



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DRESDEN

Diplomarbeit

CHARAKTERISIERUNG EINES RÖNTGENNANOFOKUS MITTELS DES RONCHITESTS

Roman Brendler
Mat.-Nr.: 3301984

Betreut durch:
Prof. Dr. Christian Schroer
und:
Priv.-Doz. Dr. Theo Woike

Eingereicht am 26.03.2014

ABRISS

Ronchigramme werden schon lange genutzt um, im Bereich sichtbaren Lichts Fehler in Optiken zu erkennen. In dieser Arbeit wird ein Experiment vorgestellt und ausgewertet, welches sich mit der Nützlichkeit von Ronchigrammen im Röntgenbereich befasst. Dabei wurden refraktive Röntgenlinsen aus Silizium sowie optische Wolframtmitter benutzt. Zum Vergleich der durch die Ronchigramme gewonnen Informationen werden neben theoretischen Überlegungen auch durchgeführte Ptychographien und Simulationen des Experiments genutzt sowie der Versuch gemacht, die Interpretation der Ronchigramme durch numerische Optimierung einer Simulation von individueller Auswertung zu entkoppeln und zu standardisieren. Dabei werden Einsichten über die Feststellbarkeit der Lage der Röntgenlinsen und deren Fabrikationsfehler gewonnen. Aufgrund der gewonnen Erfahrungen wird vorgeschlagen, wie Ronchigramme bei der Kalibrierung der Linsen genutzt werden könnten. Das Experiment wurde an der Beamline P06/PETRAIII am DESY in Hamburg durchgeführt.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einführung, Motivation und Aufbau der Arbeit	5
2	Theoretische Vorbetrachtungen zur Physik des Ronchitests	7
2.1	Prinzipieller Aufbau	7
2.2	Einige Begriffe	9
2.3	Geometrisches Modell	10
2.4	Wellenoptisches Modell	11
3	Durchführung des Experiments	13
3.1	Aufbau vor Ort	13
3.1.1	Quelle	13
3.1.2	Linse	13
3.1.3	Gitter	15
3.1.4	Detektoren	15
3.2	Überblick über die Messreihen/Verlauf der Messzeit	16
4	Ptychographie	19
4.1	Modell und Funktionsschema	19

5	Simulation	21
5.1	Modell der Simulation	21
5.1.1	Standardsimulationen	21
5.1.2	Gitterposition	23
5.1.3	Gitterperiode	25
5.2	Modellierung der erwarteten Linsenfehler	26
5.2.1	Verdrehung der Linsen	26
5.2.2	Ätzfehler	29
5.3	Nichtbeachtete Effekte	32
6	Optimierung der Simulationen	33
6.1	Herangehensweise	33
6.2	Anforderungen	33
6.3	Auswahl der Optimierungsmethode	33
6.3.1	Koordinatenverfahren	34
6.3.2	Konjugierte Gradientenmethode	34
6.3.3	Nelder-Mead Simplex	34
6.3.4	Simulierte Abkühlung	35
6.3.5	Evolutionäre Methoden	36
6.3.6	Black-Box-Methoden	36
6.3.7	In der Arbeit verwendete Methoden	36
7	Auswertung	37
7.1	Fokuspositionen aus Ronchigrammen	37
7.2	Ptychographie	40
7.3	Linsenfehler	40
7.4	Optimierung	41
8	Ergebnisse	45
8.1	Schlussfolgerungen über die Linsenfehler	45
8.2	Ergebnisse der Strahlcharakterisierung	45
8.3	Vorschlag zur Feinkalibrierung der Linsen mittels Ronchigramme	45

1 EINFÜHRUNG, MOTIVATION UND AUFBAU DER ARBEIT

Der Ronchitest wurde vom italienischen Physiker Vasco Ronchi entwickelt und von ihm erstmals im Jahr 1923 beschrieben. Die Grundidee ist es, zwei Beugungsmaxima eines Strahls, erzeugt durch Beugung an einem optisches Gitter, kohärent überlappen zu lassen und aus dem dabei entstehenden Beugungsmuster Rückschlüsse auf die Form der Wellenfront am Ort des Gitters zu ziehen. Im Laufe der Jahre wurde diese Methode auf viele optische Systeme angewendet, um die Qualität von Optiken zu prüfen. Der Ronchitest eignet sich aufgrund seiner Einfachheit sowohl in Anwendung als auch in Interpretation, die notwendige Erfahrung vorausgesetzt, besonders für schnelle Ergebnisse. Weiteres zur Historie sowie weitere Primärquellen in Quelle [2].

Die in den letzten Jahrzehnten stattfindende Entwicklung von Optiken im Röntgenbereich hat auch zum zunehmenden Bedürfnis geführt, die Form des Strahls, des Fokus bzw. die verursachenden Fehler in den Optiken zu identifizieren und zu charakterisieren. Da der Ronchitest nur ein einziges weiteres optisches Bauteil erfordert und vor allem auf die Umlenkung des Strahls verzichten kann, ist er als Interferometriemethode für den Röntgenbereich interessant geworden. Seine Eignung zur Charakterisierung eines Strahlverlaufs bzw. einer Wellenfront im Röntgenbereich soll in dieser Arbeit für eine Synchrotronstrahlungsquelle mit NFLs [11] (Nanofocusing Lenses) als fokussierender Optik untersucht werden.

Bereits etablierte Methoden zur Untersuchung des Strahlverlaufs sind zum Beispiel die Knife-Edge-Methode sowie die Ptychographie [13]. Bei der Letzteren wird sowohl das Bild des Objektes rekonstruiert, als auch die komplexe Wellenfunktion am Ort des Bildes. Deshalb wurden zum Vergleich Ptychographiemessungen an einem Siemensstern durchgeführt. Ziel dieser Arbeit ist es, eine Kurzbeschreibung der Konzepte und Methoden zu geben, die mir zur Auswertung der von uns durchgeführten Ronchimesung notwendig bzw. sinnvoll erschienen und die erreichten Ergebnisse vorzustellen.

Kapitel 2 beschäftigt sich mit den theoretischen Grundlagen und stellt Formeln für den späteren Gebrauch bereit. In Kapitel 3 werden der Verlauf des Experiments beschrieben und einige währenddessen getroffene Entscheidungen erläutert. Die Grundlagen der Ptychographie werden wiederum in Kapitel 4 angeschnitten. Verschiedene Simulationen und darauf aufbauend die Erkundung der im vorliegenden Fall möglichen Ronchigramme und deren Zusammenhang mit den Verformungen des Wellenfeldes werden in Kapitel 5 vorgestellt. Kapitel 6 stellt kurz einige in Betracht gezogene Optimierungsmethoden vor und erklärt deren Vor- und Nachteile in Bezug auf die Ansprüche des vorliegenden Problems. Das Vorgehen bei der Auswertung und die so gewonnen Erkenntnisse werden in Kapitel 7 dargestellt. Schließlich werden in Kapitel 8 die Ergebnisse zusammengefasst und verglichen sowie ein Vorschlag gemacht, um die Feinkalibrierung des Winkels zwischen den Linsen auf 90° mit Hilfe des Ronchitests durchzuführen.

2 THEORETISCHE VORBETRACHTUNGEN ZUR PHYSIK DES RONCHITESTS

2.1 PRINZIPIELLER AUFBAU

Der Aufbau des Ronchitests besteht im Prinzip aus vier Komponenten: Der Strahlungsquelle, der zu untersuchenden Optik, dem optischen Gitter und dem Detektor. Es gibt einige verschiedene Varianten des Aufbaus, etwa, dass anstatt eines geraden Strahlengangs und einmaligem Durchgang durch das Gitter der Strahl reflektiert wird, um noch nochmals das Gitter zu passieren, dann also einmal vor und nochmals der Optik, siehe auch [2].

In unserem Fall wurde ein linearer Strahlengang gewählt. Der Hauptgrund dafür ist, dass Röntgenstrahlung sich schlecht umlenken lässt und man selbst dann oft große Verluste in der Intensität hinnehmen müsste sowie weitere Fehlerquellen einbaut. Außerdem sahen wir in unserem Fall keinen deutlichen Vorteil in einem anderen Aufbau.

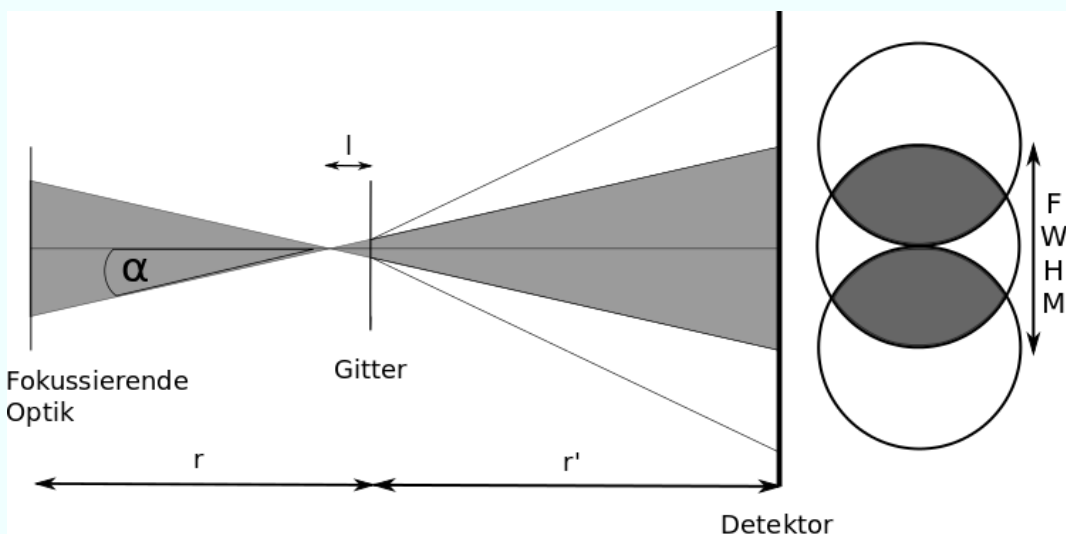


Abbildung 2.1: Grundaufbau des Ronchitests

Der Ronchitest ist eine Interferometriemethode. Die Aufspaltung des Strahls findet dabei über das Gitter statt und beobachtet wird die Interferenz zwischen je zwei (oder ggf. mehreren) Beugungsordnungen als Abbildung der Wellenfront am Ort des Gitters. Eine notwendige Bedingung ist folglich das Überlappen der Beugungsordnungen. Um die Interpretation einfach zu halten, wird meist der maximale Überlapp zwischen nullter und erster Beugungsordnung gewählt, bei dem gerade noch kein Überlapp zwischen den beiden ersten Beugungsordnungen stattfindet. Um das zu erreichen, ist die Periode des Gitters ein geeigneter experimenteller Parameter. Für den Winkel α , unter dem die m -te Beugungsordnung zu sehen ist, gilt in Abhängigkeit von der Periode des Gitters (d) sowie der Energie, bzw. der Wellenlänge (λ) [4]:

$$\sin(\alpha) = \frac{2m\lambda}{d} \quad (2.1)$$

Nehmen wir an, dass als Kriterium für optimale Überlagerung die Halbwertsbreite (engl.: Full width at half maximum: FWHM) herangezogen wird. Also, dass wir fordern: Der Ort der Halbwertsbreite des nullten Maximums soll gleich dem Mittelpunkt des ersten Maximums sein. Aus rein geometrischen Überlegungen heraus gilt dann mit r als Abstand zwischen Gitter und Detektor:

$$\tan(\alpha) = \frac{FWHM}{2r'} \quad (2.2)$$

Weiter gilt für die Definition der numerische Apertur NA für den Fall eines Brechungsindex nahe 1:

$$NA = \sin(\alpha) \quad (2.3)$$

und für kleine Winkel ist $\tan(\alpha) \approx \sin(\alpha)$ und entsprechend kann man setzen:

$$NA = \sin(\alpha) \approx \tan(\alpha) = \frac{FWHM}{2r'} \approx \frac{2m\lambda}{d} \quad (2.4)$$

Da uns die erste Ordnung interessiert, ist $m = 1$. Durch Umstellen erhalten wir damit nun eine Abschätzung für die optimale Gitterperiode:

$$d = \frac{2\lambda}{NA} \quad (2.5)$$

Bei hohen Energien kann es also entsprechend zu einer technischen Herausforderung werden, Gitter mit ausreichend kleiner Periode und gleichzeitig ausreichender Dicke herzustellen.

Ein Problem, das sich speziell im Röntgenbereich stellt, ist die Strahldivergenz. Da der Strahl nur schwach divergiert, muss man mit dem Detektor entsprechend weit vom Gitter entfernt sein bzw. eine ausreichend kleine Pixelgröße haben. Im Bereich sichtbaren Lichts ist dieses Problem weniger kritisch, da man den Strahl hier leicht durch ein weiteres Linsensystem aufweiten kann.

2.2 EINIGE BEGRIFFE

Um Verwirrung zu vermeiden, sollen zunächst einige benötigte Begriffe der Optik geklärt sowie später verwendete Konventionen festgelegt werden. Im Experiment wurden Linsen verwendet, die lediglich in eine Richtung fokussieren. Abbildung 2.2 zeigt kurz den Gedanken hinter den Bezeichnungen „horizontale Linse“ und „vertikale Linse“. Die hier gewählte Bezeichnungskonvention ist dabei, dass der Linsenstapel, welcher den Strahl in horizontaler Richtung verengt/fokussiert als horizontale Linse bezeichnet werden soll und entsprechend die in vertikaler Richtung verengende/fokussierende als vertikale Linse. Der vertikale Linienfokus entspricht dabei im idealen Falle der Sagittalebene, während der horizontale der Meridionalebene entspricht. Später werden wir sehen, dass dies für den Fall, dass bestimmte Fehler im Aufbau auftreten, nicht mehr der Fall sein wird, sondern sich die beiden Ebenen relativ zu den Linsen verdrehen. Im Allgemeinen ist die Sagittalebene dadurch definiert, dass sie die optische Achse und den Hauptstrahl enthält, während die Meridionalebene dadurch definiert ist, dass sie den Hauptstrahl enthält und senkrecht auf der Sagittalebene steht.[3]

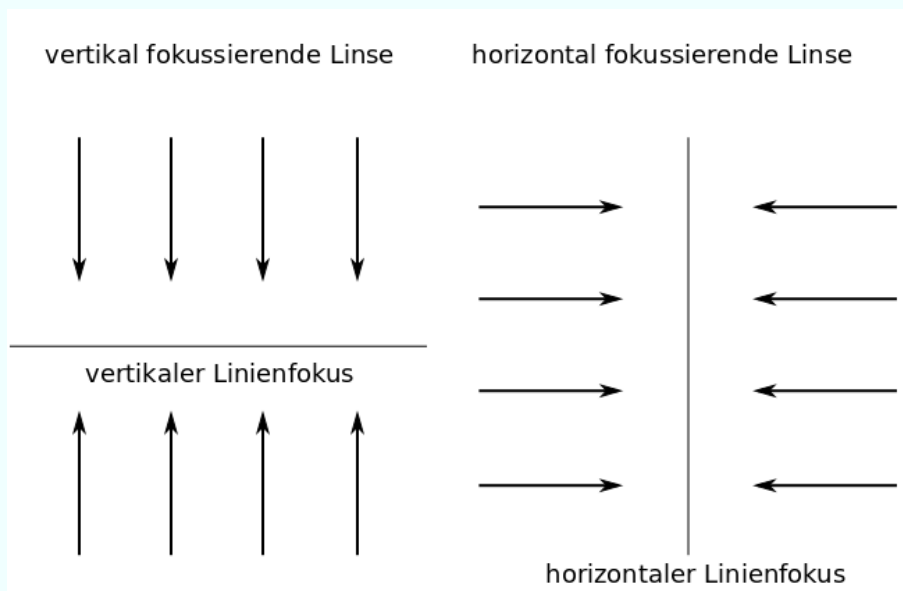


Abbildung 2.2: Prinzipskizze: Wirkung der Linsen auf die Wellenfront

Im Übrigen soll die positive Drehrichtung im Rahmen dieser Arbeit im Uhrzeigersinn, strahlaufrwärts gesehen, sein. Abbildung 2.3 zeigt schematisch ein horizontales Ronchigitter mit der Gitterperiode d und dem Winkel ϕ zwischen Ausrichtung der Gitterlinien und der Meridionalebene.

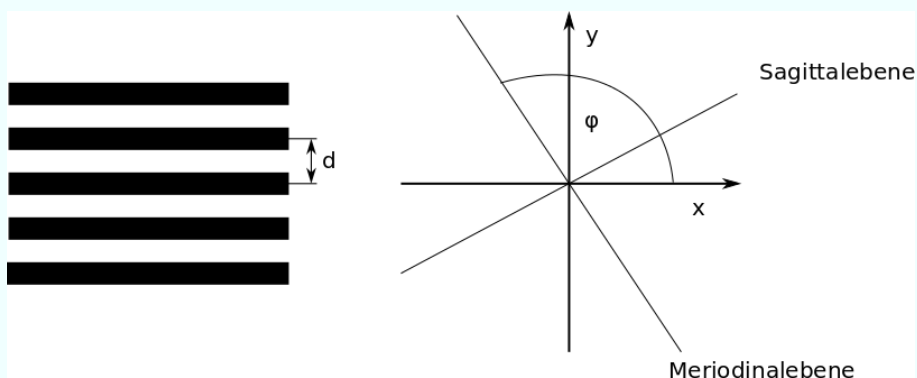


Abbildung 2.3: Prinzipskizze: horizontales Gitter

2.3 GEOMETRISCHES MODELL

In der geometrischen Betrachtungsweise kann die Wellenfront eines Systems mit primären Aberrationen beschrieben werden durch [2]:

$$W = A(x^2 + y^2)^2 + By(x^2 + y^2) + C(x^2 + 3y^2) + D(x^2 + y^2) \quad (2.6)$$

Hier stellen die Koeffizienten A, B und C sphärische Aberration, Koma und Astigmatismus dar. Der Koeffizient D bezieht sich auf den Abstand zwischen Gitter und Fokus. Genauer gilt:

$$D = \frac{l}{2r^2} \quad (2.7)$$

Weiter gilt als Darstellung für die Modulation durch das Gitter:

$$\frac{\delta W}{\delta x} \cos \phi - \frac{\delta W}{\delta y} \sin \phi = -\frac{md}{r} \quad (2.8)$$

m ist hier der m -te Gittersteg. Wenn nun die erste Gleichung entsprechend differenziert wird, so dass sie der linken Seite der zweiten Gleichung entspricht, dann führt das Einsetzen zu einem Modell für die Ronchigramme:

$$\begin{aligned} -\frac{md}{r} = & 4A(x^2 + y^2)(x \cos \phi - y \sin \phi) + B[2xy \cos \phi - (3y^2 + x^2) \sin \phi] \\ & + 2C(x \cos \phi - 3y \sin \phi) + 2D(x \cos \phi - 3y \sin \phi) + 2D(x \cos \phi - y \sin \phi) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Weiter wird typischerweise eine Drehung eingeführt, um für verschiedene Aberrationen das Problem in günstigeren Bezugssystemen zu beschreiben:

$$x = \mu \cos(\psi) + \xi \sin(\psi) \quad (2.10)$$

$$y = -\mu \sin(\psi) + \xi \cos(\psi) \quad (2.11)$$

Von Interesse ist vor allem die Wirkung eines Astigmatismus. Um diese zu beschreiben, wählt man günstigerweise die Rotation zu $\psi = \phi$, dem Winkel zwischen den Fokusebenen und dem Gitter. Wenn weiter keine sphärische Aberration und kein Koma vorliegt, also $A = 0$ und $B = 0$ ist, dann gilt:

$$2C[\mu(2 - \cos(2\phi)) - \xi \sin(2\phi)] + 2D\mu = -\frac{md}{r} \quad (2.12)$$

Dies entspricht geraden, äquidistanten und parallelen Streifen im Ronchigramm. Für den Winkel β zwischen der Schlitzzrichtung des Gitters und den Streifen im Ronchigramm gilt dann weiter:

$$\tan(\beta) = \frac{C \sin(2\phi)}{D + C(2 - \cos(2\phi))} \quad (2.13)$$

Wie man sieht, gibt es eine Abhängigkeit vom Abstand zwischen Fokus und Gitter. Das heißt, dass sich die Linien im Ronchigramm während des Fahrens des Gitters auf der optischen Achse drehen. Unter der Bedingung

$$D + C(2 - \cos(2\phi)) = 0 \quad (2.14)$$

stehen die Linien im Ronchigramm senkrecht zu den Gitterstegen. Dies geschieht in Abhängigkeit von ϕ . Für die Grenzfälle, dass ϕ gegen 90° oder 0° geht, wäre dieser Umschlag (auch „Capriola“ oder von uns „Flip“ genannt) am horizontalen (90°) bzw. vertikalen (0°) Fokus. In diesen Fällen gilt aber auch $\sin(2\phi) = 0$ was bedeutet, dass die Linien im Ronchigramm durch den Astigmatismus nicht mehr verdreht werden. Die stärkste Drehung ist für $\phi = 45^\circ$ zu erwarten. Die Position in der dann die Senkrechtstellung der Ronchilinen zu beobachten ist, befindet sich dann allerdings genau zwischen vertikalem und horizontalem Fokus. Praktisch bedeutet bereits dies eine Einschränkung der Möglichkeit, die horizontale und vertikale Fokusposition direkt mittels Ronchigramme zu vermessen, da man immer einen Kompromiss zwischen einem gut sichtbaren Effekt durch den Astigmatismus und der Position des Flips am horizontalen bzw. vertikalen Fokus schließen muss.

2.4 WELLENOPTISCHES MODELL

Es wird angenommen, dass sich die Wellenfront am Ausgang der Optik (x_0, y_0) durch eine komplexe Funktion:

$$F_0(x_0, y_0) = \exp \left[\frac{i2\pi W(x_0, y_0)}{\lambda} \right] \quad (2.15)$$

beschreiben lässt; hier ist $W(x_0, y_0)$ die Deformation der Wellenfront. Diese kann für primäre Aberrationen wie im geometrischen Modell nach Formel 2.6 gesetzt werden.

Am Ort des Gitters (x_r, y_r) gilt für das Wellenfeld dann:

$$U(x_r, y_r) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F_0(x_0, y_0) \exp \left[-i \frac{2\pi}{\lambda r} (x_r x_0 + y_r y_0) \right] dx_0 dy_0 \quad (2.16)$$

Hier ist der Exponentialterm der Propagatorkernel im Fourierraum. Das Gitter wirkt wie ein Filter im Fourierraum am Ort (x_r, y_r) der durch eine Gitterfunktion $M(x_r, y_r)$ repräsentiert wird. Für die Amplitude auf dem Detektor gilt dann mit einer weiteren Propagation vom Gitter (x_r, y_r) zum Ort des Detektors (x_1, y_1) :

$$G(x_1, y_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U(x_r, y_r) M(x_r, y_r) \left[\exp \left[i \frac{2\pi}{\lambda r} (x_r x_1 + y_r y_1) \right] \right] dx_r dy_r \quad (2.17)$$

Durch Einsetzen von $U(x_r, y_r)$ ergibt sich:

$$G(x_1, y_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F_0(x_0, y_0) dx_0 dy_0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} M(x_r, y_r) \times \left[\exp \left[i \frac{2\pi}{\lambda r} [(x_1 - x_0)x_r + (y_1 - y_0)y_r] \right] \right] dx_r dy_r \quad (2.18)$$

Für ein Gitter, bestehend aus geraden, parallelen, äquidistanten Stegen gilt:

$$M(x_r) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \exp\left(i \frac{2\pi n}{d} x_r\right) \quad (2.19)$$

Damit ergibt sich durch weiteres Einsetzen:

$$\begin{aligned} G(x_1, y_1) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \int_{-\infty}^{\infty} \int F_0(x_0, y_0) dx_0 dy_0 \\ &\times \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i \frac{2\pi}{\lambda r} \left(x_1 - x_0 + \frac{\lambda r n}{d}\right) x_r\right] dx_r \right] \\ &\times \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i \frac{2\pi}{\lambda r} (y_1 - y_0) y_r\right] dy_r \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

Mit der Darstellung der Diracschen Delta-Funktion als

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(k - k_0)x] dx = \delta(k - k_0) \quad (2.21)$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned} G(x_1, y_1) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \int_{-\infty}^{\infty} \int F_0(x_0, y_0) \delta\left(x_1 - x_0 + \frac{\lambda r n}{d}\right) \delta(y_1 - y_0) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n F_0\left(x_1 + \frac{\lambda r n}{d}, y_1\right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Für den Fall einer Stufenfunktion mit gleich breiten niedrigen wie hohen Bereichen, also eines Stufengitters mit einem Verhältnis von 1:1 zwischen Stegbreite und Lückenbreite ergibt sich für die Faktoren B_n in der Gitterfunktion:

$$B_n = (-1)^n \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)}{n\pi} \quad (2.23)$$

und somit für die Amplitude auf dem Detektor:

$$G(x_1, y_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)}{n\pi} F_0\left(x_1 + \frac{\lambda r n}{d}, y_1\right) \quad (2.24)$$

Im Prinzip sollten also alle geraden Beugungsordnungen unterdrückt sein, wie auch in [3] dargestellt.

3 DURCHFÜHRUNG DES EXPERIMENTS

Das Experiment, welches im Folgenden beschrieben und ausgewertet werden soll, fand vom 20.05.2013 bis 24.05.2013 statt. Neben Mitarbeitern des ISP waren auch Professor Ulrich Vogt und einige seiner Mitarbeiter für die Durchführung vor Ort.

3.1 AUFBAU VOR ORT

Die Abbildung 3.1 zeigt den Versuchsaufbau schematisch.

3.1.1 Quelle

Das Experiment wurde an der Beamline P06 an PETRAIII am DESY durchgeführt. Die Röntgenstrahlung wird mittels eines Undulators erzeugt. Um möglichst monochromatische Strahlung zu erhalten, wird ein Doppelkristall-Silizium-Monochromator verwendet. Optional kann auch noch ein Spiegel eingesetzt werden, um die höheren harmonischen Moden herauszufiltern. Dies haben wir im Experiment auch getan. Allerdings ist damit ein weiterer Intensitätsverlust verbunden.

3.1.2 Linsen

Verwendet wurden aus einem Siliziumwafer geätzte enddimensional parabolische Linsen. Dafür wurde ein Ionenätzverfahren angewendet [12]. Dabei sind jeweils viele Einzellinsen direkt hintereinander in den Wafer geätzt. Um eine Fokussierung in zwei Dimensionen zu erreichen, wurden zwei Linsenstapel senkrecht zueinander eingebaut.

In der folgenden Tabelle sind die Parameter der konkret gewählten Linsen aufgelistet:

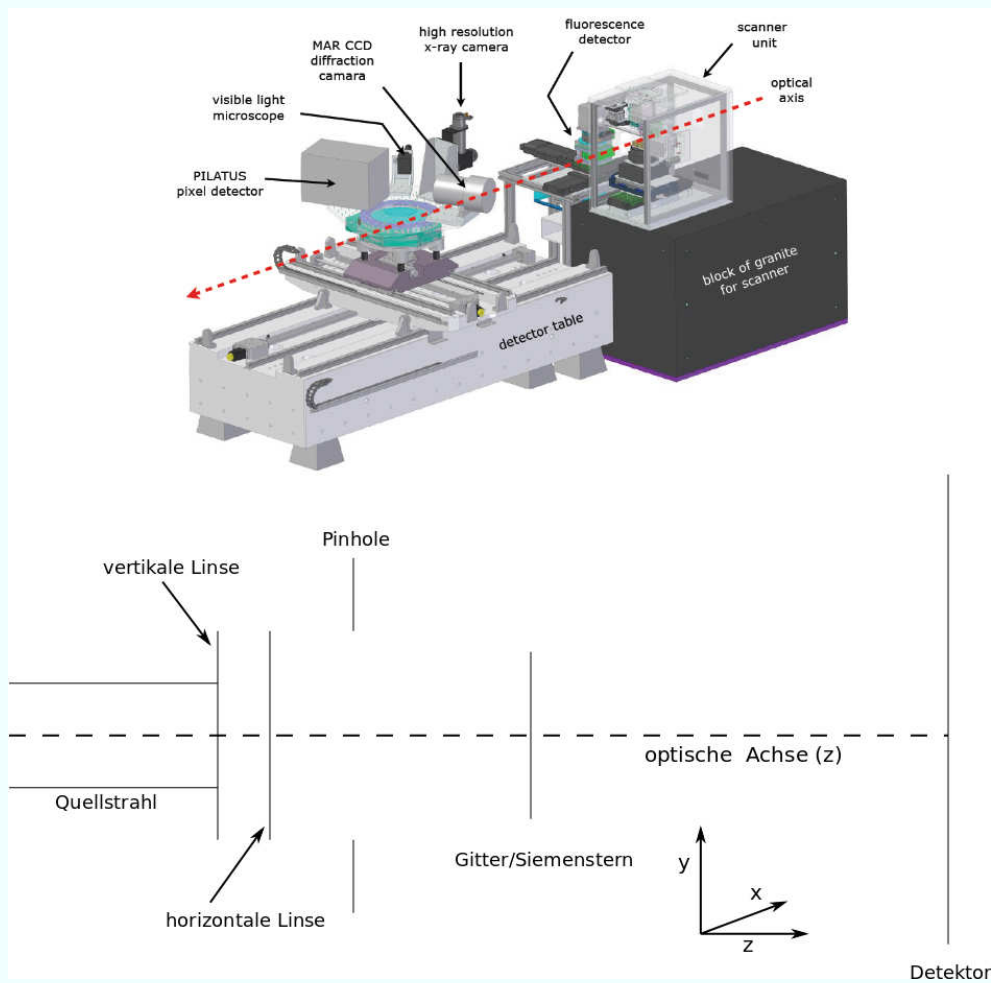


Abbildung 3.1: Prinzipskizze: Strahlverlauf, Quelle oberes Bild [14]

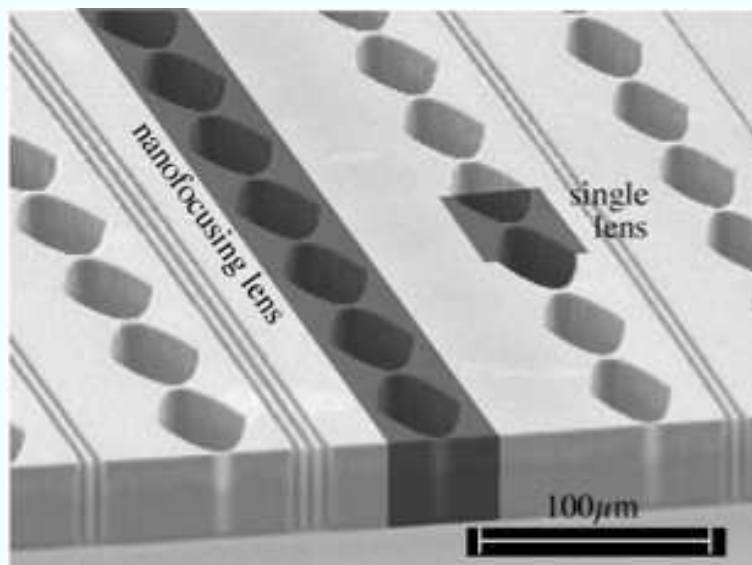


Abbildung 3.2: Nanofokussierender Linsenstapel [12]

Tabelle 3.1: Eingesetzte Linsen

Vertikale Linse:	
Einzellinsen	35
Krümmungsradius	0.01 mm
Abstand zwischen zwei Einzellinsen	0.0015 mm
Gesamtlänge einer Einzellinse	0.03 mm
Horizontale Linse:	
Einzellinsen	35
Krümmungsradius	0.008 mm
Abstand zwischen zwei Einzellinsen	0.0015 mm
Gesamtlänge einer Einzellinse	0.03 mm

3.1.3 Gitter

Die zur Verfügung stehenden Gitter waren Luft-Wolframtgitter der Dicke von $1\ \mu\text{m}$, welche auf einem Diamantsubstrat von einer Dicke von $100\ \mu\text{m}$ aufgebracht waren. Das Verhältnis von Lückenbreite (Luft) zu Stegbreite (Wolfram) war 1:1. Wie in [3] beschrieben, sind bei einem Ronchigitter, welches primär als Absorptionsgitter fungiert, die 2. Beugungsordnungen unterdrückt. Das Verhältnis der Intensitäten zwischen nullter und erster Beugungsordnung sollte 5:1 sein.

3.1.4 Detektoren

Zur Verfügung standen ein optisches Mikroskop, eine PCO-Kamera (PCO 4000 high resolution CCD), ein Pilatus-Detektor (PILATUS 300k/1M) sowie eine MAR-CCD (MAR 165 CCD). Das Mikroskop diente letztlich nur als Hilfe zum Feinaufbau des Experiments, also zum Fahren des Gitters in den Strahl, nachdem die Strahlposition vorher relativ zum Mikroskop bestimmt worden war.

Tabelle 3.2: Detektoreigenschaften [14]

Name	Pixelgröße/Sichtfeld[Pixel]	Messart	maximale Countzahl
PILATUS 300k/1M	$172\ \mu\text{m}$ / 487x619	photonenzählend	2^{20}
PCO 4000 high resolution CCD	$0.36\ \mu\text{m}$ bis $1.8\ \mu\text{m}$ / 2004x1336	integrierend	16000
MAR 165 CCD	$79.6\ \mu\text{m}$ / 2048x2048	integrierend	65000

Die anderen Detektoren wurden jeweils durchprobiert, um den Geeignetesten für die Aufnahme von Ronchigrammen zu bestimmen. Die PCO-Kamera erwies sich aufgrund zu hohen Rauschens als ungeeignet, obwohl sie die kleinste Pixelgröße geboten hätte. Der Pilatusdetektor wäre zwar die beste Wahl gewesen, da er das geringste Rauschen hat (photonenzählend im Gegensatz zu integrierend), allerdings hätte er aufgrund der großen Pixel und der geringen Strahldivergenz weiter vom Gitter entfernt sein müssen um ein verwertbares Bild zu erhalten als es im Experimentierraum möglich war. Hier standen etwas mehr als zwei Meter (genauer: $2.1\ \text{m}$) als Abstand Gitter-Detektor zur Verfügung. Angestrebt wären mindestens vier Meter gewesen. Schlussendlich wurden die Ronchigramme mit der MAR-CCD aufgenommen. Obwohl integrierend war hier das Rauschen durch die starke Kühlung ausreichend unterdrückt. Der entscheidende Vorteil war hier die mit $79.6\ \mu\text{m}$ ausreichend kleine Pixelgröße. Um die Luftstreuung zu verringern, wurde außerdem zwischen Gitter und Detektor ein Vakuumrohr eingebracht.

3.2 ÜBERBLICK ÜBER DIE MESSREIHEN/VERLAUF DER MESSZEIT

Um die geeigneten Geräte und Parameter zu finden, wurden einige Probemessungen unter anderem mit der PCO durchgeführt. Außerdem wurden bei 10 keV einige Messungen für eine Fresnelzonenplatte aufgenommen. Diese sollen aber hier nicht weiter behandelt werden, da für diesen Fall bereits an anderer Stelle Untersuchungen durchgeführt wurden [10].

Alle im Folgenden beschriebenen Messungen wurden bei 8 keV durchgeführt. Das verwendete Gitter hatte eine Periode von 310 nm, das entspricht 3225 Gitterlinien pro mm.

Um ungefähr die Fokusposition zu bestimmen, wurden einige gröbere Ronchigrammserien mit 50 µm-Schrittweite durchgeführt. Diese Bestimmung gelang vorsichtig geschätzt auf ±200 µm genau. Dieser Punkt wurde nun als Position für die Ptychographien sowie als Nullposition für die späteren Ronchigrammserien benutzt.

Als erste eigentlich interessierende Messung wurde eine Ptychographiemessung (scan56) durchgeführt, um einen Überblick zu haben und die späteren Ronchigrammserien besser einordnen zu können. Danach wurde die erste Runde Ronchigramme gemessen. Die Ronchigramme wurden jeweils so gemessen, dass 4 mm in 25 µm-Schritten auf der Strahlachse abgefahren wurden. Dabei wurde versucht die 2 mm-Marke auf den Fokus zu legen, so dass also in beide Richtungen etwa 2 mm abgerastert wurden. Jede Ronchigrammessung enthält also 161 Bilder.

Aus den Ronchigrammen wurden die Positionen des vertikalen und horizontalen Fokus abgeschätzt und mit der Abschätzung aus der Ptychographie verglichen. Danach wurde die vertikale Linse um 25 µm Strahlaufwärts (upstream) korrigiert, um zu prüfen inwiefern dies in den Ronchigrammen sichtbar wird. Nun wurden eine weitere Ptychographie (scan62) und weitere Ronchigramme aufgenommen.

Da die Empfindlichkeit auf einen Astigmatismus am höchsten ist, wenn die Gitter um 45° zu den Fokusebenen gedreht ist, wurden entsprechende Ronchigramme aufgenommen (scan66, scan67, scan68). Zuletzt wurden noch Ronchigrammserien durchgeführt, um für größere Unterschiede in der Position der beiden Fokusse, also für einen stärkeren Astigmatismus, Ronchigramme untersuchen zu können (scan69 bis scan77). Es folgte noch eine Ptychographie (scan78) zum Vergleich.

Tabelle 3.3: Relevante Messungen

Bezeichnung	Messart	Besonderheiten
scan56	Ptychographie	
scan57	Ronchigramm; horizontales Gitter	
scan58	Ronchigramm; vertikales Gitter	
scan59	Ronchigramm; gekreuztes Gitter	
scan62	Ptychographie	
scan63	Ronchigramm horizontales Gitter	
scan64	Ronchigramm vertikales Gitter	
scan65	Ronchigramm gekreuztes Gitter	
scan66	Ronchigramm horizontales Gitter gedreht	
scan67	Ronchigramm vertikales Gitter gedreht	
scan68	Ronchigramm gekreuztes Gitter gedreht	
scan69	Ronchigramm vertikales Gitter	Linsen im Optimum
scan70	Ronchigramm horizontales Gitter	Linsen im Optimum
scan71	Ronchigramm horizontales Gitter	vertikale Linse 250 μm upstream
scan72	Ronchigramm vertikales Gitter	vertikale Linse 250 μm upstream
scan75	Ronchigramm vertikales Gitter	vertikale Linse 500 μm upstream
scan76	Ronchigramm horizontales Gitter	vertikale Linse 500 μm upstream
scan77	Ronchigramm horizontales Gitter gedreht	vertikale Linse 500 μm upstream
scan78	Ptychographie	vertikale Linse 500 μm upstream

4 PTYCHOGRAPHIE

4.1 MODELL UND FUNKTIONSSCHEMA

Die Idee der Ptychographie ist es, die Intensitätsverteilung auf dem Detektor als Absolutquadrat der Fouriertransformierten des komplexen Wellenfeldes am Ort des Objektes zu betrachten. Hier stößt man beim Rekonstruieren des Wellenfeldes natürlich auf das Phasenproblem. Die mangelnde Information wird hier aus einem Überlapp zwischen mehreren aufgenommenen Bildern rekonstruiert. Das zu untersuchende Objekt wird also bei einer Messung abgerastert, wobei die Beleuchtung so groß sein muss, dass sich der ausgeleuchtete Bereich der jeweiligen Messpunkte mit dem der benachbarten Messpunkte überlagert.

Es gibt verschiedene Varianten an Ptychographiealgorithmen. Im Folgenden soll die in [8] Beschriebene als Beispiel erklärt werden, um das Verständnis für das konkrete Vorgehen und für die mathematischen und technischen Möglichkeiten und Probleme zu verbessern.

Es wird also wie folgt vorgegangen:

1. Es wird eine möglichst einfache Annahme für die Form des Objektes (O von Englisch „Object“) und des ankommenden Wellenfeldes (P von Englisch „Probe“) gemacht. Meist wird das Objekt als leer initialisiert und das ankommende Wellenfeld als Gaußischer Strahl.

2. Nun beginnt die eigentliche Schleife, in der die Arbeit verrichtet wird.

- (a) Die Funktionen P und O werden multipliziert. Das so berechnete ψ entspricht dem Wellenfeld im Realraum hinter dem Objekt:

$$\psi = P \cdot O \quad (4.1)$$

- (b) Nun wird ψ fouriertransformiert, was der Propagation zum Detektor entspricht.
- (c) Da man das Betragsquadrat der Amplitude des Wellenfeldes am Detektor also die Intensität kennt, geht man jetzt umgekehrt den Schritt und „wirft“ die Amplitude der Fouriertransformierten von ψ weg und verwendet nur die Phase weiter. Ersetzt wird die berechnete Amplitude mit dem Betrag der Wurzel aus der gemessenen Intensität.

Das neue Wellenfeld am Detektor Ψ berechnet sich also zu:

$$\Psi = \sqrt{I} \cdot \frac{F(\psi)}{|F(\psi)|} \quad (4.2)$$

Die Berechnung erfolgt hier punktweise, das heißt, dass $\frac{F(\Psi)}{|F(\Psi)|}$ an jedem Punkt den Betrag 1 hat und damit jede Information über die Amplitude aus der Multiplikation von O und P unterdrückt wird.

- (d) Es folgt eine inverse Fouriertransformation des neu gewonnen Wellenfeldes Ψ . Dieses entspricht nun einem aktualisierten Wellenfeld direkt hinter dem Objekt. Im folgenden mit ψ' bezeichnet.
- (e) Um jetzt eine aktualisierte Näherung für O und P zu erhalten, wird eine Aktualisierungsfunktion der folgenden Form angewendet:

$$O' = O + \frac{\alpha \cdot P^*}{\|P\|_{max}^2} \cdot (\psi' - \psi) \quad (4.3)$$

bzw. ganz ähnlich für das ankommende Wellenfeld P :

$$P' = P + \frac{\beta \cdot O^*}{\|O\|_{max}^2} \cdot (\psi' - \psi) \quad (4.4)$$

Der Ausdruck $\|P\|_{max}^2$ ist die L2-Norm der alten Näherung. Dies wird als Norm für das Gesamtbild gewählt, um eine Division durch Null zu vermeiden. Die Faktoren α und β dienen dazu, die Stärke der Aktualisierung im Vergleich mit der vorhergehenden Messung festzulegen. Diese können zum Beispiel 1 gesetzt werden. Mit dieser neuen Näherung für O und P wird der nächste Durchlauf gestartet.

Bei jedem Durchlauf wird ein anderes Beugungsbild verwendet, bis alle ein Mal benutzt wurden. Dann wird ggf. von Neuem angefangen. Typischerweise ist die Abbruchbedingung für den Algorithmus einfach eine maximale Anzahl an Iterationen, da es schwer ist, ein klares Konvergenzkriterium zu definieren.

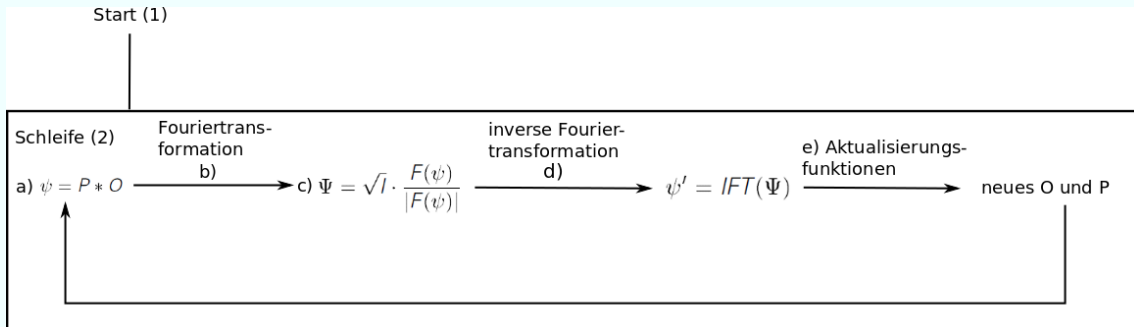


Abbildung 4.1: Funktionsskizze zur Ptychographie

5 SIMULATION

5.1 MODELL DER SIMULATION

Die Simulationen wurden mit einem am Institut für Strukturphysik entwickelten Programm Namens „Tomo“ durchgeführt. Als Darstellung des Strahls ist hier ein komplexes skalares Wellenfeld gewählt, also ein Raster aus komplexen Zahlen. Der Betrag der jeweiligen Zahlen entspricht der Amplitude des elektro-magnetischen Feldes an diesem Ort, der Winkel in der Gaußschen Zahlenebene entspricht der Phase. Die Vorstellung ist also ein zweidimensionales Wellenfeld, welches durch den Versuchsaufbau hindurchpropagiert wird. Konkret wurden folgende Schritte simuliert:

1. Simulieren des Wellenfeldes, wie es von einer Punktquelle im Abstand von 98 m erzeugt würde.
2. Durchgang durch den vertikalen und dann den horizontalen Linsenstapel.
3. Fresnelpropagation (Nahfeldpropagation) zum Gitter. Der Vergleichspunkt für die Gitterposition ist dabei eine numerisch bestimmte Fokusslänge der beiden Linsen. Dieser Punkt wurde wenn nötig mit dem geschätzten/berechneten Fokusspunkt aus der Messzeit gleichgesetzt.
4. Transmission des Feldes durch das Gitter.
5. Fourierpropagation (Fernfeldpropagation) zum Detektorschirm.

5.1.1 Standardsimulationen

Die folgenden Bilder zeigen die von mir benutzte Standardsimulation als Vergleich für den Einfluss verschiedener Effekte. In der Tabelle sind die verwendeten Parameter des Versuchsaufbaus dargestellt. Die Simulation entspricht dem, was man sähe, wenn das Experiment mit einer sehr hohen Auflösung und ohne jede Form von Störung mit perfekt eindimensional parabolisch geformten Linsen durchgeführt worden wäre. Der Ort des Gitters ist, wenn nicht anders angegeben, 1 mm vor dem idealen Fokus.

Die Einzellinsen wurden simuliert, indem pro Pixel die Materialdicke entsprechend der Linsenform bestimmt wurde und das Wellenfeld abgeschwächt und phasenverschoben wurde. Zwischen den Einzellinsen wurde entsprechend noch propagiert. Abbildung 5.1 zeigt das Wellenfeld nach

Tabelle 5.1: Parameter der Standardsimulation

Energie	8 keV
Abstand zur Quelle	98 m
Pixelgröße des simulierten Feldes	10 nm
Gesamtgröße des simulierten Feldes	40.96 μm x 40.96 μm
Pixelgröße auf dem „ Detektor“	7.96 μm
Linsen: je 35 Einzellinsen in beiden Stapeln	
Vertikale Linse:	
Krümmungsradius	0.01 mm
Abstand zwischen zwei Einzellinsen	0.0015 mm
Gesamtlänge einer Einzellinse	0.03 mm
Horizontale Linse:	
Krümmungsradius	0.008 mm
Abstand zwischen zwei Einzellinsen	0.0015 mm
Gesamtlänge einer Einzellinse	0.03 mm
Abstand zwischen den Linsen	2.6831 mm
Gleichzeitig berechnete Linsen	5
Zentrale Gitterposition	14.5737 mm nach 2. Linse
Gittermaterial	Wolfram und Luft/Vakuum
Linien/mm	3225
Periode	310 nm
Gitterdicke	1 μm
Strecke bis zum Detektor	2104 mm

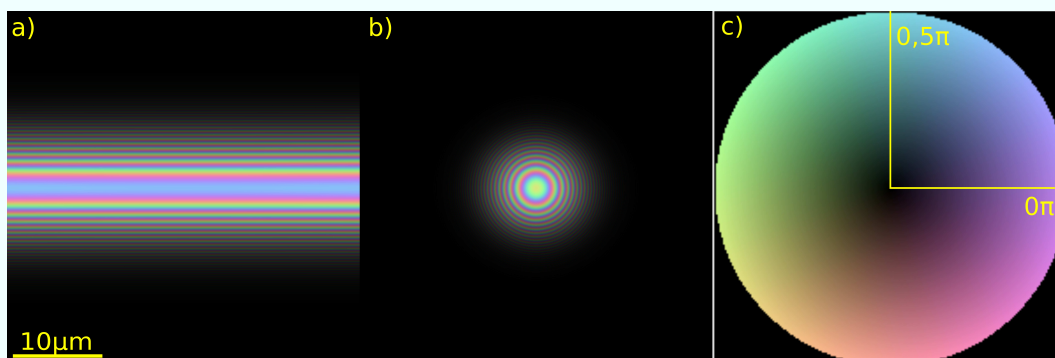


Abbildung 5.1: Simuliertes Wellenfeld direkt nach Durchgang durch die Linsenstapel; a) Nach vertikalem Linsenstapel b) Nach beiden Linsenstapeln c) Legende für die Phase

Durchgang durch die beiden Linsenstapel. Die Phase des Feldes wird hier wie im Folgenden durch die Farbe repräsentiert, die Amplitude durch die Helligkeit.

Eine Vereinfachung aus Gründen des deutlich geringeren Rechenaufwands stellt das Zusammenfassen von jeweils 5 Linsen zu einer Linse dar. Das heißt, anstatt jede Linse einzeln als dünne Linse zu betrachten, werden je 5 Linsen als dünne Linse angenommen. Der Vergleich der beiden Simulationen (Abbildung 5.2) rechtfertigt diese Vereinfachung, da der so erzeugte Fehler deutlich unter einem Prozent liegt.

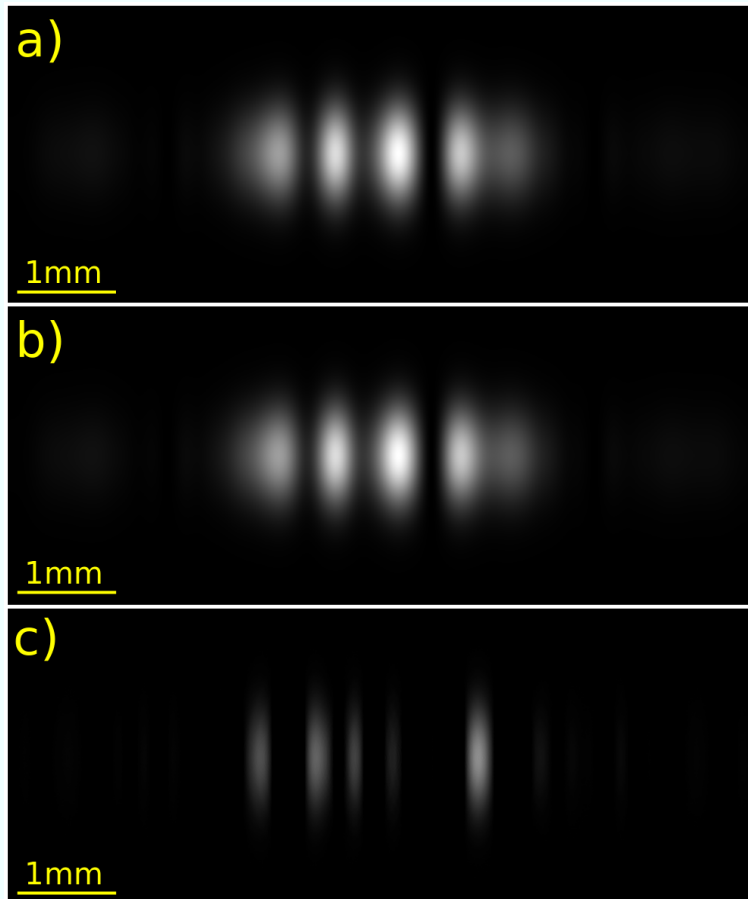


Abbildung 5.2: Intensität auf dem Detektor; a) Jede Linse einzeln simuliert b) 5 Linsen gemeinsam simuliert c) Differenz von 5 Linsen gleichzeitig mit einer Linse gleichzeitig, um Faktor 200 verstärkt

Abbildung 5.3 zeigt die Simulation für ein gekreuztes Gitter. Schon hier ist zu sehen, dass das Muster in diesem Fall komplexer wird. Da im Experiment noch eine deutlich schlechtere Auflösung sowie ein Rauschen hinzu kommt, habe ich auf eine Auswertung verzichtet.

5.1.2 Gitterposition

Es gibt sichtbare Unterschiede im gemessenen Bild, je nachdem wie genau der Strahl das Gitter trifft. Vor allem nahe am Fokus können hier erhebliche Unterschiede im Aussehen der Beugungsbilder hervorgerufen werden. Da die geometrische Näherung die Beugungsbilder als Schatten des Gitters interpretiert, ist die Vorstellung hilfreich und zumindest teilweise gerechtfertigt, dass man, wenn man die beiden Ronchigramme aus nullter und erster Ordnung zusammengefasst betrachtet, gerade ein (verzerrtes) Abbild des Gitters sieht. Entsprechend wandern, bei Verschiebung des Gitters senkrecht zur Stegichtung, die Linien im Ronchigramm mit, wie in Abbildung 5.4 veranschaulicht. Die Veränderungen sind wie das Gitter periodisch. Entsprechend habe ich hier auch nur über eine Periode (310 nm) simuliert.

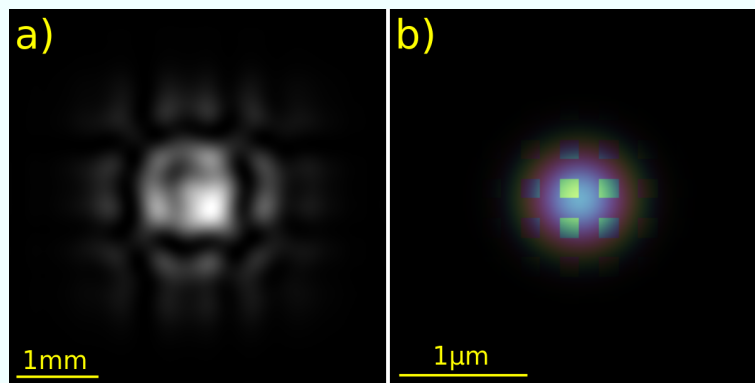


Abbildung 5.3: a) Intensität auf dem Detektor b) Wellenfeld direkt am Gitter

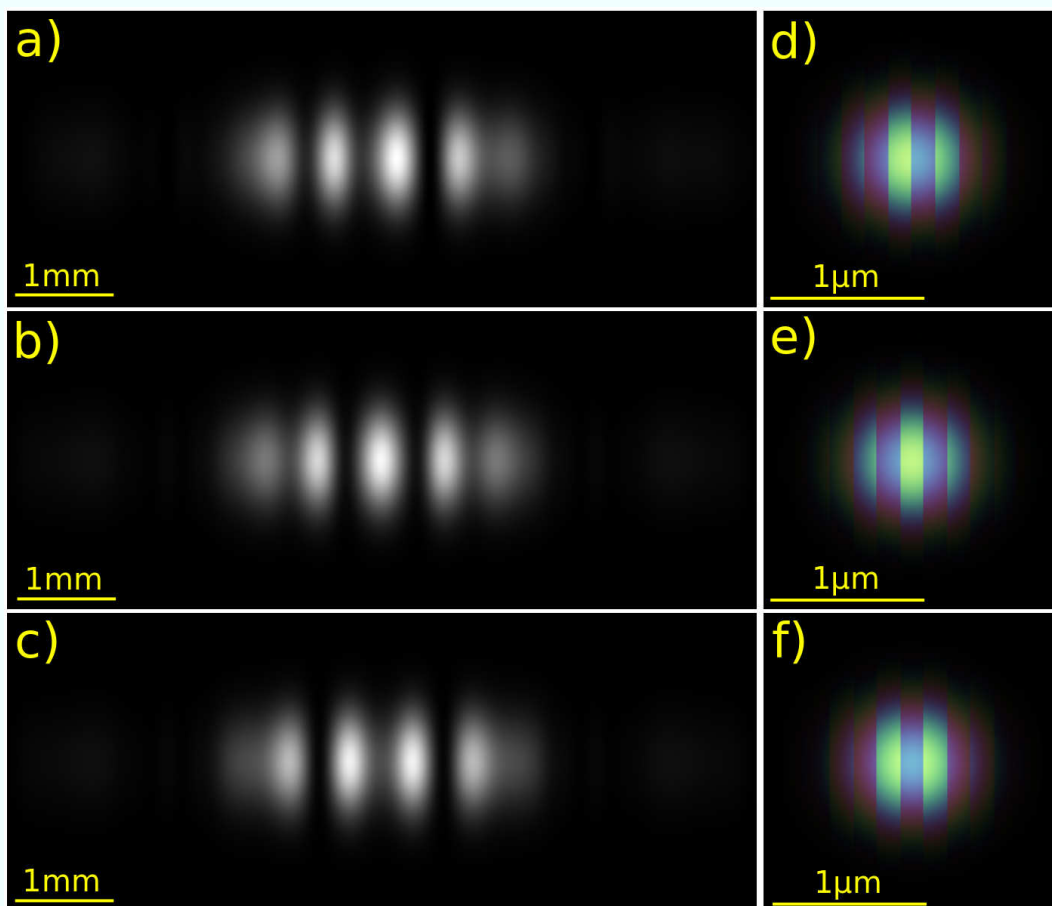


Abbildung 5.4: Links (a-c): Intensität auf dem Detektor bei Gitterverschiebung a) 0 nm b) 77.5 nm c) 232.5 nm; Rechts (d-f): Wellenfeld direkt nach Durchgang durch Gitter d) 0 nm e) 77.5 nm f) 232.5 nm

5.1.3 Gitterperiode

Wie schon in Kapitel 2.1 beschrieben ist die Wahl der Gitterperiode in Abhängigkeit von der Numerischen Apertur und der Wellenlänge richtig zu wählen. Abbildung 5.5 verdeutlicht, welchen Effekt es hat, wenn dies ungeeignet ist. Um einen Vergleich zum ungestörten Strahl zu haben, wurde in a) ohne Gitter simuliert. Die Halbwertsbreite wurde zu $FWHM = 0.94 \text{ mm}$ gemessen (Abbildung 5.6). Dies würde nach Formel 2.5 mit $NA \approx \frac{FWHM}{2r'}$ und $r' = 2100 \text{ mm}$ eine optimale Gitterperiode von $d = 1403 \text{ nm}$ bzw. eine Liniendichte von $713/\text{mm}$ bedeuten. Zum Vergleich: Im Experiment wurde ein Gitter mit $d = 310 \text{ nm}$ bzw. einer Liniendichte von $3225/\text{mm}$ gewählt und damit passable Ergebnisse erzielt. Dies zeigt, wie grob die getroffene Abschätzung für diese Linsen ist. Ein Grund dafür ist, dass die Linsen eine schwach abfallende Apertur erzeugen, so dass die Annahme des Randes des Strahls auf dem Gitter mit der Gleichsetzung mit der Halbwertsbreite nicht haltbar ist.

Der Effekt für eine zu kleine Gitterperiode ist wie erwartet ein Auseinanderdriften der Beugungsordnungen (Abb. 5.5 c)), während eine zu große Gitterperiode dafür sorgt, dass der Strahl nicht ausreichend aufgespalten wird und sich die Beugungsordnungen zu stark überlappen (Abb. 5.5 b)). Erwähnenswert ist hier allerdings noch, dass ein zu starker Überlapp das Beugungsmuster nicht verkompliziert, sondern lediglich verkleinert

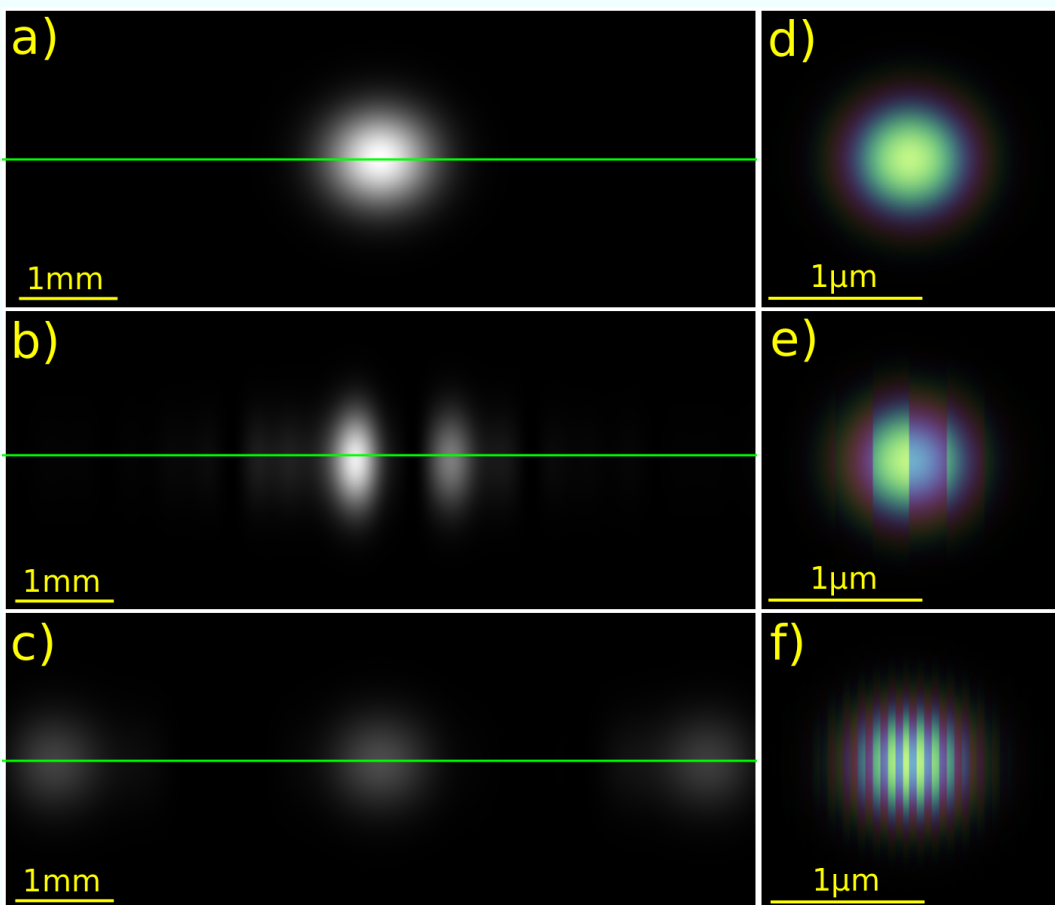


Abbildung 5.5: Links: Simulierte Intensität auf dem Detektor a) ohne Gitter b) 2000/mm c) 10 000/mm; Rechts: Wellenfeld direkt nach Durchgang durch Gitter d) ohne Gitter e) 2000/mm f) 10 000/mm

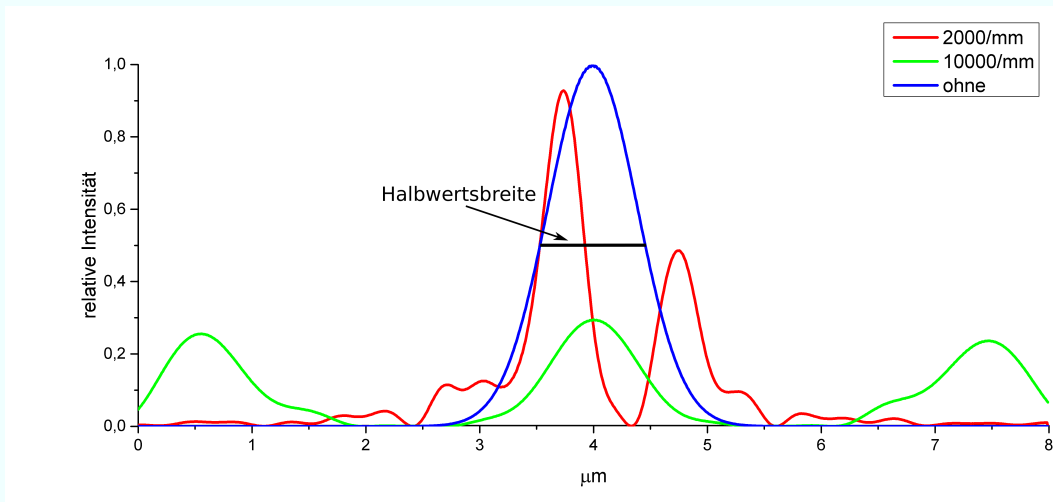


Abbildung 5.6: Relative Intensität des Beugungsmusters aus Abbildung 5.5 a) Blau b) Rot c) Grün

5.2 MODELLIERUNG DER ERWARTETEN LINSENFEHLER

5.2.1 Verdrehung der Linsen

Die Linsen können auf verschiedene Weise verdreht sein. Ich habe nur Verdrehungen um die Achse in Strahlrichtung (z-Achse) als Rotationsachse betrachtet, da die Ausrichtungsfehler in die anderen beiden Achsen minimal sind. Ausgehend von den so erzeugten Effekten wurde die Linsendrehung in zwei Kategorien eingeordnet: Relative Linsendrehung und absolute Linsendrehung. Die beiden Linsenstapel sollten im Idealfall im 90° -Winkel zueinander stehen und die jeweiligen Gitter keine zusätzliche Verdrehung um die z-Achse haben. Das heißt, das vertikale Gitter sollte perfekt vertikale Gitterstege haben usw.

Als relative Linsendrehung bezeichne ich es nun, wenn die Linsen einen Winkel ungleich 90° einschließen. Um diesen Effekt zu erzeugen, habe ich stets die vertikale Linse gedreht. Eine Drehung im Uhrzeigersinn ist dabei positiv definiert, wenn man die Linsen strahlaufwärts betrachtet. Als absolute Linsendrehung bezeichne ich es, wenn die Linsen gemeinsam gedreht sind, also ohne dass sich der Winkel zwischen ihnen ändert, sie sich aber bezüglich des Gitters um die Strahlachse drehen. Auch hier ist die positive Drehrichtung im Uhrzeigersinn definiert.

Es ist weiter, wie in Kapitel 2.13 beschrieben, zu beachten, dass die absolute Drehung der Linsen nur dann im Ronchigramm durch eine Schiefstellung der Linien sichtbar wird, wenn ein Astigmatismus vorliegt. In unserem Falle heißt dies, dass die Linsen nicht perfekt ausgerichtet sein dürfen, um den Flip noch sehen zu können. Daher wurde für die folgenden Bilder ein Astigmatismus eingeführt indem die vertikale Linse $200\ \mu\text{m}$ strahlaufwärts (also Richtung Quelle) simuliert wurde.

Bei positiver absoluter Drehung der Linsen ist die Drehung der Linien im Ronchigramm vor dem Fokus ebenfalls im Uhrzeigersinn; nach dem Fokus entsprechend entgegen dem Uhrzeigersinn. Das gerade Umgekehrte gilt natürlich für den Fall, dass die Linsen gegen den Uhrzeiger gedreht werden.

Die relative Drehung erzeugt einen interessanten Effekt, der sich später noch als glücklicher Umstand zeigen wird. Und zwar werden die Sagittal- und Meridionalebenen gedreht. Diese Drehung ist bereits für 1° sehr stark (Abb. 5.9 a) und ab 2° Linsendrehung faktisch 45° (Abb. 5.9 b), was für größere relative Drehungen der Grenzwert ist (Abb. 5.9 c). Dadurch gilt für das vertikale und

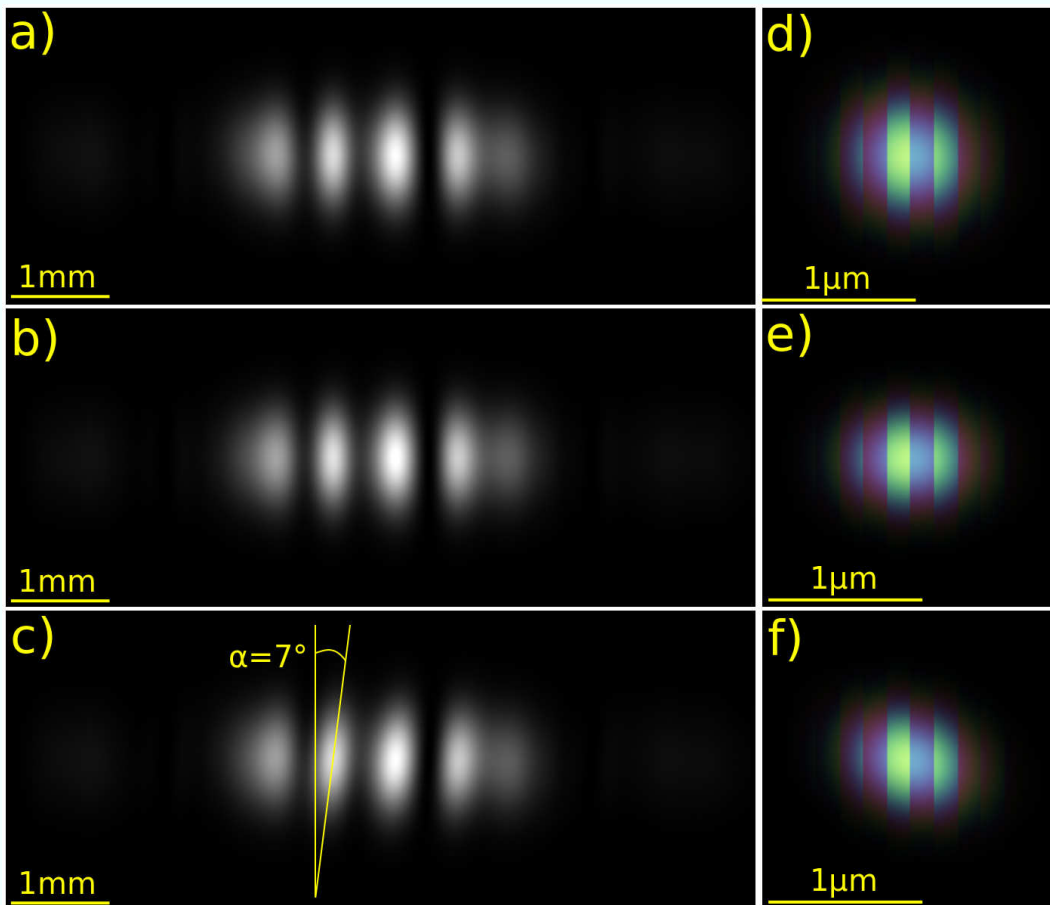


Abbildung 5.7: Links: Simulierte Intensität auf dem Detektor; Rechte Spalte: Wellenfeld direkt nach Durchgang durch Gitter je 1 mm vor Fokus a) nur Drehung, 20° b) nur Fokusabstand, keine Drehung c) 200 µm Fokusabstand, Drehung 20°

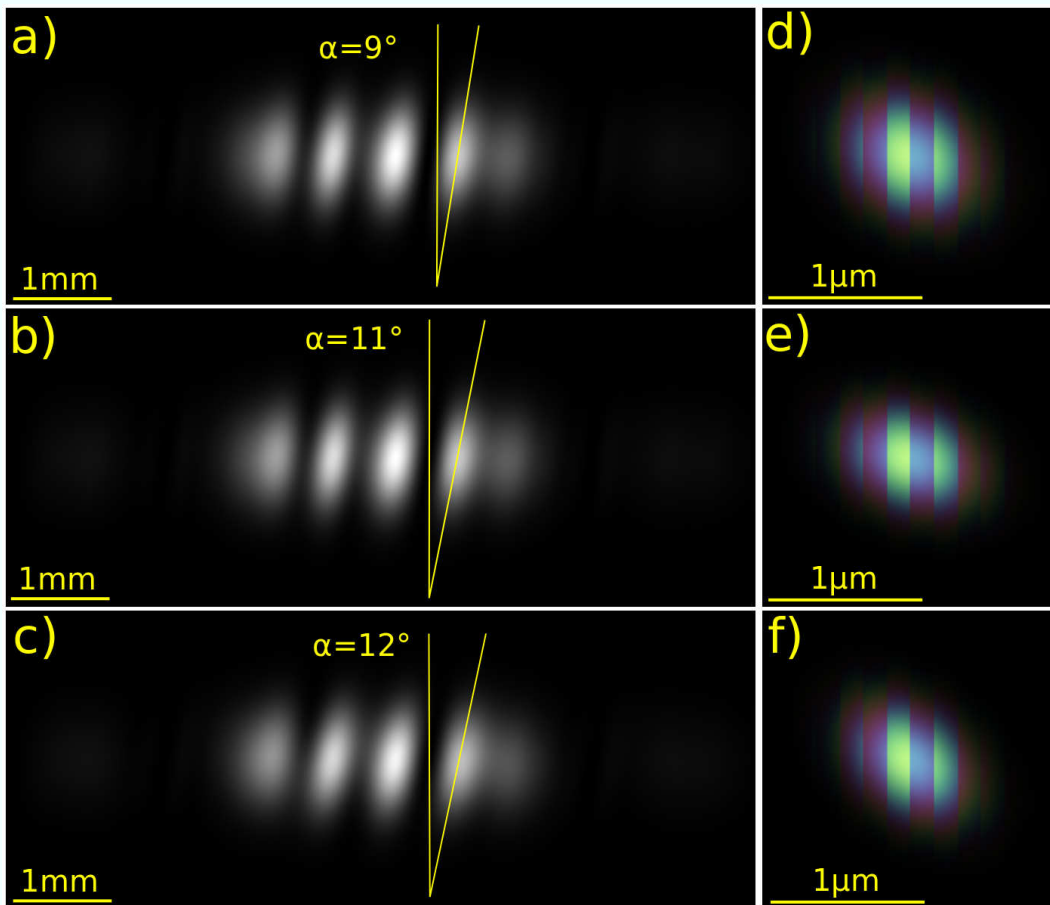


Abbildung 5.8: Links: Simulierte Intensität auf dem Detektor; Rechts: Wellenfeld direkt nach Durchgang durch Gitter a),d) nur relative Drehung: 0.5° b),e) $200\ \mu\text{m}$ Fokusabstand, relative Drehung 0.5° c),f) $200\ \mu\text{m}$ Fokusabstand, relative Drehung 0.5° , absolute Drehung 20°

horizontale Gitter $\phi \approx 45^\circ$. Dies erklärt, warum überhaupt ein Astigmatismus für die unverdrehten Gitter (z.B. für die Messung scan57) in den Ronchigrammen sichtbar wird und warum für die im 45° -Winkel stehenden Gitter (z.B. Messung scan66) kaum bis gar kein Flip, als Zeichen für einen Astigmatismus, zu sehen ist. Mehr dazu in Kapitel 7.1.

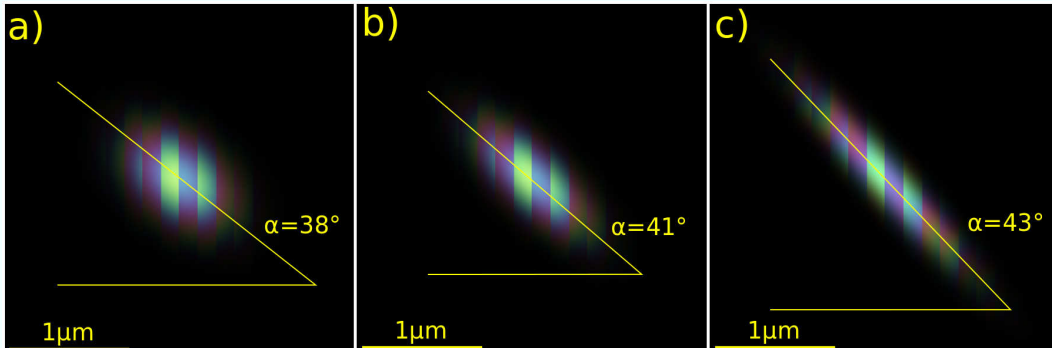


Abbildung 5.9: Simuliertes Wellenfeld, direkt nach dem Durchgang durch das Gitter a) relative Linsendrehung 1° b) relative Linsendrehung 2° c) relative Linsendrehung 5°

5.2.2 Ätzfehler

Es wurden zwei Typen von Ätzfehlern simuliert; Über- bzw. Unterätzung. Mit Unterätzung ist gemeint, dass beim Produktionsprozess unter der Maske Material weggeätzt wurde, obwohl es dort stehen bleiben sollte. Für diesen Effekt werden oft Korrekturen eingefügt, etwa, dass die Maske absichtlich zu viel abdeckt. Dabei kann es vorkommen, dass überkorrigiert wird. Dies nennt man dann Überätzung. Über- und Unterätzung wurde in „Tomo“ simuliert, indem eine konstante Dicke an Material senkrecht auf der Tangente für jeden Punkt auf der gesamten Parabelform hinzugefügt (Überätzung) oder abgezogen (Unterätzung) wurde. Die zweite Art Ätzfehler ist die Über- bzw. Unterätzung mit Böschung. Die Linsen sollten eigentlich in die Tiefe hinein ein gerades Profil aufweisen. Böschung heißt hier, dass die Dicke der Unterätzung mit der Tiefe der Linse zu- bzw. abnimmt.

In Abbildung 5.10 ist der Einfluss von Über- und Unterätzung auf das Wellenfeld und die Ronchigramme gezeigt. Der Haupteffekt ist dabei eine Verschiebung der Fokusebenen. Im Falle der Unterätzung von den Linsen weg (Abb. 5.10 a)+d) und b)+e)) was also einer Verringerung der Brechkraft entspricht. Im Falle der Überätzung auf die Linsen zu (Abb. 5.10 c)+f)), was also einer Erhöhung der Brechkraft entspricht. Zusätzlich werden die Linsen weniger parabelförmig. Dies führt zu einer spärliche Aberration. Diese ist so schwach, dass sie in den Ronchigrammen nicht bemerkbar ist.

Die Böschung verursacht in den Ronchigrammen eine Verformung, welche sich teilweise anschaulich verstehen lässt, wenn man sie sich als in die Tiefe der Linse sich ändernde Unterätzung vorstellt, die entsprechend eine Änderung der Brechkraft der Linse verursacht. Dies bedeutet für das Wellenfeld, dass der Bereich, der stärker gebrochen wurde, eher den Fokus erreicht und umgekehrt. So beobachtet man, dass im oberen Teil des Ronchigrammes aus Abbildung 5.11 b) die Streifen enger und im unteren Bereich weiter auseinander liegen, da der obere Bereich noch weiter vom Fokus entfernt ist. Aus den Bildern des Wellenfeldes ist klar ersichtlich, dass der Strahl durch die Böschung verkippt wird. Außerdem ergibt sich eine charakteristische Dreizähligkeit in der Form.

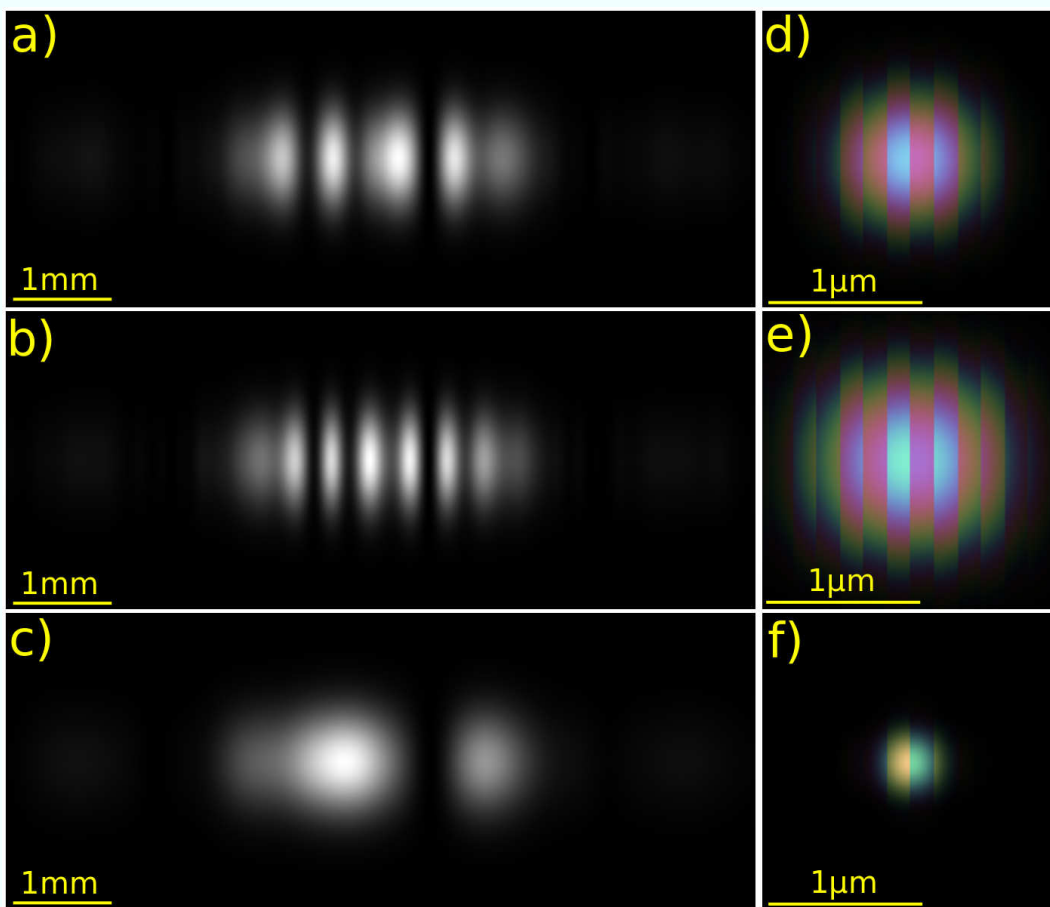


Abbildung 5.10: Linke Spalte: Simulierte Intensität auf dem Detektor; 100 nm Unterätzung; 400 nm Unterätzung; 400 nm Überätzung; Rechte Spalte: Wellenfeld direkt nach Durchgang durch Gitter

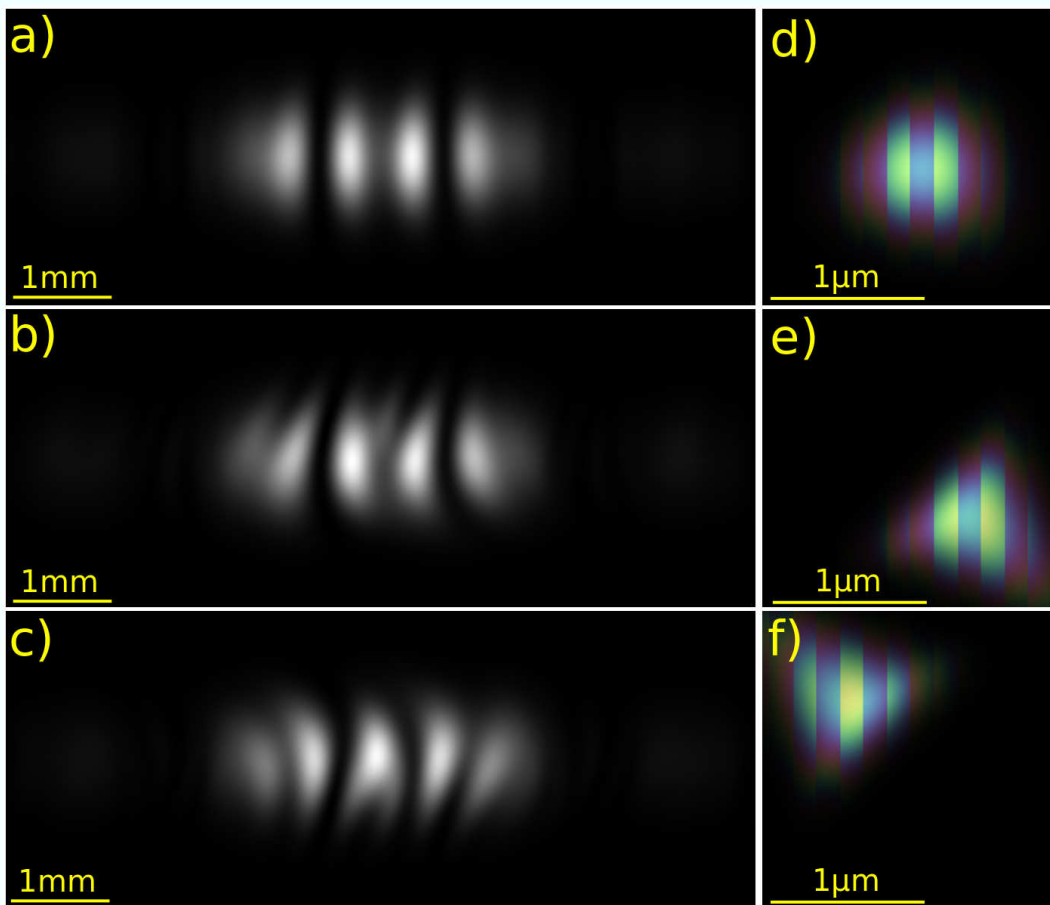


Abbildung 5.11: Links: Simulierte Intensität auf dem Detektor; Rechts: Wellenfeld direkt nach Durchgang durch Gitter; a) und d): $+0.57^\circ$ Böschung; b) und e): $+2.87^\circ$ Böschung; c) und f): -2.87° Böschung;

5.3 NICHTBEACHTETE EFFEKTE

Es gibt eine Reihe von Effekten, die im Rahmen des in der Simulation verwendeten Modells nicht beachtet werden. Zum Einen sagt die Darstellung einer elektromagnetischen Welle als komplexe Zahl nichts über die Polarisationsrichtung aus. Effekte, die auf der Polarisation des Lichtes beruhen, können entsprechend nicht mit in Betracht gezogen werden. Weiter entspricht das Ergebnis der Simulation einem zeitlich vollkommen stabilen Aufbau. Wackeln des Gitters, des Detektors, des Strahls oder irgend eines anderen Teils des Aufbaus und Schwankungen in der Intensität des Strahls werden nicht beachtet. Auch entspricht die simulierte Wellenfront einem perfekt kohärenten Strahlengang. Inkohärente Effekte müssten etwa durch mehrere Wellenfelder dargestellt werden, deren Intensität auf dem Detektor dann erst aufsummiert wird. Streuung wird nur simuliert, insofern sie durch Absorption und Phasenschub abgedeckt ist. Alle anderen Formen der Streuung, vor allem etwa Luftstreuung, werden prinzipiell nicht beachtet. Effekte im Detektor selbst sind ebenfalls nicht Teil der Simulation.

6 OPTIMIERUNG DER SIMULATIONEN

6.1 HERANGEHENSWEISE

Um die Auswertung nach verschiedenen Linsenfehlern besser zu quantifizieren und von individueller Wahrnehmung zu entkoppeln, wurde versucht, die Messdaten numerisch mit den Simulationen zu vergleichen und einen Algorithmus zu schreiben, der möglichst selbstständig und zuverlässig jene Simulation findet, welche die mit den gemessenen Bildern am besten übereinstimmt. Die Annahme ist hier natürlich, dass die für diese Simulation verwendeten Parameter für die Lage und die Fehler der Linsen die tatsächliche Situation zumindest annähern. Praktisch ist dies ein Optimierungsproblem. Als Zielfunktion wurde die Summe der Quadrate der Differenzen der Intensitäten zwischen gemessenem Bild und simuliertem Bild benutzt:

$$L = \sum_{x,y} [I_{Mess}(x,y) - I_{Sim}(x,y)]^2 \quad (6.1)$$

6.2 ANFORDERUNGEN

In unserem Fall ist die Zielfunktion keine analytische Funktion. Die Berechnung eines Punktes im Phasenraum ist außerdem sehr aufwendig und liegt im Bereich einiger Minuten. Das bedeutet, dass einige hundert bekannte Punkte ausreichen müssen, um ein Minimum zu finden. Zudem heißt es, dass die Berechnung von Näherungen für die Ableitungen der Funktion ebenfalls sehr aufwendig ist. Dieser Aufwand geht mit $4N$, wobei N die Dimension des Phasenraums ist, also die Zahl der freien Parameter.

6.3 AUSWAHL DER OPTIMIERUNGSMETHODE

Im Folgenden sollen kurz einige in Betracht gezogene Optimierungsmethoden vorgestellt werden.

6.3.1 Koordinatenverfahren

Unter einem Koordinatenverfahren versteht man eine Methode, die nacheinander in je einer Suchrichtung den Phasenraum abrastert und dann den Punkt mit dem besten Wert der Zielfunktion als neuen optimierten Punkt nimmt, um sich dann der nächsten Dimension zu widmen [5]. Ein klarer Vorteil des Koordinatenverfahren ist die leichte Implementierung. Es ist kein Wissen über die Ableitungen erster bzw. zweiter Ordnung nötig, und daher ist die Anzahl der Iterationen für rein numerische Zielfunktionen zumindest in einfachen Fällen gegebenenfalls geringer als für Methoden, die die Gradienten benötigen. Ein weiterer Vorteil in meinem speziellen Fall ist, dass die Berechnung der Zielfunktion deutlich schneller geht, wenn nur das Gitter verschoben wird. Da die anderen Methoden sich typischerweise entlang „schräger“ Vektoren im Phasenraum bewegen, können sie diesen Vorteil nicht nutzen. Ich habe das Koordinatenverfahren allerdings so implementiert, dass die Suchrichtungen entlang der Parameterachsen im Phasenraum liegen. Probleme bestehen in langsamer Konvergenz, welche außerdem nur schlecht beurteilt werden kann.

6.3.2 Konjugierte Gradientenmethode

Bei der konjugierten Gradientenmethode wird wie bei vielen anderen Optimierungsmethoden eine Folge von Punkten erzeugt, für die gilt [5]:

$$x_{k+1} = x_k + \sigma \cdot d_k \quad (6.2)$$

wobei d hier ein Vektor im Phasenraum, die Suchrichtung, ist. Speziell für dieses Verfahren gilt für die Suchrichtung:

$$d_k = -\nabla L(x_k) + \beta_k d_{k-1} \quad (6.3)$$

wobei der Gewichtungsfaktor β_k so gewählt ist, dass die aufeinanderfolgenden Suchrichtungen stets konjugiert zueinander sind, also orthogonal zueinander stehen. Im Falle eines nicht analytisch zu berechnenden Gradienten ist der Aufwand wie oben erwähnt $4N$ Zielfunktionsauswertungen pro Punkt.

6.3.3 Nelder-Mead Simplex

Die Idee des Nelder-Mead Simplex und ähnlicher Simplexmethoden ist es, ein $N+1$ -dimensionales Polytop zu konstruieren, bei welchem dann nach bestimmten Regeln Punkte ausgetauscht werden, so dass alle Punkte sich einem Minimum nähern [9] [7] [1]. Im Folgenden soll die von mir gewählte Realisierung kurz beschrieben werden:

1. Man beginnt, indem man den Startsimplex $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_{N+1}]$ festlegt. Im Prinzip ist dies beliebig wählbar, typischerweise beginnt der Simplex in der Mitte des Gebietes in der das Optimum erwartet wird und hat in den jeweiligen Richtung des Phasenraumes ein Zehntel der Länge in dieser Richtung. Natürlich ist die Wahl des Anfangssimplex, gerade für nicht streng konvexe Gebiete von großer Bedeutung für den Erfolg der Optimumssuche und die Geschwindigkeit der Konvergenz. Nun beginnt die eigentliche Schleife:
2. (a) Der Wert der Zielfunktion wird für alle x berechnet und die x werden der Größe nach geordnet und umbenannt, so dass gilt: $L(x_1) \leq L(x_2) \leq \dots \leq L(x_{N+1})$

- (b) Als nächstes wird der Schwerpunkt x_S für das Polytop ohne den Punkt x_{N+1} , also ohne den Schlechtesten berechnet.
- (c) Nun folgt die so genannte Reflexion an diesem Schwerpunkt. Dies bedeutet, es wird x_{N+1} an x_S gespiegelt: $x_R = x_S + \alpha(x_S - x_{N+1})$.
Nun kann einer von drei Fällen eintreten:
- Wenn der so berechnete Punkt besser als der Zweitschlechteste (x_N) aber nicht besser als der Beste (x_1) ist, dann wird der Schlechteste (x_{N+1}) mit diesem neuen Punkt x_R ersetzt und die Schleife bei a) neu begonnen.
 - Wenn x_R besser als alle anderen bisherigen Punkte ist wird eine Expansion vorgenommen, also mit d) fortgefahren.
 - Wenn x_R besser als x_{N+1} aber schlechter als alle anderen Punkte ist, wird eine Kontraktion vorgenommen, also mit e) fortgefahren.
- (d) Bei der Expansion wird der expandierte Punkt x_E zu: $x_E = x_S + \gamma(x_S - x_{N+1})$ berechnet. Die Idee ist hier, dass eine Richtung gefunden wurde in welche eine starke Verbesserung der Zielfunktion zu erwarten ist. Um Iterationen zu sparen „streckt“ sich der Simplex besonders stark in diese Richtung.
Nun wird x_{N+1} durch den besseren der beiden Punkte x_R und x_E ersetzt und wieder bei a) begonnen.
- (e) Bei der Kontraktion wird der kontraktierte Punkt x_K berechnet zu: $x_K = x_S + \rho(x_S - x_{N+1})$
Wenn x_K besser x_{N+1} ist, wird x_{N+1} mit x_K ersetzt und bei a) neu begonnen. Wenn der kontraktierte Punkt schlechter als x_{N+1} ist, wird die sogenannte Reduktion [f)]durchgeführt.
- (f) Bei der Reduktion werden alle Punkte außer dem Besten (x_1) ersetzt durch: $x_i = x_1 + \sigma(x_i - x_1)$. Es wird also ein neuer, kleinerer Simplex um den bisher besten Punkt im Phasenraum erstellt. Danach wird mit a) neu begonnen.
3. Wie üblich ist die Abbruchbedingung schwer zu bestimmen. Ich habe einfach eine maximale Zahl an Zielfunktionsauswertungen gewählt. Die Parameter werden standardmäßig zu $\alpha = 1$, $\gamma = 2$, $\rho = -\frac{1}{2}$ und $\sigma = \frac{1}{2}$ festgelegt.

6.3.4 Simulierte Abkühlung

Die Idee der simulierten Abkühlung (engl. „simulated annealing“) ist es, sich mehr oder minder zufällig über einen Bereich des Phasenraums zu bewegen [6]. Die Bedingung für die Akzeptanz eines neuen Punktes ist dabei wie üblich zum einen: $L(x_{Neu}) \leq L(x_{Aktuell})$. Als Besonderheit kann ein Punkt aber auch als neuer Ausgangspunkt gewählt werden, wenn x_{Neu} schlechter als $x_{Aktuell}$ ist. Dies geschieht mit einer Wahrscheinlichkeit P die proportional zur Boltzmannverteilung und abhängig von $L(x_{Neu}) - L(x_{Aktuell})$ ist:

$$P \propto \exp \left[-\frac{L(x_{Neu}) - L(x_{Aktuell})}{T} \right] \quad (6.4)$$

wobei T die aktuelle „Temperatur“ des Systems ist in Anlehnung an den natürlichen Vorgang des Abkühlens von Kristallen. T wird dabei langsam gesenkt. Die simulierte Abkühlung hat den Vorteil, dass sich die Optimierung nicht so leicht in lokalen Minima festfährt, da es vor allem für flache Minima eine hohe Wahrscheinlichkeit gibt, einen Punkt außerhalb zu akzeptieren.

6.3.5 Evolutionäre Methoden

Evolutionsstrategien haben als Grundidee und Bild die biologische Evolution vor Augen [5]. Entsprechend werden oft die einzelnen Schritte benannt.

1. Jeder Durchlauf beginnt mit einer Elterngeneration aus μ Individuen. Beim ersten Durchlauf werden diese manuell erstellt oder zufällig auf dem zu untersuchenden Gebiet bestimmt. Später ist die Elterngeneration Ergebnis der Selektion.
2. Der nächste Schritt ist die Mutation. Hier werden λ neue Individuen erzeugt, deren Genom (Parameterwerte im Phasenraum) sich von der Elterngeneration ableiten. Typischerweise erzeugt jedes Elter n Nachkommen die auf einem N-Dimensionalen Kugelrand liegen. Dabei wird der Radius der Kugel durch die Mutationsschrittweite σ festgelegt, die im Laufe der Optimierung gegen null gehen sollte und deren Wert ebenfalls Teil des Genoms sein kann. Gegebenenfalls besteht das Genom der Nachkommen aus einer Kombination mehrerer Eltern.
3. Der letzte Schritt ist die Selektion bei der die μ Eltern für die nächste Generation ausgewählt werden.

Es gibt verschiedene Varianten von evolutionären Verfahren. Typische Vorteile sind, dass auch sehr „hügelige“ Phasenräume erforscht werden können, also dass die Gefahr, dass der Algorithmus sich in lokalen Minima festfährt, deutlich geringer ist. Allerdings ist oft dennoch eine beträchtliche Anzahl an Zielfunktionsauswertungen nötig.

6.3.6 Black-Box-Methoden

Zielfunktionen, für die kein algebraischer Ausdruck bekannt ist oder prinzipiell nicht existiert, werden „Black Box“-Funktionen genannt. Das von mir in Betracht gezogene Programm „bbowda“ (Black Box Optimization with Data Analysis) wurde entwickelt von Kevin Kofler und in seiner Diplomarbeit [6] beschrieben. Vereinfacht ausgedrückt ist die dort gewählte Herangehensweise das Anlegen eines Modells der Zielfunktion auf dem zu untersuchenden Bereich des Phasenraumes als Mischung von normalisierten gewichteten kovarianten nichtlinearen Matrizen-Modellen („regularized weighted nonlinear covariance model“), die um jeden Punkt einzeln unter Miteinbeziehung der bereits bekannten Nachbarpunkte optimiert werden. Dies lohnt sich, da dabei keine neuen Punkte berechnet werden müssen, die Vorhersage über Gebiete in denen sich wahrscheinlich bessere Punkte befinden allerdings deutlich besser wird. Auf globaler Ebene wird mit Hilfe einer Gaussischen Mischwertverteilung („Gaussian mixture model“) die Dichte der Punkte angenähert, um unerforschte Bereiche ausfindig zu machen.

Diese Methode wurde explizit für Probleme entwickelt, für die die Berechnung eines einzelnen Zielfunktionswertes sehr aufwendig ist. Sie benötigt keine Gradienteninformationen oder Hessematrizen und kommt für vergleichbar komplexe Probleme mit wenigen hundert Funktionsaufrufen zu einem Minimum, wobei das gesamte gegebene Gebiet in Betracht gezogen wird.

6.3.7 In der Arbeit verwendete Methoden

Ich habe Implementierungen des Koordinatenverfahrens sowie eines einfachen Simplex in „Tomo“ erstellt. Auswertung der Ergebnisse siehe Kapitel 7.4. Die Black-Box-Methode „bbowda“ scheint sehr geeignet und sollte für weitere Untersuchungen solcher Probleme hilfreich sein.

7 AUSWERTUNG

7.1 FOKUSPOSITIONEN AUS RONCHIGRAMMEN

Für die Bestimmung der Fokuspositionen gibt es zwei Indikatoren, nach denen man bei Betrachtung der Ronchigramme Aussagen treffen kann. Zum einen ist die Anzahl der sichtbaren Linien im Fokus minimal, was man sich dadurch erklären kann, dass hier am wenigsten Spalte beleuchtet werden. Wenn die Periode des Gitters so gewählt ist, dass die nullte und erste Beugungsordnung jeweils zur Hälfte überlappt, sollte auch im Beugungsbild nur ein Streifen zu sehen sein. Da der Strahl nicht notwendigerweise genau auf den Übergang Spalt/Steg zentriert ist, ist auch das Beugungsbild entsprechend verschoben. Der zweite Indikator ist die Schrägstellung der Linien im Ronchigramm relativ zum Gitter. Wie in Kapitel 2.3 erläutert drehen sich die Linien im Ronchigramm beim Verfahren entlang der Strahlachse. Anschaulich ausgedrückt sind sie weit weg vom Fokus parallel zu den Gitterstegen. Wenn man sich dem Fokus nähert, werden sie immer steiler, bis sie am Fokus senkrecht zu den Gitterstegen stehen, siehe auch Gleichung 2.13. Bemerkenswert ist, dass man bei den parallel zu den Linsen eingebauten Gittern überhaupt eine Verdrehung der Linien im Ronchigramm beobachten kann. Dies ist nur dadurch zu erklären, dass sich die Meridional- und Sagittalebene gedreht hat. Wie in Kapitel 5.2.1 festgestellt wurde, ist dies das Ergebnis einer relativen Verdrehung der Linsen. Wie ebenfalls in Kapitel 2.3 erklärt, bedeutet diese aber auch, dass die Orte des Flips nicht mehr die Orte des vertikalen und horizontalen Fokus sind, sondern näher zusammen liegen. Abbildung 7.1 zeigt die Qualitätsprobleme der Messungen und die Messung für einige Winkel β .

Dabei ist daran zu erinnern, dass das horizontale Gitter den vertikalen Fokus untersucht und umgekehrt das vertikale Gitter den horizontalen Fokus. Es zeigt sich, dass es schwer ist, exakt das Bild herauszusuchen, bei dem der Flip stattfindet. Abbildung 7.2 verdeutlicht dies. Hier sind links 5 Bilder aus der Messung scan58 zu sehen, wobei das Mittlere als das Fokusbild gewertet wurde. Rechts ist die entsprechende Simulation zu sehen. Es ist selbst im Idealfalle schwer klar zu sagen, wo der Fokus liegt. Dies zeigt wie anfällig dieses Vorgehen für Fehlbeurteilungen ist. Die entsprechenden Ergebnisse sind also mit Vorsicht zu genießen.

Tabelle 7.1 zeigt das Ergebnis des Versuchs für alle in Frage kommenden Messungen die Fokusposition an Hand der Ronchigramme zu bestimmen. Dabei wurde eine Reihe von Messungen ignoriert. Zum einen alle gekreuzten Gitter, da hier nicht nur die Interpretation ungleich schwierig ist, sondern auch die Nachteile durch die geringe Auflösung sehr viel schwerer wiegen. Zum anderen wurden alle Messungen zu den verdrehten Gittern verworfen, da diese, wie oben festgestellt, in einem ungünstigen Winkel (nahe 90° bzw. 0°) zu den verdrehten optischen Ebenen liegen.

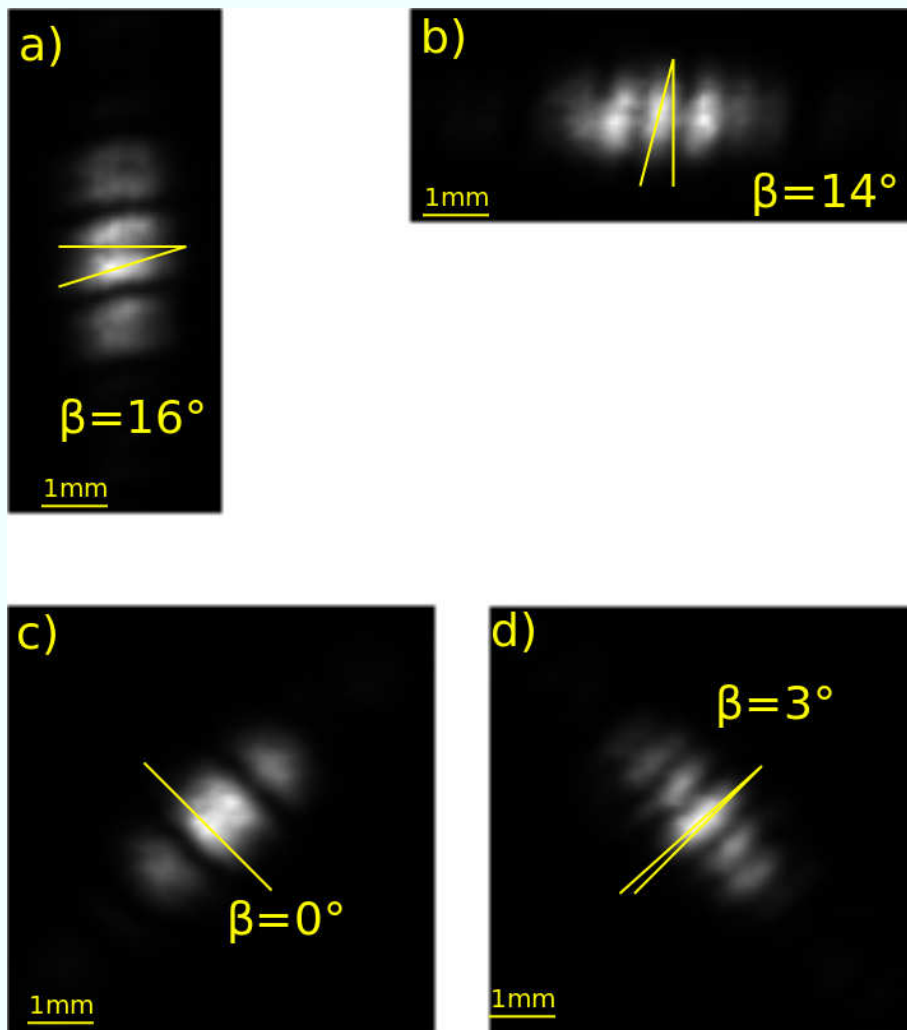


Abbildung 7.1: a) scan63; b) scan64; c) scan67; d) scan66

Tabelle 7.1: Fokussmessung mittels Flip

Messungsnummer	vertikaler Fokus	horizontaler Fokus	Differenz
scan57 scan58	-125 μm	-175 μm	-100 μm
scan63 scan64	-125 μm	-150 μm	-25 μm
scan69 scan70	-175 μm	-225 μm	-50 μm
scan71 scan72	-250 μm	-300 μm	-50 μm
scan75 scan76	-375 μm	-550 μm	-175 μm

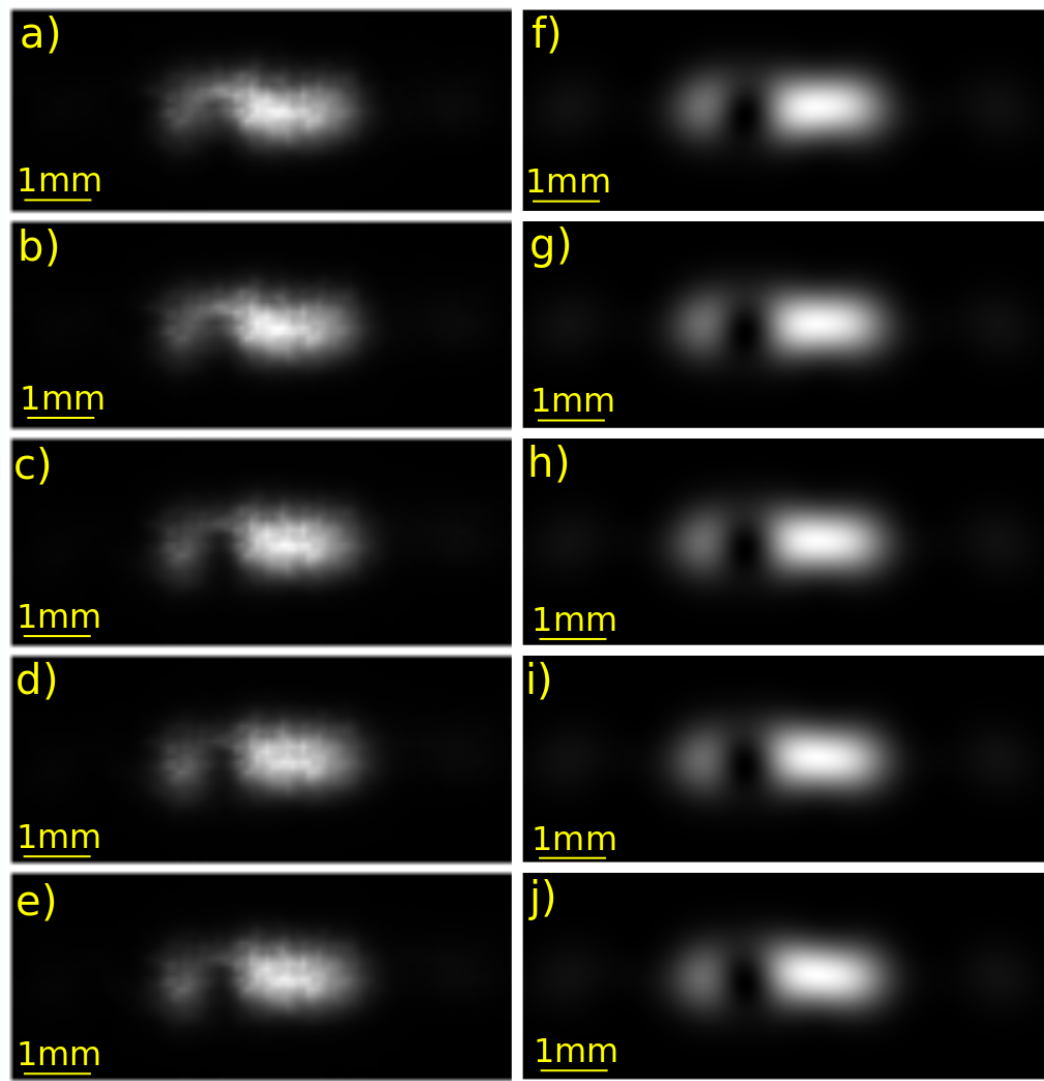


Abbildung 7.2: a) bis e): Messungen um angenommenen horizontalen Fokusflip; f) bis j) Simulationen um horizontalen Fokusflip

7.2 PTYCHOGRAPHIE

Mit Hilfe der aus der Ptychographie gewonnenen Informationen über das Wellenfeld des Strahls nahe am Fokus konnten die Kaustiken der jeweiligen Messungen rekonstruiert werden. Abbildung 7.3 zeigt diese für scan56. Dies ist die Ptychographie, welche den Ronchigrammen scan57 und scan58 entspricht. Eingezeichnet ist die Nullposition des Gitters sowie die Fokuspositionen, die in Tabelle 7.2 für die jeweiligen Ptychographiemessungen dargestellt sind. Die Messgenauigkeit ist hier zum einen durch die Schrittweite und daraus resultierend, Pixelgröße bei der Rekonstruktion der Kaustiken von $12.5\ \mu\text{m}$ gegeben, zum anderen dadurch, dass es nicht eindeutig zu sagen ist, welches Pixel die Mitte des Fokus darstellt. Daher gebe ich hier die Genauigkeit mit plus/minus einem Pixel, also $\pm 12.5\ \mu\text{m}$ an.

Abbildung 7.6 zeigt das rekonstruierte Wellenfeld beim Durchgang durch den Fokus.

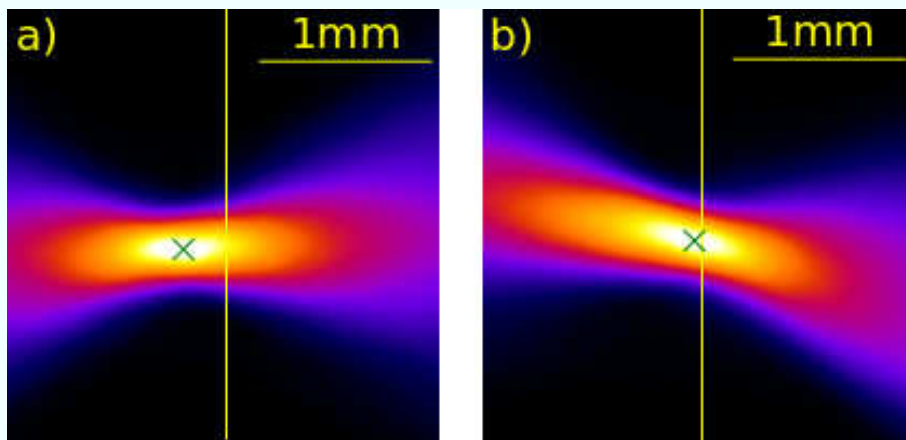


Abbildung 7.3: a) x-Kaustik für scan56 b) y-Kaustik für scan56

Tabelle 7.2: Fokussmessung an den Kaustiken

Messungsnummer	vertikaler Fokus	horizontaler Fokus	Differenz
scan56	$-62.5\ \mu\text{m}$	$-250\ \mu\text{m}$	$-187.5\ \mu\text{m}$
scan62	$-87.5\ \mu\text{m}$	$-212.5\ \mu\text{m}$	$-125\ \mu\text{m}$
scan78	$-587.5\ \mu\text{m}$	$-237.5\ \mu\text{m}$	$350\ \mu\text{m}$

7.3 LINSENFEHLER

Die Ronchigramme der Messung scan58 zeigen eine Schiefstellung der Ronchilinen, die einen Astigmatismus anzeigt. Ein Astigmatismus ist wie in Kapitel 2.3 theoretisch besprochen und in Kapitel 5.2.1 anhand von Simulationen anschaulich gemacht, nur dann zu sehen ist, wenn ϕ zwischen 0° und 90° liegt. Dies kann durch eine absolute Drehung der Linsen geschehen oder durch eine relative. Abbildung 7.4 zeigt die Ausrichtung der Linsen, aufgenommen mit der PCO-Kamera. Hier ist gut zu sehen, dass die absolute Verdrehung der Linsen weit unter 45° liegt. Damit ist anzunehmen, dass die Verdrehung der Sagittalebene, welche den Astigmatismus in den Ronchigrammen sichtbar macht, durch die relative Verdrehung der Linsen ausgelöst werden muss. Diese relative Verdrehung wurde durch die Simulationen auf 0.8° abgeschätzt. Die relative Verdrehung erklärt auch die Ellipsenförmigkeit des Wellenfeldes, welche in den Ptychographien zu beobachten ist (vgl. Kapitel 5.2.1).

Abgesehen von einer Abrundung durch den schwachen Abfall am Rand des Strahls, also der weichen Apertur, ist in den Ronchigrammen keine deutliche Abweichung der Ronchilinie von einer

Linienform zu erkennen. Dies zeigt, dass die Böschung einer gegebenenfalls vorhandenen Unterätzung unter 0.57° liegt (vgl. Abbildung 5.11 a) und d)). Dies wird auch durch das rekonstruierte Wellenfeld bestätigt, dass keine Dreizähligkeit erkennen lässt.

Zur gleichmäßigen Unterätzung ohne Böschung lässt sich nur schwer eine Aussage treffen, da der Rochitest hierzu wie in Kapitel 5.2.2 dargestellt nicht sehr empfindlich ist. Das rekonstruierte Wellenfeld zeigt jedoch kaum die für eine Unterätzung typische Wölbung/spärische Aberration. Daher würde ich die Unterätzung auf unter $\pm 100 \text{ nm}$ schätzen (vgl. Abbildung 5.10).

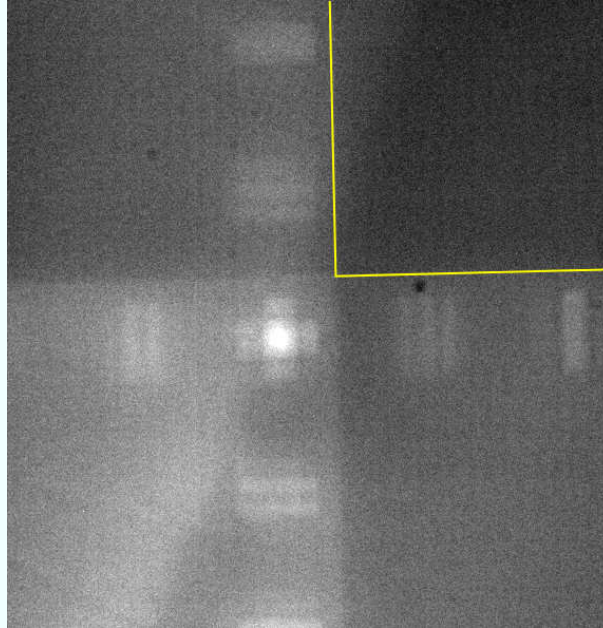


Abbildung 7.4: Aufnahme der Linsenlage

7.4 OPTIMIERUNG

Eine grobe Untersuchung der Phasenräume zu unserem Problem zeigt, dass es viele lokale Minima oder zumindest „Gräben“ gibt in denen sich die Optimierung festlaufen kann. Daher ist die Optimierung mittels der Simplexmethode auch fehlgeschlagen, da hier der Simplex fast überall ein lokales Minimum gefunden und sich darin festgefahren hat.

Die Optimierung mittels der von mir implementierten Koordinatenmethode, welche die Parameterachsen des Phasenraums als Suchrichtung hat, war von mäßigem Erfolg. Abbildung 7.7 zeigt das Ergebnis einer Optimierung eines Messbildes aus der Messung scan58 (7.7 a)). Für die relative Linsendrehung war der hier gefundene Wert 0.8° . Dies deckt sich mit meiner eigenen Auswertung. Um dies zu erreichen, war es allerdings nötig, den Parameter für die absolute Linsendrehung fest auf 0° zu setzen. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da, wie oben festgestellt, rein aus den Ronchigrammen nicht zwischen diesen beiden Effekten unterschieden werden kann.

Für die Böschung wurde allerdings ein deutlich zu großer Wert von 1.14° gefunden. Das ist auch an der leichten Dreizähligkeit des so simulierten Wellenfeldes zu sehen. Der Parameter für die Unterätzung ist zu genau 0 nm optimiert worden. Da eine eventuell vorhandene Unterätzung sich allerdings vor allem in einer Verschiebung des Fokusses entlang der optischen Achse bemerkbar machen würde und der Parameter für die Position des Gitters entlang der optischen Achse nicht Teil der Optimierung ist, bedeutet dies lediglich, dass die Simulation das Gitter an einem Ort angenommen hat, an dem keine solche Korrektur hilfreich wäre.

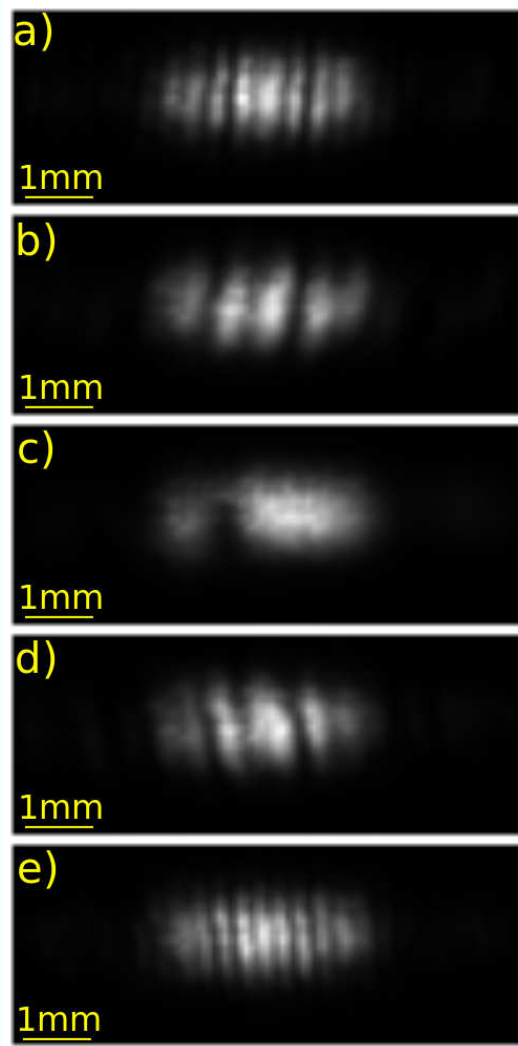


Abbildung 7.5: a) 2 mm vor dem Fokus b) 1 mm vor dem Fokus c) im Fokus d) 1 mm nach Fokus e) 2 mm nach Fokus

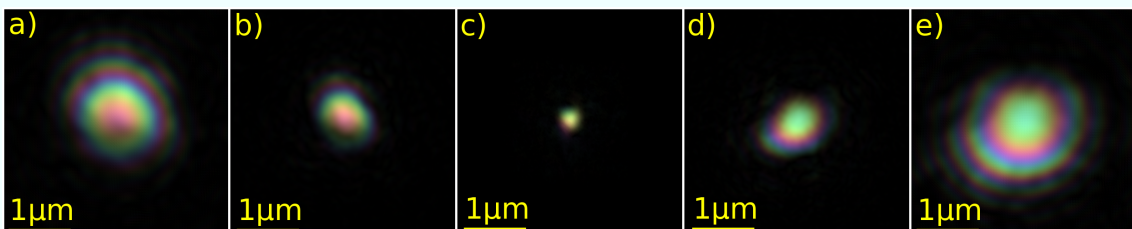


Abbildung 7.6: a) 2 mm vor dem Fokus b) 1 mm vor dem Fokus c) im Fokus d) 1 mm nach Fokus e) 2 mm nach Fokus

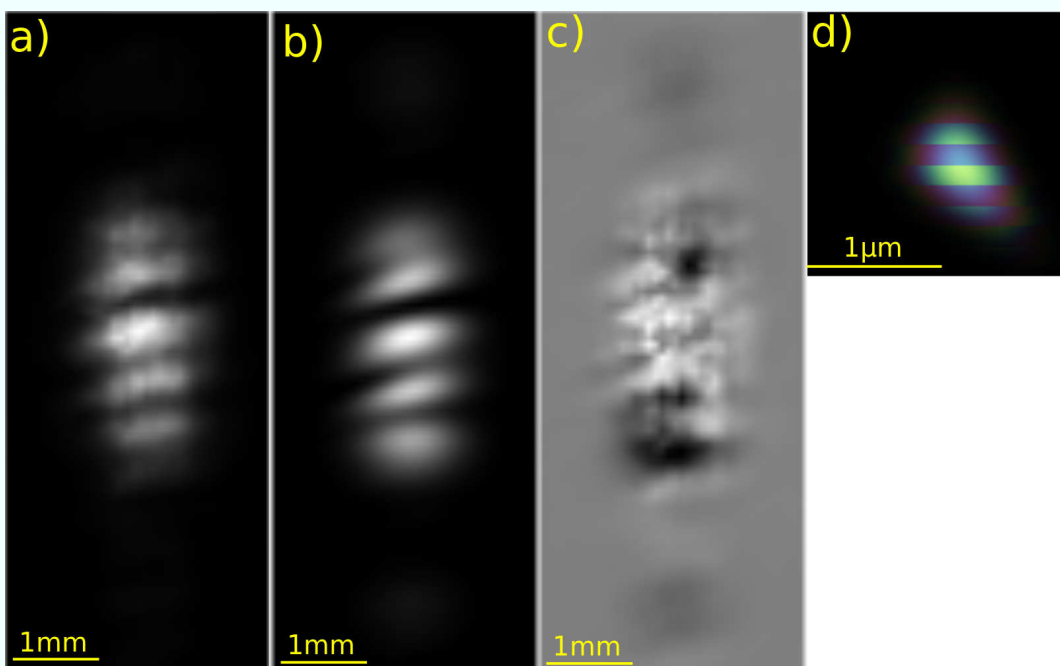


Abbildung 7.7: a) Für die Optimierung verwendetes Vergleichsbild b) Optimiertes simuliertes Ronchigramm c) Differenz Messung und Simulation d) Simuliertes Wellenfeld zur Optimierung am Gitter

8 ERGEBNISSE

8.1 SCHLUSSFOLGERUNGEN ÜBER DIE LINSENFEHLER

Die durchgeführten Messungen und die darauf aufbauenden Überlegungen haben keine Produktionsfehler bei den Linsen feststellen können. Die Grenze für die Unterätzung setze ich dabei auf $0 \text{ nm} \pm 100 \text{ nm}$ und für die Böschung auf $0^\circ \pm 0.57^\circ$. Diese Ergebnisse sind allerdings vor allem auf Grund der Ptychographie erzielt worden, da sich der Ronchitest, zumindest beim gegebenen Versuchsaufbau als nicht empfindlich genug erwiesen hat. Es konnte jedoch ein Fehler im konkreten Aufbau vermessen werden. Die relative Linsendrehung wurde damit zu $0.8^\circ \pm 0.1^\circ$ bestimmt. Hier haben sich die Ronchigramme als spezifischer aussagekräftig erwiesen als die Ptychographie.

8.2 ERGEBNISSE DER STRAHLCHARAKTERISIERUNG

Die Lage des horizontalen und vertikalen Fokusses ist mittels der Ronchimethode nur grob möglich, wie bereits aus den theoretischen Überlegungen in Kapitel 2.3 hervorgeht. Schon vom Prinzip her müssen die durch Ronchigramme gemessenen Abstände zu klein sein. Hinzu kommt im konkreten Falle der durchgeführten Messungen noch das Problem der geringen Auflösung und der teilweise zu kleinen Gitter. Bei diesen ist es mehrfach vorgekommen, dass der Strahl, während des Fahrens des Gitters entlang der optischen Achse, das Gitter nicht mehr getroffen hat und die Messung damit unvollständig war.

8.3 VORSCHLAG ZUR FEINKALIBRIERUNG DER LINSEN MITTELS RONCHIGRAMME

Wie in Kapitel 5.2.1 an Hand der Simulationen nahegelegt und in Kapitel 7.1 als Erklärung dafür angeführt, dass man bei unverdrehten Gittern überhaupt eine Liniendrehung beobachten konnte, ist der Ronchitest sehr empfindlich auf eine relative Linsendrehung, deren Auswirkung, selbst unter den suboptimalen Bedingungen der durchgeführten Messungen, deutlich waren. Abbildung 8.1 zeigt eine simulierte Messreihe, die zeigt, wie eine Kalibrierung der relativen Linsendrehung aussehen könnte. Die hier dargestellte Auflösung ist dabei 10 Mal so hoch wie sie in unserem Experiment war.

Hier wurde bei a) davon ausgegangen, dass das Ronchigitter ein paar Punkte abgefahren hat, dadurch grob die Fokuspositionen bekannt sind und das Gitter dann in einen Abstand von etwa **1 mm** vor dem Fokus gefahren wurde. Dieser Abstand ist natürlich vom konkreten Aufbau abhängig und sollte bei kürzeren Brennweiten der Linsen ebenfalls kleiner gewählt werden. Die Interpretation des Ronchigramms geht nun folgendermaßen: Es sei bekannt, dass die Linsen etwa senkrecht bzw. parallel zum Gitter ausgerichtet sind, die absolute Verdrehung sollte also unter 5° bis 10° sein. Die Verdrehung der Ronchilinen kann also vollständig der relative Drehung zugeordnet werden. Aus Simulationen oder Erfahrung ist weiter bekannt, dass der beobachtete Effekt klar anzeigt, dass die vertikale Linse zur horizontalen Linse um mindestens -1° verdreht ist. Also wird die vertikale Linse um $+1^\circ$ gedreht.

Abbildung 8.1 b) zeigt nun das Ergebnis dieser Veränderung. Die Linien im Ronchigramm sind immer noch schief, also ist die optimale Lage noch nicht erreicht. Eine weitere Drehung der vertikalen Linse um $+1^\circ$ wird eingeleitet.

In c) ist nun gerade noch so zu erkennen, dass die Ronchilinen in die entgegengesetzte Richtung schief liegen. Der optimale Punkt wurde also überschritten. Eine Korrektur der vertikalen Linse um 0.5° bringt schließlich das in d) gezeigte Ergebnis und das Ende der Kalibrierung. Die nun in der Simulation erreichte Lage ist für die vertikale Linse -0.2° und keine Verdrehung der horizontalen Linse.

Inwiefern ein Experimentator in der Lage wäre diese Kalibrierung genauer durchzuführen, hängt von der Messqualität und der Erfahrung des Auswertenden bei der Interpretation von Ronchigrammen ab. Kritisch für die Umsetzung dieses Vorschlags ist die Möglichkeit, die Linsen zumindest für einige Grad schnell, zuverlässig und reproduzierbar um die optische Achse zu drehen. Dies war zum Zeitpunkt des von mir durchgeführten Experiments noch nicht der Fall.

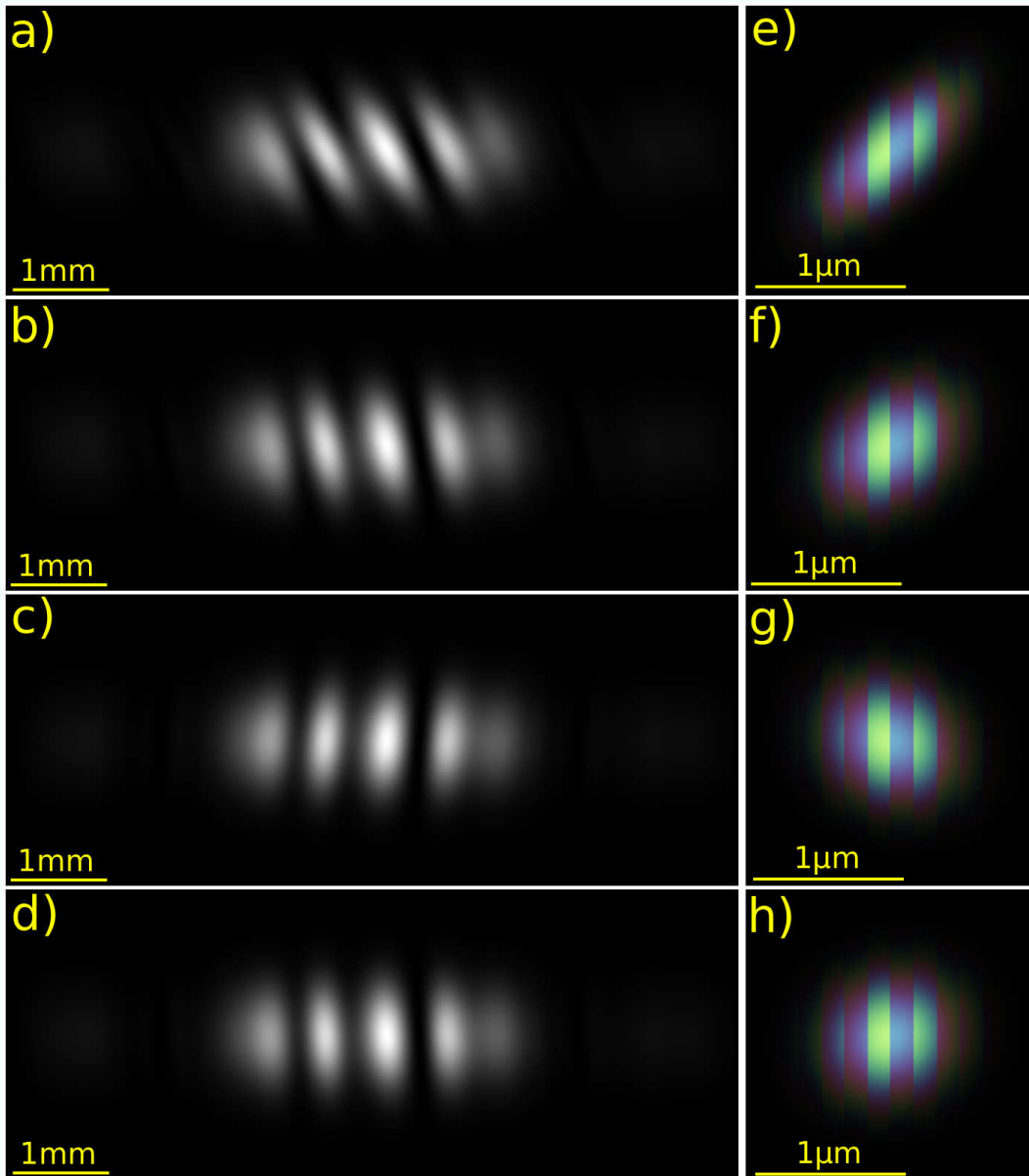


Abbildung 8.1: Simulationen zum Vorschlag einer Kalibrierung

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Abgerufen am 25.03.2014. URL: http://en.wikipedia.org/wiki/Nelder-Mead_method.
- [2] A. Corneja-Rodriguez. "Ronchi Test". In: ed. by Daniel Malacara. Wiley, 2007. Chap. 9, pp. 317–350.
- [3] Herbert Gross. *Handbook of Optical Systems*. Ed. by Herbert Gross. Vol. 1. Wil, 2005.
- [4] Halliday, Resnick, and Walker. *Physik*. Ed. by Prof. Dr. Stephan W. Koch. Wiley, 2003.
- [5] Manfred Kasper. *Die Optimierung elektromagnetischer Felder mit Hilfe der Finiten Elemente Methode und deren Anwendung auf ein Wirbelstromproblem*. VDI Verlag, 1990.
- [6] Kevin Kofler. "Black Box Optimization with Data Analysis". Diplomarbeit. Universität Wien, 2007. URL: <http://www.tigen.org/kevin.kofler/bbowda/>.
- [7] Marco A. Luersen and Rodolphe Le Riche. "Globalized Nelder-Mead method for engineering optimization". In: *Computers and Structures* 82 (2004), pp. 2251–2260.
- [8] Andrew M. Maiden and John M Rodenburg. "An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging". In: *Ultramicroscopy* 109 (2009), pp. 1256–1262.
- [9] J. A. Nelder and R. Mead. "A simplex method for function minimization". In: *Computer Journal* 7 (1965), pp. 308–313.
- [10] Daniel Nilsson et al. "Ronchi Test for characterization of Nanofocusing optics at a hard x-ray free-electron laser". In: *Optics Letters* 37 (2012), pp. 5046–5048.
- [11] C. G. Schroer et al. "Hard x-ray nanoprobe based on refractive x-ray lenses". In: *Applied Physics Letters* 87 (2005).
- [12] CG Schroer et al. "Nanofocusing parabolic refractive x-ray lenses". In: *Applied Physics Letters* 82 (2003), pp. 1485–1487.
- [13] A. Schropp et al. "Hard x-ray nanobeam characterization by coherent diffraction microscopy". In: *Applied Physics Letters* 96 (2010).
- [14] *Unified Data Sheet für die Beamline PETRAIII/P06*. Abgerufen am 07.03.2013. URL: http://photon-science.desy.de/facilities/petra_iii/beamlines/p06_hard_x_ray_micro_probe/unified_data_sheet_p06/index_eng.html.

ERKLÄRUNG

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig, unter Angabe aller Zitate und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Dresden, 26.03.2014

