolle.

#### 3.1.1 Simulation des reflektierten Spektrums

Im Rahmen einer Bachelorarbeit [5] wurde eine Simulationssoftware entwickelt, welche die Reflektivität eines beliebigen eindimensionalen Schichtsystems mittels des Matrixformalismus (siehe Kap. 1.1.1) berechnet. Als Quelle für die komplexen Brechzahlen der Materialien wurde die Datenbank [6] verwendet. Die Simulationen zur Modellierung und Optimierung der angefertigten Proben hinsichtlich der Signalausbeute, des Modulationskontrastes im Spektrum (Gl. 1.55) und der Auflösung wurden mit dieser Software durchgeführt.

#### 3.1.2 Optimierungsprozess

Die Proben wurden in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut für angewandte Optik und Feinmechanik in Jena entwickelt und hergestellt. Zur Untersuchung der Eigenschaften der XCT sollte es möglich sein, mehrere Effekte an ihnen nachzuweisen:

- Modulationen im reflektierten Spektrum
- Abhängigkeit der Modulationsfrequenz von der Tiefe
- Genauigkeit bei der Bestimmung der Tiefe einer isolierten Schicht
- Auflösung zweier getrennter Grenzschichten
- Einfluss und Notwendigkeit einer hochreflektierenden Deckschicht

Dementsprechend war es sinnvoll, mehrere unterschiedliche Schichtsysteme herzustellen. Die Materialauswahl, die Schichttiefen und der nötige Einfallswinkel wurden dann in mehreren Schritten hinsichtlich der Signalausbeute, des spektralen Modulationskontrastes und des Herstellungsaufwandes mit Hilfe der Simulationssoftware optimiert.

Für die Herstellung der Proben wurden Sputter-Anlagen verwendet, die hauptsächlich für die Fertigung von Mehrschichtsystemen für XUV-Optiken konzipiert sind. Für das Silizium-Transmissionsfenster sind Gold und Silizium aufgrund des vergleichsweise hohen Brechzahlkontrastes und des damit verbundenen hohen Modulationskontrastes optimale Materialien. Im Wasserfenster eignen sich Borkarbid

(B<sub>4</sub>C) und Platin am besten. Alle vier Materialien konnten standardmäßig von der Sputter-Anlage verarbeitet werden. Der optimale Einfallswinkel als Kompromiss zwischen Signalausbeute, Modulationskontrast und möglicher Auflösung (siehe Kap. 2.3.3) beträgt etwa 75° zur Oberfläche.

### 3.1.3 Probenherstellung und Übersicht

Alle Schichtsysteme wurden auf kristalline, hochreine Siliziumwafer mit einem Durchmesser von 10 cm aufgebracht. Die Schichtdickengenauigkeit beträgt laut Hersteller etwa 0,1 nm. Um möglichst wenig Belüftungsvorgänge des Aufbaus durchführen zu müssen, wurden jeweils 8 Schichtsysteme auf einen Siliziumwafer, der in 10 Bereiche unterteilt wurde, aufgebracht (siehe Abbildung 3.2). Zwei Bereiche blieben auf jedem Wafer für eventuelle Testbeschichtungen frei. Vier Siliziumwafer wurden mit unterschiedlichen Proben beschichtet, sodass insgesamt 32 verschiedene Schichtsysteme untersucht werden konnten. Im Herstellungsprozess wurden Oxidationen innerhalb der Probe vermieden, indem jedes einzelne Schichtsystem maskiert und in einem separaten Beschichtungsvorgang hergestellt wurde. Eine Übersicht der hergestellten Schichtsysteme befindet sich in Abbildung 3.1. Für beide Transmissionsfenster wurde eine einzelne Schicht unter vier verschieden dicken Schichten vergraben, um die Abhängigkeit der spektralen Modulationsfrequenzen von der Schichtdicke zu demonstrieren. Im Wasserfenster wurde außerdem die Dicke der vergrabenen Schicht in vier Schritten variiert. Die Auflösung des Verfahrens kann dann an der Unterscheidbarkeit des Vorder- und Rückseitenreflexes der vergrabenen Schicht gemessen werden. Im Silizium-Transmissionsfenster würde eine der Auflösung von ca. 15 nm entsprechende dicke Goldschicht die Strahlung so stark absorbieren, dass der Rückseitenreflex zu schwach wäre, um ihn noch zu detektieren. Daher wurden hier zwei separate Goldschichten durch eine in vier Schritten variierte Siliziumschiicht getrennt, um die Auflösung zu bestimmen. Alle Schichtsysteme wurden einmal ohne (-) und einmal mit (+) einer hochreflektierenden Deckschicht hergestellt, um deren Einfluss auf die Eindeutigkeit der gemessenen Tiefen nachzuweisen.

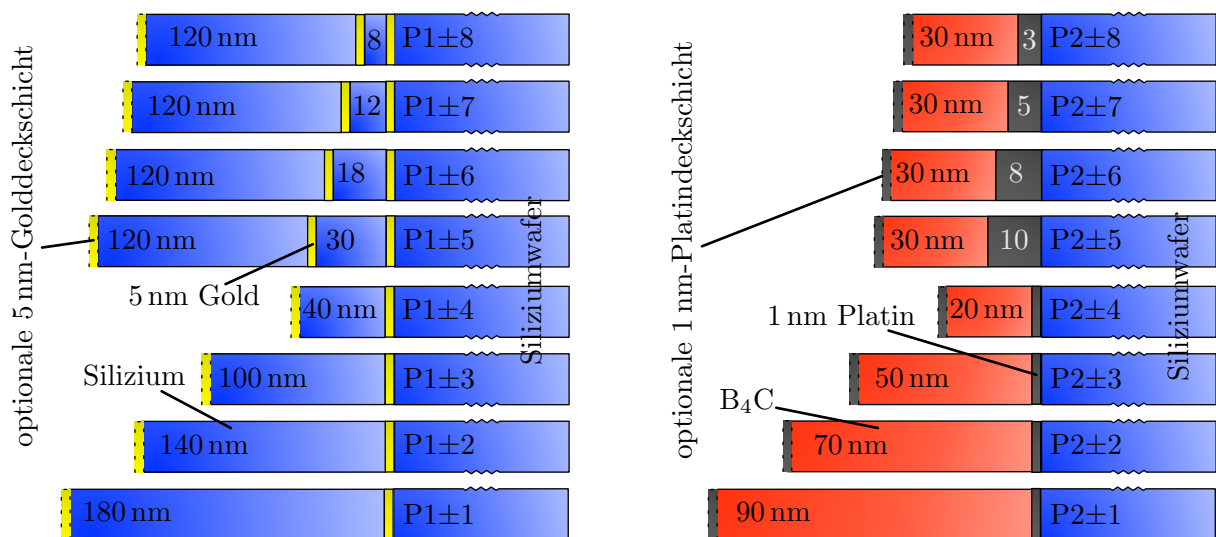


Abbildung 3.1: Übersicht aller hergestellten Schichtsysteme und Nomenklatur (nicht maßstäblich): **(Links)** Siliziumbasierte Proben mit 5 nm Golddeckschicht (Probe 1+1 bis Probe 1+8) und ohne (Probe 1-1 bis Probe 1-8) (Silizium:blau, Gold: gelb) **(Rechts)** B<sub>4</sub>C-basierte Proben mit 1 nm Platindeckschicht (Probe 2+1 bis Probe 2+8) und ohne (Probe 2-1 bis Probe 2-8) (Silizium: blau, B<sub>4</sub>C: rot, Platin: dunkelgrau)

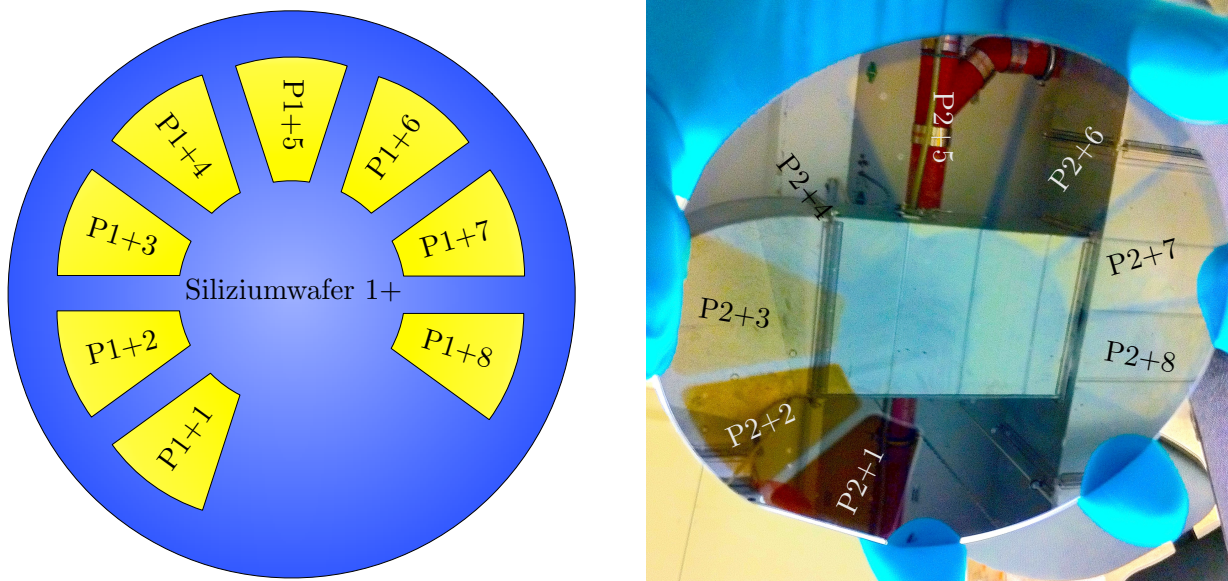


Abbildung 3.2: Probenanordnung auf Siliziumwafer: **(Links)** Nicht maßstäbliche Skizze des Siliziumwafers mit den Proben 1+1 bis 1+8; Zwei Position blieben frei. **(Rechts)** Bild des fertig beschichteten Wafers mit den Proben 2+1 bis 2+8; Die Anordnung der Proben auf dem Wafer ist die selbe wie im linken Bild. Die einzelnen Proben haben im sichtbaren Spektralbereich aufgrund der unterschiedlichen Dicke unterschiedliche Farben. Im Wafer spiegelt sich die Umgebung.

## 3.2 Optische Abbildung

Grundsätzlich erlauben die auf großen Bereichen eindimensional strukturierten Proben das Verwenden von divergenter Strahlung. Der sich ausdehnende Strahl kann auf einen einheitlichen Bereich auf der Probe gelenkt und der reflektierte Strahl spektral untersucht werden, ohne dass eine Fokussierungsoptik und eine Abbildung nötig wären. Diese Variante der XCT hätte jedoch entscheidende Nachteile gegenüber der in Abbildung 2.2 dargestellten Variante mit Fokussierung auf die Probe.

- Das Verwenden eines abbildenden Spektrometers zur Untersuchung der reflektierten Strahlung wäre nicht möglich. Die spektrale Aufspaltung in der durch das dispersive Element vorgegebenen Ebene würde von der Strahldivergenz überlagert und die spektrale Auflösung wäre deutlich reduziert. Damit wäre nur noch die Durchführung der zeitaufwendigen SS-XCT (siehe Kap. 2.2.5) möglich.
- Der ausgedehnte Strahl auf der Probe würde die Auflösung der durch stückweises Abrastern der Probenoberfläche zusätzlich erhaltbaren lateralen Strukturinformation im Vergleich zum fokussierten Strahl drastisch verringern.
- Die Anforderung an die räumliche Kohärenz (Kohärenzeigenschaften in den räumlichen Dimensionen analog zur zeitlichen Kohärenz) der Strahlungsquelle wäre deutlich höher als im fokussierenden Fall, da das Quellgebiet der interferierenden Strahlen ausgedehnt ist.

Aufgrund dieser erheblichen Einschränkungen entschieden wir uns für einen XCT-Aufbau mit Fokussierung auf die Probenoberfläche.

### 3.2.1 Spektrometer

Als XUV Spektrometer wurde ein abbildendes Gitterspektrometer nach [14] verwendet. Ein toroidaler Spiegel bildet den mit dem Spektrometer beobachteten Quellpunkt der XUV Strahlung auf eine CCD-Kamera ab. Der Spiegel besteht aus einem Quarzglassubstrat mit Nickelbeschichtung ( $R_1 = 24$  mm;

$R_2 = 5375$  mm; Länge = 81 mm). Er fokussiert die XUV-Strahlung unter streifendem Einfall von  $3,83^\circ$  auf die CCD-Kamera (Akzeptanzwinkel  $4,1 \cdot 10^{-4}$  sr). Zwischen Spiegel und Kamera befindet sich ein aus freistehenden Goldstegen bestehendes Gitter mit einer Gitterkonstante von wahlweise 1000, 2000 oder 5000 Linien/mm. Die Goldstege werden durch ein zweidimensionales Übergitter mit einer Gitterperiode von 58,8 Linien/mm gestützt. Da die spektrale Auflösung von der Fokusgröße auf der CCD-Kamera in der dispersiven Ebene abhängt, sinkt die spektrale Auflösung mit wachsender Ausdehnung der Strahlungsquelle. Sie ist außerdem durch sphärische Aberrationen der toroidalen Spiegel begrenzt. Der Einfluss des Übergitters auf die Auflösung wird in Kapitel 4.5.3 diskutiert.

Die Strahlungsquelle ist ein Synchrotronstrahlrohr (siehe Kap. 2.2.3). Die ausgekoppelte Strahlung von Bending-Magnets, Wiggeln und Undulatoren ist zwar divergent, wird aber an den meisten Strahlrohren durch abbildende Optiken an der für den Aufbau des Nutzers vorgesehenen Position fokussiert. Die Größe des Fokus hängt neben den Eigenschaften der fokussierenden Optik auch von der Art der Erzeugung ab (siehe Kap. 1.5). Um von den Fokussierungseigenschaften des Strahlrohres der Synchrotronquelle unabhängig zu sein und die Quellgröße, also die spektrale Auflösung, frei wählen zu können, wurde der Synchrotronfokus nicht direkt auf die Probe gerichtet. Stattdessen wurde der Fokus durch einen variablen, senkrecht zur dispersiven Ebene des Gitters eingebrachten Spalt beschnitten und mit einem zweiten toroidalen Spiegel (baugleich zum Spektrometerspiegel) auf die Probe abgebildet. Durch den Spalt kann die Erhöhung der spektralen Auflösung nur unter Hinnahme eines verringerten Photonflusses erreicht werden. Es muss demnach ein Kompromiss zwischen Auflösung und Photonfluss eingegangen werden.

### 3.2.2 Optisches Design

Der schließlich verwendete optische Aufbau des XCT Experimentes ist in Abbildung 3.3 maßstäblich dargestellt. Der Spalt muss so ausgerichtet sein, dass er den Fokus des Synchrotrons genau in der dispersiven Ebene des Spektrometers beschneidet. Aufgrund des Einfallswinkels der toroidalen Spiegel in vertikaler Richtung von  $3,83^\circ$  und des Einfallswinkels von  $75^\circ$  auf die Probe in horizontaler Richtung, ist die Ausrichtung des Spaltes in nicht-trivialer Weise mit der Ausrichtung der Probe und des Spektrometers verknüpft. Dies musste bei der Justage und Strahlführung beachtet werden. Optional kann zwischen Probe und Spektrometer ein Aluminiumfilter, Zirkonfilter oder eine XUV-Photodiode in den Strahl gebracht werden. Der gesamte Aufbau wurde mit der „Raytracing“-Software *ZEMAX* simuliert und optimiert.

## 3.3 Synchrotron-Strahlungsquellen

Ebenso essentiell wie die zu untersuchenden Proben (siehe Kap. 3.1.3) für die erste experimentelle Demonstration von XCT war die Wahl der geeigneten Lichtquelle. Die Reflektivität der Silizium-basierten Proben im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $75^\circ$  zur Oberfläche liegt in der Größenordnung von  $10^{-1}$  mit hochreflektierender Deckschicht und  $10^{-2}$  ohne Deckschicht. Die Reflektivität der Borkarbid-basierten Proben liegt im Wasserfenster in der Größenordnung von  $10^{-5}$  mit Deckschicht bis  $10^{-6}$  ohne Deckschicht. Das verwendete XUV Spektrometer zur Aufnahme des reflektierten Spektrum (siehe Kap. 3.2.1) wurde in einem früheren Experiment auf Sensitivität kalibriert [15], [16]. Daher sind die nötigen Belichtungszeiten für eine maximale Aussteuerung der verwendeten Kamera bei gegebenem Photonfluss bekannt. Um viele XCT Aufnahmen aufnehmen zu können, sollte die Belichtungszeit maximal einige Minuten betragen. Die von der Probe reflektierten Photonflüsse sollten für die Sättigung der CCD-Kamera (und damit maximaler Dynamik) in der Größenordnung von  $10^{10}$  Photonen/s bis  $10^{11}$  Photonen/s in 0.1 % Bandbreite liegen. Für die entsprechende Quelle entspricht dies unter Berücksichtigung der Probenreflektivität benötigten Photonflüssen von  $> 10^{12}$  Photonen/s in 0.1 % Bandbreite. Wegen des hohen Flusses und des kleinen Fokus, entschieden wir uns, Undulatoren als Strahlungsquellen für XCT zu nutzen.



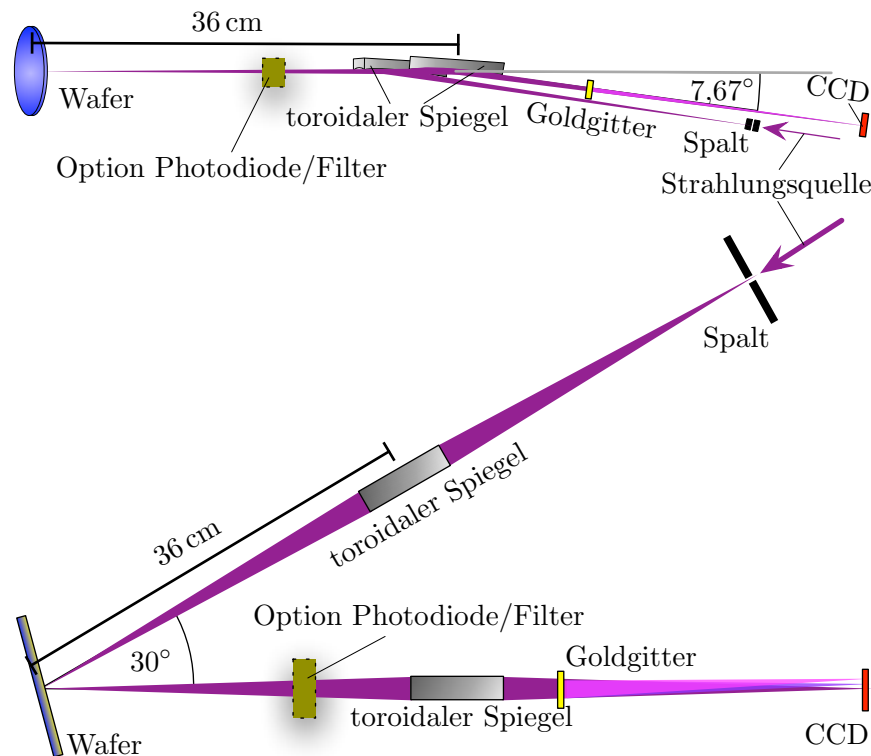


Abbildung 3.3: Maßstäbliche Skizze des optischen Aufbaus basierend auf *ZEMAX*-Simulationen: **(Oben)** Seitenansicht **(Unten)** Draufsicht

### SS-XCT mit Undulatoren

Aufgrund der spektralen Verteilung von Undulatorstrahlung (siehe Kap. 1.5.3) in einzelnen quasinomochromatischen Harmonischen, werden diese Strahlungsquellen normalerweise nur als monochromatische Quellen genutzt. Durch den Einsatz von Monochromatoren wird die spektrale Breite in den meisten Strahlrohren noch zusätzlich reduziert. Um die Lage der einzelnen Harmonischen zu ändern und so die monochromatische Strahlung durchstimmbar zu machen, ist es üblich, dass sowohl der Abstand der periodischen Magnetstrukturen, als auch die Monochromatoreinstellungen während des Experimentes geändert werden können. Daher ist SS-OCT (siehe Kap. 2.2.5), also das schrittweise Durchstimmen einer monochromatischen Quelle und simultanes Messen der reflektierten Intensität, mit den Standardprozeduren und Betriebsmodi von Undulatorstrahlrohren durchführbar.

### SD-XCT mit Undulatoren

SD-OCT benötigt hingegen eine breitbandige Strahlungsquelle. Daher sind Undulatoren für diese OCT Variante eigentlich ungeeignet. Jedoch ist es möglich, die Wellenlänge der Undulator-Strahlung innerhalb der Belichtungszeit der CCD-Kamera des Spektrometers durchzufahren. So kann die komplette spektrale Information mit nur einer Aufnahme des Spektrometers gewonnen werden. Somit ist dieses, eigentlich auf SS-OCT basierende Verfahren, gleichwertig zur SD-OCT.

#### 3.3.1 DESY: DORIS III - BW3

Das erste Teil des Experimentes wurde im Oktober 2011 am Strahlrohr BW3 des DORIS III Positronen-Speicherrings am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg durchgeführt. Dieses für XUV- und weiche Röntgenstrahlung ausgelegte Strahlrohr besitzt zwei 4 m lange Undulatoren. Undulator I besteht aus 21 Magnetperioden und die erste Harmonische kann von 15 eV bis 600 eV durch-

gefahren werden. Undulator III besteht aus 44 Magnetperioden und kann von 300 eV bis 1800 eV durchgefahren werden. Die Strahldivergenz im Fokus beträgt 0,089 mrad vertikal und 0,3 mrad horizontal. Der Fokus hat eine Größe von  $200 \times 300 \mu\text{m}$ . Zwei Gittermonochromatoren erreichen eine spektrale Auflösung von bis zu  $10^{-3}$  eV. Der Photonenfluss bei 500 eV beträgt  $3 \cdot 10^{12}$  Photonen/s in 0.1 % Bandbreite. Die Polarisationsrichtung ist nicht variabel und horizontal ausgerichtet [17],[18]. Der Druck am Anschlussflansch für die Experimentierkammer darf nicht größer als  $5 \cdot 10^{-8}$  mbar sein, um die Strahlrohroptiken nicht zu verschmutzen.

### 3.3.2 HZB: BESSY II - UE112-PGM-1

Das zweite Experiment fand im November 2011 am Strahlrohr UE112-PGM-1 des BESSY II Synchrotrons am Helmholtz Zentrum Berlin statt. Diese ebenfalls für XUV Strahlung konzipierte Strahlungsquelle besteht aus einem 3,5 m langen Undulator mit 32 Magnetperioden, der auf Wellenlängen zwischen 20 eV und 700 eV eingestellt werden kann. Die Strahldivergenz im Fokus beträgt 0,5 mrad vertikal und 1,4 mrad horizontal. Der Fokus hat dabei eine Größe von  $80 \times 30 \mu\text{m}$ . Der Photonenfluss bei 20 eV bis 100 eV ist größer als  $10^{13}$  Photonen/s in 0.1 % Bandbreite. Bei 100 eV bis 300 eV ist er größer als  $10^{12}$  Photonen/s in 0.1 % Bandbreite. Der Monochromator PGM erreicht eine spektrale Auflösung von bis zu  $3 \cdot 10^{-4}$  eV. Die Polarisationsrichtung dieses Strahlrohres ist zudem frei wählbar [19]. Der Druck am Anschlussflansch für die Experimentierkammer darf  $5 \cdot 10^{-9}$  mbar nicht übersteigen.

## 3.4 Aufbau

Wie in Kapitel 1.4 beschrieben, wird XUV und weiche Röntgenstrahlung in Luft unter Atmosphärendruck innerhalb von wenigen Mikrometern vollständig absorbiert. Der die optischen Bestandteile enthaltende Teil des experimentelle Aufbaus muss daher für ein dauerhaftes Hochvakuum von kleiner als  $10^{-5}$  mbar konzipiert sein. Um die Justage unter Vakuum zu ermöglichen, müssen die mechanischen Verstellmöglichkeiten der Optiken und die Probenpositionierung motorisiert sein. Der experimentelle Aufbau wurde am Institut für Optik und Quantenelektronik der Universität Jena konzipiert und geplant und größten Teils auch dort gefertigt.

### 3.4.1 Vakuumkammer

In Abbildung 3.4 und 3.6 ist die Vakuumkammer dargestellt. Die Hauptkammer, die die optischen Elemente, sowie die zu untersuchende Probe enthält, wird von einer Turbomolekularpumpe gepumpt. Die Hauptkammer erreicht einen minimalen Druck von  $1 \cdot 10^{-6}$  mbar. Dies liegt zwei bzw. drei Größenordnungen überhalb des von den Strahlrohrbetreibern geforderten maximalen Druckes. Daher wurden zwischen Hauptkammer und Strahlrohranschluss zwei (BW3) bzw. drei (UE112-PGM-1) differentielle Pumpstufen eingerichtet. Dabei werden die jeweils durch eine Turbomolekularpumpe gepumpten Teilmengen mittels Blenden, deren Durchmesser dem XUV-Strahldurchmesser an der jeweiligen Position entsprechen, voneinander abgeschottet. Zusätzlich wurde hinter der ersten differentiellen Pumpstufe ein Vakuumschieber mit Quarzglasfenster eingebaut, damit die Kammer unabhängig von den differentiellen Pumpstufen belüftet und evakuiert werden konnte. Somit war es möglich, die Optiken unter Atmosphärendruck mit sichtbarem Weißlicht aus dem Strahlrohr zu justieren.

In der gewählten Geometrie erwies es sich als praktisch, den Spalt in der ersten differentiellen Pumpstufe zu installieren. Die Ausrichtung des optischen Aufbaus (siehe Kap. 3.2.2) in der Vakuumkammer ist in Abbildung 3.5 dargestellt.

### 3.4.2 Motorisierung und Justage

Die Veränderung der Strahlage der optischen Abbildung und der Probenpositionierung unter Vakuumbedingungen, machte Motorisierungen an folgenden Achsen erforderlich:



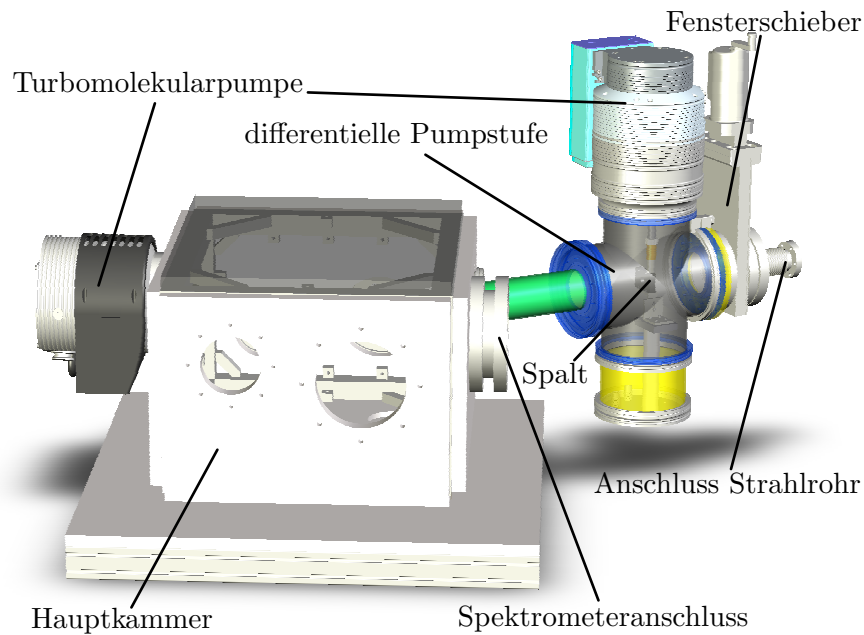


Abbildung 3.4: Dreidimensionale Skizze der Vakuumkammer

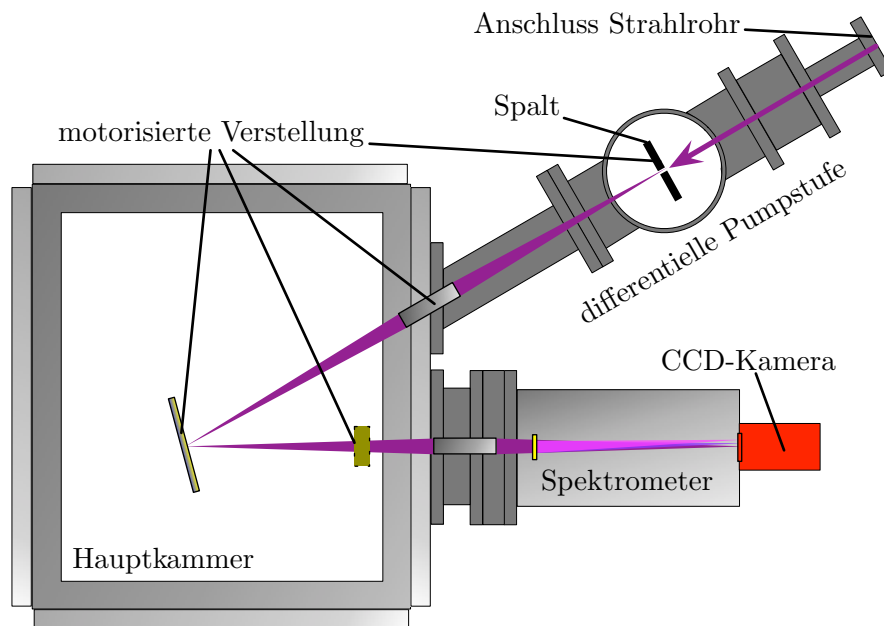


Abbildung 3.5: Maßstäbliche Skizze der Vakuumkammer am DESY Strahlrohr BW3 mit optischem Aufbau (Draufsicht)

- **Spalt:** Translationsachse senkrecht zur Strahlrichtung zur exakten Ausrichtung des Spaltes auf die Fokusposition; Spaltbreite zur Einstellung der Fokusgröße auf der Probe und damit der spektralen Auflösung und des Photonenflusses
- **erster toroidaler Spiegel:** Drei Translations- und zwei Verkippungsachsen zur exakten Justage der Abbildung auf der Probe
- **Probenhalter:** Probenposition in Strahlrichtung zur Einstellung der Distanz zwischen toroida-

lem Spiegel und Probe; Rotationsachse und Translationsachse senkrecht zur Strahlrichtung zum Einstellen der Fokusposition auf der Probe

- **Filterrad:** Rotationsachse zur Auswahl zwischen Aluminiumfilter, Zirkonfilter, XUV-Photodiode oder ungehinderter Transmission.

Der toroidale Spiegel des Spektrometers konnte mit Hilfe zweier Mikrometerschrauben manuell von außen justiert werden. Die Änderung des Einfallswinkel auf die Probenoberfläche konnte aufgrund der ohnehin festen Spektrometerposition nur manuell unter Luftdruck eingestellt werden.

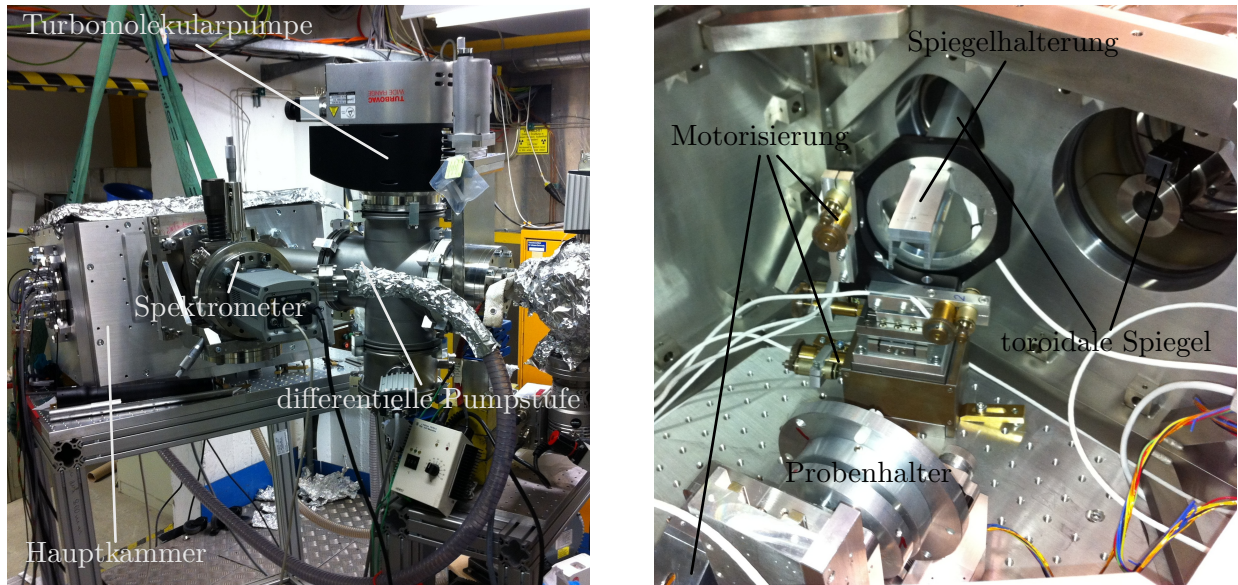


Abbildung 3.6: Fotos des Aufbaus: **(Links)** Foto der Vakuummutter am DESY Strahlrohr BW3 **(Rechts)** Foto des Aufbaus innerhalb der Hauptkammer

## Justage

Zunächst wurde die Hauptkammer parallel zur Strahlebene (nach der Reflexion am ersten Spiegel) ausgerichtet. Die Monochromatoren beider Strahlrohre können dazu auf Transmission der nullten Gitterbeugungsordnung eingestellt werden. Die Hintergrundstrahlung der Undulatoren ist breitbandig genug, sodass sichtbares weißes Licht abgestrahlt wird. Mit Hilfe dieses Lichts und des geschlossenen Vakuumschiebers mit Quarzglasfenster, war es möglich den optischen Aufbau unter Atmosphärendruck zu justieren. Zuerst wurde der Spalt in der Fokusebene des Synchrotrons eingebracht. Mit einer CCD-Kamera im Fokus des ersten toroidalen Spiegels wurde dessen Ausrichtung und Abbildung eingerichtet. Die Probe wurde dann an die mit der CCD-Kamera bestimmte Fokusposition gebracht und der reflektierte Strahl in das fest angebrachte Spektrometer gelenkt. Mit dem Reflex einer Siliziumoberfläche auf der Probe und monochromatischer XUV-Strahlung wurde der toroidale Spiegel des Spektrometers justiert.

### 3.4.3 Detektoren

Als Detektoren für die XUV- und weiche Röntgenstrahlung kamen eine Photodiode und eine CCD-Kamera zum Einsatz. Die Photodiode vom Typ SXUV-100 der Firma IRD [20] ist vom Hersteller auf absolute Photonenflüsse kalibriert. Sie besitzt eine nutzbare Fläche von  $10\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ . Ein Strom-Spannungs-Wandler und die Verstärkungselektronik ist vom Hersteller in die vakuumtaugliche Trägerstruktur der Diode integriert. Als Messgeräte kamen digitale Voltmeter mit einer Dynamik von 8 Bit (BW3) und 16 Bit (UE112-PGM-1) zum Einsatz. Die CCD-Kamera vom Typ Newton DO940P

der Firma Andor ist Teil des XUV-Spektrometers nach [14]. Die XUV-Kamera besitzt  $2048 \times 512$  Pixel mit einer Größe von jeweils  $13,5 \mu\text{m} \times 13,5 \mu\text{m}$  und kann mit Hilfe eines Peltierelementes auf bis zu  $-70^\circ \text{C}$  abgekühlt werden, um thermisches Rauschen zu verringern [21].

# Kapitel 4

## Auswertung

### 4.1 Diskrete Fourier-Transformation des Spektrums

Da durch die Pixel der CCD-Kamera bzw. den Diskretisierungsabstand der Photonenenergie bei SS-XCT das gemessene Spektrum immer diskret ist, muss eine diskrete Fourier-Transformation (DFT) durchgeführt werden, um das XCT-Signal zu erhalten. Die Diskretisierung der Messwerte ist bei SS-XCT durch die Schrittweite zwischen zwei eingestellten Energien frei wählbar. Die Zeit zur Aufnahme des Spektrums steigt allerdings mit zunehmender Messpunktanzahl. Bei der SD-XCT ist die Diskretisierung der Messwerte durch die Winkeldispersion des Gitters und die Pixelbreite der CCD-Kamera gegeben. Das diskrete XCT-Signal  $X(l)$  als DFT des diskreten Spektrums  $S_A(m)$  ist

$$X(l) = \sum_{m=0}^{N-1} S_A(m) e^{\frac{2\pi i}{N} m \cdot l}. \quad (4.1)$$

Dabei ist  $m$  die äquidistante Nummerierung der Messwerte des Spektrums beginnend bei 0,  $l$  die Nummerierung des XCT-Signals beginnend bei 0 und  $N$  die Anzahl der Messpunkte. Um das XCT-Signal in Abhängigkeit der Tiefe der reflektierenden Grenzschichten im Vergleich zur Deckschicht (vgl. Kap. 2.3) zu erhalten, muss ein Zusammenhang zwischen der Nummerierung der Frequenzen  $l$  und der Tiefendifferenz  $d_{ij} = z_i - z_j$  gefunden werden.

Sei  $\Delta\omega_m$  der Abstand zwischen zwei Messpunkten (äquidistante Messwertverteilung vorausgesetzt), so ergibt sich die diskrete Variante des in Gleichung (2.9) hergeleiteten Spektrums zu:

$$S_A(m) = S_0[m\Delta\omega_m] \left\{ R_{\text{ges}} + \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \cos \left[ \frac{2\pi}{N} m \frac{N\Delta\omega_m 2n_D \sin \alpha_D}{2\pi c} d_{ij}(l) \right] \right\} \quad (4.2)$$

Bei der Berechnung der DFT, also dem Einsetzen von Gleichung (4.2) in Gleichung (4.1), wird der Zusammenhang zwischen der gesuchten diskreten Tiefenvariable  $d_{ij}(l)$  und der Nummerierung der DFT Frequenzen  $l$  offensichtlich:

$$d_{ij}(l) = l \frac{\pi c}{N\Delta\omega_m n_D \sin \alpha_D} \quad (4.3)$$

Die Indices  $i$  und  $j$  machen noch einmal deutlich, dass es sich bei der Tiefenkoordinate  $d_{ij}$  um Differenzen handelt und tatsächliche Schichttiefen sich immer auf die Oberfläche der Probe beziehen müssen ( $d_{i1}$ ).

#### 4.1.1 Anzahl der Diskretisierungsschritte

Wird  $N\Delta\omega_m = \omega_{\text{max}}$  konstant gehalten und  $N$  erhöht, so steigt die maximal darstellbare Tiefe. Das gemessene Spektrum ist außerdem reell. Damit gilt, wie aus Gleichung (4.1) ersichtlich, für die DFT

Amplituden  $X(l)$ :

$$X(N - l) = X(-l) = X^*(l) \quad (4.4)$$

Daher sind im XCT-Signal nur  $N/2$  unabhängige Tiefen  $d_{ij}(l)$  vorhanden. Um die Tiefe  $d_{ij\max}$  als unabhängige Komponente im XCT-Signal darzustellen, muss demnach die Bedingung

$$N > 2d_{ij\max} \frac{\omega_{\max} n_D \sin \alpha_D}{\pi c} \quad (4.5)$$

erfüllt sein. Diese Bedingung wird als Nyquist-Shannon-Kriterium bezeichnet.

### 4.1.2 „Zero-Padding“

Der Abstand zwischen zwei durch die DFT berechneten Tiefen ist antiproportional zur maximalen Frequenz  $\omega_{\max}$ , bis zu der das Spektrum diskretisiert ist. Die maximal detektierbare Frequenz ist durch das Messverfahren begrenzt. Jedoch ist es möglich, den Abstand zwischen zwei DFT Frequenzen beliebig zu verringern, indem  $\omega_{\max}$  in der Diskretisierung entsprechend erhöht wird und das Signal der nicht gemessenen hohen Frequenzen durch Nullen dargestellt wird. Diese Methode wird „Zero-Padding“ genannt. Es ist sinnvoll,  $\omega_{\max}$  so groß zu wählen, dass der Abstand zwischen zwei diskreten Tiefen viel kleiner ist als die zu erwartende physikalisch begrenzte Auflösung der Messmethode.

### 4.1.3 Fensterfunktionen

Durch das „Zero-Padding“ kommt es an den Rändern des spektralen Fensters zu einem stufenartigen Abfall. Die Fourier-Transformation einer Rechteckfunktion ist eine sinc-Funktion, sodass neben dem Hauptmaximum weitere Nebenmaxima in der Fourier-Transformation auftauchen. Dies führt dazu, dass im XCT-Signal zusätzlich zu sämtlichen zu einer Schicht gehörenden Maxima auch deren Nebenmaxima vorhanden sind. Dies kann zu Fehlinterpretationen des XCT-Signals und weiteren Scheintiefen führen. Um die Höhe der Nebenmaxima zu reduzieren, können vor der Fourier-Transformation Fensterfunktionen auf das Spektrum angewendet werden, sodass das Spektrum an den Rändern flacher und weniger sprunghaft gegen null geht. Je flacher das Spektrum an den Rändern abfällt, desto stärker werden die Nebenmaxima unterdrückt. Es verringert sich dadurch allerdings die effektiv nutzbare Bandbreite und damit die erreichbare Auflösung. Daher muss ein Kompromiss zwischen der Stärke der Unterdrückung der Nebenmaxima und der Auflösung eingegangen werden [5], [22].

## 4.2 XCT mit dispersiven Proben

In Kapitel 1.3.2 wurde das FD-OCT Signal unter der Bedingung hergeleitet, dass die gesamte Probe mit  $n = 1 = \text{konst.}$  nicht dispersiv sei (siehe Gl. (1.62)). Die Absorptionseigenschaften der Probe konnten außerdem nach Gleichung (1.68) in den Reflektivitätskoeffizienten  $R_i$  zusammengefasst werden. In Kapitel 2.3.2 wurde gezeigt, wie das Tiefenprofil der Probe aus dem XCT-Signal rekonstruiert werden kann. Die Probe wurde hier als schichtweise nicht dispersiv mit  $n_i = \text{bel.} = \text{konst.}$  angenommen.

Im Allgemeinen sind Materialien jedoch dispersiv. Sowohl die Reflektivitäten der einzelnen Grenzschichten, als auch die Brechungswinkel und die optischen Wege in den Schichten sind Funktionen der Wellenlänge bzw. der Photonenenergie. Um die Reflektivität einer dispersiven Probe exakt zu berechnen, muss der Matrixformalismus (siehe Kap. 1.1.1) angewendet werden, der alle zu berücksichtigenden Effekte enthält. In Anhang A.5 ist diese Rechnung exemplarisch für eine Schicht durchgeführt. Die Abhängigkeit der Reflektivität von den Schichtdicken ist nicht mehr in unabhängigen Summanden von Kosinusfunktionen gegeben. Daher lässt sich das Tiefenprofil streng genommen nicht mehr mit der FD-OCT Methode, sprich einer Fourier-Transformation rekonstruieren. Es lässt sich jedoch zeigen, dass, unter einigen Näherungen und Gültigkeitsbedingungen, die für FD-OCT Rekonstruktion benötigte

Form der Abhängigkeit von den Schichtdicken wieder hergestellt werden kann. Diese Rechnung ist in Anhang A.5.1 exemplarisch ausgeführt. Das reflektierte Spektrum ergibt sich damit zu:

$$S_A(\omega) = S_0(\omega) \left\{ R_{\text{ges}}(\omega) + 2 \sum_{i>j=1}^N \sqrt{R_i(\omega)R_j(\omega)} \right. \\ \left. \times \cos \left[ \omega \sum_{m=j}^{i-1} \frac{2n_m(\omega)(z_{m+1} - z_m) \sin \alpha_m(\omega)}{c} \right] \right\} \quad (4.6)$$

Die Absorption ist weiterhin in den Koeffizienten  $R_i(\omega)$  zusammengefasst. Neben dem Spektrum der Lichtquelle hängen nun auch sämtliche Reflektivitäten und die Frequenz der Kosinusschwingungen von  $\omega$  ab.

#### 4.2.1 Einfluss der Dispersion auf die Auflösung

Für die Analyse des Einflusses der Dispersion auf die Auflösung der XCT, ist es nützlich das XCT Signal einer einzelnen Schicht zu betrachten. Der Vorderseitenreflex  $R_1$  interferiert dann nur mit dem Rückseitenreflex  $R_2$ :

$$S_A(\omega) = S_0(\omega) \left\{ R_{\text{ges}}(\omega) + 2\sqrt{R_1(\omega)R_2(\omega)} \cos \left[ \omega \frac{2n_1(\omega)(z_2 - z_1) \sin \alpha_1(\omega)}{c} \right] \right\} \quad (4.7)$$

Das XCT Signal ergibt sich einfach aus der Fourier-Transformation von (4.7).

$$\text{FT}[S_A(\omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \\ = \text{FT}[R_{\text{ges}}(\omega)] \otimes \text{FT}[S_0(\omega)] + 2\text{FT} \left[ \sqrt{R_1(\omega)R_2(\omega)} \right] \\ \otimes \left\{ \text{FT}[S_0(\omega)] \otimes \text{FT} \left[ \cos \left( \omega \frac{2n_1(\omega)(z_2 - z_1) \sin \alpha_1(\omega)}{c} \right) \right] \right\} \quad (4.8)$$

Dabei ist  $\otimes$  die Faltung in  $\tau$ :

$$f(\tau) \otimes g(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau') g(\tau - \tau') d\tau' \quad (4.9)$$

Für nicht dispersive Medien ist die Fourier-Transformation des Kosinusterns gleich der  $\delta$ -Distribution und die Reflektivitäten sind konstante Terme. Die  $\delta$ -Distribution wird mit der Fourier-Transformation des Spektrums der Lichtquelle, sprich deren Kohärenzfunktion gefaltet und dadurch verbreitert. Wie in Kapitel 1.3.2 dargestellt, ist die Auflösung dadurch nur vom Spektrum der Lichtquelle abhängig. Gleichung 4.8 zeigt, dass das Spektrum nicht mehr nur mit einer einzigen spektralen Frequenz moduliert ist. Durch die im Allgemeinen nichtlineare Abhängigkeit der Modulationsfrequenz von  $\omega$  ist es „gechirpt“. Aufgrund der durch den „Chirp“ hinzukommenden Modulationsfrequenzen verbreitert sich das XCT-Signal und die Auflösung kann sich signifikant verschlechtern. Zusätzlich wird das XCT-Signal durch die Faltung mit der Fourier-Transformation der Reflektivitäten verbreitert, was die Auflösung ebenfalls vermindert. Im dispersiven Fall hängt die Auflösung also nicht mehr allein vom Spektrum der Lichtquelle ab, sondern auch von den Eigenschaften der zu untersuchenden Probe.

#### 4.2.2 Korrektur- und Verbesserungsmöglichkeiten

Die in Kapitel 4.2.1 für eine einzelne Schicht dargestellten Verbreiterungsmechanismen gelten selbstverständlich auch für Mehrschichtsysteme. Das XCT-Signal ist die Fourier-Transformation von

Gleichung (4.6). Wäre die Dispersion und die Dicke jeder Schicht vollständig bekannt, ließe sich das XCT-Signal von den dispersiven Verbreiterungen entfalten und die durch das Spektrum der Lichtquelle definierte Auflösung erreichen. Da aber das Ziel der XCT genau darin besteht, die Struktur einer Probe zu bestimmen, ist die vorherige Kenntnis der Strukturinformationen paradox. Insofern kann die theoretische Auflösung für nicht dispersive Materialien im Experiment nicht erreicht werden. Die Auflösung kann aber dennoch verbessert werden, indem die vorher tatsächlich bekannten Informationen über die Probe und die Lichtquelle mit in die Auswertung des XCT-Signals einfließen.

### Entfaltung des XCT-Signals vom Spektrum der Lichtquelle

Innerhalb der Begrenzungen des spektralen Fensters lässt sich durch ein „Top-Hat“-artiges Quellspektrum, dessen Fourier-Transformation eine sinc-Funktion ist, die beste Auflösung hinsichtlich der FWHM-Breite des nullten Maximums der Funktion erreichen [22]. Weicht das Spektrum der Lichtquelle von dieser idealen Form ab, verringert sich die Auflösung der XCT. Wenn der Verlauf des Quellspektrums jedoch bekannt ist, zum Beispiel durch eine zusätzliche Messung, so kann das XCT-Signal von diesem Spektrum entfaltet werden und die Auflösung eines „Top-Hat“-artigen Quellspektrums zurückgewonnen werden. Die Entfaltung ist am einfachsten auszuführen, indem das reflektierte Spektrum durch das Spektrum der Lichtquelle geteilt wird. Das so erhaltene Signal entspricht der spektralen Reflektivität  $R_A(\omega)$  der Probe. Mit  $\omega_{\min}$  und  $\omega_{\max}$  der linken und rechten Begrenzung des spektralen Fensters und

$$\Theta(\omega, \omega_{\min}, \omega_{\max}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \omega_{\min} \leq \omega \leq \omega_{\max} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.10)$$

gilt:

$$R_A(\omega) = \frac{S_A(\omega)}{S_0(\omega)} = \Theta(\omega, \omega_{\min}, \omega_{\max}) \left\{ R_{\text{ges}}(\omega) + 2 \sum_{i>j=1}^N \sqrt{R_i(\omega)R_j(\omega)} \times \cos \left[ \omega \sum_{m=j}^{i-1} \frac{2n_m(\omega)(z_{m+1} - z_m) \sin \alpha_m(\omega)}{c} \right] \right\} \quad (4.11)$$

### Entfaltung des XCT-Signals vom Verlauf der Reflektivitäten

Da sich im XUV-Bereich die Brechzahlen der verwendeten Materialien und deren spektrale Verläufe nur wenig unterscheiden ( $n \approx 1$ ), ist es möglich, wie in Kapitel 2.3.2 gezeigt, die Brechzahlen  $n_m(\omega)$  durch die Brechzahl des dominanten Materials der Probe  $n_D(\omega)$  anzunähern. Wenn das Material bekannt ist, aus dem die Probe hauptsächlich besteht, kann  $n_D(\omega)$  mit der Datenbank [6] ermittelt werden.

Aufgrund der Ähnlichkeit der Brechzahlverläufe gleichen sich außerdem die Verläufe der Reflektivitäten der einzelnen Grenzschichten. Sie fallen im Allgemeinen exponentiell mit zunehmender Photonenenergie ab. Der Einfluss auf die Auflösung kann verringert werden, indem das XCT-Signal vom groben Verlauf  $R_g(\omega)$  der gemessenen Reflektivität entfaltet wird. Diese Entfaltung kann wiederum durch die Gewichtung der Reflektivitäten im Spektrum erreicht werden. Die gewichteten Reflektivitäten der einzelnen Grenzschichten können dann als schwach von  $\omega$  abhängig betrachtet werden.

$$R_{i,g}(\omega) = \frac{R_i(\omega)}{R_g(\omega)} \approx \text{konst.} \quad (4.12)$$



$$R_{A,g}(\omega) = \frac{R_A(\omega)}{R_g(\omega)} \simeq \Theta(\omega, \omega_{\min}, \omega_{\max}) \left\{ R_{\text{ges},g}(\omega) + 2 \sum_{i>j=1}^N \sqrt{R_{i,g}(\omega)R_{j,g}(\omega)} \right. \\ \left. \times \cos \left[ \omega \frac{2n_D(\omega) \sin \alpha_D(\omega)}{c} (z_i - z_j) \right] \right\} \quad (4.13)$$

### Transformation in den $k$ -Raum

Für die Korrektur des Verbreiterungseffektes durch den nichtlinearen „Chirp“, kann eine Koordinaten-Transformation von  $R_{A,g}(\omega)$  ausgeführt werden. Die Transformationsvorschrift lautet:

$$k_D = k_D(\omega) = \omega \frac{2n_D(\omega) \sin \alpha_D(\omega)}{c} \quad (4.14)$$

Aufgrund der nicht-trivialen Abhängigkeit von  $\omega$  ist die Umkehrtransformation, die für die Transformation aller  $\omega$ -abhängigen Terme in Gleichung (4.13) nötig ist, nicht analytisch darstellbar. Außerdem sind die Verläufe der  $R_{i,g}(\omega)$  nicht bekannt. Da jedoch durch die beiden vorherigen Korrekturen - neben der trivial zu transformierenden Funktion  $\Theta$  - nur noch schwach von  $\omega$  abhängige Terme existieren, können diese Terme näherungsweise als konstant angesehen werden. Das korrigierte und transformierte Spektrum ergibt sich dann zu:

$$R_{A,g}(k_D) \simeq \Theta(k_D, k_{D,\min}, k_{D,\max}) \left\{ R_{\text{ges},g}(k_D) + 2 \sum_{i>j=1}^N \sqrt{R_{i,g}(k_D)R_{j,g}(k_D)} \cos [k_D(z_i - z_j)] \right\} \quad (4.15)$$

Die Fourier-Transformation, die nötig ist um das XCT-Signal zu erhalten, muss nun in  $k_D$  statt in  $\omega$  ausgeführt werden. Für den diskreten Fall und äquidistante Messpunkte mit dem Abstand  $\Delta k_{D,m}$  gilt nun für die Tiefen analog zu Gleichung 4.3:

$$d_{ij}(l) = l \frac{2\pi}{N \Delta k_{D,m}} \quad (4.16)$$

### Fensterfunktion

Wie in Kapitel 4.1.3 beschrieben, lassen sich unerwünschte Nebenmaxima im XCT-Signal unterdrücken, indem die korrigierte Reflektivität noch mit einer Fensterfunktion  $F(k_D)$  gewichtet wird.

$$R_{A,g,F}(k_D) = F(k_D) \cdot R_{A,g}(k_D) \quad (4.17)$$

Als Fensterfunktion wurde das variable Kaiser-Bessel-Fenster verwendet [22].

$$F(k_D) = \begin{cases} \frac{I_0 \left[ \beta \sqrt{1 - \left( \frac{2(k_D - \gamma)}{\eta} \right)^2} \right]}{I_0(\beta)} & \text{für } k_{D,\min} \leq k_D \leq k_{D,\max} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.18)$$

Dabei ist  $\eta = k_{D,\max} - k_{D,\min}$  und  $\gamma = (k_{D,\max} + k_{D,\min})/2$ .  $I_0$  ist die modifizierte Besselfunktion.  $\beta$  ist ein frei wählbarer Parameter. Für  $\beta = 0$  entspricht die Funktion einem rechteckigen Fenster. Je größer  $\beta$  ist, desto stärker werden Nebenmaxima unterdrückt und desto schlechter wird die erreichbare Auflösung.

### 4.2.3 Verbleibende auflösungsvermindernde Effekte

Infolge der durchgeführten Näherungen und der Abhängigkeit der einzelnen Reflektivitäten von  $k_D$  kann die theoretisch mögliche Auflösung trotz der Korrekturen nicht erreicht werden. Der Einfluss der



ebenfalls frequenzabhängigen Absorption, die in den  $R_{i,g}(k_D)$  zusammengefasst ist, kann aufgrund der Abhängigkeit von der Tiefe der jeweiligen Schichten (siehe Gl. (1.68)) nicht durch Entfaltung korrigiert werden. Die Näherungen der Brechzahlen führen neben der Verschlechterung der Auflösung auch zu einem systematischem Fehler in der nach Gleichung (4.16) berechneten Tiefe (siehe auch Kap. 4.5.1). Durch die Verwendung von Fensterfunktionen wird die Auflösung ebenfalls vermindert. In Anhang B.1 sind die Auswirkungen der verschiedenen Korrekturen auf die Auflösung der XCT für ein simuliertes Spektrum einer einzelnen Schicht beispielhaft dargestellt.

### 4.3 Messung des reflektierten Spektrums

Das experimentelle Vorgehen zur Messung der Rohdaten sowie deren Nachbearbeitung unterschieden sich je nach gewähltem Messverfahren. Die an den Proben reflektierten Spektren wurden mit zwei unterschiedlichen Verfahren aufgenommen.

#### 4.3.1 „Swept-Source“-XCT

Bei der Durchführung von SS-XCT wurden der Undulator und der Monochromator des Strahlrohres genutzt, um die Wellenlänge bzw. die Photonenenergie der Strahlung einzustellen. Dabei konnten die Standardprozeduren genutzt werden, um den Abstand der periodischen Magnetanordnungen des Undulators und den Monochromator automatisiert aufeinander abzustimmen. Die Photonenenergie konnte bis zu einer Genauigkeit von  $\approx 10^{-3}$  eV eingestellt werden (siehe Kap. 3.3). Aufgrund der Anschaulichkeit wurde die gesamte Auswertung und Messung der Spektren in Abhängigkeit der Photonenenergie  $\mathcal{E}_m$  in Elektronenvolt durchgeführt, welche linear mit der Frequenz  $\omega$  zusammenhängt:

$$\mathcal{E}_m[\text{eV}] = \frac{\hbar}{q}\omega \quad (4.19)$$

Das zu untersuchende spektrale Fenster wurde diskretisiert. Die Anzahl  $N$  der Diskretisierungspunkte wurde so gewählt, dass die maximal zu erwartende Tiefe noch aufgelöst werden konnte (siehe Gl. (4.5)). Jede der  $N$  Photonenenergien  $\mathcal{E}_m$  wurde einzeln eingestellt und jeweils die Intensität der reflektierten monochromatischen Strahlung mit einer XUV-Photodiode oder der CCD-Kamera des Spektrometers gemessen.

#### Photodiode

Bei SS-XCT mit XUV-Photodiode wird das Spektrometer nicht benötigt. Der Einfallswinkel konnte frei eingestellt werden, da die konstruktionsbedingte Beschränkung durch das fest angebrachte Spektrometer wegfiel. Die Entfernung zur Oberfläche der Probe wurde so gewählt, dass der reflektierte, divergente Strahl vollständig auf der nutzbaren Diodenfläche lag. Der Spalt diente zur Begrenzung des Photonenflusses auf der Diode, um diese immer unterhalb der Sättigung zu betreiben. Gemessen wurde die verstärkte Spannung  $U_D(\mathcal{E}_m)$  des integrierten Strom-Spannungswandlers der Diode. Um das Spektrum (4.20) zu erhalten, müssen die Sensitivität der Diode  $SE_D(\mathcal{E}_m)$ , die Diodenfläche  $A_D$  und der Diskretisierungsabstand  $\Delta\mathcal{E}_m(\mathcal{E}_m)$  einbezogen werden (siehe Kapitel 1.2.4). Die Sensitivität gibt an, in welchem Verhältnis die gemessene Spannung zur einfallenden Lichtleistung steht. Sie ist im Allgemeinen eine Funktion der Photonenenergie und abhängig von der Quanteneffizienz und der Spannungsverstärkung der Diode.

$$S_A(\mathcal{E}_m) = \frac{U_D(\mathcal{E}_m)}{SE_D(\mathcal{E}_m)A_D\Delta\mathcal{E}_m} \quad (4.20)$$

### CCD-Kamera

Die CCD-Kamera des Spektrometers wurde ebenfalls als Intensitätsdetektor für SS-XCT verwendet. Aufgrund der festen Spektrometerposition konnte der Einfallswinkel von  $75^\circ$  zur Probenoberfläche nicht geändert werden. Die reflektierte monochromatische Strahlung wird durch den toroidalen Spiegel des Spektrometers und das Gitter auf die Kamera abgebildet. In jedem Pixel der CCD-Kamera wird die in der Belichtungszeit deponierte Strahlungsenergie in Ladungsträger umgewandelt. Die Ladungsträgeranzahl wird dann mit einem Analog-Digital-Wandler in Counts umgerechnet. Es sinnvoll die Counts aller beleuchteten Pixel der ersten und minusersten Beugungsordnung des Gitters aufzaddieren, um ein höheres Messsignal und ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis zu erreichen. Ein Rohdatenbild der CCD-Kamera ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Analog zur Messung mit der Diode müssen die Integrationsfläche, also der Anzahl der aufaddierten Pixel  $n_{\text{px}}$  multipliziert mit deren Fläche  $A_{\text{px}}$ , die Belichtungszeit  $t_{\text{bel}}$ , der Umwandlungseffizienz  $UE_S(\mathcal{E}_m)$  des Spektrometers und der Diskretisierungsabstand der Photonenenergien  $\Delta\mathcal{E}_m(\mathcal{E}_m)$  einbezogen werden, um das Spektrum zu erhalten. Die Umwandlungseffizienz gibt das Verhältnis zwischen Counts und eingestrahelter Lichtenergie an [4],[16]. Wenn  $C(\mathcal{E}_m)$  die Summe der Counts in der ersten und minusersten Beugungsordnung in Abhängigkeit der eingestellten Photonenenergie ist, berechnet sich das Spektrum zu:

$$S_A(\mathcal{E}_m) = \frac{C(\mathcal{E}_m)}{UE_S(\mathcal{E}_m)t_{\text{bel}}n_{\text{px}}A_{\text{px}}\Delta\mathcal{E}_m} \quad (4.21)$$

Grundsätzlich diene der Spalt auch bei dieser Messmethode lediglich zur Begrenzung des maximalen Photonenflusses. Bei kleinen Spaltbreiten konnte jedoch die Position der ersten und minusersten Beugungsordnung in Abhängigkeit der eingestellten Photonenenergie des Strahlrohres auf eine Pixelbreite genau bestimmt werden. Mit Hilfe dieser Daten konnte die spektrale Funktion des Spektrometers, also der Abstand der ersten zur nullten Beugungsordnung in Abhängigkeit der Photonenenergie interpoliert werden (siehe Anhang C.1).

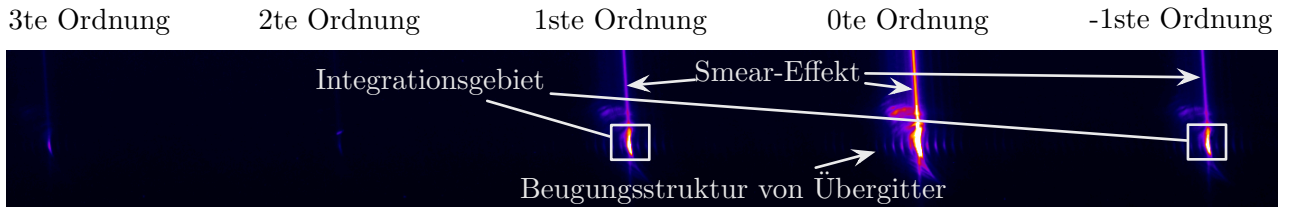


Abbildung 4.1: Rohdatenbild von SS-XCT mit CCD-Kamera an Probe 1-7 bei 79 eV: Das Bild wurde bereits so gedreht, dass die dispersive Ebene in horizontaler Richtung liegt. Die nullte, erste und minuserste Beugungsordnung des 1000 Linien/mm Goldgitters sind deutlich zu erkennen. Höhere Ordnungen treten wesentlich schwächer auf. Das Gebiet in dem alle Counts aufaddiert werden, ist mit weißen Rechtecken markiert. Die Unterstruktur, die besonders bei der nullten Beugungsordnung zu erkennen ist, stammt vom Übergitter bzw. der Trägerstruktur des Goldgitters (siehe auch Kap. 4.5.3). Da in der Auslesezeit des CCD-Chips weiterhin belichtet wird, kommt es zu sogenannten „Smear“-Effekten.

#### 4.3.2 „Spectrometer-based“-XCT

Wie in Kapitel 3.3 beschrieben, sollte mit Hilfe des Monochromators eine der SD-XCT gleichwertige Messung durchgeführt werden. Dazu sollte die Photonenenergie der Strahlung während der Belichtungszeit der CCD-Kamera von der niedrigsten bis zur höchsten Energie des gewünschten spektralen Fensters durchgeföhren werden. Während des Experimentes an BW3 stellte sich jedoch heraus, dass dieses Strahlrohr auch kontinuierliche, breitbandige und intensive Strahlung bereitstellen kann, sodass SD-XCT direkt ausgeführt werden konnte. Dazu war es nötig, den Monochromator so einzustellen, dass dessen nullte Beugungsordnung transmittiert wurde. Diese Einstellung war bereits zur Erzeugung von sichtbarem, weißen Licht für die Justage bekannt. Anhand des reflektierten Spektrums einer

reinen Siliziumoberfläche und der bekannten Reflektivität von Silizium, konnte das Spektrum dieser breitbandigen Strahlung rekonstruiert werden. Bei einem Abstand der periodischen Magnetstrukturen des Undulators von 120 mm war das abgestrahlte Spektrum homogen, artefakt- und modulationsfrei und damit optimal geeignet, um SD-XCT direkt durchzuführen. Das Rohdatenbild dieses Spektrums ist in Abb. 4.4 dargestellt.

Um das Spektrum aus dem Rohdatenbild zu erhalten, muss zunächst die Position der nullten Ordnung bestimmt werden. Mit Hilfe der spektralen Funktion des Spektrometers für die erste bzw. minuserste Beugungsordnung (siehe Anhang C.1) kann dann jedem Pixel anhand des Abstandes zur nullten Ordnung eine Photonenenergie  $\mathcal{E}_m$  und eine Photonenenergiebreite  $\Delta\mathcal{E}_m(\mathcal{E}_m)$  (definiert durch die Ausdehnung des Pixels in der dispersiven Ebene und abhängig von der Photonenenergie) zugewiesen werden. Für die Erhöhung des Messsignals und des Signal-Rausch-Verhältnisses, können die Counts mehrerer Pixel in einer Pixelreihe senkrecht zur dispersiven Richtung aufaddiert werden. Bei zu großen Integrationsbereichen um das Zentrum der Beugungsstruktur, verringert sich jedoch die spektrale Auflösung, weil dann stärker aberrierte Randbereiche der Abbildungsfunktion des toroidalen Spiegels mit zum Signal beitragen. Die spektrale Diskretisierung ist allerdings durch die Pixelbreite und die spektrale Funktion des Spektrometers festgelegt und ist nicht äquidistant. Das Spektrum errechnet sich analog zu Gleichung (4.21), wobei der Diskretisierungsabstand selbst eine Funktion der Photonenenergie ist.

$$S_A(\mathcal{E}_m) = \frac{C(\mathcal{E}_m)}{UE_S(\mathcal{E}_m)t_{\text{bel}}n_{\text{px}}A_{\text{px}}\Delta\mathcal{E}_m(\mathcal{E}_m)} \quad (4.22)$$

Die maximale Tiefe, die noch aufgelöst werden kann, ist nicht wie bei SS-XCT durch den Diskretisierungsabstand, sondern durch Ausdehnung des Fokus in der dispersiven Ebene auf der Probe bestimmt. Der Diskretisierungsabstand stellt daher lediglich eine obere Grenze für die erreichbare spektrale Auflösung dar. Die Fokusaussdehnung wurde mit dem Spalt so eingestellt, dass die maximal zu erwartende Tiefe noch aufgelöst werden konnte. Um die Störungen durch ebenfalls aus dem Strahlrohr emittiertes, sichtbares Licht zu minimieren, konnte ein Aluminiumfilter oder ein Zirkonfilter vor den Spektrometereingang gebracht werden. Diese Filter sind nur für XUV-Strahlung eines bestimmten Energiebereiches und nicht für sichtbares Licht transparent. Da die Filter aber die Bandbreite der nutzbaren Strahlung und damit die Auflösung der XCT verringern, wurde weitgehend auf deren Einsatz verzichtet. Stattdessen wurde eine zusätzliche Messung mit geschlossenem Quarzglas-Fensterschieber ausgeführt. Dadurch war es möglich, allein das sichtbare Licht im Spektrometer zu detektieren, weil die XUV-Strahlung vom Fenster absorbiert wurde. Dieser Weißlicht-Hintergrund wurde dann pixelweise vom ursprünglichen Messsignal abgezogen. Da einige Messreihen sowohl mit, als auch ohne Filter durchgeführt wurden, konnte zusätzlich die spektrale Transmission der Filter ermittelt werden (siehe Anhang C.2).

### 4.3.3 Normierung auf Ringstrom

Sowohl BESSY II als auch DORIS III wurden in einem Modus betrieben, bei dem nach einer gewissen Zeit (einige Stunden) neue Ladungsträger in den Speicherring injiziert wurden, um die Verluste bei der Führung der Ladungsträger im Synchrotron auszugleichen. Zwischen zwei Injektionen nahm deshalb der Strom im Synchrotron (Ringstrom) und damit auch der Photonenfluss des Strahlrohres zeitlich ab. Da der Photonenfluss aber proportional zum Ringstrom ist (siehe Kap. 1.5.3), konnten alle gemessenen Signale auf den Ringstrom  $I_R$  zum jeweiligen Messzeitpunkt normiert werden.

### 4.3.4 Aufnahme eines Referenzspektrums

Für die Entfaltung des gemessenen Spektrums von den spektralen Eigenschaften der Lichtquelle, muss das Spektrum der Lichtquelle bekannt sein (siehe Kap. 4.2.2). Daher wurde zusätzlich zu jeder Messung eine Referenzmessung an einer reinen Siliziumoberfläche auf dem nur stückweise beschichteten Wafer durchgeführt. Da die Reflektivität von Silizium bekannt ist, kann das Spektrum der Lichtquelle

rekonstruiert werden. Dabei wird der Einfluss der Reflektivität des ersten toroidalen Spiegels mit berücksichtigt.

## 4.4 Signalverarbeitung und Auswertungsroutine

Aufgrund der Komplexität der Auswertungsroutinen, können nicht alle Schritte bei allen ausgewerteten XCT-Messungen detailliert beschrieben und gezeigt werden. Da die Auswertungsroutine aber für alle Messungen analog verläuft, wird in diesem Kapitel das Vorgehen exemplarisch für eine einzelne Messung an der Probe 1+2 im SD-XCT Verfahren im Silizium-Transmissionsfenster demonstriert. Auf den Siliziumwafer ist eine 5 nm Goldschicht aufgebracht, die von einer 140 nm dicken Siliziumschicht bedeckt ist. Als hochreflektierende Deckschicht dient ebenfalls eine 5 nm Goldschicht. Der Einfallswinkel betrug  $74,8^\circ \pm 1^\circ$  zur Probenoberfläche. Die Messung wurde an BW3 mit p-Polarisation durchgeführt. Der Magnetabstand des Undulators betrug 120 mm und die Spaltbreite war  $50 \mu\text{m} \pm 25 \mu\text{m}$ .

### 4.4.1 Messsignal

In Abbildung 4.2 ist das Rohdatenbild der CCD-Kamera gezeigt. Die Anteile des sichtbaren weißen Lichtes wurden bereits abgezogen. Die Modulationen im Spektrum sind eindeutig zu erkennen. Die Belichtungszeit betrug 10 s und der Ringstrom zum Messzeitpunkt 128 mA. Die Position der nullten

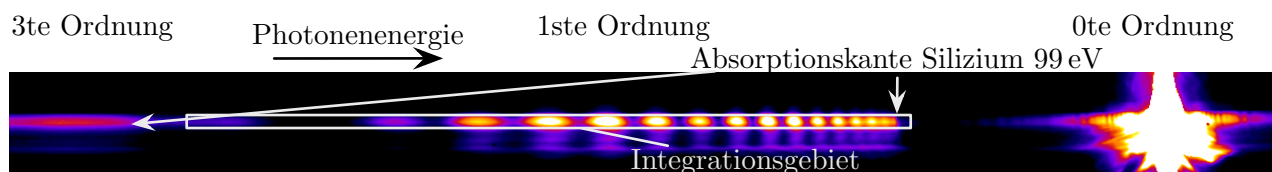


Abbildung 4.2: Rohdatenbild der CCD-Kamera bei SD-XCT an Probe 1+2: Das Bild wurde bereits so gedreht, dass die dispersive Ebene in horizontaler Richtung liegt. Die Belichtungszeit betrug 10 s. In der ersten Beugungsordnung sind deutlich die erwarteten Modulationen zu erkennen. Das Gebiet in dem alle Counts aufaddiert wurden, ist mit einem weißen Rechteck markiert. Der Bereich wurde so gewählt, dass der Einfluss der dritten Beugungsordnung vernachlässigt werden kann. Der Einfluss der zweiten Beugungsordnung kann ebenfalls vernachlässigt werden, weil sie wesentlich schwächer auftritt, als die geraden Ordnungen. Der Abstandes jeder vertikalen Pixelreihe zur Position der nullten Beugungsordnung kann mit Hilfe der Spektrometerkalibrierung einer Photonenergie zugeordnet werden. Die Absorptionskante von Silizium bei 99 eV ist deutlich zu erkennen.

Beugungsordnung konnte anhand der Symmetrie der ersten und minusersten Beugungsordnung auf ein Pixel genau auf der horizontalen Achse festgelegt werden. Anhand dieser Position kann mit Hilfe der spektralen Funktion des Spektrometers (siehe Kap. C.1) die Photonenergie und die Photonenergiebreite für jede vertikale Pixelreihe festgelegt werden. Die verwendete spektrale Funktion des Spektrometers bezieht sich nur auf die erste bzw. minuserste Beugungsordnung. Da die Reflektivität der Probe an der oberen Grenze des spektralen Fensters bei 99 eV mit steigender Photonenergie steil abfällt und dann gering bleibt, kann diese Kante genutzt werden um die höheren Beugungsordnungen zu identifizieren. Dabei stellte sich heraus, dass bei siliziumbasierten Proben die Kante bei 99 eV der dritten Beugungsordnung bei ca. 31 eV der ersten Beugungsordnung liegt (siehe Abb. 4.2) und demnach im relevanten Photonenergiebereich der Einfluss der höheren Beugungsordnungen vernachlässigt werden kann. Abbildung 4.3 zeigt die Counts  $C$  der in vertikaler Richtung aufaddierten Pixel aus dem markierten Bereich des Rohdatenbildes 4.2 in Abhängigkeit der errechneten Photonenergie und normiert auf den Ringstrom  $I_R$  und das Photonenergieintervall des jeweiligen Pixels:

$$C_{\text{gew}}(\mathcal{E}_m) = \frac{C(\mathcal{E}_m)}{I_R \Delta \mathcal{E}_m(\mathcal{E}_m)} \quad (4.23)$$

Nach Gleichung (4.22) kann aus  $C_{\text{gew}}(\mathcal{E}_m)$  das Spektrum berechnet werden.

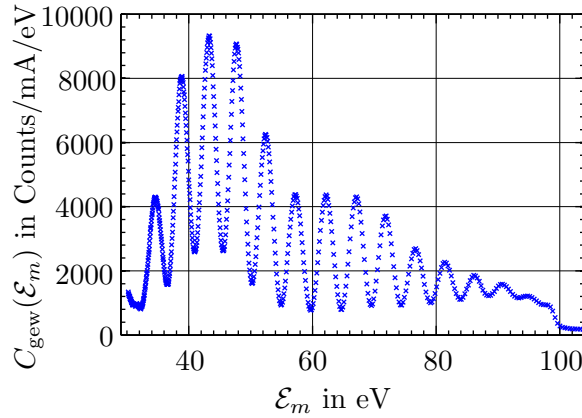


Abbildung 4.3: Aufaddierte und normierte Counts  $C_{\text{gew}}(\mathcal{E}_m)$  des markierten Bereiches im Rohdatenbild 4.2 von Probe 1+2 in Abhängigkeit der Photonenenergie

#### 4.4.2 Referenzsignal

Wie in Kapitel 4.3.4 beschrieben, konnte das Spektrum der Quelle aus dem gemessenen reflektierten Spektrum einer reinen Siliziumoberfläche rekonstruiert werden. Die Berechnung des Signals der Referenzmessung verlief analog zu Kap. 4.4.1. Die Messung wurde mit den selben Parameter durchgeführt. Nur die Belichtungszeit von 60 s und der Ringstrom von 124,1 mA waren unterschiedlich. Das Rohdatenbild der CCD-Kamera ist in Abbildung 4.4 gezeigt. Auf der linken Seite in Abbildung 4.5 sind die



Abbildung 4.4: Rohdatenbild der CCD-Kamera bei SD-XCT auf reiner Siliziumoberfläche: Das Bild wurde bereits so gedreht, dass die dispersive Ebene in horizontaler Richtung liegt. Die Belichtungszeit betrug 60 s. Das Gebiet in dem alle Counts aufaddiert wurden, ist mit einem weißen Rechteck markiert. Der Bereich wurde so gewählt, dass der Einfluss der dritten Beugungsordnung vernachlässigt werden kann. Der Abstandes jeder vertikalen Pixelreihe zur Position der nullten Beugungsordnung kann mit Hilfe der Spektrometerekalibrierung einer Photonenenergie zugeordnet werden. Das Spektrum ist nicht moduliert. Die Absorptionskante von Silizium bei 99 eV ist deutlich zu erkennen.

aufaddierten Counts  $C^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})$ , gewichtet mit dem Ringstrom, der Photonenenergiebreite des jeweiligen Pixels und der Reflektivität von Silizium dargestellt. Die theoretische Reflektivität von Silizium wurde mit dem Matrixformalismus und der Datenbank [6] für den entsprechenden Einfallswinkel, die Polarisation und die Energie  $\mathcal{E}_m^{\text{Ref}}$  berechnet und ist in in Abbildung 4.5 rechts dargestellt.

$$C_{\text{gew}}^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}}) = \frac{C^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})}{R_{\text{Si}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}}) I_R^{\text{Ref}} \Delta \mathcal{E}_m^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})} \quad (4.24)$$

Mit Gleichung (4.22) kann aus  $C_{\text{gew}}^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})$  das Spektrum der Lichtquelle berechnet werden.

#### 4.4.3 Korrekturen

Vor der Fourier-Transformation wurden die in Kapitel 4.2.2 beschriebenen Korrekturen durchgeführt, um die Auflösung zu verbessern.

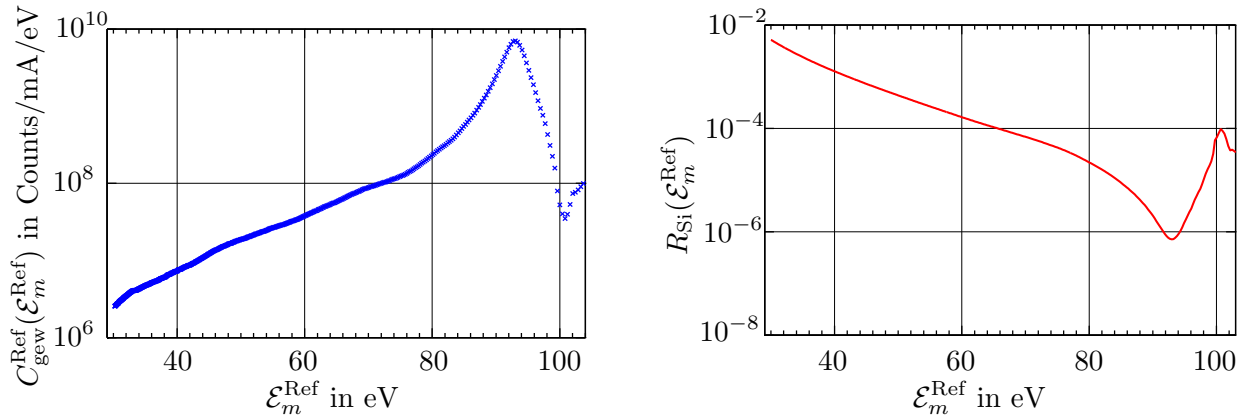


Abbildung 4.5: **(Links)** Aufaddierte und normierte Counts  $C_{\text{gew}}^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})$  des markierten Bereiches im Rohdatenbild 4.4 einer reinen Siliziumoberfläche in Abhängigkeit der Photonenergie (logarithmisch) **(Rechts)** Reflektivität von Silizium im Silizium-Transmissionsfenster bei einem Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation (logarithmisch)

### Entfaltung vom Spektrum der Lichtquelle

Das korrigierte Spektrum entspricht der Reflektivität der Probe 1+2 und ergibt sich nach Gleichung (4.11) aus dem Verhältnis des reflektierten Spektrums der Probe und des Quellspektrums.

$$R_A(\mathcal{E}_m) = \frac{S_A(\mathcal{E}_m)}{S_0(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})} = \frac{\text{UE}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}}) t_{\text{bel}}^{\text{Ref}} n_{\text{px}}^{\text{Ref}} C_{\text{gew}}^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m)}{\text{UE}(\mathcal{E}_m) t_{\text{bel}} n_{\text{px}} C_{\text{gew}}^{\text{Ref}}(\mathcal{E}_m^{\text{Ref}})} \quad (4.25)$$

Die Diskretisierung des Referenzsignals wurde durch lineare Interpolation an die Diskretisierung des Messsignals angepasst, sodass  $\mathcal{E}_m = \mathcal{E}_m^{\text{Ref}}$  galt. Dadurch konnte die Reflektivität der Probe ohne Kenntnis der Umwandlungseffizienz des Spektrometers berechnet werden. Die so bestimmte Reflektivität der Probe 1+2 ist in Abbildung 4.6 dargestellt.

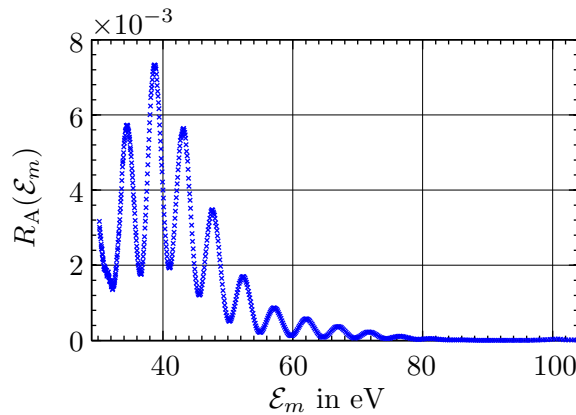


Abbildung 4.6: Gemessene Reflektivität  $R_A(\mathcal{E}_m)$  der Probe 1+2 unter  $74,8^\circ$  in p-Polarisation

### Entfaltung von der Reflektivität des dominanten Materials

Die Gesamtreflektivität der Probe fällt mit zunehmender Energie stark ab. Dadurch verschlechtert sich die Auflösung, weil die Bandbreite des Signals (FWHM der Einhüllenden) kleiner ist, als die Breite des Silizium-Transmissionsfensters (siehe auch Gl. (4.8)). Als gute Näherung für den groben Verlauf der gemessenen Reflektivität stellte sich die Reflektivität einer isolierten Grenzschicht des dominanten

Materials heraus. Daher wurde die gemessene Reflektivität mit der Reflektivität von Silizium (siehe Abb. 4.5 rechts) gewichtet. Sie ist in Abbildung 4.7 dargestellt.

$$R_{A,g}(\mathcal{E}_m) = \frac{R_A(\mathcal{E}_m)}{R_{Si}(\mathcal{E}_m)} \quad (4.26)$$

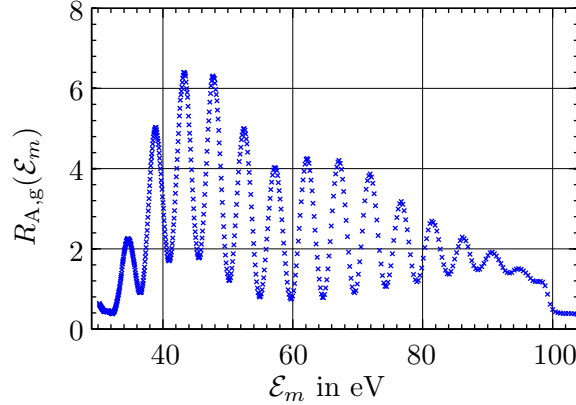


Abbildung 4.7: Korrigierte Reflektivität  $R_{A,g}(\mathcal{E}_m)$  der Probe 1+2

Durch die Korrektur wurde die effektiv nutzbare Bandbreite im Vergleich zur gemessenen Reflektivität erhöht. Durch die in Kapitel 4.2.3 genannten nicht korrigierbaren Effekte fällt das Signal aber weiterhin, wenn auch weniger stark, mit der Energie ab und die erreichbare Auflösung bleibt damit unterhalb der theoretischen erreichbaren.

### Transformation in den $k$ -Raum

Um den durch die Dispersion bedingten nicht linearen spektralen „Chirp“ zu korrigieren wurden die diskreten Energien  $\mathcal{E}_m$  in den  $k$ -Raum umgerechnet.

$$k_{D,m} = \mathcal{E}_m \frac{2q \sqrt{n_D^2(\mathcal{E}_m) - \cos^2 \alpha_0}}{\hbar c} \quad (4.27)$$

Dabei ist  $\alpha_0$  der Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  und  $n_D(\mathcal{E}_m)$  der Realteil der Brechzahl vom dominanten Material, was in diesem Fall Silizium war. In Abbildung 4.9 ist der Realteil der Brechzahl von Silizium im Silizium-Transmissionsfenster dargestellt.

#### 4.4.4 Fourier-Transformation

Die DFT kann numerisch am schnellsten mit dem „Fast-Fourier-Transform“-Algorithmus (FFT) berechnet werden. Wie in Kapitel 4.1 beschrieben, wurde das korrigierte Signal vor der Berechnung der FFT mittels „Zero-Padding“ im Intervall  $0 \leq k_{D,m} \leq 100 \text{ nm}^{-1}$  fortgesetzt, um eine hohe numerische Auflösung zu erhalten, die weit über der physikalisch möglichen Auflösung liegt. Voraussetzung zur Durchführbarkeit der FFT ist eine äquidistante Diskretisierung mit  $2^n$  Diskretisierungsschritten  $l$ . Daher wurde die Diskretisierung des Signals durch lineare Interpolation mit  $n = 17$  angepasst. Die tatsächlich auflösbare Tiefe, ist natürlich weiterhin von der ursprünglichen Diskretisierung bzw. Spektrometerauflösung abhängig und kann nicht durch Interpolation erhöht werden.

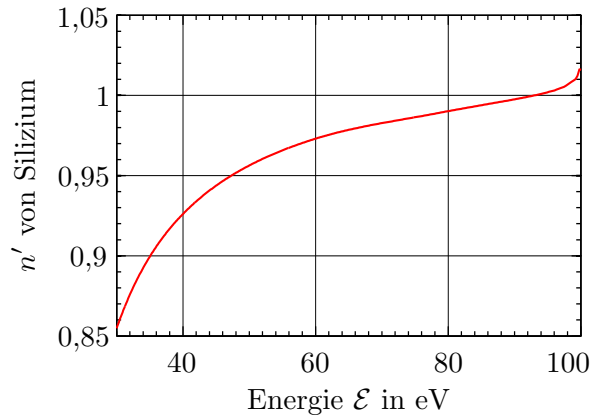


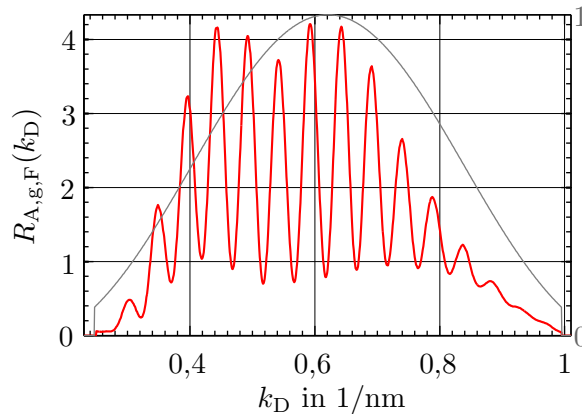
Abbildung 4.8: Realteil der Brechzahl von Silizium im Silizium-Transmissionsfenster

### Fensterfunktion

Als Parameter für das Kaiser-Bessel-Fenster (siehe Gl. (4.18)) wurde in diesem Fall  $\beta = 4$  gewählt. Die Fenstergrenzen wurden auf  $k_{D,\min} = 0,247 \text{ nm}^{-1}$  und  $k_{D,\max} = 0,995 \text{ nm}^{-1}$  gesetzt was den Photonenenergien  $\mathcal{E}_{\min} = 30 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 100 \text{ eV}$  entspricht. Die Gewichtung der korrigierten Reflektivität mit der Fensterfunktion wurde in der neuen Diskretisierung durchgeführt:

$$R_{A,g,F}(k_{D,l}) = F(k_{D,l}) \cdot R_{A,g}(k_{D,l}) \quad (4.28)$$

In Abbildung 4.9 ist die gewichtete Reflektivität  $R_{A,g,F}$  im relevanten Bereich über  $k_D$  aufgetragen. Die verwendete Fensterfunktion wurde ebenfalls in den Graphen eingezeichnet.


 Abbildung 4.9: Korrigierte und mit Fensterfunktion gewichtete Reflektivität  $R_{A,g,F}$  der Probe 1+2 über  $k_D$  (rot); Kaiser-Bessel-Fenster für  $\beta = 4$  (grau)

### XCT-Signal

Der Realteil des durch die FFT erhaltenen XCT-Signals ist links in Abbildung 4.10 dargestellt. Die Tiefenkoordinate wurde aus den FFT Frequenzen mit Gleichung (4.16) berechnet. Wie nach Gleichung 2.2 erwartet, tritt der „konstante“ Anteil mit seinem hohen Signal bei einer Tiefe von null auf. Die Tiefe der vergrabenen Goldschicht lässt sich an der Position des entsprechenden Maximums der Einhüllenden der Schwingung ablesen. Daher ist es sinnvoll, statt des Realteils den Betrag (siehe Anhang A.4) des XCT-Signals über der Tiefe aufzutragen. Die Einflüsse der Terme, die zusätzlich zum informationstragenden Anteil in Gleichung (A.5) auftreten, können, aufgrund der geringen Reflektivitäten der vergrabenen Schichten vernachlässigt werden. Der Betrag des XCT-Signals im positiven



Bereich ist rechts in Abbildung 4.10 dargestellt. Das dargestellte Messergebnis wird in Kapitel 4.6.1 interpretiert.

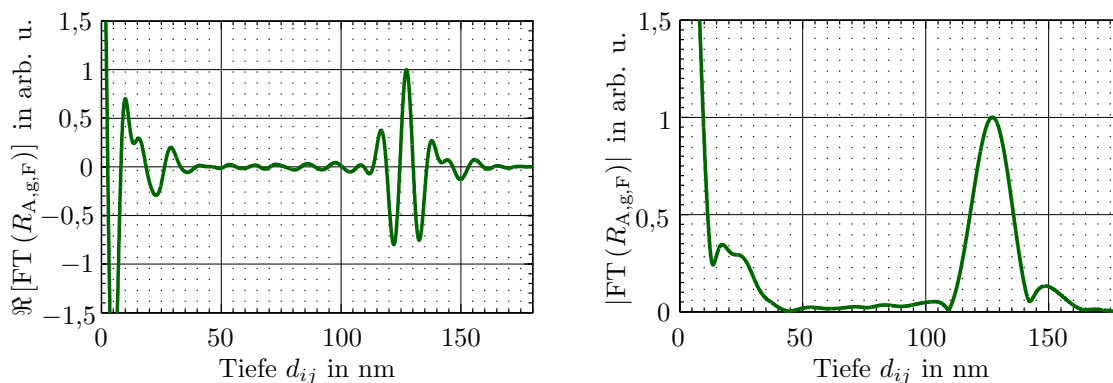


Abbildung 4.10: **(Links)** Realteil des XCT Signals der Probe 1+2 **(Rechts)** Betrag des XCT Signals der Probe 1+2

## 4.5 Auflösung, Genauigkeit und der Einfluss von Messfehlern

Die in den Messungen tatsächlich erreichte Auflösung wurde bestimmt, indem die FWHM-Breite des zu der jeweiligen Schicht gehörenden Maximums im XCT Signals abgelesen wurde. Außerdem wurden die Proben mit den in unterschiedlichem Abstand getrennten vergrabenen Schichten vermessen. So konnte der minimale noch aufzulösende Abstand direkt gemessen werden.

Um die Güte der Messung und den Einfluss der nach den Korrekturen noch vorhandenen auflösungsvermindernden Effekten (siehe Kap. 4.2.3) zu bestimmen, muss die gemessene Auflösung mit der theoretisch erreichbaren Auflösung verglichen werden. Diese hängt aber ebenfalls vom Einfallswinkel, der Probendispersion und der Breite und Form der verwendeten Fensterfunktion ab. Daher wurde sie bestimmt, indem die FWHM-Breite der Fourier-Transformation der Fensterfunktion (siehe Gl. (4.18)) berechnet wurde. Da die Fensterfunktion in Abhängigkeit von  $k_D$  angegeben ist, fließen die Informationen über Einfallswinkel und Dispersion der Probe mit in den ermittelten Wert ein.

Weder der Diskretisierungsabstand bei SS-XCT noch die spektrale Auflösung des Spektrometers bei SD-XCT haben Einfluss auf die Auflösung. Lediglich die maximal noch abzubildende Tiefe verringert sich bei einem großen Diskretisierungsabstand bzw. bei einer niedrigen Spektrometerrauflösung. Das ist einer der Vorteile von OCT bzw. XCT gegenüber abbildenden Mikroskopieverfahren, bei denen eine niedrige Detektorauflösung direkt zu einer niedrigen optischen Auflösung führt.

### 4.5.1 Systematische Messfehler und Genauigkeit

Grundsätzlich muss zwischen der Auflösung und der Genauigkeit, mit der die tatsächliche Tiefe einer isolierten Schicht bestimmt werden kann, unterschieden werden. Neben dem durch die Messung erzeugten statistischen Fehler (siehe Kap. 4.5.2), ist die Genauigkeit durch die begrenzte Kenntnis der Struktur und der Dispersion systematisch eingeschränkt. In die Berechnung von  $k_D$  und damit der Tiefe werden die Brechzahlen der vorhandenen Materialien mit der Brechzahl des dominanten Materials angenähert. Dadurch kann  $k_D$  unabhängig von der Struktur der Probe berechnet werden (siehe Gl. (4.11) und (4.13)). Demnach ist die Genauigkeit abhängig von der Güte der durchgeführten Näherungen. Je höher der Anteil des nicht dominanten Materials in der Probe ist und je größer die Abweichungen der Brechzahlen dieser Materialien vom dominanten Material sind, desto geringer ist die Genauigkeit. Daher kann eine Abschätzung der Genauigkeit nur erfolgen, wenn unabhängig von der Messung bereits einige Informationen zur Probenstruktur und Zusammensetzung bekannt sind. Um die tatsächlichen Struktur einer unbekannt Probe exakt zu ermitteln, muss somit auch die

Dispersion der Materialien bestimmt werden (siehe Kap. 4.10.2). Für die im XCT-Experiment vermessenen Proben ist die Struktur und Zusammensetzung bekannt. Damit kann die Abschätzung der Genauigkeit für jede Einzelmessung mittels Simulationen erfolgen, die mit den gleichen Näherungen wie die experimentellen Daten ausgewertet werden.

### 4.5.2 Statistische Messfehler

Der statistische Fehler beim Messen der Photonenenergie bei SS-XCT ist aufgrund der sehr hohen Monochromatorauflösung von  $\approx 10^{-3}$  eV vernachlässigbar. Da die spektrale Funktion des Spektrometers ebenfalls mit dem Monochromator gemessen wurde, überträgt sich der geringe statistische Messfehler auch auf SD-XCT. Der Messfehler der Spaltbreite kann ebenfalls vernachlässigt werden, da die Spaltbreite nur die spektrale Auflösung des Spektrometers definiert.

Da die Tiefenstruktur nicht direkt aus dem Spektrum, sondern aus dessen Modulationsfrequenzen rekonstruiert wird, ist die Auflösung und die Genauigkeit von XCT außerdem sehr stabil gegenüber statistischem Detektorrauschen. Daher lässt sich der Fehler der Intensitäts- bzw. spektralen Intensitätsmessung der jeweiligen Messgeräte nicht direkt in einen statistischen Fehler der Genauigkeit überführen.

Da kein Goniometer benutzt wurde, ist der Fehler bei der Messung des Einfallswinkels mit  $\pm 1^\circ$  relativ groß. Der Messfehler hat direkten Einfluss auf die Berechnung von  $k_D$  und damit auf den Fehler der Tiefenbestimmung. Der Einfluss auf die Genauigkeit jeder Messung konnte bestimmt werden, indem die Auswertungsroutine nochmals mit einem um den Messfehler veränderten Winkel durchgeführt wurde. Der Veränderung der Position des Maximums entspricht dann dem durch die Winkelmessung bedingten Fehler der Genauigkeit des Verfahrens.

### 4.5.3 Einfluss des Übergitters bei Messung mit dem Spektrometer

Das Beugungsbild des Goldgitters entsteht aus der Faltung der Beugung des Gitters selbst und der Beugung der zweidimensionalen Trägerstruktur des Goldgitters mit einer Gitterkonstante von 58,8 Linien/mm. Der Abstand zwischen zwei Beugungsordnungen des Trägergitters ist viel kleiner als beim Goldgitter selbst. Der Einfluss der Beugungsstrukturen senkrecht zur dispersiven Ebene kann durch Wahl des geeigneten Integrationsgebietes vernachlässigt werden. In der dispersiven Ebene kommt es durch die Faltung zu einer Kontrastverschlechterung des eigentlichen Beugungsbildes und damit zu einer geringeren spektralen Auflösung. Dadurch verringert sich die maximal noch abzubildende Tiefe.

## 4.6 Silizium-Transmissionsfenster

Messungen im Energiebereich des Silizium-Transmissionsfenster wurden am DESY Strahlrohr BW3 durchgeführt. Hauptsächlich wurden die auf Silizium basierenden Proben vermessen. Der Photonenfluss war ausreichend, um sowohl SS-XCT mit Photodiode und SS-XCT mit CCD-Kamera als auch SD-XCT mit Spektrometer durchzuführen. Dabei kam das 1000 Linien/mm Gitter zum Einsatz. Die Auswertung verlief analog zum im Kapitel 4.4 beschriebenen Vorgehen.

### 4.6.1 Auflösung

In Abbildung 4.11 ist die korrigierte Reflektivität der Probe 1+2 (5 nm Gold, 140 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer), welche bereits in Kapitel 4.4 gezeigt ist und das durch Fourier-Transformation gewonnene XCT-Signal dargestellt. Die Messzeit betrug 10 s. Um Nebenmaxima zu unterdrücken wurden Fensterparameter von  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 100$  eV gewählt. Die mit diesen Parametern theoretisch erreichende Auflösung beträgt 14 nm. Die erreichte Auflösung, ermittelt anhand der FWHM-Breite, beträgt 17,7 nm und weicht damit um 3,7 nm von der theoretischen ab. Dies

demonstriert, dass XCT im Silizium-Transmissionsfenster durchführbar ist und Auflösungen im niedrigen zweistelligen Nanometer-Bereich erreicht werden. Die Auflösung ist damit um 2 Größenordnungen besser als bei bisherigen hochauflösenden OCT Messgeräten [3]. Die Abweichung zwischen theoretischer und experimenteller Auflösung liegt einerseits in den verbleibenden auflösungsvermindernden Effekten, die in Kapitel 4.2.3 beschrieben sind. Andererseits haben die Goldschichten selbst eine Ausdehnung von 5 nm. Der Vorder- und Rückseitenreflex können somit zwar nicht aufgelöst werden, jedoch führt deren Überlagerung zu einer Verbreiterung des XCT-Signals. Die gemessene Tiefe bei 127,1 nm liegt allerdings um 17,9 nm niedriger als die vom Hersteller angegebene. Der Fehler der Genauigkeit durch die Winkelmessung beträgt  $\pm 0,6$  nm und erklärt damit nicht die große Abweichung. Der systematische Fehler, der durch die Näherung aller Brechzahlen durch die Brechzahl von Silizium entsteht, wurde mit Hilfe der Simulationssoftware und der ursprünglich erwarteten Probenstruktur berechnet. Weil Gold nur in geringem Mengen im Vergleich zu Silizium vorkommt, wird die Schichtdicke systematisch nur um weniger als 0,1 nm zu groß bestimmt. Damit können systematische Fehler gegenüber den statistischen vernachlässigt werden und Messfehler als Ursache für die Abweichung ausgeschlossen werden. Aufgrund dieser Erkenntnis wurden im Nachhinein ergänzende Messungen der Schichtdicken mit einem Röntgendiffraktometer (XRR) durchgeführt. Die Ergebnisse werden in Kapitel 4.8 diskutiert.

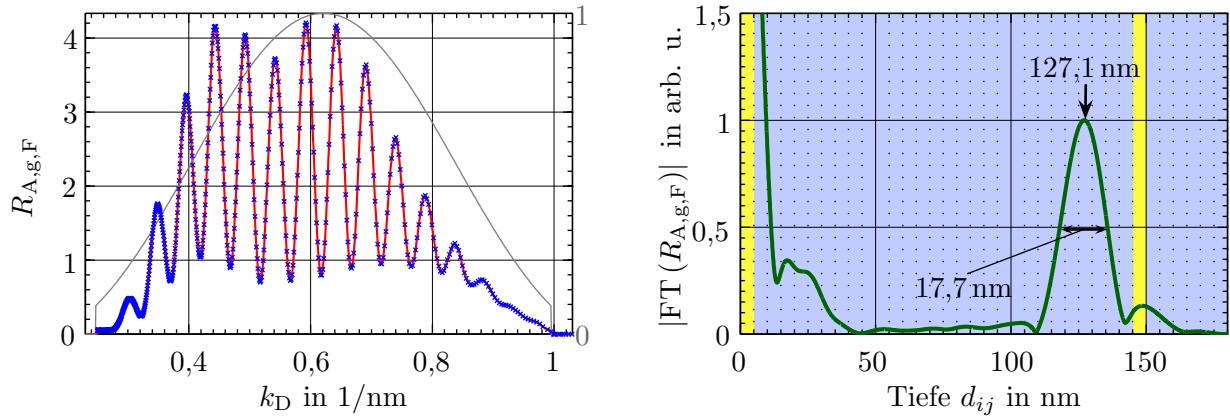


Abbildung 4.11: SD-XCT Messung der Probe 1+2 (5 nm Gold, 140 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 10 s. Als dominantes Material wurde Silizium verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 100$  eV und damit ist eine theoretische Auflösung von 14 nm erreichbar. (**Links**) Korrigierte Reflektivität in der Diskretisierung durch die CCD-Pixel (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) (**Rechts**) Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, Gold: gelb)

Die beste erreichte Auflösung im Silizium-Transmissionsfenster wurde mit der Probe 1+3 (5 nm Gold, 100 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) mit SD-XCT unter  $74,8^\circ \pm 1^\circ$  gemessen. Diese Messung ist in Abbildung 4.12 dargestellt. Hier wurden die Nebenmaxima zur Verbesserung der Auflösung nicht unterdrückt. Die Fensterparameter sind  $\beta = 0$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 100$  eV. Die erreichte Auflösung liegt bei 14,5 nm und weicht damit um 4,2 nm von der theoretischen Auflösung von 10,2 nm ab.

Aufgrund des speziellen Brechzahlverlaufs von Silizium (siehe Abb. 4.8) ist das um den „Chirp“ korrigierte spektrale Fenster in  $k_D$  breiter als das ursprüngliche. Daher ist die theoretisch erreichbare Auflösung für diese Probe besser als die theoretische Auflösung für dispersionsfreie Medien in diesem Spektralbereich.

Die Schichtdicke wurde bei 90,4 nm gemessen und liegt damit um 14,6 nm zu niedrig. Der Fehler durch die Winkelmessung beträgt  $\pm 0,4$  nm und der systematische Fehler kann dagegen wiederum vernachlässigt werden. (siehe Kapitel 4.8).

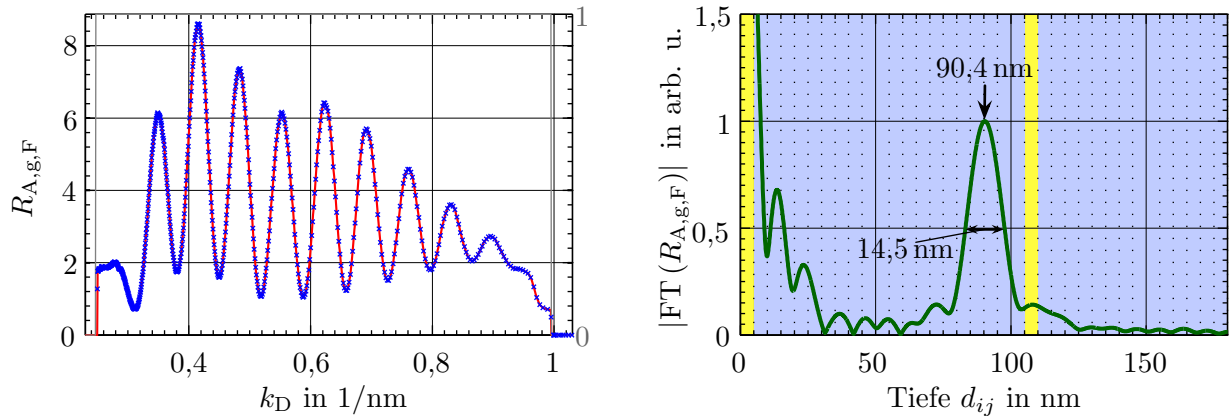


Abbildung 4.12: SD-XCT Messung der Probe 1+3 (5 nm Gold, 100 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 10 s. Als dominantes Material wurde Silizium verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 0$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 100 \text{ eV}$  und damit ist eine theoretische Auflösung von  $10,2 \text{ nm}$  erreichbar. **(Links)** Korrigierte Reflektivität in der Diskretisierung durch die CCD-Pixel (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts)** Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, Gold: gelb)

Anhand der Proben 1+5 bis 1+8 wurde die Auflösbarkeit zweier getrennter, vergrabener Schichten untersucht. In Abbildung 4.13 sind die Messergebnisse von Probe 1+7 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 12 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) und 1+8 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 8 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) dargestellt. Die theoretisch erreichbare Auflösung beträgt  $14 \text{ nm}$ . Während bei Probe 1+7 die Goldschichten noch getrennt voneinander dargestellt werden, reicht die Auflösung bei Probe 1+8 dafür nicht mehr aus. Die direkt gemessene Punkt zu Punkt Auflösung ist demnach besser als  $17 \text{ nm}$ . Die Schichttiefen wurden insgesamt wieder zu niedrig bestimmt. Der Fehler durch die Winkelmessung beträgt  $\pm 0,5 \text{ nm}$ . Auch hier erklärt der systematische Fehler, aufgrund dessen die Tiefen um weniger als  $1 \text{ nm}$  zu groß gemessen werden, nicht die große Abweichung von den erwarteten Schichttiefen.

Außerdem ist bei Probe 1+7 eine Scheintiefe bei  $16,7 \text{ nm}$  beobachtbar. Sie entsteht aus der Interferenz aus den beiden vergrabenen Goldschichten und entspricht der Differenz der zugehörigen Tiefen. Sie entspricht jedoch keiner realen Schicht. Ohne Kenntnis über den Probenaufbau, könnte hier nicht zwischen Scheintiefe und realen Tiefen unterschieden werden. Die Abweichung der Position der Scheintiefe und der Differenz zwischen den beiden anderen Maxima von  $17,6 \text{ nm}$  kann durch die nicht korrigierten Effekte (siehe Kap. 4.2.3) und den Einfluss von Nebenmaxima der Fourier-Transformation und der Betragsbildung (siehe Anhang A.4) erklärt werden. Die aus Gold bestehende Deckschicht unterdrückt die Scheintiefe nicht im erwarteten, simulierten Maße. Die Reflektivität der aufgetragenen Goldschicht ist anscheinend dazu nicht hoch genug. Dies legt den Schluss nahe, dass die Goldschicht nicht den geforderten Vorgaben hinsichtlich Geschlossenheit, Dicke und Rauheit entspricht.

#### 4.6.2 Einfluss der hochreflektierenden Deckschicht

In Abbildung 4.14 ist die SD-XCT Messung der Probe 1-7 (120 nm Silizium, 5 nm Gold, 12 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) dargestellt und ist analog zur Messung mit Probe 2+7 nur ohne die Deckschicht aus Gold. Die Bedingungen sind zur Messung der Probe 1+7 identisch. Die bestimmte Reflektivität der Probe höher als bei Probe 2+7, was den Erwartungen, dass die Goldschicht die Reflektivität erhöht, entgegen spricht. Daher betrug die Messzeit auch nur  $3 \text{ s}$  statt  $10 \text{ s}$ . Diese Erkenntnis bestätigt die bereits angestellte Vermutung, dass die Beschaffenheit der Goldschicht nicht den Vorgaben entspricht. Wieder können die 2 Schichten getrennt voneinander aufgelöst werden und liegen bei  $112,8 \text{ nm}$  und  $128,4 \text{ nm}$ . Die Differenz beträgt  $15,6 \text{ nm}$  und weicht damit nur um  $0,2 \text{ nm}$

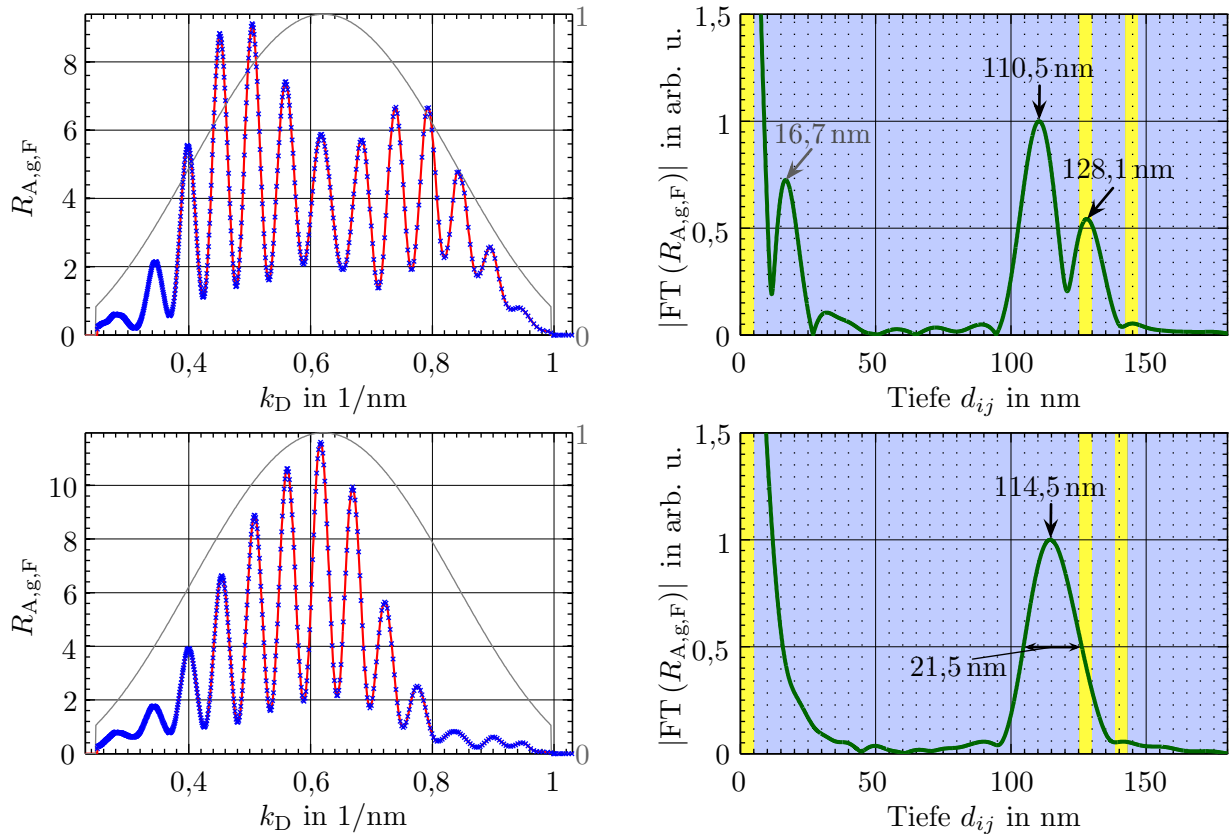


Abbildung 4.13: SD-XCT Messung der Probe 1+7 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 12 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) und 1+8 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 8 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 10 s. Als dominantes Material wurde Silizium verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 100$  eV und damit ist eine theoretische Auflösung von 14 nm erreichbar. **(Links oben)** Korrigierte Reflektivität von Probe 1+7 in der Diskretisierung durch die CCD-Pixel (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts oben)** Betrag des XCT Signals von Probe 1+7 und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, Gold: gelb) **(Links unten)** Korrigierte Reflektivität von Probe 1+8 **(Rechts unten)** Betrag des XCT Signals von Probe 1+8

von der Position des stark ausgeprägten Maximums der Scheintiefe bei 15,8 nm ab. Das Fehlen der Deckschicht erhöht wie erwartet deutlich die Amplitude der Scheintiefe und macht eine eindeutige Rekonstruktion ohne vorherige Kenntnis der Probenstruktur unmöglich. Der Fehler durch die Winkelmessung beim Bestimmen der Tiefen beträgt  $\pm 0,5$  nm und durch den systematischen Fehler werden die Tiefen um weniger als 0,5 nm zu groß berechnet.

### Vergleich SD-XCT und SS-XCT

In Abbildung 4.15 wurde die Messung der Probe 1-7 im SS-XCT Verfahren wiederholt. Dabei wurde einerseits die Photodiode und andererseits die CCD-Kamera als Intensitätsdetektor verwendet. Der Diskretisierungsabstand der Photonenenergie beträgt 1 eV. Die Messbedingungen sind zu denen von Probe 1+7 identisch. Der Winkel wurde nicht geändert. Daher können die auftretenden Abweichungen von bis zu 1,3 nm zwischen SD-XCT und SS-XCT weder durch den Fehler der Winkelmessung noch durch den systematischen Fehler der Näherung der Brechzahl erklärt werden. Vielmehr gibt der Vergleich der Messungen Aufschluss über die bisher nicht quantifizierte Verringerung der Genauigkeit durch die Messfehler der Intensitätsmessgeräte. Eine auf dieser Messung basierte Größtfehlerabschätzung wird in Kapitel 4.8 beschrieben.

Abgesehen von den Abweichungen die relativ betrachtet weniger als 1% der gemessenen Schichttiefen

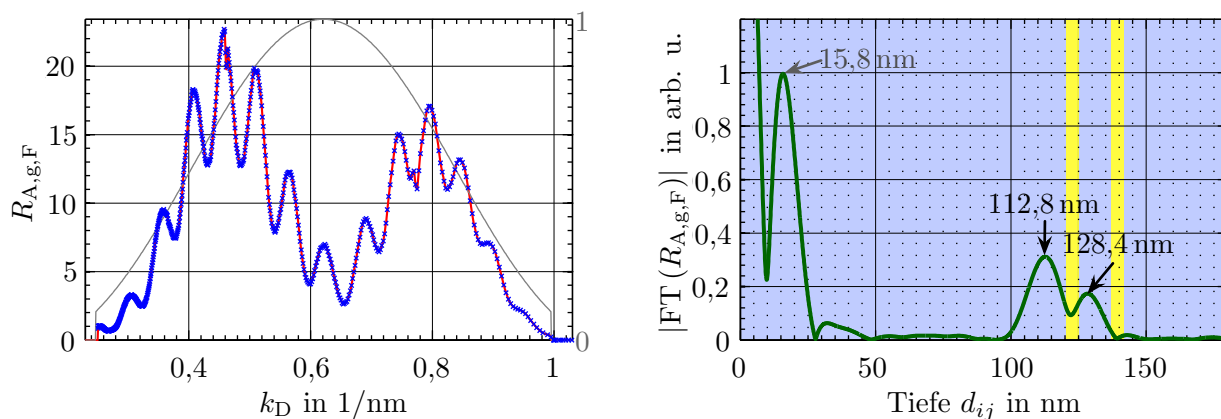


Abbildung 4.14: SD-XCT Messung der Probe 1-7 (120 nm Silizium, 5 nm Gold, 12 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 3 s. Als dominantes Material wurde Silizium verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 100$  eV und damit ist eine theoretische Auflösung von 14 nm erreichbar. **(Links)** Korrigierte Reflektivität in der Diskretisierung durch die CCD-Pixel (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts)** Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, Gold: gelb)

betragen, sind die XCT-Signale der drei unabhängigen Messungen identisch. Der große Vorteil der SS-XCT besteht darin, dass kein Spektrometer benötigt wird. Daher konnte bei Messungen mit der Photodiode der Einfallswinkel frei geändert werden, weil die Diode immer an die Stelle des reflektierten Strahles versetzt werden konnte. Außerdem ist der Diskretisierungsabstand und damit die maximal zu detektierende Tiefe frei wählbar. Der Fluss des Strahlrohres ist durch die automatische Anpassung von Monochromatoreinstellung und Abstand der Undulatormagnete immer maximal und ermöglicht es, auch Messungen bei Proben mit geringer Reflektivität durchzuführen. Ein entscheidender Nachteil ist jedoch die wesentlich höhere Messzeit dieser Methode. So ist bei Messzeiten von 30 min für ein einziges Spektrum eine dreidimensionale Tomografie wie sie mit SD-XCT möglich ist (siehe Kap. 4.9), nicht in einer akzeptablen Messdauer durchführbar.

#### 4.6.3 Probe aus $B_4C$ im Silizium-Transmissionsfenster

In Abbildung 4.16 ist eine SS-XCT Messung der  $B_4C$ -basierten Probe 2+2 (1 nm Platin, 70 nm  $B_4C$ , 1 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster dargestellt. Der Einfallswinkel betrug  $69,6^\circ \pm 1^\circ$ . Die gemessene Auflösung von 16,3 nm weicht um 2 nm von den theoretisch erreichbaren 14,2 nm ab. Auch hier wurde die Tiefe der Platinschicht mit 46,9 nm weit unterhalb der erwarteten 71 nm bestimmt. Diese Messung demonstriert, dass im Silizium-Transmissionsfenster nicht notwendigerweise nur Proben gemessen werden können, die auf Silizium basieren. Allerdings ist in anderen Materialien die Absorption höher und damit die maximale Eindringtiefe geringer.

### 4.7 Wasserfenster

Im Wasserfenster war das reflektierte Signal um eine bis drei Größenordnungen schwächer als im Silizium-Transmissionsfenster. Für den Betrieb des Spektrometers muss im Wasserfenster das Goldgitter mit 5000 Linien/mm verwendet werden. Die Effizienz in Bezug auf die Transmission in die erste Ordnung dieses Gitters ist wesentlich geringer als die des 1000 Linien/mm Gitters und das Signal war deswegen zu schwach, um es noch mit der CCD-Kamera messen zu können. Somit konnte im Wasserfenster keine SD-XCT durchgeführt werden. Auch in SS-XCT waren die reflektierten Signale schwach, konnten aber noch mit der Photodiode gemessen werden. Letztlich stellte sich heraus, dass die geringen Photonenströme ihre Ursache in Kohlenstoffablagerungen auf dem fokussierenden toroidalen Spiegel



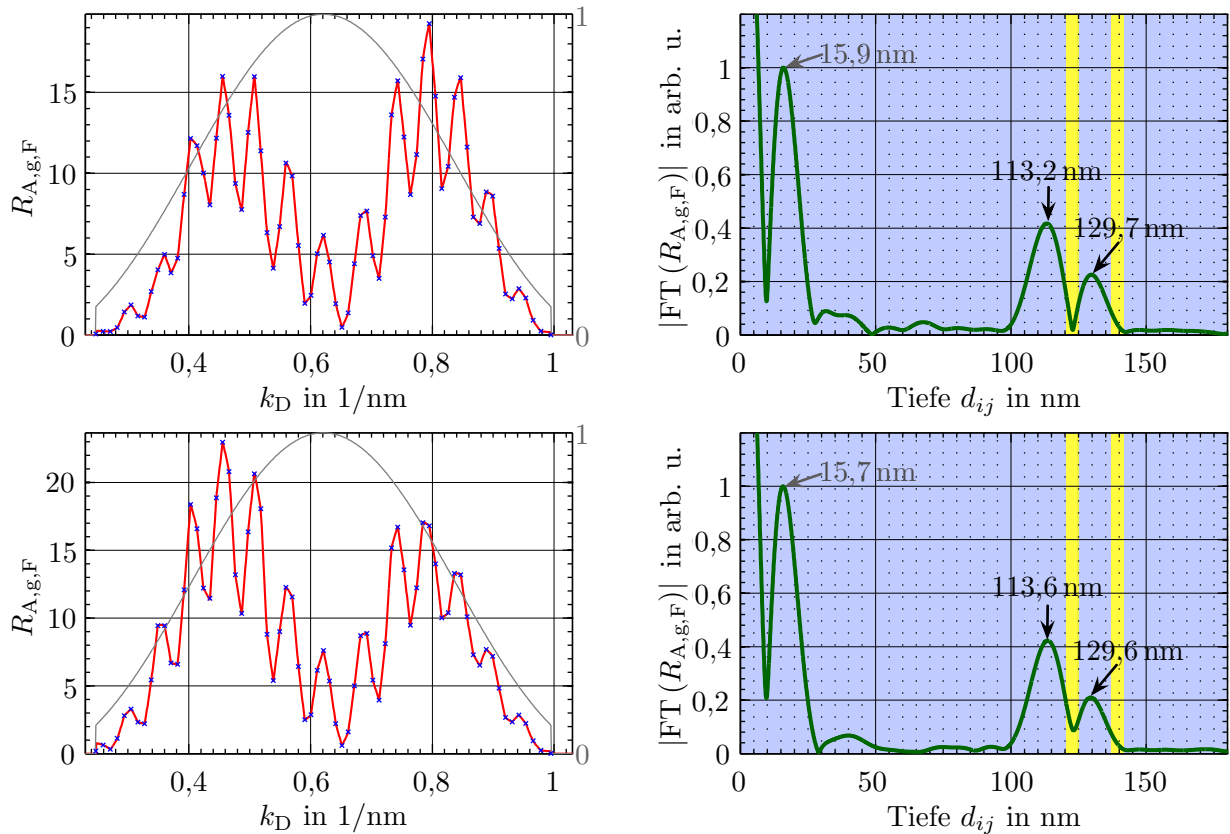


Abbildung 4.15: SS-XCT Messung der Probe 1-7 (120 nm Silizium, 5 nm Gold, 12 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $74,8^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 34 min. Als dominantes Material wurde Silizium verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 100$  eV und damit ist eine theoretische Auflösung von 14 nm erreichbar. **(Links oben)** Korrigierte Reflektivität aufgenommen mit der Photodiode in der gewählten Diskretisierung von 1 eV (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts oben)** Betrag des XCT Signals mit Photodiode und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, Gold: gelb) **(Links unten)** Korrigierte Reflektivität aufgenommen mit CCD-Kamera **(Rechts unten)** Betrag des XCT Signals mit CCD-Kamera

hatten (siehe Kapitel 4.10.1).

#### 4.7.1 Auflösung

Eine SS-XCT Messung der Probe 2+1 (1 nm Platin, 90 nm  $B_4C$ , 1 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Wasserfenster unter einem Einfallswinkel von  $69,6^\circ \pm 1^\circ$  zur Oberfläche ist in Abbildung 4.17 dargestellt. Die Messzeit betrug 23 min. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 300$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 550$  eV, sodass die theoretisch erreichbare Auflösung bei 4,4 nm liegt. Die minimale Energie des Fensters wurde von 284 eV auf 300 eV erhöht, um störenden Einflüsse der Absorptionskante von Kohlenstoff auf dem toroidalen Spiegel (siehe Kap. 4.10.1) auf das reflektierte Spektrum zu verhindern. Die experimentell erreichte Auflösung beträgt 5,7 nm. Dies demonstriert, dass XCT im Wasserfenster durchführbar ist und Auflösungen im einstelligen Nanometer-Bereich erreicht werden. Damit ist die Auflösung um drei Größenordnungen besser als bei konventionellen hochauflösenden OCT Geräten [3]. Die Abweichungen zwischen experimenteller und theoretischer Auflösung lassen sich analog zum Silizium-Transmissionsfenster mit verbleibenden dispersiven Effekten und der Verbreiterung durch den nicht auflösbaren Vorder- und Rückseitenreflex der Platinschicht erklären. Die gemessene Tiefe der Platinschicht beträgt 62,7 nm und liegt damit 28,3 nm unterhalb der erwarteten Schichttiefe. Die Verringerung der Genauigkeit durch die Winkelmessung beträgt 0,4 nm. Der systematische Fehler ist

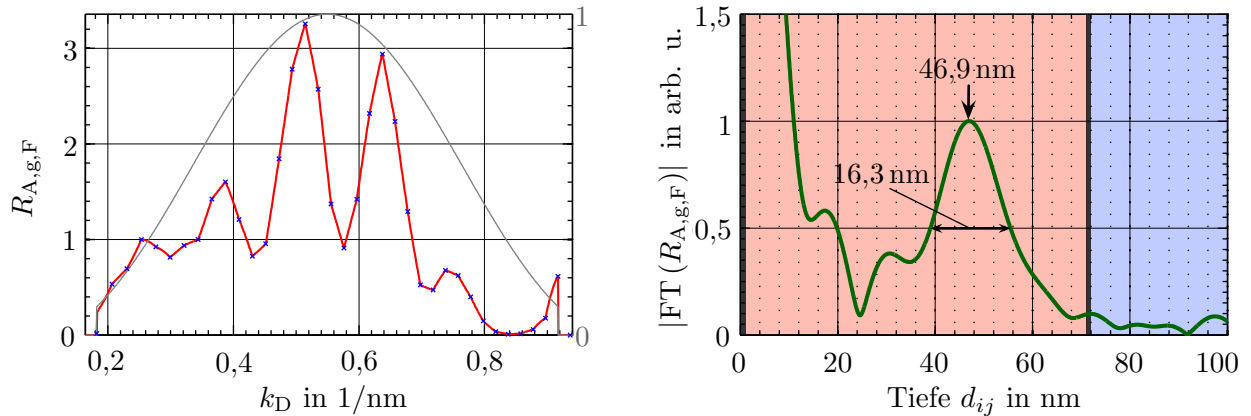


Abbildung 4.16: SS-XCT Messung mit Photodiode der Probe 2+2 (1 nm Platin, 70 nm B<sub>4</sub>C, 1 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Silizium-Transmissionsfenster unter einem Einfallswinkel von  $69,6^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 22 min. Als dominantes Material wurde B<sub>4</sub>C verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 100 \text{ eV}$  und damit ist eine theoretische Auflösung von 14,2 nm erreichbar. **(Links)** Korrigierte Reflektivität in der gewählten Diskretisierung von 2 eV (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts)** Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, B<sub>4</sub>C: rot, Platin: dunkelgrau)

aufgrund der im Vergleich zu B<sub>4</sub>C geringen Mengen an Platin vernachlässigbar.

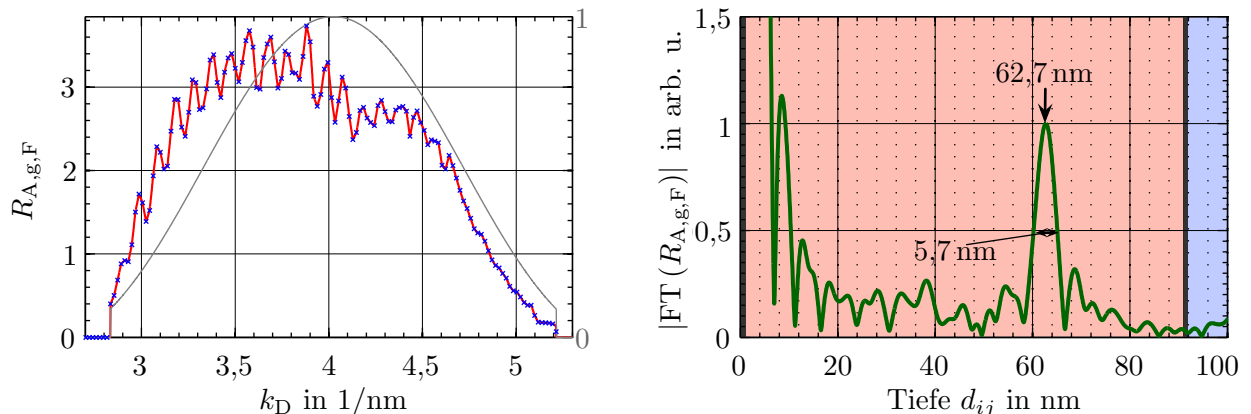


Abbildung 4.17: SS-XCT Messung mit Photodiode der Probe 2+1 (1 nm Platin, 90 nm B<sub>4</sub>C, 1 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Wasserfenster unter einem Einfallswinkel von  $69,6^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3. Die Messzeit betrug 22 min. Als dominantes Material wurde B<sub>4</sub>C verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 300 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 550 \text{ eV}$  und damit ist eine theoretische Auflösung von 4,4 nm erreichbar. **(Links)** Korrigierte Reflektivität in der gewählten Diskretisierung von 2 eV (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau), **(Rechts)** Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau, B<sub>4</sub>C: rot, Platin: dunkelgrau)

Wieder wurde die Auflösung direkt anhand zweier in unterschiedlichen Abständen getrennten Grenzflächen bestimmt. Die Ergebnisse der SS-XCT Messungen an den Proben 2+7 (1 nm Platin, 30 nm B<sub>4</sub>C, 5 nm Platin auf einem Siliziumwafer) und 2+8 (1 nm Platin, 30 nm B<sub>4</sub>C, 3 nm Platin auf einem Siliziumwafer) sind in Abbildung 4.18 dargestellt. Die gewählten Fensterbegrenzungen sind  $\mathcal{E}_{\min} = 290 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 550 \text{ eV}$ . Für Probe 2+7 wurde  $\beta = 5$  und für Probe 2+8  $\beta = 3$  gesetzt, sodass die theoretisch erreichbare Auflösung bei 4,6 bzw. 3,8 nm liegt. Die Vorder- und Rückseite der vergrabenen Platinschicht sind in beiden Fällen auflösbar. In beiden Messungen ist auch das zur Scheintiefe gehörende Maximum bei der Differenz der Tiefen beider Grenzflächen der Platinschicht zu erkennen.



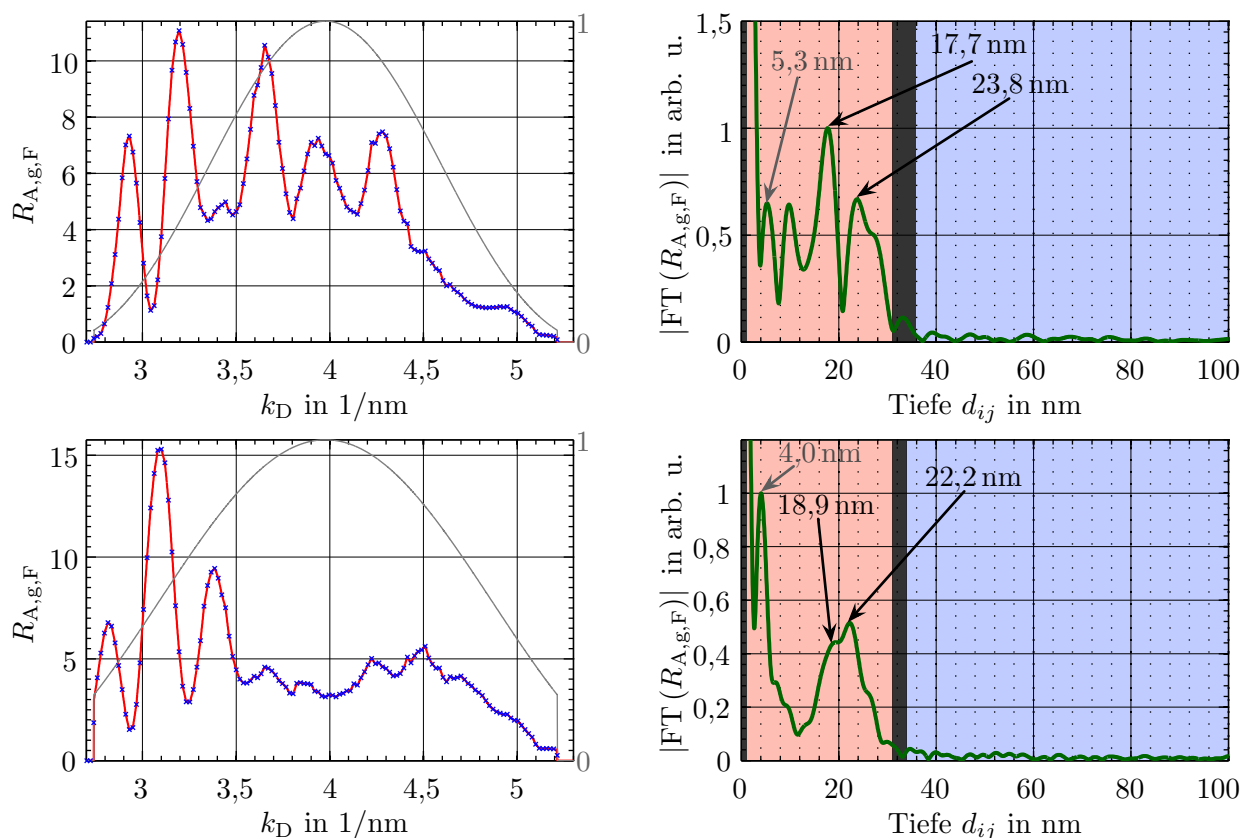


Abbildung 4.18: SS-XCT Messung mit Photodiode der Probe 2+7 (1 nm Platin, 30 nm  $B_4C$ , 5 nm Platin auf einem Siliziumwafer) und 2+8 (1 nm Platin, 30 nm  $B_4C$ , 3 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Wasserfenster unter einem Einfallswinkel von  $69,6^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 23 min. Als dominantes Material wurde  $B_4C$  verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 5$  für Probe 2+7,  $\beta = 3$  für Probe 2+8,  $\mathcal{E}_{\min} = 290 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 550 \text{ eV}$  und damit ist eine theoretische Auflösung von 4,6 nm bzw. 3,8 nm erreichbar. **(Links oben)** Korrigierte Reflektivität von Probe 2+7 in der gewählten Diskretisierung von 2 eV (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts oben)** Betrag des XCT Signals von Probe 2+7 und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau,  $B_4C$ : rot, Platin: dunkelgrau) **(Links unten)** Korrigierte Reflektivität von Probe 2+8 **(Rechts unten)** Betrag des XCT Signals von Probe 2+8

Auch die Deckschicht aus Platin unterdrückt die Scheintiefen also nicht vollständig. Die gemessene Schichtabstand bei Probe 2+7 beträgt 6,1 nm und die Scheintiefe, in diesem Fall mit geringer Amplitude, tritt bei 5,3 nm auf. Die gemessenen Schichtdifferenz bei Probe 2+8 beträgt 3,3 nm und die Scheintiefe liegt bei 4 nm. Da die Grenzflächen der Platinschicht in Probe 2+8 gerade an der Grenze der Auflösbarkeit abgebildet werden, beträgt die anhand dieser Messungen ermittelte Auflösung  $\approx 3,3 \text{ nm}$  und stellt damit den besten Wert dar, der im gesamten Experiment erreicht wurde. Die Auflösung überschreitet sogar die eigentlich erreichbare Grenze von 3,8 nm. Die Ursache liegt darin begründet, dass der theoretische Wert als FWHM-Breite der Fourier-Transformation der Fensterfunktion bestimmt wurde. Für die hier gemessenen nicht gaußförmigen Verläufe der Umgebung der Maxima der Schichttiefen im XCT-Signal können die zwei benachbarten Grenzflächen auch noch getrennt abgebildet werden, wenn sie weniger als die FWHM-Breite voneinander entfernt sind.

Die Abweichungen der Differenzen von den Positionen der Scheintiefen können durch die nicht korrigierten Effekte (siehe Kap. 4.2.3) und den Einfluss von Nebenmaxima der Fourier-Transformation und der Betragsbildung (siehe Anhang A.4) erklärt werden. Die Schichttiefen wurden wieder niedriger gemessen als erwartet. Der durch den Winkelmessfehler verursachte Fehler der Genauigkeit beträgt 0,3 nm. Durch den systematischen Fehler der Brechzahlnäherung wurden die Schichten um weniger als 0,5 nm zu niedrig bestimmt.

### 4.7.2 Einfluss der hochreflektierenden Deckschicht

Analog zu den Messungen im Silizium-Transmissionsfenster wurde die Probe 2-7 (30 nm  $B_4C$ , 5 nm Platin auf einem Siliziumwafer), auf die keine hochreflektive Deckschicht aufgebracht wurde, vermessen. Das Messergebnis ist in Abbildung 4.19 dargestellt. Wieder können die Vorder- und Rückseite der Platinschicht getrennt voneinander aufgelöst werden. Wie erwartet ist die Amplitude der Scheintiefe bei 5,4 nm wesentlich höher als bei der Messung mit Deckschicht (siehe Abb. 4.18 oben) und eine eindeutige Rekonstruktion der Struktur ist ohne die vorherige Kenntnis der Probe nicht möglich. Die Schichttiefen sind wieder niedriger als erwartet. Probe 2+7 und 2-7 sind in 2 getrennt und unabhängig durchgeführten Beschichtungsvorgängen entstanden, womit die Abweichungen zwischen den gemessenen Tiefen von Probe 2-7 und Probe 2-8 erklärt werden können.

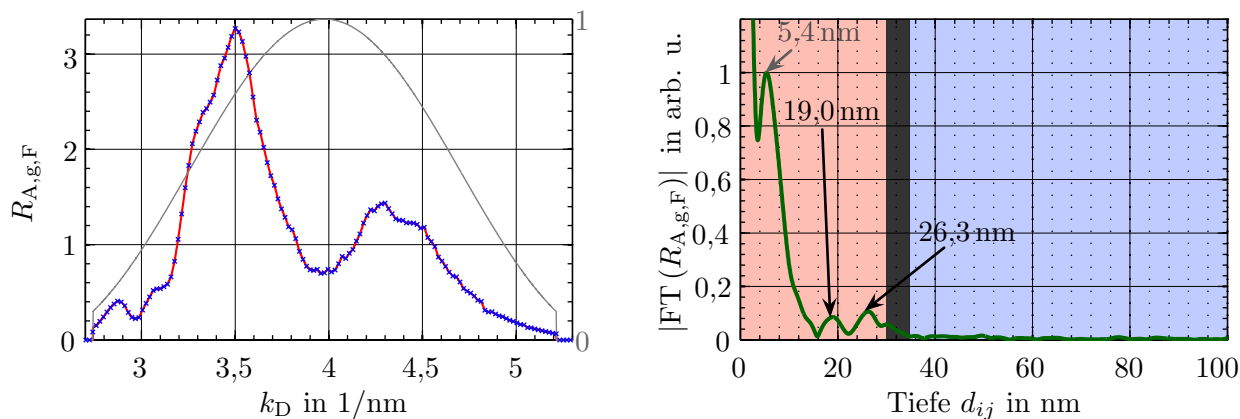


Abbildung 4.19: SS-XCT Messung mit Photodiode der Probe 2-7 (30 nm  $B_4C$ , 5 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Wasserfenster unter einem Einfallswinkel von  $69,6^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 22 min. Als dominantes Material wurde  $B_4C$  verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 290$  eV und  $\mathcal{E}_{\max} = 550$  eV und damit ist eine theoretische Auflösung von 4,3 nm erreichbar. **(Links)** Korrigierte Reflektivität in der gewählten Diskretisierung von 2 eV (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) **(Rechts)** Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau,  $B_4C$ : rot, Platin: dunkelgrau)

### 4.7.3 Einfluss des Einfallswinkels

Wie bereits beschrieben, ist das reflektierte Signal im Wasserfenster sehr gering und liegt nur wenig über dem Rauschniveau der Photodiode. Um die Reflektivität der Probe zu steigern, kann der Einfallswinkel erhöht werden. Dabei sinkt jedoch die Auflösung. Die Probe 2+1 wurde unter einem Einfallswinkel von  $15^\circ \pm 1^\circ$  zur Oberfläche vermessen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.20 dargestellt. Die Reflektivität liegt um 2 Größenordnungen höher als bei den Messungen unter  $69,6^\circ$ . Es ist zu beachten, dass der angegebene Wert der korrigierten Reflektivität bereits mit der Reflektivität einer isolierten  $B_4C$  Schicht unter  $15^\circ$  gewichtet wurde und die Werte deshalb in der selben Größenordnung liegen, wie bei den Messungen unter  $69,6^\circ$ . Die erreichte Auflösung beträgt 17,2 nm und ist damit nur wenig schlechter als die theoretisch erreichbare Auflösung von 15 nm. Wie erwartet, ist die Auflösung schlechter als bei den Messungen unter steilem Winkel und sogar schlechter als die Auflösungen bei den Messungen im Silizium-Transmissionsfenster. Es ist daher nur sinnvoll unter flachen Einfallswinkeln zu messen, wenn die hohe Auflösung im Wasserfenster für den jeweiligen Anwendungszweck nicht nötig ist. Die gemessene Tiefe der Platinschicht beträgt 64,3 nm und ist damit wieder geringer als erwartet. Der Fehler der Tiefe durch die Winkelmessung beträgt aufgrund des flachen Einfalls  $\pm 3,6$  nm. Damit stimmt die gemessene Tiefe mit dem Ergebnis der Messung unter  $69,6^\circ$  innerhalb der Fehlergrenzen überein.

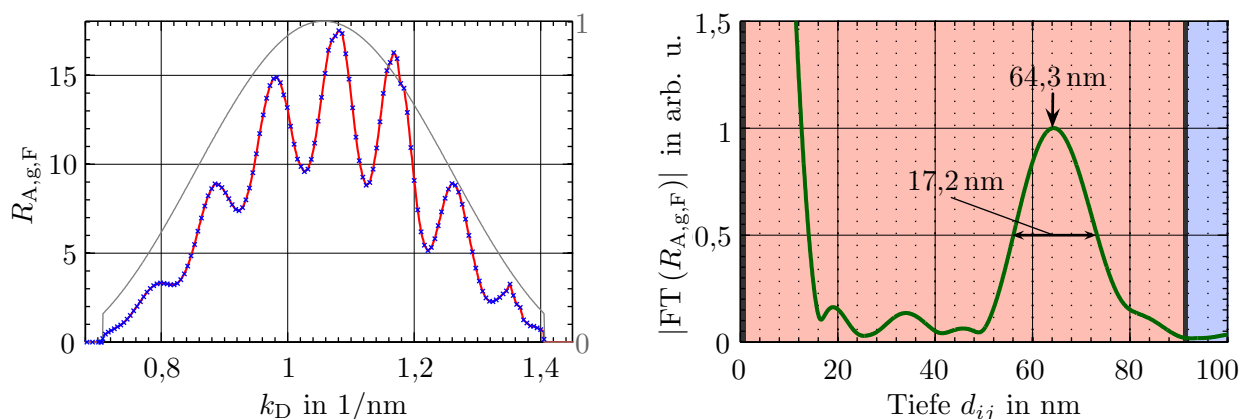


Abbildung 4.20: SS-XCT Messung mit Photodiode der Probe 2+1 (1 nm Platin, 90 nm  $B_4C$ , 1 nm Platin auf einem Siliziumwafer) im Wasserfenster unter einem Einfallswinkel von  $15^\circ$  zur Oberfläche und p-Polarisation an BW3: Die Messzeit betrug 22 min. Als dominantes Material wurde  $B_4C$  verwendet. Die Fensterparameter sind  $\beta = 4$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 290 \text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 550 \text{ eV}$  und damit ist eine theoretische Auflösung von 15 nm erreichbar. (**Links**) Korrigierte Reflektivität in der gewählten Diskretisierung von 2 eV (blau), interpoliert (rot) und Fensterfunktion (grau) (**Rechts**) Betrag des XCT Signals und erwartete Probenstruktur (Silizium: blau,  $B_4C$ : rot, Platin: dunkelgrau)

## 4.8 Genauigkeit und Abweichung der gemessenen Tiefen

In Kapitel 4.6 und 4.7 wurde bereits auf die Genauigkeit der Tiefenbestimmung mit XCT eingegangen. Es wurde gezeigt, dass die Genauigkeit durch den statistischen Fehler der Messung des Einfallswinkels verringert wird. Außerdem wurde die Tiefenstruktur der Probe 2-7 unter identischen Bedingungen mit unterschiedlichen Messgeräten im Silizium-Transmissionsfenster ermittelt (siehe Kap. 4.6.2). Die Abweichung zwischen den Messungen kann als Anhaltspunkt für den statistischen Fehler der Tiefe, der durch die Intensitäts- bzw. spektrale Intensitätsmessung entsteht, angesehen werden. Auf Grundlage dieser Messungen kann durch eine Größtfehlerabschätzung der gesamte statistische Fehler für die Genauigkeit von XCT angegeben werden. Im Silizium-Transmissionsfenster ergibt er sich aus der Summe der beschriebenen statistischen Messfehler und beträgt etwa  $\pm 2 \text{ nm}$ . Im Wasserfenster konnte SD-XCT nicht durchgeführt werden und daher war eine Vergleichsmessung nicht möglich. Es ist jedoch anzunehmen, dass sich der statistische Fehler der Intensitätsmessung durch die geringen Signalstärken und das somit stärkere Rauschen erhöht. Wird der Fehler als doppelt so hoch wie bei den Messungen im Silizium-Transmissionsfenster angenommen, ergibt sich ein gesamter statistischer Fehler im Wasserfenster (für steile Einfallswinkel) von etwa  $\pm 3 \text{ nm}$ .

Weiterhin werden, aufgrund der Näherungen der Brechzahlen der Materialien die Tiefen für die siliziumbasierten Proben systematisch zu groß und für die  $B_4C$ -basierten Proben systematisch zu klein bestimmt. Der systematische Fehler kann aber nur abgeschätzt bzw. berechnet werden, wenn Informationen über die Probenstruktur und Zusammensetzung bereits vor der Messung bekannt sind. Daher wird der systematische Fehler für eine allgemeine Angabe der mit XCT erreichbaren Genauigkeit nicht berücksichtigt. Er muss für jede untersuchte Probe mit Hilfe der bereits vorhandenen Informationen über die Struktur separat abgeschätzt werden.

### 4.8.1 Unabhängige Vermessung der Schichtsysteme mit einem Röntgendiffraktometer

Die gemessenen Tiefen lagen in allen Messungen stets unterhalb der erwarteten Tiefen. Weder der abgeschätzte statistische noch der in den einzelnen Messungen beschriebene systematische Fehler der Tiefe erklärt die großen auftretenden Abweichungen. Die erwarteten Tiefen sind die Werte, die als Vorgabe für die Beschichtungen an den Hersteller (Fraunhofer-Institut für Angewandte Optik und Feinmecha-

nik) gesandt wurden. Die Fertigkeitstoleranzen wurden mit 0,05 nm bis 0,1 nm je nach Schichtdicke angegeben und können damit ebenfalls als Ursache für die Abweichungen ausgeschlossen werden. Die Schichtdicken ausgewählter Proben wurden daraufhin vom Fraunhofer-Institut mit einem Röntgendiffraktometer (XRR) bestimmt. Dabei wird die reflektierte Intensität von monochromatischer harter Röntgenstrahlung in Abhängigkeit des Einfallswinkels aufgenommen und die Probenstruktur mit Hilfe eines iterativen Algorithmus und der Matrixmethode ermittelt. Die Ergebnisse dieser Messung sind in Tabelle 4.1 zusammen mit den Vorgaben und den XCT Messergebnissen gezeigt. Bei den Messungen an allen Proben auf die eine Deckschicht aus Gold aufgebracht war, konvergierte der iterative Algorithmus nicht im erwarteten Maße. Dies bestätigt die bereits getroffene Annahme, dass die Goldschicht hinsichtlich der Rauheit, der Geschlossenheit und der Dicke stark von den Erwartungen abweicht.

Tabelle 4.1: Vergleich der mit XCT ermittelten Tiefen mit den durch XRR ermittelten Tiefen

Probe / Schicht	Soll	XCT	XRR
P1+2 / tiefe Au Schicht	185 nm	162 nm $\pm$ 2 nm	140,5 nm $\pm$ 0,7 nm
P2+1 / tiefe Pt Schicht	91 nm	63 nm $\pm$ 3 nm	75,6 nm $\pm$ 0,4 nm
P1-2 / tiefe Au Schicht	140 nm	131 nm $\pm$ 3 nm	131,3 nm $\pm$ 0,7 nm
P2-2 / tiefe Pt Schicht	70 nm	53 nm $\pm$ 3 nm	48,4 nm $\pm$ 0,2 nm
P1+5 / mittlere Au Schicht	125 nm	110 nm $\pm$ 2 nm	95,2 nm $\pm$ 0,5 nm
P1+5 / tiefe Au Schicht	160 nm	141,5 nm $\pm$ 2 nm	126,2 nm $\pm$ 0,6 nm
P2+6 / vordere Pt Schicht	31 nm	17,5 nm $\pm$ 3 nm	23,1 nm $\pm$ 0,1 nm
P2+6 / hintere Pt Schicht	39 nm	25 nm $\pm$ 3 nm	32 nm $\pm$ 0,1 nm

Tatsächlich sind die durch XRR ermittelten Tiefen auch systematisch geringer als die erwarteten. Da das XRR-Verfahren ein sehr genaues Standardverfahren für die Vermessung von Schichtsystemen ist, kann davon ausgegangen werden, dass die XRR Messergebnisse der realen Probenstruktur entsprechen. Die Schichten müssen sich demnach seit dem Herstellungszeitpunkt verändert haben. Die Ursache der Degradierung der Schichtsysteme sind wahrscheinlich chemische Prozesse unter Luft und Wassereinfluss. Um diese Vermutung zu bestätigen, sind weitere Messungen und Untersuchungen der Schichtsysteme geplant. Außerdem kann davon ausgegangen werden, dass die Lagerungsbedingungen und die Lagerungsdauer Einfluss auf die Degradierung der Schichten hat. Die Proben der XCT- und XRR-Messung sind zwar im gleichen Beschichtungsvorgang hergestellt worden, jedoch wurden sie unabhängig voneinander gelagert. Zwischen Herstellung und XCT-Messung lagen ca. 2 Wochen. Die XRR-Messung fand drei Monate später statt. Damit könnte sich die Abweichung zwischen XRR und XCT erklären lassen.

Zusammenfassend kann also angenommen werden, dass die Abweichungen der mit XCT gemessenen Tiefen von den Vorgaben nicht durch die Messmethode verursacht werden. Für einen eindeutigen Beweis, dass die tatsächlichen Schichttiefen mit einer Genauigkeit innerhalb der Fehlertoleranzen durch XCT bestimmt werden können, ist es jedoch nötig, sowohl XCT als auch XRR an der selben Probe, zur selben Zeit und unter identischen Bedingungen durchzuführen.

## 4.9 3D-Tomografie

Durch ein Rasterverfahren wurde ein Ausschnitt vom Siliziumwafer 1+ lateral vermessen. Der Ausschnitt enthält sowohl die Proben 1+4 (5 nm Gold, 40 nm Silizium, 5 nm Gold auf Silizium) und 1+5 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 30 nm Silizium, 5 nm Gold auf Silizium), als auch eine reine Siliziumschicht zwischen den beiden Proben und besitzt eine laterale Ausdehnung von 6 mm  $\times$  2 mm (siehe Abbildung 4.21). Der laterale Rasterabstand beträgt in beiden Dimensionen 0,1 mm. Um die

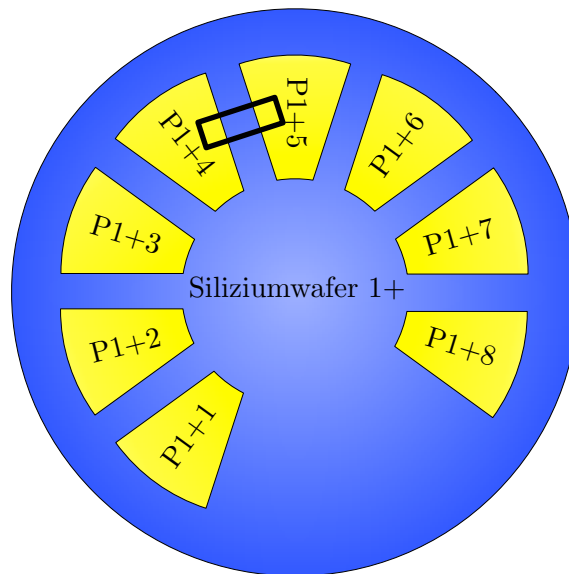


Abbildung 4.21: Tomografiertes Ausschnitt vom Siliziumwafer 1+: Der tomografierte Ausschnitt umfasste die Probe 1+4 (5 nm Gold, 40 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) 1+5 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 30 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) und eine reine Siliziumoberfläche. Die laterale Ausdehnung des tomografierte Bereiches beträgt  $2\text{ mm} \times 6\text{ mm}$ .

Messzeit gering zu halten, wurde mit SD-XCT bei weit geöffnetem Spalt und einer Belichtungszeit von 1 s pro Rasterpunkt gemessen. Die spektrale Auflösung war dennoch ausreichend für die vorkommende Strukturiefen. Die gesamte Aufnahme besteht aus 1281 Rasterpunkten und dauerte ca. 2,5 h. Die Messung wurde am DESY Strahlrohr BW3 unter einem Winkel von  $74,8^\circ \pm 1^\circ$  durchgeführt. Bei den gewählten Fensterparametern von  $\beta = 5$ ,  $\mathcal{E}_{\min} = 30\text{ eV}$  und  $\mathcal{E}_{\max} = 100\text{ eV}$  beträgt die theoretische erreichbare axiale Auflösung 15,2 nm. Die laterale Auflösung ist durch die Fokusgröße auf der Probe bestimmt. Bei der gewählten Spalteinstellung wurde die Fokusgröße im wesentlichen durch den Fokus des Strahlrohres bestimmt und betrug damit in etwa  $200\text{ }\mu\text{m} \times 300\text{ }\mu\text{m}$ . Eine dreidimensionale Skizze des tomografierten Ausschnittes ist ein Abbildung 4.22 gezeigt. Mit XCT können die Schichttiefen nur relativ zur Oberfläche bestimmt werden. Deshalb wird der Ausschnitt, wie ebenfalls in der Abbildung 4.22 gezeigt, als ein einheitlicher Block mit einer Deckschicht bei einer Tiefe von 0 nm abgebildet. Die XCT-Signale aus repräsentativ ausgewählten Schnittebenen sind in Falschfarben kodiert ebenfalls in der Abbildung dargestellt. Die dreidimensionale Struktur des Ausschnittes wird wiedergegeben und alle Schichten werden getrennt voneinander aufgelöst. Damit ist die Durchführbarkeit dreidimensionaler XCT demonstriert. Aufgrund der minimalen Schrittweite der Motoren und der kartesischen Rasterkoordinaten, welche mit einer Translations- und einer Rotationsachse des Probenhalters angefahren wurde, kommt es zu Diskretisierungsfehlern. Die Scheintiefe der Probe 1+5 ist deutlich zu erkennen. Der Übergang zwischen den einzelnen Zonen ist aufgrund der schlechten lateralen Auflösung nicht scharf. Daher kann aus dieser Messung keine Aussage über die tatsächliche Qualität der Übergänge zwischen den Schichtsystemen getroffen werden.

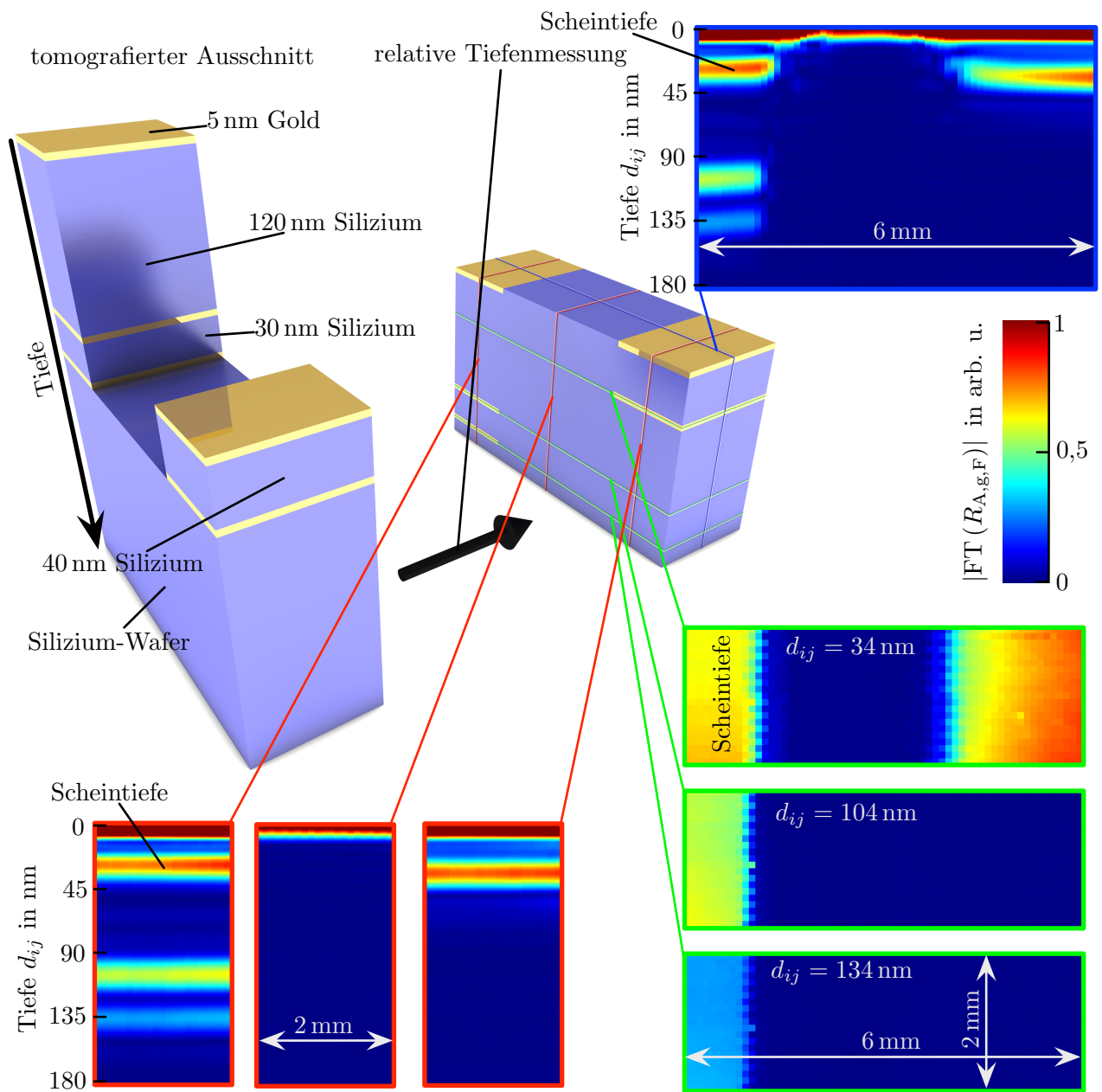


Abbildung 4.22: Ergebnisse der dreidimensionalen Tomografie: Der tomografierte Ausschnitt umfasste die Probe 1+4 (5 nm Gold, 40 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer), 1+5 (5 nm Gold, 120 nm Silizium, 5 nm Gold, 30 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer) und eine reine Siliziumoberfläche. Durch die relative Tiefenmessung wird die Oberfläche des jeweiligen Schichtsystems immer mit einer Tiefe von 0 bestimmt. Die laterale Ausdehnung des tomografierten Bereiches beträgt  $2 \text{ mm} \times 6 \text{ mm}$  und die laterale Auflösung liegt bei  $300 \mu\text{m}$ . Die axiale Auflösung liegt bei  $17 \text{ nm}$ . Um den dreidimensionalen Datensatz zu visualisieren, wurden das XCT Signal der Schnittbilder von 3 senkrecht aufeinander stehenden Ebenen (rot, grün und blau) in Falschfarben abgebildet. Wieder ist die Scheintiefe bei Probe 1+5 zu erkennen.



## 4.10 Sonstiges

### 4.10.1 Ablagerung von Kohlenstoff

Da die reflektierte Intensität im Wasserfenster deutlich geringer war als erwartet, wurden Messungen durchgeführt, um die bereits mehrfach beschriebene Annahme, dass sich Kohlenstoff auf den Optiken absetzt, zu bestätigen. Der Effekt ist bekannt [23] und einer der Gründe warum die Vakuumanforderungen an Synchrotronstrahlrohren sehr hoch sind. Durch die XUV-Bestrahlung werden kohlenstoffhaltige Moleküle des Restgases durch Ionisation aufgespaltet. Mit zunehmender Bestrahlungsdauer setzt sich daher eine Schicht aus Kohlenstoff auf den Optiken ab. Links in Abbildung 4.23 ist die Reflektivität einer reinen Siliziumoberfläche im Silizium-Transmissionsfenster dargestellt. Die Reflektivität steigt mit zunehmender Bestrahlungszeit an. Da die Reflektivität von Kohlenstoffschichten in diesem Photonenenergiebereich höher ist als von Silizium, stellt diese Messung einen Beweis dar, dass das Vakuum in der Hauptkammer nicht ausreicht, um das Absetzen von Kohlenstoff auf den Optiken zu verhindern. Auch mit bloßen Auge waren nach dem Experiment sowohl auf der Probe als auch auf dem ersten toroidalen Spiegel schwarze Zonen zu erkennen. Rechts in Abbildung 4.23 ist das normierte Diodensignal des an einer reinen Siliziumschicht reflektierten Lichtes im Wasserfenster dargestellt. Die Messung wurde auf einer vorher nicht bestrahlte Stelle durchgeführt. Es ist eindeutig die Kohlenstoff-Absorptionskante bei 284 eV als auch die Sauerstoff-Absorptionskante bei 543 eV erkennbar. Dieser Effekt kann nur von einer Kohlenstoffschicht auf dem abbildenden toroidalen Spiegel, die auch Wasser enthält, stammen. Durch diese Ablagerungen sank die Reflektivität des Spiegels im Wasserfenster um zwei bis drei Größenordnungen und erklärt so die geringe Signalstärke.

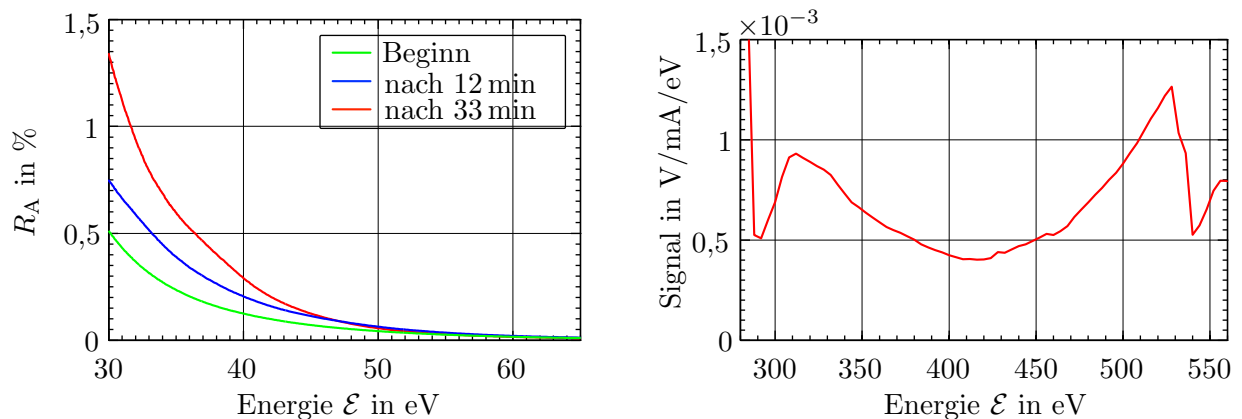


Abbildung 4.23: Ablagerung von Kohlenstoff: **(Links)** Reflektivität an reiner Siliziumoberfläche in Abhängigkeit für verschiedene Bestrahlungszeiten im Silizium-Transmissionsfenster **(Rechts)** Diodensignal von nicht beschädigter reiner Siliziumoberfläche im Wasser-Transmissionsfenster; Die Absorptionskanten von Kohlenstoff (284 eV) und Sauerstoff (543 eV) sind deutlich zu erkennen und zeigen, dass sich auch auf dem toroidalen Spiegel eine wasserhaltige Kohlenstoffschicht abgelagert hat.

### 4.10.2 Weitere Proben und Messungen mit Streulicht

Am BESSY Strahlrohr UE112-PGM-1 wurde hauptsächlich versucht, weiteren Proben deren Gesamtreflektivität weit unterhalb der Reflektivität der angefertigten Proben lag (z.B. dünne Schichten aus „Diamond-Like-Carbon“-DLC und mit Gold beschichtete YBCO-Substrate), zu vermessen. Aufgrund der in Kapitel 4.10.1 beschriebenen Kohlenstoffablagerungen reichte die reflektierte Intensität für XCT jedoch nicht aus. Die gemessene Diodenspannung des reflektierten Lichtes dieser Proben war vom Rauschen kaum zu unterscheiden. Modulationen wurden trotz der schichtartigen Strukturierung der Proben nicht beobachtet.

Es wurden Messungen durchgeführt, bei denen sich die Diode bzw. das Spektrometer nicht direkt

im spekularen Reflex der Probe, sondern in einem leicht geänderten Winkel dazu befanden. Dadurch sollte statt des reflektierten Lichtes das von der Probe gestreute Licht detektiert werden. Die ohnehin geringe gestreute Intensität wurde durch die Kohlenstoffablagerungen noch weiter reduziert. Daher lag auch hier das Diodensignal kaum überhalb des Rauschpegels. Mit dem Spektrometer konnte gestreutes Licht detektiert werden. Modulationen waren jedoch nicht erkennbar. Dieser Effekt und die Eigenschaften von XCT mit streuenden Proben konnten im zeitlichen Rahmen dieser Diplomarbeit nicht näher untersucht werden. Hier besteht weiterer Forschungsbedarf (siehe Kap. Ausblick).



## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde ein Experiment zur erstmaligen Demonstration von optischer Kohärenztomografie mit XUV- und weicher Röntgenstrahlung (XCT) konzipiert, aufgebaut und durchgeführt. Als Strahlungsquellen wurden die Strahlrohre BW3 am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) und UE112-PGM-1 am Synchrotron des Helmholtz Zentrums Berlin (BESSY) genutzt. Es wurde anhand von eindimensional strukturierten Schichtsystemen gezeigt, dass mit dem Verfahren die Struktur in axialer Richtung zerstörungsfrei abgebildet werden kann. Die axiale Auflösung ist dabei unabhängig von der Fokussierung der Strahlung. Damit wurde das Ziel der Diplomarbeit erreicht.

Mit Licht im Spektralbereich des Wasserfensters wurde eine axiale Auflösung von bemerkenswerten 3,3 nm erreicht. Im Silizium-Transmissionsfenster betrug sie 14,5 nm. Damit ist die Auflösung von XCT um drei bzw. zwei Größenordnungen besser als von konventioneller optischer Kohärenztomografie mit breitbandigen Quellen im infraroten Spektralbereich [3]. Die Eindringtiefen ( $1/e$ -Abfall) der XUV Strahlung liegen dabei bei einigen 100 nm.

Der statistische Fehler bei der Bestimmung der absoluten Tiefe ist durch die Messfehler des Einfallswinkels und der Intensität begrenzt und wurde auf  $\pm 3$  nm im Wasserfenster und  $\pm 2$  nm im Silizium-Transmissionsfenster abgeschätzt. Die Genauigkeit des Verfahrens hängt außerdem systematisch von zusätzlichen Informationen über die Zusammensetzung der Probe und deren Dispersion ab. Je mehr Informationen im Vorfeld über die Probe bekannt sind, desto höher ist die Genauigkeit. Die mittels XCT bestimmten absoluten Tiefen der am Fraunhofer-Institut für Angewandte Optik und Feinmechanik hergestellten Schichtsysteme lagen alle unterhalb derjenigen Werte, die in Auftrag gegeben wurden. Aufgrund der Größe der Abweichungen konnte der statistische Fehler als Ursache ausgeschlossen werden. Gleiches galt für den systematischen Fehler, da die Zusammensetzung der Proben vollständig bekannt war. Daher wurden unabhängige Messungen der Schichtdicken mit einem Röntgendiffraktometer (XRR) an ausgewählten Proben durchgeführt. Es konnte gezeigt werden, dass die Schichttiefen der untersuchten Proben tatsächlich unterhalb der angeforderten Werte lagen. Aufgrund der kleinen Fertigkeitstoleranzen von  $\pm 0,1$  nm bei der Herstellung, liegt der Schluss nahe, dass die Schichtstrukturen unter Einfluss von Atmosphärgasen und Wasser während der Lagerung degradierten. Zwischen XCT und XRR wurden ebenfalls Abweichungen festgestellt. Jedoch wurden die Messungen mit Proben durchgeführt, die zwar aus dem selben Herstellungsprozess stammten, aber unterschiedliche Lagerungsbedingungen und Lagerungszeiten unterlagen. Es kann also davon ausgegangen werden, dass die mit XCT festgestellten Abweichungen der Schichtdicken von den Vorgaben neben den bereits erwähnten Messfehlern keine durch das Verfahren bedingte Ursache haben und die gemessenen Werte den tatsächlichen Tiefen entsprechen.

Es wurde gezeigt, dass selbst mit einer hochreflektierende Deckschicht im XCT-Signal Scheintiefen auftreten und deshalb die Probenstruktur nicht eindeutig rekonstruiert werden kann, wenn vorher keine weiteren Informationen über die Probe bekannt sind.

Mit einem Rasterverfahren und SD-XCT wurde ein dreidimensionales Bild eines Bereiches von  $6 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$  auf einem Siliziumwafer aufgenommen, der sowohl zwei verschiedene Schichtsysteme, als auch einen nichtbeschichteten Teil enthielt. Die laterale Auflösung betrug aufgrund der Fokusgeometrie etwa  $300 \mu\text{m}$ , während die axiale Auflösung, von der Fokussierung unabhängig, bei 17 nm lag.

## **Ausblick**

Die vorgestellte Forschungsarbeit demonstriert XCT erstmals experimentell und stellt damit den ersten Schritt der Entwicklung dieses neuen Verfahrens dar. Viele Ansatzpunkte für weiterführende Forschungen ergeben sich direkt aus den beobachteten Problemen und Eigenschaften der XCT.

### **Untersuchung der Effekte, die zur Degradierung der Proben führen**

Um die Genauigkeit von XCT exakt zu bestimmen, müssen die Effekte, die zur Degradierung der Schichtsysteme und zu kleineren Schichtdicken führen, quantifiziert werden. Es ist daher sinnvoll, ein weiteres Experiment durchzuführen, bei dem zusätzlich zur XCT eine unabhängige Messung der Schichtdicken unter den selben Bedingungen, mit der selben Probe und zur selben Zeit erfolgt.

### **Vollständige Unterdrückung der Scheintiefen**

Um die Struktur komplexer Proben eindeutig rekonstruieren zu können, müssen die Scheintiefen komplett unterdrückt werden. Der Bau eines Interferometers mit Referenzspiegel würde dieses Problem lösen, ist aber aufgrund des benötigten Strahlteilers und der hohen Anforderung an die Stabilität sehr aufwendig. Die eindeutige Trennung zwischen realen und Scheintiefen kann auch durch eine Vergrößerung des Abstandes zwischen Probe und hochreflektierender Deckschicht erreicht werden. Der Abstand der Deckschicht von der Probe muss lediglich größer sein, als die maximal zu untersuchende Tiefe in der Probe. Es ist aber aufgrund der Absorption nicht möglich, die Dicke der Deckschicht so weit zu erhöhen, dass deren Oberfläche ausreichend von der Probe entfernt ist. Die Deckschicht könnte aber in Form einer wenige Nanometer dicken Folie und einem variablen Halterungsmechanismus in die gewünschte Entfernung zur Probe gebracht werden und wäre damit nicht mehr direkt mit der Probe verbunden. Daher wäre mit dieser Methode die vorherige Beschichtung von Proben nicht mehr notwendig.

### **streuende Proben**

Im Experiment konnte zwar gestreutes Licht detektiert werden, jedoch wurden keine Modulationen im Spektrum beobachtet. Für die Untersuchung dieses Effektes und die theoretische Betrachtung der Streuung komplexer Proben im XUV- und weichen Röntgenbereich bedarf es weiterführender Forschungsarbeit. Um die geringen Streusignale messen zu können, muss die Intensität der Quelle erhöht werden bzw. störende Schichtablagerungen vermieden werden.

### **Verbesserung der Genauigkeit und Messung der Dispersion**

Die Genauigkeit des Verfahrens hängt unter anderem von den vor der Messung bekannten Informationen über die Zusammensetzung der Probe ab. Wenn die Dispersion und Zusammensetzung der Probe bekannt ist, kann mit XCT die Struktur genau ermittelt werden. Ist die Struktur, aber nicht die Zusammensetzung bekannt, kann umgekehrt anhand der Verschiebung der Tiefen im XCT-Signal auf die Dispersion und die Zusammensetzung der Probe geschlossen werden. Werden mehrere XCT-Messungen der selben Probe unter verschiedenen Einfallswinkeln und mit unterschiedlicher Polarisierung durchgeführt, sollte es, ähnlich zur Ellipsometrie, möglich sein, sowohl die Dispersion der Probe als auch die Struktur zu ermitteln und damit auch die Genauigkeit zu erhöhen. Dazu könnte, ähnlich zum im Kapitel 4.8 beschriebenen XRR-Verfahren, ein iterativer Algorithmus und die Matrixmethode verwendet werden.

### **Weitere Strahlungsquellen**

Um das Verfahren hin zur praktischen Anwendung weiterzuentwickeln, müssen kompaktere Strahlungsquellen im XUV wie „High Harmonic Generation“ in Gasen, „Surface High Harmonic Generation“ oder

heiße Laserplasmen auf ihre Verwendbarkeit für XCT untersucht werden.

## Danksagung

Das erste XCT-Experiment zu planen, zu bauen und durchzuführen hat mir, abgesehen von den wirklich stressigen Momenten, die wahrscheinlich in jedem Forschungsprojekt an der ein oder anderen Stelle auftreten, viel Spaß gemacht. Ich habe sehr viel über projektorientierte Arbeitsweise gelernt und bin mit dem Ergebnis dieser Arbeit sehr zufrieden. Allen Beteiligten möchte ich dafür ganz herzlich danken. Insbesondere möchte ich mich bedanken bei

- meinem Betreuer Christian Rödel. Seine Mitarbeit und die ständige Bereitschaft über Probleme zu diskutieren und diese zu lösen waren unverzichtbar für das Gelingen des Projektes. Insbesondere bin ich ihm dankbar, dass er in der Betreuung die richtige Balance zwischen Anleitung und Freiräumen für selbstverantwortliches, eigenständigen Arbeitens gefunden hat. So konnte ich immer meine Vorstellungen umsetzen, hatte aber nie das Gefühl mit auftretenden Problemen alleine zu sein.
- Prof. Gerhard Paulus für seine Mitarbeit und seine Unterstützung. Außerdem möchte ich mich für die vielen Konferenzen, Tagungen und Messreisen bedanken, die mir ermöglicht wurden und für das damit zusammenhängende Vertrauen in mich.
- Alexander Blinne für seine Simulationssoftware, seine Mitarbeit beim Experiment und seine Automatisierungsprogramme, ohne die viele Messungen nicht durchführbar gewesen wären.
- Wolfgang Ziegler, für die technische Umsetzung des Projektes und die Ruhe die er ausstrahlt, selbst wenn die Zeit knapp wird. Außerdem danke ich allen Beteiligten der Werkstätten für die schnelle Fertigstellung der Teile.
- Martin Wünsche für die fortwährende Hilfsbereitschaft, seine Mitarbeit beim Experiment und die Korrektur der Diplomarbeit.
- Dr. Ulf Zastrau und Vinzenz Hilbert für ihre Mitarbeit beim Experiment und die zahlreichen Vorschläge und Ideen.
- Dr. Torsten Feigl, Dr. Mark Schürmann und Michael Scheler für die freundliche Zusammenarbeit und die Herstellung der Schichtsysteme.
- Dr. Jens Viefhaus und Dr. Leif Glaser für die Beratung und die Hilfe mit dem Strahlrohr BW3 am DESY.
- Prof. Gregor Schiwietz und Dr. Ali Savci für die Beratung und die Hilfe mit dem Strahlrohr UE112-PGM-1 am BESSY.
- Prof. Eckhart Förster für seine Unterstützung.
- der gesamten NLO-Arbeitsgruppe für die angenehme Arbeitsatmosphäre und Jana Bierbach für die netten Kaffeepausen (und den Kaffee).
- meiner Familie, die mich während der Diplomarbeit, des Studiums und auch in allen anderen Lebenslagen immer unterstützt und mir Rückhalt gegeben hat.
- meinen Freunden für die tolle Studienzeit.
- Sandy Neupert, die mich fast mein gesamtes Studium lang begleitet, bestärkt und unterstützt hat.

# Literaturverzeichnis

- [1] D. Huang, E. Swanson, C. Lin, J. Schuman, W. Stinson, W. Chang, M. Hee, T. Flotte, K. Gregory, C. Puliafito, and J. G. Fujimoto. Optical coherence tomography. *Science*, 254(5035):1178–1181, November 1991.
- [2] W. Drexler and J. G. Fujimoto. *Optical Coherence Tomography*. Springer Verlag, 2008.
- [3] R. Leitgeb, W. Drexler, A. Unterhuber, B. Hermann, T. Bajraszewski, T. Le, A. Stingl, and A. Fercher. Ultrahigh resolution Fourier domain optical coherence tomography. *Optics express*, 12(10):2156–65, May 2004.
- [4] S. Fuchs, A. Blinne, C. Rödel, U. Zastra, V. Hilbert, M. Wünsche, J. Bierbach, E. Frumker, E. Förster, and G. G. Paulus. Optical coherence tomography using broad-bandwidth XUV and soft X-ray radiation. *Applied Physics B*, 106(4):789–795, March 2012.
- [5] A. Blinne. *Kohärenztomographie mit kurzen Wellenlängen*. Bachelorarbeit, Jena, 2011.
- [6] B. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis. X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at  $E = 50\text{-}30,000$  eV,  $Z = 1\text{-}92$ . *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 54(2):181–342, July 1993.
- [7] J. C. Maxwell. A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 155:459–512, 1865.
- [8] B. E. A. Saleh and M. C. Teich. *Fundamentals of Photonics*. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [9] F. Lederer. Grundkonzepte der Optik. *Vorlesungsskript*, 2008.
- [10] A. A. Michelson and E. W. Morley. On the Relative Motion of the Earth and the Luminiferous Ether. *American Journal of Science*, 36(203):333–345, 1887.
- [11] D. Attwood. *Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications*. Cambridge University Press, 2000.
- [12] A. S. Morlens, P. Zeitoun, L. Vanbostal, P. Mercere, G. Faivre, S. Hubert, P. Troussel, C. Remond, R. Marmoret, F. Delmotte, M. F. Ravet, and M. Rouillay. Study of XUV beam splitter flatness for use on a Michelson interferometer. *Laser and Particle Beams*, 22(03):279–284, July 2004.
- [13] A. B. Vakhtin, D. J. Kane, W. R. Wood, and K. A. Peterson. Common-Path Interferometer for Frequency-Domain Optical Coherence Tomography. *Applied Optics*, 42(34):6953, 2003.
- [14] J. Jasny, U. Teubner, W. Theobald, C. Wulker, J. Bergmann, and F. P. Schäfer. A Single-Shot Spectrograph For The Soft-X-Ray Region. *Review Of Scientific Instruments*, 65(5):1631–1635, 1994.
- [15] S. Fuchs, C. Rödel, A. E. Paz, S. Kuschel, M. Wünsche, V. Hilbert, U. Zastra, W. Ziegler, E. Förster, and G. G. Paulus. Sensitivity calibration of an imaging XUV spectrometer-detector system for high intensity laser experiments. *Review of Scientific Instruments*, submitted, 2012.

- [16] S. Fuchs. *Kalibrierung eines XUV-Spektrometers zur Effizienzbestimmung von Hoher Harmonischer Strahlung*. Studienarbeit, Jena, 2010.
- [17] HASYLAB. Web-Seite DORIS III BW3. <http://hasylab.desy.de>.
- [18] O. Björneholm, F. Federmann, C. Larsson, U. Hahn, A. Rieck, S. Kakar, T. Möller, A. Beutler, and F. Fössing. Performance of the extreme ultraviolet high resolution undulator beamline BW3 at Hasylab: First results and time-of-flight spectroscopy. *Review of Scientific Instruments*, 66(2):1732, 1995.
- [19] HZB. Web-Seite BESSY II UE112-PGM-1. [http://www.bessy.de/bit/upload/ID\\_13\\_3.pdf](http://www.bessy.de/bit/upload/ID_13_3.pdf).
- [20] IRD Inc. Web-Seite EQ-Photonics. <http://www.eqphotonics.de/cms/cms/upload/datasheets/>.
- [21] Andor. Web-Seite Andor. [http://www.andor.com/scientific\\_cameras/high-energy-xray-camera/](http://www.andor.com/scientific_cameras/high-energy-xray-camera/).
- [22] T. Butz. *Fouriertransformation für Fußgänger*, 2009.
- [23] F. Eggenstein, F. Senf, T. Zeschke, and W. Gudat. Cleaning of contaminated XUV-optics at BESSY II. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 468:325–328, 2001.
- [24] B. Hassibi. Handout to Course EE160 - Electrical Engineering - California Institute of Technology. [http://www.ee2.caltech.edu/Faculty/babak/courses/ee160/handout\\_wk.pdf](http://www.ee2.caltech.edu/Faculty/babak/courses/ee160/handout_wk.pdf), 2010.

## Anhang A

# Rechnungen und Beweise

### A.1 Intensität an Interferometerausgang eines OCT Gerätes

Es gelten die Bedingungen aus Kapitel 1.3 mit  $r_R = \sqrt{R_R}$  und  $r_i = \sqrt{R_i}$ .

$$\begin{aligned}
I(\delta) &= \frac{\varepsilon_0 c}{8} \left\langle \left| r_R \mathbf{E}(t + \delta) + \sum_{i=1}^N r_i \mathbf{E}(t + \delta_i) \right|^2 \right\rangle \\
&= \frac{\varepsilon_0 c}{8} \left\{ R_R \underbrace{\langle \mathbf{E}(t + \delta) \mathbf{E}^*(t + \delta) \rangle}_{\Gamma(0)} + \sum_{i=1}^N R_i \underbrace{\langle \mathbf{E}(t + \delta_i) \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \rangle}_{\Gamma(0)} \right. \\
&\quad + \sum_{i=1}^N \left[ r_R r_i^* \underbrace{\langle \mathbf{E}(t + \delta) \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \rangle}_{\Gamma(\delta - \delta_i)} + r_R^* r_i \underbrace{\langle \mathbf{E}^*(t + \delta) \mathbf{E}(t + \delta_i) \rangle}_{\Gamma^*(\delta - \delta_i)} \right] \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left[ r_i r_j^* \underbrace{\langle \mathbf{E}(t + \delta_i) \mathbf{E}^*(t + \delta_j) \rangle}_{\Gamma(\delta_i - \delta_j)} + r_i^* r_j \underbrace{\langle \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \mathbf{E}(t + \delta_j) \rangle}_{\Gamma^*(\delta_i - \delta_j)} \right] \right\} \\
&= \frac{I_0}{4} \left\{ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right. \\
&\quad + \sum_{i=1}^N \left[ r_R r_i^* \gamma_G(\delta - \delta_i) e^{-i\omega_0(\delta - \delta_i)} + r_R^* r_i \gamma_G(\delta - \delta_i) e^{i\omega_0(\delta - \delta_i)} \right] \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left[ r_i r_j^* \gamma_G(\delta_i - \delta_j) e^{-i\omega_0(\delta_i - \delta_j)} + r_i^* r_j \gamma_G(\delta_i - \delta_j) e^{i\omega_0(\delta_i - \delta_j)} \right] \right\} \quad (\text{A.1})
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned}
I(\delta) &= \frac{I_0}{4} \left\{ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right. \\
&\quad + 2 \sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \gamma_G(\delta - \delta_i) \cos[\omega_0(\delta - \delta_i)] \\
&\quad \left. + \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \gamma_G(\delta_i - \delta_j) \cos[\omega_0(\delta_i - \delta_j)] \right\} \quad (\text{A.2})
\end{aligned}$$

## A.2 Kohärenzfunktion des Feldes am Interferometerausgang eines OCT Gerätes

Es gelten die Bedingungen aus Kapitel 1.3 mit  $r_R = \sqrt{R_R}$  und  $r_i = \sqrt{R_i}$ .

$$\begin{aligned}
 \Gamma_A(\tau) &= \frac{1}{4} \left\langle \left[ r_R^* \mathbf{E}^*(t + \delta) + \sum_{i=1}^N r_i^* \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \right] \left[ r_R \mathbf{E}(t + \delta + \tau) + \sum_{i=1}^N r_i \mathbf{E}(t + \delta_i + \tau) \right] \right\rangle \\
 &= \frac{1}{4} \left\{ R_R \underbrace{\langle \mathbf{E}^*(t + \delta) \mathbf{E}(t + \delta + \tau) \rangle}_{\Gamma(\tau)} + \sum_{i=1}^N R_i \underbrace{\langle \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \mathbf{E}(t + \delta_i + \tau) \rangle}_{\Gamma(\tau)} \right. \\
 &\quad + \sum_{i=1}^N \left[ r_R^* r_i \underbrace{\langle \mathbf{E}^*(t + \delta) \mathbf{E}(t + \delta_i + \tau) \rangle}_{\Gamma[\tau - (\delta - \delta_i)]} + r_R r_i^* \underbrace{\langle \mathbf{E}(t + \delta + \tau) \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \rangle}_{\Gamma[\tau + (\delta - \delta_i)]} \right] \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left[ r_i^* r_j \underbrace{\langle \mathbf{E}^*(t + \delta_i) \mathbf{E}(t + \delta_j + \tau) \rangle}_{\Gamma[\tau - (\delta_i - \delta_j)]} + r_i r_j^* \underbrace{\langle \mathbf{E}(t + \delta_i + \tau) \mathbf{E}^*(t + \delta_j) \rangle}_{\Gamma[\tau + (\delta_i - \delta_j)]} \right] \right\} \\
 &= \frac{I_0}{2\varepsilon_0 c} \left\{ \left[ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right] \gamma_G(\tau) e^{-i\omega_0 \tau} \right. \\
 &\quad + \sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \left[ \gamma_G[\tau - (\delta - \delta_i)] e^{-i\omega_0[\tau - (\delta - \delta_i)]} + \gamma_G[\tau + (\delta - \delta_i)] e^{-i\omega_0[\tau + (\delta - \delta_i)]} \right] \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \left[ \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] e^{-i\omega_0[\tau - (\delta_i - \delta_j)]} + \gamma_G[\tau + (\delta_i - \delta_j)] e^{-i\omega_0[\tau + (\delta_i - \delta_j)]} \right] \right\} \quad (\text{A.3})
 \end{aligned}$$

## A.3 Spektrum am Interferometerausgang eines OCT Gerätes

Es gelten die Bedingungen aus Kapitel 1.3 mit  $r_R = \sqrt{R_R}$  und  $r_i = \sqrt{R_i}$ . Zusammen mit Anhang A.2 gilt:

$$\begin{aligned}
 S_A(\omega) &= \frac{\varepsilon_0 c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_A(\tau) e^{i\omega \tau} d\tau \\
 &= \frac{\varepsilon_0 c}{16\pi} \left\{ \left[ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right] \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega \tau} d\tau \right. \\
 &\quad + \sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma[\tau - (\delta - \delta_i)] e^{i\omega \tau} d\tau + \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma[\tau + (\delta - \delta_i)] e^{i\omega \tau} d\tau \right\} \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma[\tau - (\delta_i - \delta_j)] e^{i\omega \tau} d\tau + \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma[\tau + (\delta_i - \delta_j)] e^{i\omega \tau} d\tau \right\} \right\} \\
 &= \frac{S_0(\omega)}{4} \left\{ R_R + \sum_{i=1}^N R_i + 2 \sum_{i=1}^N \sqrt{R_R R_i} \cos[\omega(\delta - \delta_i)] + \sum_{i \neq j=1}^N \sqrt{R_i R_j} \cos[\omega(\delta_i - \delta_j)] \right\} \quad (\text{A.4})
 \end{aligned}$$



## A.4 Betrag des OCT Signals

Der Betrag des OCT Signals errechnet sich aus dem Betrag von Gleichung A.4. Es gilt  $R_R = R_0$ .

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \right| = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} |\Gamma_A(\tau)| \\
 & = \frac{I_0}{4} \left\{ \underbrace{\left[ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right]^2}_{\text{„konstanter“ Term bei 0}} \gamma_G^2(\tau) + \underbrace{\sum_{i \neq j=0}^N R_i R_j \gamma_G^2[\tau - (\delta_i - \delta_j)]}_{\text{enthält vollständige Tiefeninformation}} \right. \\
 & + 2 \sum_{i \neq j=0}^N R_i R_j \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] \gamma_G[\tau + (\delta_i - \delta_j)] \cos[2\omega_0(\delta_i - \delta_j)] \\
 & + 2 \sum_{i \neq j=0}^N \left[ R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right] \sqrt{R_i R_j} \gamma_G[\tau] \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] \cos[\omega_0(\delta_i - \delta_j)] \\
 & + 2 \sum_{i \neq j \neq m=0}^N R_i \sqrt{R_j R_m} \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_m)] \cos[\omega_0(\delta_m - \delta_j)] \\
 & + 2 \sum_{i \neq j \neq m=0}^N R_i \sqrt{R_j R_m} \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] \gamma_G[\tau - (\delta_m - \delta_i)] \cos[\omega_0(2\delta_i - \delta_j - \delta_m)] \\
 & \left. + 2 \sum_{i \neq j \neq m \neq n=0}^N \sqrt{R_i R_j R_m R_n} \gamma_G[\tau - (\delta_i - \delta_j)] \gamma_G[\tau - (\delta_m - \delta_n)] \cos[\omega_0(\delta_i - \delta_j - \delta_m + \delta_n)] \right\}^{1/2} \quad (\text{A.5})
 \end{aligned}$$

## A.5 Reflektiertes Spektrum einer dispersiven Schicht

Die Feldreflektivität einer einzelnen Schicht  $f$  zwischen Substrat und „Cladding“ beträgt laut den Fresnel'schen Formel für TE-Polarisation:

$$r^{\text{TE}} = \frac{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} - k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) - i(M_{21}^{\text{TE}} + k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})}{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} + k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) + i(M_{21}^{\text{TE}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})} \quad (\text{A.6})$$

Für die einzelne Schicht ergibt sich die Matrix  $M^{\text{TE}}$  zu:

$$M^{\text{TM}} = \begin{pmatrix} \cos(k_{fz} z) & \frac{1}{k_{fz}} \sin(k_{fz} z) \\ -k_{fz} \sin(k_{fz} z) & \cos(k_{fz} z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Exemplarisch wird die Rechnung hier für dispersive Medien durchgeführt (Wellenzahlen  $k$  hängen von  $\omega$  ab, dieses wird in der folgenden Schreibweise nicht mitgeführt). Die Absorption wird aber aufgrund der Übersichtlichkeit vernachlässigt. Daher sind  $k_{sz}$ ,  $k_{fz}$  und  $k_{cz}$  reellwertige Funktionen. Für ein rechteckförmiges Quellspektrum der Amplitude 1, ergibt sich das reflektierte Spektrum aus dem Betragsquadrat von Gleichung (A.6).

$$R_A = \frac{(k_{cz} - k_{sz})^2 \cos^2(k_{fz} d) + (k_{sz} k_{cz} - 1)^2 \sin^2(k_{fz} d) \frac{1}{k_{fz}^2}}{(k_{cz} + k_{sz})^2 \cos^2(k_{fz} d) + (-k_{sz} k_{cz} - 1)^2 \sin^2(k_{fz} d) \frac{1}{k_{fz}^2}} \quad (\text{A.8})$$

Nach längerer Rechnung lässt sich Gleichung (A.8) umformen in

$$R_A = A \left[ \frac{B}{C} + \frac{1 - \frac{B}{C}}{C \cos^2(k_{fz}d) + 1} \right]. \quad (\text{A.9})$$

Dabei gilt:

$$A = \frac{\left(k_{fz} - \frac{k_{sz}k_{cz}}{k_{fz}}\right)^2}{\left(k_{fz} + \frac{k_{sz}k_{cz}}{k_{fz}}\right)^2} \quad (\text{A.10})$$

$$B = \frac{(k_{cz} - k_{sz})^2}{\left(k_{fz} - \frac{k_{sz}k_{cz}}{k_{fz}}\right)^2} - 1 \quad (\text{A.11})$$

$$C = \frac{(k_{cz} + k_{sz})^2}{\left(k_{fz} + \frac{k_{sz}k_{cz}}{k_{fz}}\right)^2} - 1 \quad (\text{A.12})$$

Es ist zu erkennen, dass das reflektierte Spektrum nicht wie in der OCT Theorie angenommen, linear von  $\cos(k_{fz}d)$  abhängt und das zugrunde liegende OCT Modell damit streng genommen nicht gilt.

### A.5.1 Näherung

Jedoch kann unter der Voraussetzung, dass sich die Brechzahlen nur wenig unterscheiden und damit Mehrfachreflexionen zwischen den Grenzflächen vernachlässigt werden können, das Ergebnis aus Gleichung (A.9) genähert werden. Denn für ähnliche Brechzahlen gilt:  $|C| \ll 1$ . Mit dem Grenzwert der geometrischen Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_0 q^k = \frac{a_0}{q-1} \quad \text{für } |q| < 1 \quad (\text{A.13})$$

gilt für das reflektierte Spektrum:

$$\begin{aligned} R_A &= A \left[ \frac{B}{C} + \left(1 - \frac{B}{C}\right) \sum_{k=0}^{\infty} (-C \cos^2(k_{fz}d))^k \right] \\ &\approx A \left[ \frac{B}{C} + \left(1 - \frac{B}{C}\right) (1 - C \cos^2(k_{fz}d)) \right] \\ &= A \left[ 1 + \left(\frac{B}{2} - \frac{C}{2}\right) + \left(\frac{B}{2} - \frac{C}{2}\right) \cos(2k_{fz}d) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Diese Näherungslösung (A.14) entspricht damit der algebraischen Form des verwendeten OCT Modells.

## A.6 Beweis Wiener-Kchinin Theorem

Sei  $\Gamma(\tau)$  die Autokorrelationsfunktion eines stationären Feldes  $E(t)$ .

$$\Gamma(\tau) = \langle E(t)E(t+\tau) \rangle \quad (\text{A.15})$$

Erfülle  $\Gamma(\tau)$  ferner die Dirichlet Bedingung und sei damit absolut integrierbar, so dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Gamma(\tau)| \, d\tau \quad (\text{A.16})$$

konvergiert und die Fourier-Transformation

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.17})$$

existiert. Sei  $\bar{E}(\omega)$  die beschränkte Fourier-Transformation der Feldes.

$$\bar{E}_T(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} E(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.18})$$

Die Zugehörige spektrale Intensitätsdichte des beschränkten Zeitbereiches ist

$$S_T(\omega) = \pi\varepsilon_0 n c \left\langle \frac{1}{T} |\bar{E}_T(\omega)|^2 \right\rangle \quad (\text{A.19})$$

und die gesamte spektrale Intensitätsdichte der existierende Grenzwert

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} S_T(\omega). \quad (\text{A.20})$$

**Wiener-Kchinin-Theorem:**

$$S(\omega) = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.21})$$

**Beweis (nach [24]):** Es ist

$$\begin{aligned} \left\langle |\bar{E}_T(\omega)|^2 \right\rangle &= \frac{1}{4\pi^2} \left\langle \left| \int_{-T/2}^{T/2} E(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \left\langle \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} E(t) E(\tau) e^{i\omega(t-\tau)} dt d\tau \right\rangle \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \langle E(t) E(\tau) \rangle e^{i\omega(t-\tau)} dt d\tau \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \Gamma(t-\tau) e^{i\omega(t-\tau)} dt d\tau \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Weiterhin gilt

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} f(t-\tau) dt d\tau = \int_{-T}^T (T-|\tau|) f(\tau) d\tau \quad (\text{A.23})$$

und damit

$$S_T(\omega) = \pi\varepsilon_0 n c \left\langle \frac{1}{T} |\bar{E}_T(\omega)|^2 \right\rangle = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-T}^T (1 - \frac{|\tau|}{T}) \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.24})$$

mit der Definition

$$\Gamma_T(\tau) = \begin{cases} (1 - \frac{|\tau|}{T})\Gamma(\tau) & |\tau| < T \\ 0 & |\tau| \geq T \end{cases}. \quad (\text{A.25})$$

Um das Integral zu lösen und umzuformen wird hier der Satz von Lebesgue verwendet.

**Satz von Lebesque:** Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$  ein Maßraum und sei  $(f_n)$  eine Folge von  $\mathcal{A}$ -messbaren Funktionen  $f_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ .

Die Folge  $(f_n)$  konvergiere  $\mu$ -fast überall gegen eine  $\mathcal{A}$ -messbare Funktion  $f$ . Ferner werde die Folge  $(f_n)$  von einer  $\mu$ -integrierbaren Funktion  $g$  auf  $\Omega$  majorisiert, sprich für alle  $n \in \mathbb{N}$  gelte  $|f_n| \leq g$   $\mu$ -fast überall. Es ist zu beachten, dass bei dieser Definition von Integrierbarkeit der Wert  $\infty$  ausgeschlossen ist, das heißt  $\int_{\Omega} |g| d\mu < \infty$ .

Dann sind  $f$  und alle  $f_n$   $\mu$ -integrierbar und es gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f_n d\mu = \int_{\Omega} f d\mu \quad \text{sowie} \quad (\text{A.26})$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} |f_n - f| d\mu = 0 \quad (\text{A.27})$$

Betrachtet man die  $f_n$  als die komplexwertigen Funktionen  $\Gamma_T(\tau)e^{i\omega\tau}$ , dann ist der zugehörige Grenzwert  $f = \Gamma(\tau)e^{i\omega\tau}$ . Des weiteren kann die Funktion  $g = |\Gamma(\tau)|$  gesetzt werden. Mit Gleichung A.25 gilt dann offensichtlich

$$|\Gamma_T(\tau)e^{i\omega\tau}| \leq |\Gamma(\tau)| \quad (\text{A.28})$$

und die Bedingungen für die Gültigkeit des Satzes von Lebesque sind erfüllt. Damit ist

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \pi\varepsilon_0 n c \lim_{T \rightarrow \infty} \left\langle \frac{1}{T} |\overline{E}_T(\omega)|^2 \right\rangle = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

# Anhang B

## Zusätzliche Abbildungen

### B.1 Auswirkungen der Dispersionskorrekturen auf das XCT Signal

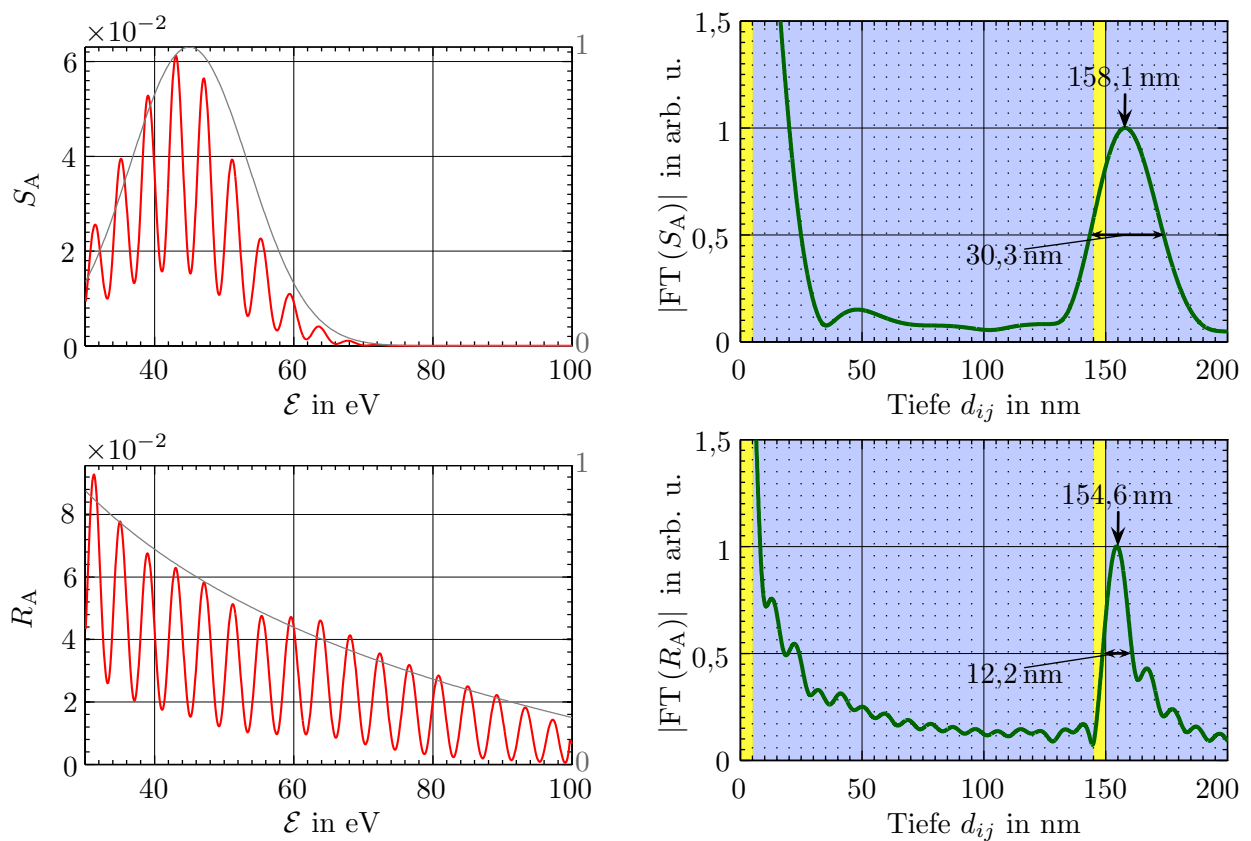


Abbildung B.1: Auswirkung der Dispersionskorrekturen auf das XCT-Signal eines simulierten Spektrums des Schichtsystems 1+2 (5 nm Gold, 140 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer): **(Links oben)** Reflektiertes Spektrum des Systems (rot), gaußförmiges Quellspektrum mit einer FWHM-Breite von 20 eV (grau) **(Rechts oben)** Betrag des XCT Signals ohne Korrekturen; Die Tiefe stimmt nicht mit der tatsächlichen überein (Gold: gelb, Silizium: blau), da hier mit einer Brechzahl des dominanten Material von  $n = 1$  gerechnet wurde. **(Links unten)** Mit dem Spektrum der Lichtquelle gewichtete Reflektivität des Systems (rot) und der grobe Verlauf der Reflektivität (grau) **(Rechts unten)** Betrag des XCT Signals korrigiert mit dem Spektrum der Lichtquelle; Die Auflösung verbessert sich.

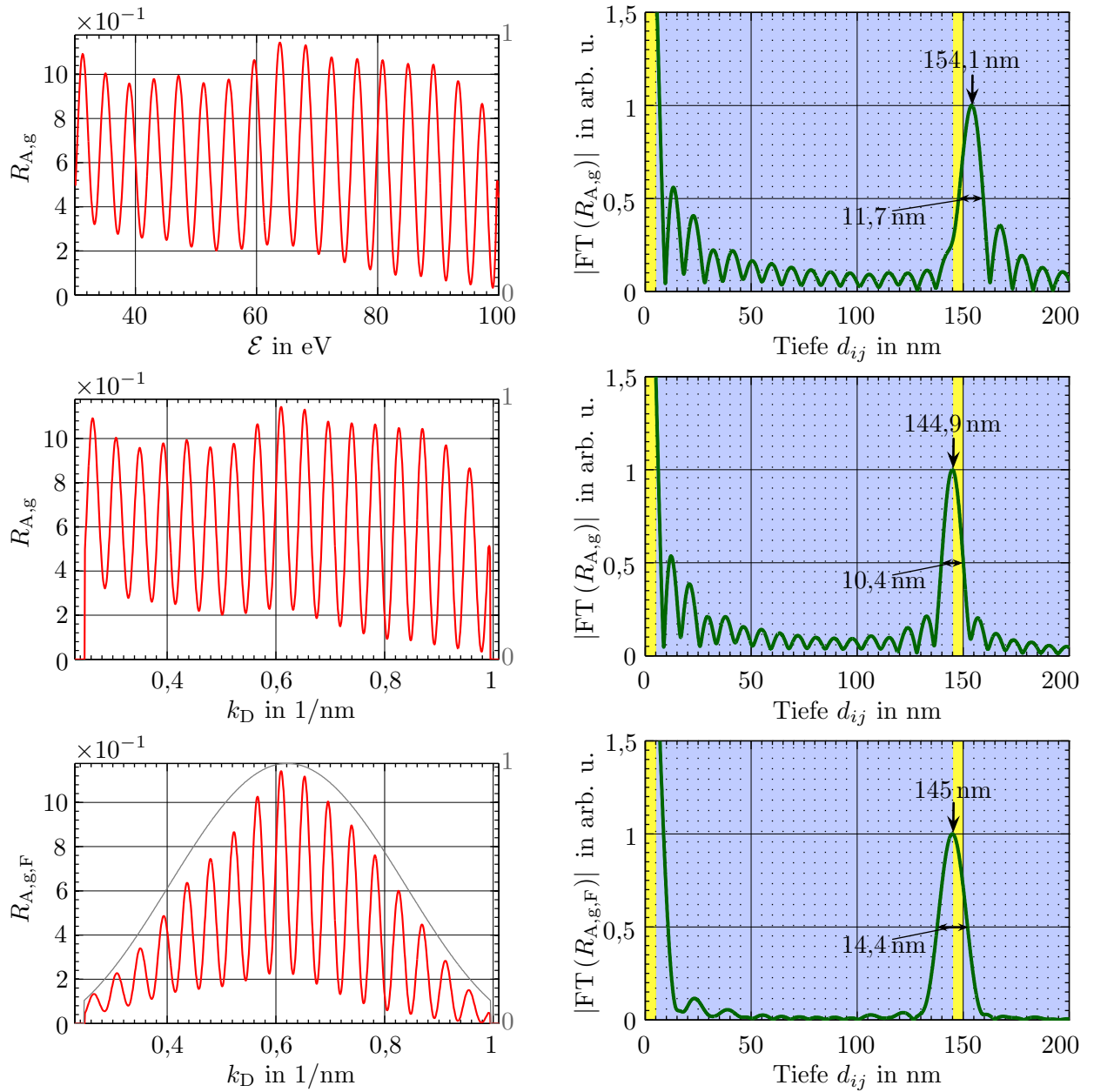


Abbildung B.2: Auswirkung der Dispersionskorrekturen auf das XCT-Signal eines simulierten Spektrums des Schichtsystems 1+2 (5 nm Gold, 140 nm Silizium, 5 nm Gold auf einem Siliziumwafer): **(Links oben)** Mit dem Spektrum der Lichtquelle und dem groben Verlauf gewichtete Reflektivität des Systems (rot) **(Rechts oben)** Betrag des XCT Signals korrigiert mit dem Spektrum der Lichtquelle und dem groben Verlauf; Die Auflösung verbessert sich. **(Links mitte)** Mit dem Spektrum der Lichtquelle und dem groben Verlauf gewichtete Reflektivität des Systems über  $k_D$  mit Silizium als dominantes Material (rot) **(Rechts mitte)** Betrag des XCT Signals korrigiert mit dem Spektrum der Lichtquelle und dem groben Verlauf und der Fourier-Transformation im  $k$ -Raum; Die Auflösung erreicht ein Maximum und die Tiefe stimmt mit der tatsächlichen überein. **(Links unten)** Mit dem Spektrum der Lichtquelle und dem groben Verlauf gewichtete Reflektivität des Systems über  $k_D$  mit Silizium als dominantes Material und einer Fensterfunktion (rot), Kaiser-Bessel-Fenster mit  $\beta = 4$  (grau) **(Rechts unten)** Betrag des XCT Signals korrigiert mit dem Spektrum der Lichtquelle und dem groben Verlauf und der Fourier-Transformation im  $k$ -Raum und Fensterfunktion; Die Auflösung wird etwas schlechter, aber die Nebenmaxima werden unterdrückt.

# Anhang C

## Sonstiges

### C.1 Spektrale Funktion des Spektrometers

Mit Hilfe des Monochromators wurde die Position der ersten Ordnung für Photonenergien im Silizium-Transmissionsfenster relativ zur nullten Ordnung des Spektrometersgitters bestimmt. So konnte für das 1000 Linien/mm eine spektrale Kalibrierung durchgeführt werden. Ausserdem wurde die spektrale Breite jedes Pixels als Funktion der Position relativ zur nullten Gitterordnung bestimmt. Die Ergebnisse sind in Abbildung C.1 dargestellt.

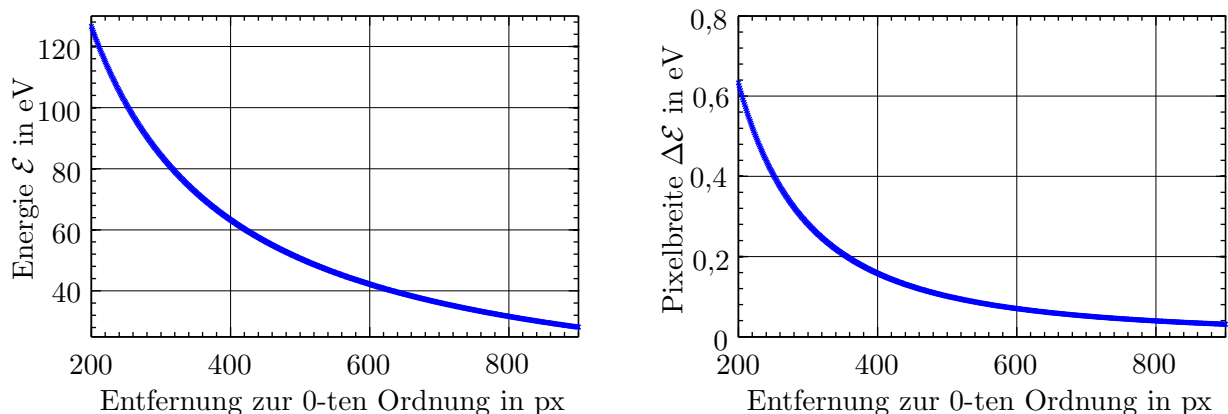


Abbildung C.1: Spektrale Funktion des Spektrometers für das 1000 Linien/mm Gitter: **(Links)** Photonenergie über der Pixelposition relativ zur nullten Beugungsordnung **(Rechts)** Photonenergiebreite eines Pixels über der Pixelposition relativ zur nullten Beugungsordnung

### C.2 Filtertransmissionen

Die Transmission des  $0,2 \mu\text{m}$ -dicken Aluminium- und des ebenfalls  $0,2 \mu\text{m}$ -dicken Zirkonfilters wurde bestimmt, indem die Counts in der ersten Ordnung auf der CCD-Kamera mit und ohne Filter bei sonst gleichen Bedingungen ermittelt wurden. Die Energie der Strahlung wurde mit dem Monochromator eingestellt und durchgeföhrt. Das Ergebnis ist in Abbildung C.2 gezeigt.

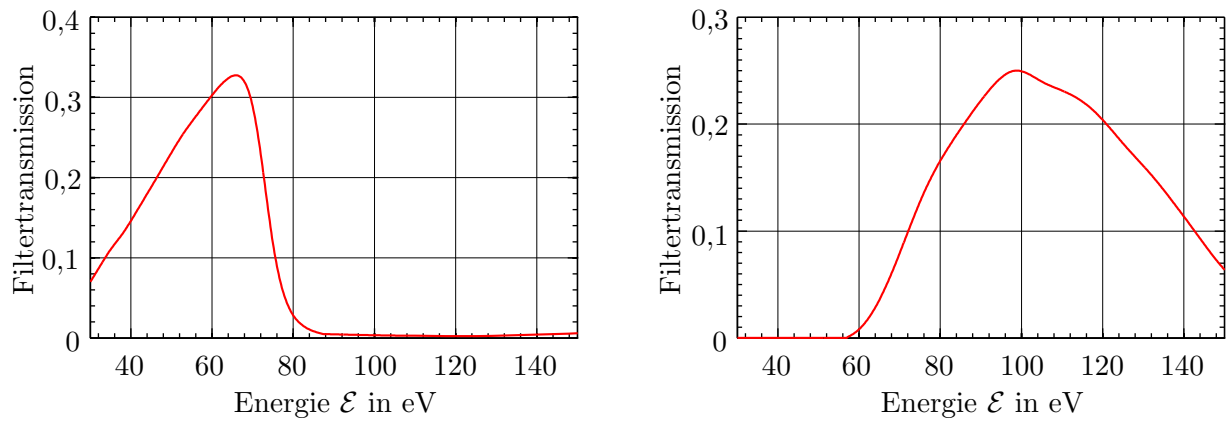


Abbildung C.2: Transmission der verwendeten Filter: (**Links**)  $0,2\ \mu\text{m}$ -dicker Aluminiumfilter (**Rechts**)  $0,2\ \mu\text{m}$ -dicker Zirkonfilter



# Abbildungsverzeichnis

1.1	OCT-Aufbau . . . . .	10
1.2	TD-OCT-Messsignal . . . . .	11
1.3	FD-OCT-Messsignal . . . . .	13
1.4	Abstrahlung Ladung . . . . .	16
1.5	Undulator Prinzip . . . . .	17
2.1	Eindringtiefen in Silizium und $B_4C$ . . . . .	20
2.2	Skizze XCT-Aufbau . . . . .	22
2.3	Gangunterschied . . . . .	24
3.1	Probenübersicht . . . . .	27
3.2	Probenanordnung auf Siliziumwafer . . . . .	28
3.3	Maßstäbliche Skizze des optischen Aufbaus . . . . .	30
3.4	Dreidimensionale Skizze der Vakuumkammer . . . . .	32
3.5	Draufsicht auf optischen Aufbau in der Vakuumkammer . . . . .	32
3.6	Fotos des Aufbaus . . . . .	33
4.1	Rohdatenbild von SS-XCT mit CCD-Kamera . . . . .	41
4.2	Rohdatenbild des reflektierten Spektrums an Probe 1+2 . . . . .	43
4.3	Lineout Probe 1+2 . . . . .	44
4.4	Rohdatenbild des Reflektierten Spektrums an reiner Siliziumoberfläche . . . . .	44
4.5	Lineout Siliziumoberfläche . . . . .	45
4.6	Reflektivität der Probe 1+2 . . . . .	45
4.7	korrigierte Reflektivität der Probe 1+2 . . . . .	46
4.8	Brechzahl von Silizium . . . . .	47
4.9	korrigierte und transformierte Reflektivität der Probe 1+2 . . . . .	47
4.10	XCT Signal der Probe 1+2 . . . . .	48
4.11	SD-XCT Messung der Probe 1+2 . . . . .	50
4.12	SD-XCT Messung der Probe 1+3 . . . . .	51
4.13	SD-XCT-Messung der Probe 1+7 und 1+8 . . . . .	52
4.14	SD-XCT-Messung der Probe 1-7 . . . . .	53
4.15	SS-XCT Messungen der Probe 1-7 . . . . .	54
4.16	SS-XCT-Messung der Probe 2+2 . . . . .	55
4.17	SS-XCT Messung der Probe 2+1 . . . . .	55
4.18	SS-XCT-Messung der Proben 2+7 und 2+8 . . . . .	56
4.19	SS-XCT-Messung der Probe 2-7 . . . . .	57
4.20	SS-XCT-Messung der Probe 2+1 unter $15^\circ$ . . . . .	58
4.21	Tomografierter Ausschnitt vom Siliziumwafer 1+ . . . . .	60
4.22	Tomografie . . . . .	61
4.23	Ablagerung von Kohlenstoff . . . . .	62

B.1	Auswirkung der Korrekturen auf das XCT-Signal 1 . . . . .	76
B.2	Auswirkung der Korrekturen auf das XCT-Signal 2 . . . . .	77
C.1	Spektrale Funktion des Spektrometers . . . . .	78
C.2	Transmission des Aluminium- und des Zirkonfilters . . . . .	79

## **Erklärung**

Hiermit erkläre ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbständig verfasst und ich keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Jena, den 30. April 2012

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände, die vorliegende Diplomarbeit für die öffentliche Nutzung in der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Jena, den 30. April 2012