

Friedrich-Schiller-Universität Jena
Physikalisch-Astronomische Fakultät
Institut für Optik und Quantenelektronik



Bachelorarbeit

Kohärenztomographie mit kurzen Wellenlängen

Alexander Blinne

eingereicht von **Alexander Blinne**
geboren am 19.10.1987 in Essen
Matrikelnummer: 101623
E-Mail: Alexander.Blinne@uni-jena.de

1. Gutachter
Prof. Dr. rer. nat. habil. Gerhard G. Paulus
Institut für Optik und Quantenelektronik Jena
Friedrich-Schiller-Universität Jena

2. Gutachter
Prof. Dr. rer. nat. Malte C. Kaluza
Institut für Optik und Quantenelektronik Jena
Friedrich-Schiller-Universität Jena

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. März 2011

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

Jena, den 30. März 2011

1 Zusammenfassung

Die optische Kohärenztomographie ist eine Methode, die mit Hilfe der Kohärenzeigenschaft von Licht beim Durchleuchten von Proben Tiefenauflösung erreicht. Dazu untersucht man das von den Strukturen in der Probe reflektierte Licht. Im Spektralbereich von sichtbarem Licht und Infrarot wird die optische Kohärenztomographie bereits in vielen Varianten eingesetzt. Sie findet in den Biowissenschaften und insbesondere in der Ophthalmologie Verwendung.

Für klassische Mikroskopie benötigt man zur Verbesserung der Auflösung nach dem ABESchen Beugungslimit kürzere Wellenlängen und beugungsbegrenzte Optiken mit großer numerischer Apertur. Zielt man auf den Einsatz extrem-ultravioletter Strahlung (XUV) und weicher Röntgenstrahlung (SXR) ab, ist letzteres sehr schwierig. Es gibt hier wegen der hohen Absorption keine refraktiven Optiken und auch reflektive Optiken sind problematisch. Um hohe Reflektivitäten zu erreichen, wählt man streifenden Lichteinfall, was zu Abbildungsfehlern und kleinen Aperturen führt, die nur mit großem Aufwand und unter Intensitätsverlust behoben werden können. Mit der in dieser Arbeit vorgeschlagenen optischen Kohärenztomographie können alle diese prinzipbedingten Hürden bei kurzen Wellenlängen effektiv umgangen werden.

Bei der optischen Kohärenztomographie wird die Tiefe, in der sich reflektierende Strukturen befinden, durch Beobachtung der Interferenz zwischen dem an ihnen reflektierten Licht und einem Referenzstrahl festgestellt. Dabei wird die Auflösung durch die Kohärenzlänge bzw. die Bandbreite der verwendeten Strahlung definiert und hängt im Gegensatz zur klassischen Mikroskopie nicht von den Strahleigenschaften ab. Die Kohärenzlänge ist proportional zu $\frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$ und liegt aufgrund der bisher verwendeten Wellenlängen im Bereich von Mikrometern. Für die angestrebten Wellenlängen im XUV- oder SXR-Bereich lassen sich aber Auflösungen von wenigen 10 Nanometern bzw. wenigen Nanometern realisieren.

Diese Arbeit befasst sich mit dieser neuartigen Methode der Mikroskopie. Dazu ist eine Reihe theoretischer Vorbetrachtungen nötig, welche von der Streuung kurzwelliges Lichts bis hin zur Interferenz an Schichtstrukturen reichen. Ferner wird ein Experiment beschrieben, das bereits zur Durchführung vorgeschlagen wurde. Im Rahmen der Bachelorarbeit wurde eine Software für die Simulation dieses Experiments entwickelt, welche eine Matrixmethode unter Einbeziehung einer Datenbank für Brechungsindizes verwendet. Mit einer intuitiv bedienbaren grafischen Oberfläche können Vielschichtsysteme online modifiziert und die Reflektivitäten bzw. die Korrelationsfunktion ausgegeben werden. Die Ergebnisse solcher Simulationen werden vorgestellt und im Hinblick auf erreichbare Auflösungen bei der tomographischen Rekonstruktion interpretiert.

Inhaltsverzeichnis

1	Zusammenfassung	1
2	Optische Kohärenztomographie	3
2.1	Kohärenz	3
2.1.1	Zeitliche Kohärenz	3
2.1.2	Einfluss der Kohärenz auf interferierende Strahlen	3
2.1.3	WIENER-CHINTSCHIN-Theorem	4
2.2	Time-Domain OCT	5
2.3	Fourier-Domain OCT	6
2.3.1	Auflösung	7
2.3.2	Fensterfunktionen	8
3	Kohärenztomographie bei kurzen Wellenlängen	8
3.1	Strahlquellen im XUV und SXR	9
3.2	Eigenschaften von XUV und SXR im Medium	9
3.2.1	Streutheorie	9
3.2.2	Absorption und Dispersion	11
3.3	Abbildende Optik und Spektroskopie im XUV	13
3.4	Experimenteller Aufbau	13
4	Simulation	14
4.1	Reflektivität von 1D-Strukturen	14
4.1.1	Matrixformalismus	14
4.1.2	FRESNELSche Formeln	15
4.1.3	Optische Eigenschaften von Materialien im XUV und SXR	17
4.2	Simulationssoftware	17
5	Ergebnisse	18
5.1	Simulationen im Siliziumfenster	18
5.1.1	Molybdän-Silizium-Schichtsysteme	18
5.1.2	Lanthan-Silizium	20
5.2	Wasserfenster und Borcarbid	22
5.2.1	Borcarbid und Lanthan	22
5.2.2	Borcarbid und Quarz	23
5.3	Grenzen der XUV-Kohärenztomographie	26
6	Ausblick der XCT	26

2 Optische Kohärenztomographie

Als Tomographie bezeichnet man eine Klasse von Verfahren, die die innere Struktur von Proben aufklären können. Sie werden zum Beispiel in der Medizin und Biologie in Form von Computertomographie oder Magnetresonanztomographie eingesetzt. Bei optischer Tomographie werden die Proben dazu mit Licht durchleuchtet. Das Verfahren der optischen Kohärenztomographie basiert auf der Eigenschaft der Kohärenz von Licht.

2.1 Kohärenz

Als Kohärenz bezeichnet man die Fähigkeit von Licht zur Interferenz. Die Grundvoraussetzung für Interferenz ist das Vorhandensein einer festen Phasenbeziehung zwischen den Lichtfeldern, die miteinander überlagert werden sollen. Ein Maß für Kohärenz ist die Korrelationsfunktion Γ . Diese gibt an, mit welcher Sicherheit sich die Feldamplitude und Phase am Ort \mathbf{r}_2 zum Zeitpunkt $t + \tau$ schätzen lässt, wenn man das Feld am Ort \mathbf{r}_1 zum Zeitpunkt t kennt. Nach [1] lässt sie sich als

$$\Gamma_{12}(\tau) = \langle E^*(\mathbf{r}_1, t) E(\mathbf{r}_2, t + \tau) \rangle, \quad \Gamma_{12}^{(0)} = \frac{\Gamma_{12}}{\langle E(\mathbf{r}_1, t) \rangle \langle E(\mathbf{r}_2, t + \tau) \rangle} \quad (1)$$

schreiben, wobei $\langle \dots \rangle$ für eine zeitliche Mittelung steht. Dabei nimmt die normierte Korrelationsfunktion $\Gamma^{(0)}$ für ebene Wellen identisch den Wert 1 an. Dies bedeutet, dass man sie als kohärent bezeichnet. Werte zwischen 0 und 1 weisen auf ein teilweise kohärentes Feld, der Wert 0 auf ein vollständig inkohärentes Feld hin. Bei einem Wellenfeld, das von räumlich getrennten und unabhängigen Oszillatoren hervorgerufen wird, wird sie hingegen bereits für kleine Abstände zwischen \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 sehr kleine Werte annehmen, was bedeutet, dass dieses Wellenfeld keine räumliche Kohärenz besitzt.

2.1.1 Zeitliche Kohärenz

Zeitliche Kohärenz ist die Fähigkeit von zeitlich getrennten Wellenfronten am selben Ort miteinander zu interferieren, es ist also $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$. Die zeitliche Kohärenz ist diejenige Eigenschaft von Licht, die bestimmt, ob es zur Interferenz kommt, wenn in einem Michelson-Interferometer ein Lichtweg verlängert oder verkürzt wird. Später wird gezeigt, dass genau dies die für Kohärenztomographie entscheidende Eigenschaft von Licht ist.

2.1.2 Einfluss der Kohärenz auf interferierende Strahlen

Ein schmalbandiges, aber nicht monochromatisches Wellenfeld lässt sich als Überlagerung benachbarter monochromatischer Wellen verstehen. Ist an einem bestimmten Ort und zu einer bestimmten Zeit die Phase bekannt, kann man versuchen, für spätere Zeiten die Phase vorherzusagen. Die Unsicherheit $\Delta\phi = \tau \Delta\omega$ wächst mit der vergangenen Zeit τ . Ist $\Delta\phi \ll \pi$, ist die resultierende Phase also festgelegt und es kann zu einer Interferenzerscheinung kommen. Nach längerer Zeit, wenn $\Delta\phi$ in die Größenordnung von π kommt, wird die Phase statistisch unabhängig von

der Phase zum Anfangszeitpunkt sein. Als Kohärenzlänge definiert man nach [1] diejenige Strecke, die Licht zurücklegt, bis der Phasenunterschied zwischen zwei Wellen mit den Frequenzen ω und $\omega + \Delta\omega$ den Wert π erreicht, also

$$l_{\text{coh}} := c\tau_{\text{coh}} := c \frac{\pi}{\Delta\omega} = \frac{\lambda^2}{2\Delta\lambda} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda_{\text{FWHM}}}. \quad (2)$$

Die Kohärenzlänge lässt sich auch als die Länge $c\tau$ definieren, bei der die normierte Korrelationsfunktion $\Gamma^{(0)}$ auf den Wert $\frac{1}{e}$ abgefallen ist.

Da die Kohärenzlänge, wie später zu sehen sein wird, die mit optischer Kohärenztomographie erreichbaren Auflösungen wesentlich bestimmt, ist es gewünscht, diese so klein wie möglich zu wählen. Dies lässt sich durch breitbandiges Licht schon gut erreichen. Die Mittenwellenlänge des Lichts geht aber quadratisch ein. Besonders lohnend ist also eine Verkleinerung der Wellenlänge.

2.1.3 WIENER-CHINTSCHIN-Theorem

Die Kohärenzfunktion eines Wellenfeldes hängt direkt mit seinem Leistungsspektrum zusammen. Verwendet man die folgende Form der Fouriertransformation

$$E(\omega) \stackrel{FT}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\omega t} dt$$

$$E(t) \stackrel{FT^{-1}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

lässt sich schreiben

$$\begin{aligned} \Gamma(\tau) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T E^*(t) E(t + \tau) dt \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \int_{-\infty}^{\infty} E^*(\omega') e^{i\omega' t} d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega'') e^{-i\omega''(t+\tau)} d\omega'' dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E^*(\omega') E(\omega'') e^{-i\omega''\tau} \underbrace{\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T e^{i(\omega' - \omega'')t} dt}_{\delta(\omega' - \omega'')} d\omega' d\omega'' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{|E(\omega')|^2}_{I(\omega')} e^{-i\omega'\tau} d\omega' = FT^{-1} [I(\omega)]. \end{aligned}$$

Die Korrelationsfunktion hängt also über die Fouriertransformation mit dem Leistungsspektrum der Lichtquelle zusammen. Je breiter das Spektrum, desto kürzer die Kohärenzlänge. Nun lässt sich aber auch die genaue Form der Korrelationsfunktion berechnen. Da man das Leistungsspektrum durch Filter formen kann,

lässt sich also auch das Abklingen der Korrelationsfunktion optimieren. Für ein GAUSSförmiges Spektrum lässt sich die oben anschaulich begründete Gleichung für die Kohärenzlänge (2) direkt ablesen, da die Glockenkurve bei Fouriertransformation erhalten ist.

2.2 Time-Domain OCT

Nun ist es das Ziel, das Innere eines Körpers mit Hilfe von Licht mit einer begrenzten Kohärenzfunktion zu rekonstruieren. Dazu soll das Licht in ihn eindringen und in seinem Inneren reflektiert werden. Man muss dann feststellen, in welcher Tiefe Teile des Lichts reflektiert wurden. Dies kann man, indem man einen Referenzstrahl bekannter Laufstrecke betrachtet und überprüft, ob es zwischen ihm und dem in einer zunächst unbekanntem Tiefe in der Probe reflektierten Licht zu einer Interferenzerscheinung kommt. Dies ist offensichtlich nur dann der Fall, wenn der Längenunterschied zwischen beiden Lichtwegen kleiner als die Kohärenzlänge ist.

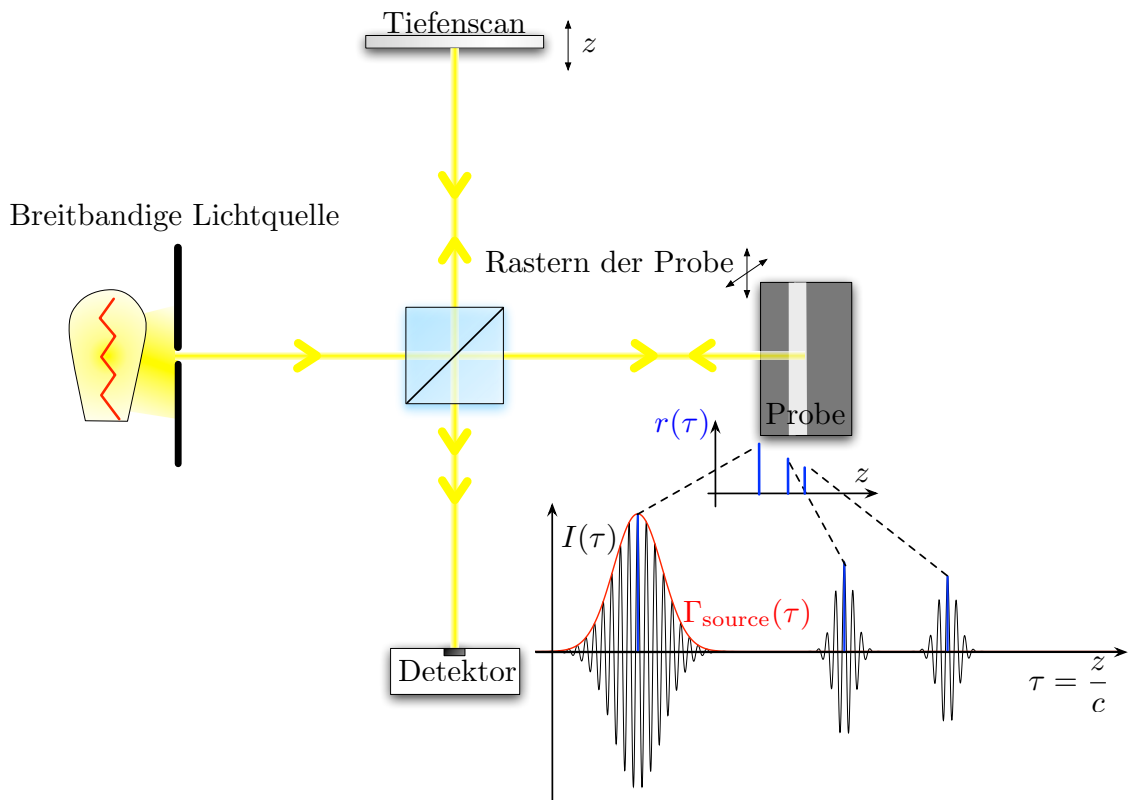


Abbildung 1: Klassischer Aufbau einer Time-Domain OCT (schematische Darstellung)

Die einfachste Möglichkeit einer Kohärenztomographie ist der Aufbau eines Michelson-Interferometers und einer breitbandigen Lichtquelle wie in Grafik 1 dargestellt. Das Detektorsignal ergibt sich aus der zeitlichen Mittelung [3] der am Detektor auftreffenden Intensitäten, wie sie durch die Überlagerung aller entstehenden Wellen entsteht. Es hängt von der verwendeten Wellenlänge und der Zeitverschiebung des

Referenzarms, ausgedrückt durch z_R ab und lässt sich als

$$I_D(k, z_R) = \frac{\rho}{2} \left\langle \left| \frac{E(k)}{\sqrt{2}} r_R e^{i(2kz_R - \omega t)} + \frac{E(k)}{\sqrt{2}} \sum_{n=1}^N r_{S_n} e^{i(2kz_{S_n} - \omega t)} \right|^2 \right\rangle$$

schreiben. Hierbei wurde eine diskrete Struktur von einzelnen reflektiven Schichten angenommen. Wertet man diesen Ausdruck aus, erhält man das spektrale Interferogramm

$$\begin{aligned} I_D(k, z_R) = & \frac{\rho}{4} [S(k) (R_R + R_{S_1} + R_{S_2} + \dots)] \\ & + \frac{\rho}{2} \left[S(k) \sum_{n=1}^N \sqrt{R_R R_{S_n}} \cos(2k_0(z_R - z_{S_n})) \right] \\ & + \frac{\rho}{4} \left[S(k) \sum_{n=1 \neq m}^N \sqrt{R_{S_n} R_{S_m}} \cos(2k_0(z_{S_n} - z_{S_m})) \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

Hierbei wurde $S(k) = \langle |E(k)|^2 \rangle$ eingesetzt, was die Intensität der Lichtquelle abhängig von der Wellenzahl angibt. Nimmt man nun ein GAUSSförmiges Spektrum an und integriert über alle k , erhält man einen Ausdruck für das Detektorsignal, der von der am Referenzarm eingestellten Verschiebung z_R abhängt und nach [3] die Form

$$\begin{aligned} I_D(z_R) = & \frac{\rho}{4} [S_0 (R_R + R_{S_1} + R_{S_2} + \dots)] \\ & + \frac{\rho}{2} \left[S_0 \sum_{n=1}^N \sqrt{R_R R_{S_n}} \underbrace{e^{-(z_R - z_{S_n})^2 \Delta k^2}}_{\Gamma^{(0)}(z_R - z_{S_n})} \cos(2k_0(z_R - z_{S_n})) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

hat, wobei S_0 die Intensität der Lichtquelle ist und ρ ein Maß für die Empfindlichkeit des Detektors darstellt. Die Verschiebung z_R entspricht einer Zeitverzögerung $\tau = \frac{z_R}{c}$ zwischen Referenzwelle und in der Probe reflektierter Welle. Sollte diese Zeitverzögerung groß sein, überlagern sich die Wellen inkohärent. Es addieren sich dann einfach ihre Intensitäten. Dies führt zum so genannten Gleichstromanteil im Detektorsignal (4), was im in der Grafik gezeigten Diagramm der Nulllinie entspricht. Für jede in der Probe reflektierte Lichtwelle, hier dargestellt durch drei δ -Peaks der Höhen R_{S_n} in der Reflektivität $R(z)$, ergibt sich ein Interferenzmuster, dessen Einhüllende die Kohärenzfunktion ist.

2.3 Fourier-Domain OCT

Beim spektralen Interferogramm (3) gibt es neben dem Gleichstromterm zwei verschiedene variable Terme. Die Interferenzen, bei denen der Referenzarm beteiligt ist, werden als Kreuzkorrelationen bezeichnet. Zusätzlich kommt es aber zu einer Interferenz der in der Probe reflektierten Strahlen untereinander, was den als Autokorrelation bezeichneten letzten Term erzeugt und ein unerwünschter Nebeneffekt ist, der aber mit Verfahren wie dem in [3] beschriebenen „Phase Shifting“ behoben

werden kann. Hierbei wird ein phasenschiebendes Element in den Referenzarm gebracht und eine zweite Messung mit einer Phasenverschiebung von ϕ durchgeführt. Dies wirkt sich nur auf den Kreuzkorrelationsterm aus, welcher sein Vorzeichen wechselt. Danach wird die Differenz beider Messungen gebildet.

Für eine Kohärenztomographie im Frequenzraum wählt man eine feste Verschiebung z_R des Referenzarms. Es ist also kein Tiefenscan mehr notwendig. Führt man dann eine Fouriertransformation dieses spektralen Interferogramms durch und verwendet das WIENER-CHINTSCHIN-Theorem und die Faltungsregel, erhält man nach [3]

$$\begin{aligned} \hat{I}_D(z) = & \frac{\rho}{8} [\Gamma(z) (R_R + R_{S1} + R_{S2} + \dots)] \\ & + \frac{\rho}{4} \left[\Gamma(z) * \sum_{n=1}^N \sqrt{R_R R_{S_n}} \delta(z \pm 2(z_R - z_{S_n})) \right] \\ & + \frac{\rho}{8} \left[\Gamma(z) * \sum_{n=1 \neq m}^N \sqrt{R_{S_n} R_{S_m}} \delta(z \pm 2(z_{S_n} - z_{S_m})) \right], \end{aligned} \quad (5)$$

wobei die Bezeichnung der unterschiedlichen Terme beibehalten wird. Die vorherige Abhängigkeit von der Wellenzahl k ist durch die Transformation übergegangen in die Abhängigkeit von einer neuen Tiefenvariable z . Die Kreuzkorrelationsterme enthalten dabei tatsächlich das gesuchte Reflexionsprofil

$$\sqrt{R_S(z_S)} = \sum_{n=1}^N \sqrt{R_{S_n}} \delta(z_S - z_{S_n})$$

als Funktion von z . Die hier für diskrete reflektive Strukturen gemachten Betrachtungen gelten auch für ein kontinuierliches Reflektivitätsprofil. Dieses lässt sich also durch Fouriertransformation aus dem spektralen Interferogramm gewinnen.

2.3.1 Auflösung

Die Kohärenzlänge gibt in beiden Varianten der Kohärenztomographie die Auflösung vor. Sie wird durch die spektrale Bandbreite $\Delta\lambda$ des verwendeten Lichts bestimmt (Gleichung (2)). Bei Kohärenztomographie im Zeitbereich findet sich die Korrelationsfunktion direkt als Einhüllende der Interferenzmuster für jede in der Probe auftretende Reflexion. Im Frequenzraum kann die Messung als eine Multiplikation des gesamten theoretisch vorhandenen und auf die Intensitätsverteilung der Lichtquelle normierten Interferogramms mit einer Fensterfunktion $S(k)$ angesehen werden. Normiert man das in einem gewissen Spektralbereich gemessene Interferogramm auf die Intensität der Quelle, entspricht das einem Rechteckfenster. Die Multiplikation im Spektralbereich bedeutet für die Rekonstruktion des Reflexionsprofils die Faltung mit der Fouriertransformierten des Fensters. Hierdurch ergibt sich die Auflösung der Kohärenztomographie im Frequenzraum.

Die Auflösung, mit der das Spektrum aufgenommen wird, bestimmt lediglich die Tiefe, in die die Rekonstruktion vordringen kann. Größere Tiefen werden durch Modulationen mit höherer Frequenz repräsentiert, die bei einer begrenzten Auflösung des Spektrometers nicht mehr gemessen werden können.

2.3.2 Fensterfunktionen

Das Rechteck-Fenster entspricht einem scharfen Abschneiden des aufgenommenen Spektrums. Das Rechteck-Fenster ist dabei ungeeignet, da seine Transformierte, die sinc-Funktion, Nebenmaxima enthält, die verglichen mit dem Hauptmaximum zu wenig gedämpft sind. Dies führt also zu einer verwaschenen und kontrastarmen Rekonstruktion mit unerwünschten Artefakten. Dabei gilt, dass eine lokalisierte Reflexion, wie an einer Grenzfläche, in der Rekonstruktion einem einzelnen idealen Peak entspricht, der aber mit der Transformierten der Fensterfunktion gefaltet wird.

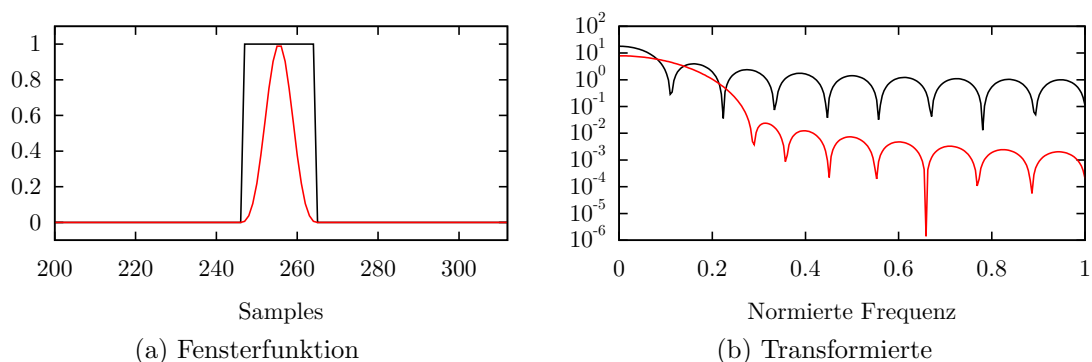


Abbildung 2: Vergleich der Transformierten von Rechteck- (schwarz) und Kaiserfenster mit $\alpha = 7$ (rot)

Es gibt allerdings eine ganze Reihe besser geeigneter Fensterfunktionen, die zu artefaktärmeren Ergebnissen führen, zum Beispiel das Kaiser-Bessel-Fenster, das bei der Transformation einen sehr großen Anteil des Signals in die Nähe der ursprünglichen Frequenz überträgt. Es hat nach [4] die Form

$$w(n) = \frac{1}{I_0(\alpha)} I_0 \left(\alpha \sqrt{1 - \left(\frac{2n}{M} \right)^2} \right),$$

wobei I_0 die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung ist und M die Breite des Fensters in Samples angibt. Das Argument n läuft dabei von $-\frac{M}{2}$ bis $\frac{M}{2}$. Der Parameter α bestimmt die Breite des Fensters, wobei für $\alpha = 0$ das Kaiserfenster gleich dem Rechteckfenster ist, mit zunehmendem α das Fenster aber schmaler wird. Gleichzeitig wird die in der Rekonstruktion erreichte Auflösung mit wachsendem α auch etwas schlechter, wie an dem breiteren Hauptmaximum zu sehen ist. Das erste Nebenmaximum ist gegenüber dem Hauptmaximum, wie in Abbildung 2 dargestellt, deutlich schwächer. Dadurch wird das rekonstruierte Reflektivitätsprofil kontrastreicher und enthält weniger Artefakte. Dies wird später an einigen Beispielen gezeigt.

3 Kohärenztomographie bei kurzen Wellenlängen

Um nun das Verfahren der optischen Kohärenztomographie auf kurze Wellenlängen zu übertragen, muss bekannt sein, wie man solches Licht erzeugt und wie es sich in diesen Spektralbereichen verhält.

3.1 Strahlquellen im XUV und SXR

Die Begriffe XUV und SXR stehen für verschiedene Bereiche kurzwelligigen Lichts. Es existiert jedoch keine scharfe, allgemeingültige Definition für die Bezeichnung der verschiedenen Spektralbereiche. Jenseits des ultravioletten Lichts bei etwa 10 bis 300 eV spricht man von extrem-ultravioletter Strahlung oder XUV, darüber beginnt der Bereich der weichen Röntgenstrahlung (soft x-ray, SXR). Bei noch kürzeren Wellen, ab etwa 4000 eV, spricht man bereits von mittlerer Röntgenstrahlung.

Es gibt zwei physikalische Effekte, die zur Erzeugung von Strahlung führen. Zum einen die starke Beschleunigung geladener Teilchen, insbesondere Elektronen, die dann sogenannte Synchrotronstrahlung aussenden. Zum anderen Zustandsübergänge von Elektronen in niedrigen Schalen von schwereren Atomen oder Molekülen.

In einer Röntgenröhre treten beide Effekte auf, da die schnellen Elektronen bei dem Eintritt in das Metall der Anode einerseits stark abgebremst werden, was zu kontinuierlicher Bremsstrahlung führt, andererseits aber auch die Hüllen der Metallatome anregen, was zum charakteristischen Spektrum führt. Die Strahlung einer Röntgenröhre ist breitbandig, enthält außerdem charakteristische Linien, ist sehr ungerichtet und weist wenig Kohärenz auf.

Eine Möglichkeit zur Erzeugung sehr viel brillanterer Strahlung ist das direkte Beschleunigen bzw. Umlenken von Elektronen aus einem Beschleunigerring. In der Regel wird die hierbei entstehende Strahlung als Synchrotronstrahlung bezeichnet. Es gibt verschiedene technische Konzepte Elektronen, durch periodische Anordnung von ablenkenden Magnetfeldern, zur Abstrahlung Licht zu bewegen, das je nach gewählter Methode mehr oder weniger kohärent ist. Diese Konzepte reichen von einfachen Wiggeln über Undulatoren bis hin zu Freie-Elektronen-Lasern.

Die Erzeugung von ultraviolettem Licht und weicher Röntgenstrahlung ist außerdem durch nichtlineare Effekte an Hochenergielasern möglich, beispielsweise durch hohe Harmonische oder durch Laser-Plasma-Wechselwirkungen.

3.2 Eigenschaften von XUV und SXR im Medium

Die so erzeugte Strahlung wird mit dem Medium, durch das sie als Welle propagiert, wechselwirken. Sind die Wellenlängen groß gegenüber den Teilchenabständen, kann dies dadurch beschrieben werden, dass sich die Phasengeschwindigkeit in der Regel verlangsamt und das Licht einer Absorption oder Dämpfung unterworfen ist. Dies wird beschrieben mit der komplexen Brechzahl $n(\omega) = \eta(\omega) + i\kappa(\omega)$, deren Realteil die Änderung der Phasengeschwindigkeit und deren Imaginärteil die Absorption quantifiziert. Sie ist Ausdruck dessen, dass das Licht die einzelnen Teilchen nicht auflösen kann sondern das Licht nur insgesamt durch ein effektives Medium beeinflusst wird.

3.2.1 Streutheorie

Sind die Wellenlängen kürzer ist es angebracht, zunächst die Streuung von Licht an einzelnen Teilchen zu betrachten, genauer gesagt die Wechselwirkung mit der Elektronenhülle. Es gibt zwar auch Streuung an größeren Partikeln, zum Beispiel wird in der OCT die Mie-Streuung an mikroskopischen Objekten genutzt. In unserem Fall

wird es vor allem Thomson-Streuung an freien oder Rayleigh-Streuung an gebundenen Elektronen sein. Für den Spezialfall der Streuung in Vorwärtsrichtung zeigt sich, dass auch hier die Transmission des kurzwelligen Lichts durch das Medium mit einer Brechzahl $n(\omega)$ beschrieben werden kann.

Zur Betrachtung der Streuung von Licht an einem gebundenen Elektron benötigt man seine Bewegungsgleichung unter Berücksichtigung der wirkenden Lorentzkraft. Die Bewegungsgleichung für das Elektron lautet nach [1]

$$m\ddot{\mathbf{x}}(t) + m\gamma\dot{\mathbf{x}}(t) + m\omega_s^2\mathbf{x}(t) = -e\mathbf{E}_i(t), \quad (6)$$

wobei m die Masse des Elektrons ist. Die Schwingung des Elektrons sei gedämpft, was durch die Konstante γ beschrieben wird, und die Bindungsenergie wird durch ω_s ausgedrückt. Das einstrahlende Lichtfeld heißt \mathbf{E} . Setzt man an, dass es sich um ein monochromatisches einstrahlendes Feld mit $\mathbf{E}_i(t) = \mathbf{E}_i(\omega)e^{-i\omega t}$ handelt, folgt im Frequenzraum aus (6) die algebraische Gleichung

$$m(-i\omega)^2\mathbf{x}(\omega) + m\gamma(-i\omega)\mathbf{x}(\omega) + m\omega_s^2\mathbf{x}(\omega) = -e\mathbf{E}_i(\omega).$$

Diese lässt sich leicht lösen und man erhält für die Beschleunigung des Elektrons den Ausdruck

$$\mathbf{a}(\omega) = -\omega^2\mathbf{x}(\omega) = -\omega^2 \frac{1}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega} \frac{e\mathbf{E}_i(\omega)}{m}. \quad (7)$$

Wie in [1] gezeigt, erzeugt eine beschleunigte Punktladung ein Elektrisches Feld der Form

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\mathbf{a}_T \left(t - \frac{r}{c}\right)}{4\pi\epsilon_0 c^2 r}, \quad r \equiv |\mathbf{r}|. \quad (8)$$

Hierbei ist \mathbf{a}_T die von \mathbf{a} zur Ausbreitungsrichtung senkrechte Komponente, für deren Betrag mit dem Streuwinkel Θ gilt $a_T = a \sin \Theta$. Ein Elektron, welches durch ein äußeres Feld \mathbf{E}_i in Schwingung versetzt wird erzeugt ein gestreutes Feld \mathbf{E} , was sich durch Einsetzen von (7) in (8) ergibt:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \frac{\omega^2 \sin \Theta}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega} \mathbf{E}_i(\omega) \frac{e^{-i\omega(t - \frac{r}{c})}}{r}.$$

Dies entspricht, wie nach dem HUYGENSSchen Prinzip zu erwarten war, einer Kugelwelle.

Das Ziel ist es hier, die Streuung des einfallenden Feldes an ganzen Atomen zu beschreiben, deren Hüllen in der Regel aus vielen Elektronen besteht. Dies ist möglich, indem man die gestreuten Kugelwellen aufsummiert, wobei berücksichtigt werden muss, dass das eingestrahelte Feld die Elektronen an unterschiedlichen Orten mit unterschiedlichen Phasen erreicht. Der Ansatz für das eingestrahelte Feld am Ort des Elektrons s wird zu $\mathbf{E}_i^{(s)}(t) = \mathbf{E}_i(\omega)e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r}_s)}$ verallgemeinert und die Überlagerung der einzelnen Kugelwellen wie in [1] zu

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -r_e \sum_{s=1}^Z \frac{\omega^2 \mathbf{E}_i(\omega) \sin \Theta}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega} \frac{1}{r_s} e^{-i[\omega(t - \frac{r_s}{c}) - \mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r}_s]} \quad (9)$$

berechnet. Hierbei ist $\mathbf{r}_s \equiv \mathbf{r} - \Delta\mathbf{r}_s$ mit $r_s \equiv |\mathbf{r}_s|$ und r_e der klassische Elektronenradius $r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}$. Um dies besser auszuwerten, ist es üblich die für $r \gg \Delta r_s$ gute Näherung $r_s \simeq r - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_s$ anzuwenden. Dabei ist \mathbf{k}_0 der normierte Wellenzahlvektor der resultierenden auslaufenden Welle, welche in großer Entfernung wieder als ebene Welle beschrieben werden kann. Setzt man diese Näherung im Exponentialterm von (9) ein und $r_s \simeq r$ im Amplitudenterm und verwendet $\mathbf{k} = k\mathbf{k}_0$ und $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_i$, so ergibt sich für die Amplitude des gestreuten Feldes nach [1] insgesamt

$$E(\mathbf{r}, t) = -\frac{r_e}{r} \left[\underbrace{\sum_{s=1}^Z \frac{\omega^2 e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \Delta\mathbf{r}_s}}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega}}_{f(\Delta\mathbf{k}, \omega)} \right] E_i \sin \Theta e^{-i\omega(t - \frac{r}{c})}.$$

Die Größe f wird Atomstrukturfaktor genannt und ist komplex. Oft wird die Notation $f = f_1 + if_2$ verwendet. Obwohl hier eine theoretische Herleitung von f gegeben wurde, ist es doch meist eine Messgröße.

Oft ist der Grenzfall für f interessant, in dem der Phasenterm verschwindet. Die dafür nötige Bedingung $|\Delta\mathbf{k} \cdot \Delta\mathbf{r}_s| \ll 1$ ist sowohl für große Wellenlängen ($|\Delta\mathbf{k} \cdot \Delta\mathbf{r}_s| \propto \frac{a_0}{\lambda}$), als auch für Vorwärtsstreuung ($\Delta\mathbf{k} = 0$) gegeben [1]. Dieser Fall wird durch den Index 0 gekennzeichnet und es ergibt sich

$$f^0(\omega) = \sum_{s=0}^Z \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega}.$$

Nun werden oft diejenigen Oszillatoren mit gleichen ω_s zusammengefasst [1], z.B. mehrere Elektronen der gleichen Schale, wobei Oszillatorstärken g_s eingeführt werden, die die Anzahl der jeweiligen Elektronen angeben. Unter der Nebenbedingung $Z = \sum_s g_s$ gilt dann

$$f^0(\omega) = \sum_s \frac{g_s \omega^2}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega}. \quad (10)$$

Auf dieses Ergebnis wird später zurückgegriffen werden.

3.2.2 Absorption und Dispersion

Für die Transmission elektromagnetischer Wellen in einem solchen Medium liefert die MAXWELLSche Theorie des Lichts nach [1] die folgende Wellengleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{-1}{\epsilon_0} \left[\frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + c^2 \nabla \rho(\mathbf{r}, t) \right],$$

die sich für eine sich in \mathbf{k} -Richtung ausbreitende Transversalwelle zu

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \right) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, t) = \frac{-1}{\epsilon_0} \frac{\partial \mathbf{J}_T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (11)$$

vereinfacht. Um jetzt die Ströme \mathbf{J} zu beschreiben, bezieht man sich wieder auf den Spezialfall der Vorwärtsstreuung, bei dem wie im vorherigen Kapitel gezeigt, die

Positionen der Elektronen zueinander keine Rolle spielt. Ebenso ist die Oszillation der Elektronen immer transversal zur Ausbreitungsrichtung, da diese sich nicht verändert. Es gilt also

$$\mathbf{J}_T(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -en_a \sum_s g_s \mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t),$$

wobei n_a die mittlere Atomzahldichte bezeichnet. Mit \mathbf{x} aus Gleichung (7) erhält man

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e^2 n_a}{m} \sum_s \frac{g_s}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (12)$$

Setzt man nun (12) in (11) ein, können die Terme nach der Ordnung ihrer Ableitung sortiert und die Gleichung auf die übliche Form der Wellengleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{c^2}{n^2(\omega)} \nabla^2 \right) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, t) = 0$$

gebracht werden, wobei

$$\begin{aligned} n(\omega) &= \sqrt{1 - \frac{e^2 n_a}{m} \sum_s \frac{g_s}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega}} \\ &\approx 1 - \frac{e^2 n_a}{2m} \sum_s \frac{g_s}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\gamma\omega}, \end{aligned}$$

was unter Verwendung von Gleichung (10) mit Hilfe des Atomstrukturfaktors f^0 als

$$= 1 - \frac{n_a r_e \lambda^2}{2\pi} (f_1^0 + i f_2^0) \quad (13)$$

geschrieben werden kann, während $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ die Vakuumwellenlänge ist. Diese Gleichung stellt die wichtige Verbindung zwischen Streutheorie und Propagation von Wellen dar, auf die sich die Simulation des Experiments stützt. Für die Brechzahl wird in diesen Spektralbereichen auch oft die Notation $n(\omega) = 1 - \delta + i\beta$ verwendet, wobei, da im Röntgenbereich $\omega \gg \omega_s$, δ und β jeweils kleiner als 10^{-3} sind.

Die Abhängigkeit der Phasengeschwindigkeit von der Frequenz wird als Dispersion bezeichnet und wird mit δ bzw. dem Realteil von n beschrieben. Dass dieser Realteil von Material zu Material unterschiedlich ist, führt dazu, dass an den Grenzflächen zwischen unterschiedlichen Materialien überhaupt Licht reflektiert wird.

Die Absorption des Lichts im Medium wird durch den Imaginärteil der Brechzahl beschrieben, da er zu einem Imaginärteil des \mathbf{k} -Vektors führt, welcher zu einer exponentiellen Dämpfung der Welle führt. Die Eindringtiefe $l_{\text{abs}} = \frac{1}{\rho\mu}$ hängt dabei direkt mit β zusammen und es gilt

$$\rho\mu \stackrel{[1]}{=} 2n_a r_e \lambda f_2^0(\omega) = 2\beta \frac{2\pi}{\lambda} = 2\beta k.$$

Da viele Materialien kurzwellige Strahlung absorbieren, ist es nötig, sich ein Transmissionsfenster zu suchen um Informationen aus der Tiefe zu erhalten. Die im Folgenden vorgeschlagenen Experimente zielen besonders auf das Siliziumfenster zwischen 30 und 100 eV und das Wasserfenster zwischen 290 und 530 eV ab.

3.3 Abbildende Optik und Spektroskopie im XUV

Im Bereich kurzer Wellenlängen von XUV bis SXR ist das Verhältnis $\frac{\beta}{\delta}$ nach [1] in der Größenordnung von eins. Das hat zur Folge, dass es aufgrund von Absorption nicht sinnvoll möglich ist, durch Refraktion abbildende Optiken aufzubauen. Es bleibt die Verwendung reflektiver Optiken. Einfache Spiegel haben sehr niedrige Reflektivitäten, da der Brechzahlprung zum Vakuum sehr klein ist. Bei Einfallswinkeln im Bereich des kritischen Winkels der Totalreflexion wird die Reflektivität wieder größer. Diese Winkel betragen typischerweise nur wenige Grad. Gekrümmte Spiegel zur Abbildung neigen durch den flachen Einfallswinkel und die nicht idealen Oberflächen zu Abbildungsfehlern. Ebenfalls führt dies entweder zu kleinen Aperturen oder man muss einen hohen Verlust an Intensität in Kauf nehmen. Höhere Reflektivitäten auch bei steilerem Lichteinfall werden von Vielschichtsystemen erreicht, welche später auch betrachtet werden. Ein ganz andere Ansatz, auf den hier nur verwiesen werden soll ist die Verwendung diffraktiver Optiken wie zum Beispiel FRESNELScher Zonenplatten wie in einem Röntgenmikroskop.

Weil δ für kurze Wellenlängen sehr viel kleiner als 1 ist, kann man auf Basis von Materialdispersion kein Spektrometer aufbauen. Es kann hier ausschließlich auf Gitterstrukturen zurückgegriffen werden. Zur Verwendung in diesem Experiment wird ein Reflexionsgitter vorgeschlagen, dass in Reflexion ein Spektrum erzeugen kann. Es ist gekrümmt, so dass man keine zusätzliche abbildende Optik benötigt. Somit kann die Anzahl optischer Elemente gering gehalten werden.

3.4 Experimenteller Aufbau

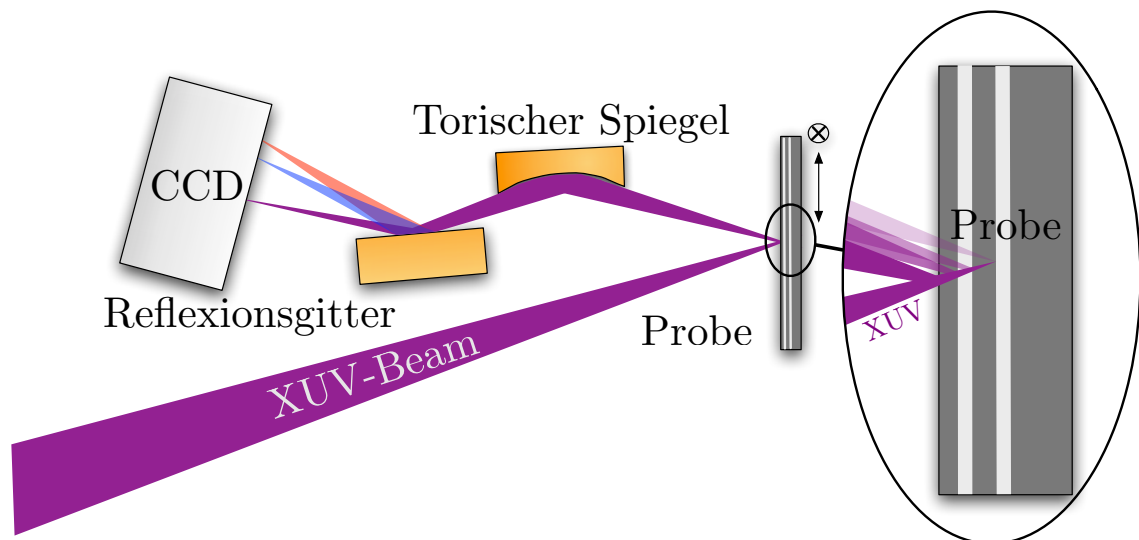


Abbildung 3: Experimenteller Aufbau der XUV-OCT: Kohärenztomographie bei kurzen Wellenlängen (schematische Darstellung)

Um nun optische Kohärenztomographie bei kurzen Wellenlängen, kurz XUV-OCT oder XCT, zu betreiben, ist es günstig, den Aufbau eines Strahlengangs mit Strahlteiler zu umgehen, da im XUV-Bereich keine breitbandigen Strahlteiler verfügbar

sind. Tatsächlich funktioniert auch der immer vorhandene an der Oberfläche der Probe reflektierte Strahl als Referenzstrahl, da er nach Gleichung (5) einen Autokorrelationsterm erzeugt. Es reicht also aus, sich die spektrale Reflektivität der Probe anzuschauen und eine Fouriertransformation durchzuführen. Die Lichtquelle kann entweder breitbandig sein (spectral domain OCT, SDOCT) oder muss einen gewissen Wellenlängenbereich abfahren können (swept source OCT, SSOCT). Dies ist möglich, da es sich bei einem Vielschichtsystem um ein lineares System handelt, bei dem sich Komponenten zu verschiedenen Frequenzen nicht mischen.

4 Simulation

Dieses Experiment soll vorab durch eine Simulation untersucht werden. Für ein grundlegendes Experiment kann zunächst ein eindimensionales Untersuchungsobjekt verwendet werden. Dies entspricht einem Vielschichtsystem, welches mit Sputter- und Bedampfungstechnologien hergestellt werden kann. Seine Reflektivität kann mit den im Folgenden beschriebenen Methoden berechnet werden.

4.1 Reflektivität von 1D-Strukturen

Die Reflektivität eindimensionaler Strukturen, also Stapeln von homogenen Schichten, lässt sich berechnen, indem man den Zusammenhang der Lichtfelder vor und hinter dem Schichtsystem berechnet und dann die verallgemeinerten FRESNELSchen Formeln anwendet.

4.1.1 Matrixformalismus

Für die Feldamplituden in einer homogenen Schicht f je nach Polarisationsrichtung [5]

$$\begin{array}{ll}
 \text{TE-Polarisation} & \text{TM-Polarisation} \\
 0 = \left(\frac{d^2}{dx^2} + k_{fx}^2 \right) E_{\perp}(x) & 0 = \left(\frac{d^2}{dx^2} + k_{fx}^2 \right) H_{\perp}(x) \\
 H_z(x) = -\frac{i}{\omega\mu_0} \frac{\partial}{\partial x} E_{\perp}(x) & E_z(x) = \frac{i}{\omega\varepsilon_0\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} H_{\perp}(x),
 \end{array}$$

wobei die Ausbreitung der Welle parallel zur x - z -Ebene stattfindet und die Schichten parallel zur y - z -Ebene liegen. Bei TE-Polarisation ist das elektrische Feld rein transversal zur Einfallsebene, das Magnetfeld liegt in der Einfallsebene (wobei es natürlich nach wie vor Transversal zur Ausbreitungsrichtung ist). Dieser Fall wird international auch als s-Polarisation bezeichnet. Für die transversal-magnetische TM-Polarisation gilt das Umgekehrte (Magnetfeld transversal zur Einfallsebene) und sie wird p-Polarisation genannt. Unpolarisierte Wellen können als Überlagerung beider Polarisierungen beschrieben werden und werden u-polarisiert genannt. Die Ausbreitung in z -Richtung ist durch den Ansatz $E(x, z) = E(x) e^{ik_z z}$ bzw. $H(x, z) = H(x) e^{ik_z z}$ berücksichtigt, woraus folgt, dass $k_{fx}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_f(\omega) - k_z^2$ ist. Außerdem wird

$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$ verwendet. Es lassen sich nach [5] die beiden Polarisationsrichtungen simultan behandeln, indem man die Benennungen

$$\begin{aligned} E_{\perp}, H_{\perp} &\rightarrow F \\ i\omega\mu_0 H_z, -i\omega\varepsilon_0 E_z &\rightarrow G \end{aligned}$$

eingührt. Es zeigt sich, dass sich mit $\alpha_f^{\text{TM}} = \frac{1}{n_f^2}$ und $\alpha_f^{\text{TE}} = 1$ unabhängig von der Polarisationsrichtung

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{d^2}{dx^2} + k_{fx}^2 \right) F(x) \\ G &= \alpha_f \frac{\partial}{\partial x} F(x) \end{aligned}$$

ergibt.

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

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

Man kann also einer Schicht f mit der Dicke d_f die Matrix $\mathbf{m}_f = \mathbf{m}_f(d_f)$ zuordnen, die die Felder F und G durch die Schicht propagiert, mit der man also die Felder am Ende der Schicht berechnen kann, wenn die Felder am Anfang der Schicht bekannt sind. Die Propagation durch einen Stapel von n Schichten f , und damit bei $D = \sum_{f=1}^n d_f$ kann dann einfach durch Hintereinanderausführung dieser Propagationen beschrieben werden

$$\begin{pmatrix} F(D) \\ G(D) \end{pmatrix} = \underbrace{\prod_{f=1}^n \mathbf{m}_f}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix} = \mathbf{m}_n \cdots \mathbf{m}_1 \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

4.1.2 FRESNELSche Formeln

Das oberhalb der Schichtstruktur liegende Medium wird „cladding“ genannt und habe den Brechungsindex $n_c(\omega)$. Fällt aus dem cladding eine Welle mit der Photonenenergie $E = \hbar\omega$ unter einem Winkel φ zur Oberfläche ein, folgen die für die Berechnung der Komponenten des Wellenvektors wichtigen Formeln

$$\begin{aligned} k_0 &= \frac{E}{\hbar c} \\ k_z &= k_0 n_c \cos(\varphi) \\ k_{fx} &= \sqrt{(k_0 n_f)^2 - k_z^2}. \end{aligned}$$

Dabei ist darauf hinzuweisen, dass hier durchweg komplexe Brechzahlen verwendet werden und somit neben der Dispersion auch Absorption berücksichtigt wird. Es

gelten also 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

$$\mathbf{k}_I = \begin{pmatrix} k_{cx} \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} \quad \mathbf{k}_R = \begin{pmatrix} -k_{cx} \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} \quad \mathbf{k}_T = \begin{pmatrix} k_{sx} \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} .$$

Für die Amplituden des einfallenden Lichts gilt

$$\begin{aligned} F_c(x) &= (F_I e^{ik_{cx}x} + F_R e^{-ik_{cx}x}) && \Rightarrow F_0 = F_I + F_R \\ G_c(x) &= i\alpha_c k_{cx} (F_I e^{ik_{cx}x} - F_R e^{-ik_{cx}x}) && \Rightarrow G_0 = i\alpha_c k_{cx} (F_I - F_R) \end{aligned}$$

und für das transmittierte Licht

$$\begin{aligned} F_s(x) &= F_T e^{ik_{sx}x} && \Rightarrow F(D) = F_T \\ G_s(x) &= i\alpha_s k_{sx} F_T e^{ik_{sx}x} && \Rightarrow G(D) = i\alpha_s k_{sx} F_T . \end{aligned}$$

Gleichzeitig hängen die Felder aber über die Propagation durch das Schichtsystem miteinander zusammen, was sich zeigt, wenn man diese Amplituden in Gleichung (14) einsetzt

$$\begin{pmatrix} F_T \\ i\alpha_s k_{sx} F_T \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} F_I + F_R \\ i\alpha_c k_{cx} (F_I - F_R) \end{pmatrix} .$$

Hieraus ergeben sich die verallgemeinerten FRESNELSchen Formeln

$$\begin{aligned} F_R &= \frac{(\alpha_c k_{cx} M_{22} - \alpha_s k_{sx} M_{11}) - i(M_{21} + \alpha_s \alpha_c k_{sx} k_{cx} M_{12})}{(\alpha_c k_{cx} M_{22} + \alpha_s k_{sx} M_{11}) + i(M_{21} - \alpha_s \alpha_c k_{sx} k_{cx} M_{12})} F_I \\ F_T &= \frac{2\alpha_c k_{cx} (M_{11} M_{22} - M_{12} M_{21})}{(\alpha_c k_{cx} M_{22} + \alpha_s k_{sx} M_{11}) + i(M_{21} - \alpha_s \alpha_c k_{sx} k_{cx} M_{12})} F_I , \end{aligned} \quad (15)$$

welche noch auf die beiden Polarisationsrichtungen TE und TM spezialisiert werden müssen. Für TE ist dies einfach, da $F^{\text{TE}} = E_{\perp}^{\text{TE}}$ und $\alpha^{\text{TE}} = 1$, es ergibt sich aus (15) für den komplexen Reflexionskoeffizienten $r^{\text{TE}} = \frac{F_R^{\text{TE}}}{F_I^{\text{TE}}}$

$$r^{\text{TE}} = \frac{(k_{cx} M_{22}^{\text{TE}} - k_{sx} M_{11}^{\text{TE}}) - i(M_{21}^{\text{TE}} + k_{sx} k_{cx} M_{12}^{\text{TE}})}{(k_{cx} M_{22}^{\text{TE}} + k_{sx} M_{11}^{\text{TE}}) + i(M_{21}^{\text{TE}} - k_{sx} k_{cx} M_{12}^{\text{TE}})} .$$

Im Fall der TM-Polarisation muss beachtet werden, dass $\frac{F_{R,T}^{\text{TM}}}{F_I^{\text{TM}}} = \frac{H_{\perp R,T}^{\text{TM}}}{H_{\perp I}^{\text{TM}}}$, obwohl das Verhältnis der elektrischen Felder gesucht ist. Zunächst muss also das Verhältnis zwischen E und H bestimmt werden. Nach [5] gilt

$$E_{\perp}^{\text{TM}} = -\frac{1}{\omega c n} H_{\perp}^{\text{TM}}$$

und damit

$$\begin{aligned} r^{\text{TM}} &= \frac{E_{\perp R}^{\text{TM}}}{E_{\perp I}^{\text{TM}}} = \frac{n_c H_{\perp R}^{\text{TM}}}{n_c H_{\perp I}^{\text{TM}}} \\ &= \frac{(n_s^2 k_{cx} M_{22}^{\text{TM}} - n_c^2 k_{sx} M_{11}^{\text{TM}}) - i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} + k_{sx} k_{cx} M_{12}^{\text{TM}})}{(n_s^2 k_{cx} M_{22}^{\text{TM}} + n_c^2 k_{sx} M_{11}^{\text{TM}}) + i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} - k_{sx} k_{cx} M_{12}^{\text{TM}})} . \end{aligned}$$

4.1.3 Optische Eigenschaften von Materialien im XUV und SXR

Zur Berechnung der Propagation durch die einzelnen Schichten der Struktur ist es wie oben gesehen nötig, die Brechzahlen der verschiedenen Materialien bei den verwendeten Energien zu kennen. Hierbei stützt sich die Berechnung auf Daten von B. L. Henke und E. M. Gullikson (siehe [2]). Dort sind die Atomstrukturfaktoren aller Elemente des Periodensystems vermessen worden. Aus diesen kann mit Formel (13) aus Kapitel 3.2.1 der Brechungsindex für alle denkbaren Verbindungen berechnet werden, indem die Atomstrukturfaktoren der auftretenden Atome entsprechend der Anzahl ihres Auftretens aufsummiert werden, wie in [2] gezeigt. Diese Berechnungen werden durch ein von der Arbeitsgruppe „X-ray Optics & Microscopy“ der STONY BROOK UNIVERSITY in IDL geschriebenes Programm (siehe [6]) durchgeführt.

Diese Brechzahlen fließen dann in die Schichtmatrizen ein, wodurch sich dann mit Hilfe der verallgemeinerten FRESNELSchen Formeln für ein beliebiges Schichtsystem über einen beliebigen Wellenlängenbereich innerhalb der von den Henke-Tabellen angebotenen 30-30000 eV das komplexe Reflexionsverhalten berechnen lässt.

4.2 Simulationssoftware

Die Ergebnisse dieser Arbeit basieren auf einer eigens in der Programmiersprache Python entwickelten Simulationssoftware. Es lassen sich periodische oder nichtperiodische Schichtsysteme aus beliebigen Verbindungen benutzerfreundlich eingeben und zusammen mit allen weiteren Parametern abspeichern. Die Anwendung berechnet dann mit Hilfe der Matrixmethode die komplexe Reflektivität des Schichtsystems zu einem gegebenen Einfallswinkel, wobei die Brechzahlen aus den Daten von Henke und Gullikson berechnet werden.

Um die Bandbreite des Spektrometers zu berücksichtigen, kann das berechnete Reflexionsspektrum mit einer Gaußkurve einer gegebenen Breite gefaltet werden. Dies simuliert ein Spektrometer, bei dem ein monochromatisches Signal ein gemessenes Spektrum mit einer bestimmten Halbwertsbreite erzeugt.

Um nun das Tiefenprofil der Reflexion zu rekonstruieren wird das Reflexionsspektrum dann mit einer Fensterfunktion, wenn nicht anders angegeben, mit dem Kaiserfenster multipliziert. Dann wird im Sinne der tomographischen Rekonstruktion eine inverse Fouriertransformation durchgeführt. Bei schrägem Lichteinfall zeigt nur eine Komponente des \mathbf{k} -Vektors in die Tiefe. Die Länge dieser Komponente beträgt $\sin(\varphi)k$. Da die Tiefe z bei der Transformation reziprok mit den Ortsfrequenzen k zusammenhängt muss die Tiefenskala mit einem Faktor $\frac{1}{\sin(\varphi)}$ versehen werden. Die berechneten Spektren werden sofort graphisch dargestellt und können auch in Form von Zahlenwerten abgespeichert werden. Die Struktur des Schichtsystems lässt sich in der graphischen Darstellung gleich wiedererkennen, da an jeder Grenzschicht Licht reflektiert wird, was zu einem Peak im transformierten Reflexionsspektrum führt.

5 Ergebnisse

Es sind im Wesentlichen zwei Transmissionsbereiche vielversprechend: das Siliziumfenster und das Wasserfenster. In beiden wurden hier beispielhaft verschiedene Proben simuliert. Das Wasserfenster hat insbesondere für biologische Proben eine große Bedeutung. Ebenfalls soll die erreichbare Auflösung betrachtet werden. Theoretisch ergibt sich bereits aus der Kohärenzlänge eine Grenze für die maximal erreichbare axiale Auflösung, im Siliziumfenster von ca. 10 nm, im Wasserfenster von ca. 2,5 nm. Diese wird durch das verwenden einer Fensterfunktion noch etwas verschlechtert, gleichzeitig wird aber der Kontrast stark erhöht, was an verschiedenen Beispielen diskutiert wird.

5.1 Simulationen im Siliziumfenster

Silizium hat für Licht mit Photonenenergien im Bereich von 30 bis 100 eV eine Absorptionslänge, nach der die Intensität von Licht auf $\frac{1}{e}$ abgefallen ist, von 200 nm bei 30 eV bis 500 nm bei 100 eV. In 100 nm Tiefe vergrabene Strukturen sollten also durch das hier vorgestellte Verfahren leicht sichtbar gemacht werden.

5.1.1 Molybdän-Silizium-Schichtsysteme

Es wurde nun eine in eben dieser Tiefe vergrabene Schicht Molybdän simuliert, um ihre Reflexionseigenschaften zu betrachten. Diese Materialien wurden gewählt, da es dafür Beschichtungstechnologien gibt.

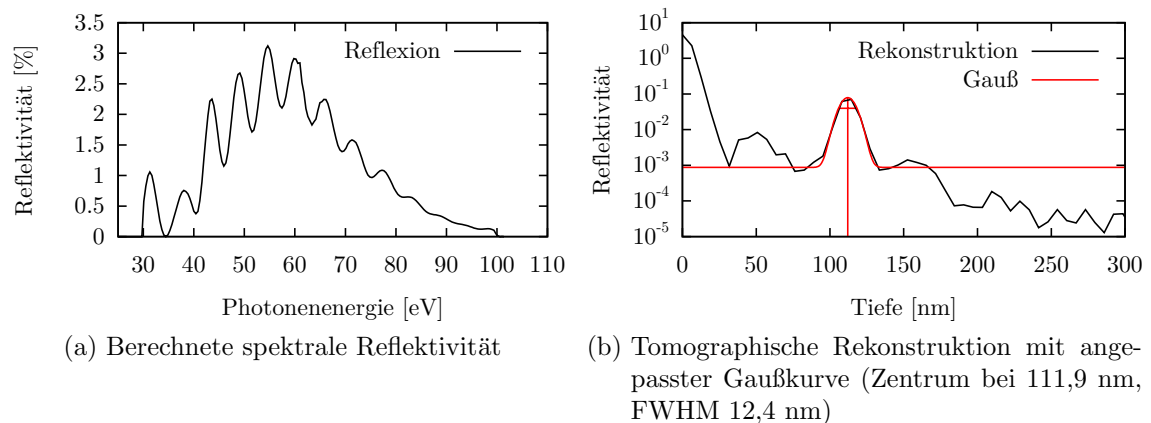


Abbildung 4: Eine dünne Schicht (5 nm) Molybdän vergraben unter 100 nm Silizium

Wie man sieht, ist das Reflexionsspektrum (Abbildung 4a) moduliert. Diese Modulationen enthalten Informationen über die Tiefe, in der Licht reflektiert wurde, denn der Phasenunterschied hängt bei gegebener Weglängendifferenz zwischen in der Tiefe und an der Oberfläche reflektierten Wellen nur vom Wellenzahlvektor und damit von der Photonenenergie ab. Es handelt sich also ganz einfach um die Interferenzerscheinung zwischen diesen beiden Anteilen der Lichtwelle. Dabei interferieren die monochromatischen Anteile unterschiedlicher Frequenzen unabhängig voneinander miteinander. Die kurze Kohärenzlänge von 10 nm des gesamten Lichtfelds spielt

also für diese Interferenz keine Rolle. Es macht also keinen Unterschied, ob man das gesamte Spektrum breitbandig misst oder das Spektrum mit einer monochromatischen Welle durchfährt.

Die tomographische Rekonstruktion (Abbildung 4b) zeigt, passend zur Modulationsfrequenz, in etwa 100 nm Tiefe die Reflexion an der vergrabenen Schicht. Es wurde eine Glockenkurve der Form $r(z) = r_0 + h e^{-4 \ln(2) \left(\frac{z-z_0}{w}\right)^2}$ zur Anpassung verwendet. Die Halbwertsbreite w der Glockenkurve entspricht in etwa der Kohärenzlänge, ist aber durch das Fenster leicht vergrößert.

Leider erscheint die Grenzfläche nicht genau in 100 nm Tiefe, sondern etwas tiefer. Der schräge Lichteinfall ist bereits korrigiert und kann zur Erklärung nicht mehr herangezogen werden. Auch, dass es sich bei den 112 nm um die optische Weglänge handelt genügt nicht als Erklärung, da der Realteil der Brechzahl viel zu nah an eins ist.

Molybdän hat im Gegensatz zu Silizium allerdings eine viel kürzere Absorptionslänge in dem hier verwendeten Wellenlängenbereich. Das bedeutet, dass keine Strukturen erkennbar sein sollten, die sich hinter einer dickeren Schicht Molybdän befinden, beispielsweise die untere Grenzfläche der Schicht selbst.

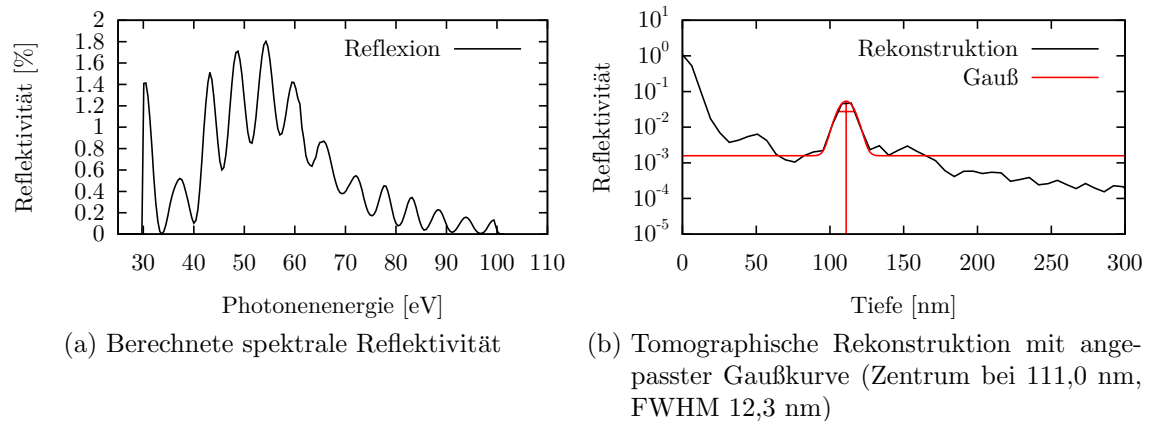


Abbildung 5: Eine 100 nm dicke Schicht Molybdän vergraben unter 100 nm Silizium

Diese Simulation einer solchen Schicht zeigt deutlich, dass in Abbildung 5b die Unterseite keinen sichtbaren Reflex mehr erzeugt, da hier bereits kein Licht mehr ankommt.

Verwendet man hingegen nur jeweils dünne Schichten aus Molybdän, kann man auch einen Schichtstapel betrachten, beispielsweise 7 dünne (5 nm) Schichten Molybdän, die jeweils von 100 nm Silizium voneinander getrennt werden.

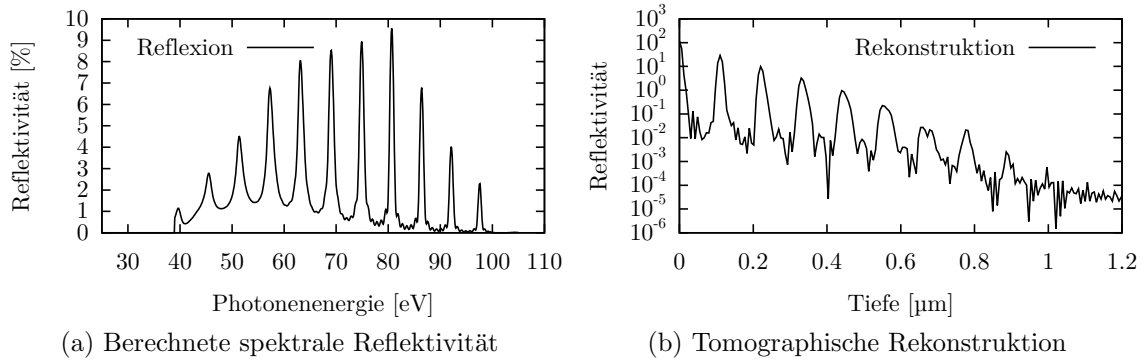
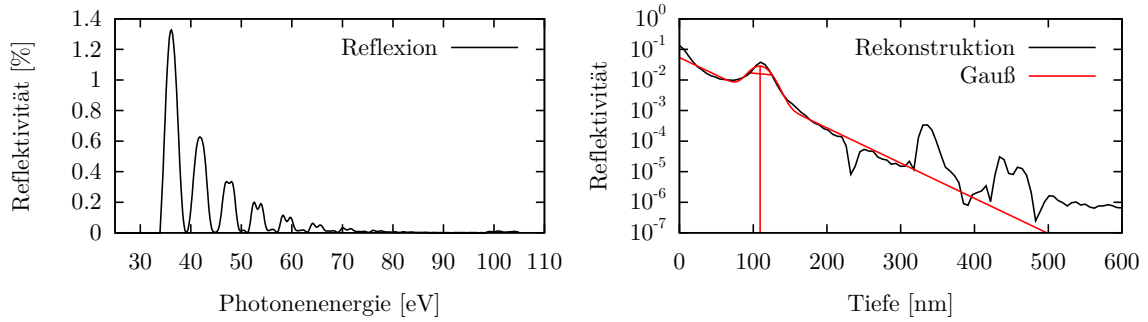


Abbildung 6: Ein Stapel von 7 je 5 nm dicken Schichten Molybdän vergraben unter und getrennt durch je 100 nm Silizium

Man kann die 7 Schichten deutlich im rekonstruierten Tiefenspektrum erkennen. Auffällig ist allerdings, dass es scheinbar noch weitere Schichten im gleichen Abstand gibt. Dies ist ein Effekt, der sich aus der periodischen Struktur ergibt: Die Modulation der Reflektivität nähert sich immer mehr einem Dirac-Kamm (Abbildung 6a), welcher in der Transformation wieder ein Dirac-Kamm ist. Ein endlicher Dirac-Kamm, wie er einen endlichen Schichtstapel beschreibt, wird in der Transformation durch kleine Modulationen zwischen den Spitzen des transformierten Kamms gekennzeichnet, welche aber hier schon so klein sind, dass die Breite des Kamms und damit die Anzahl der Schichten in der Rekonstruktion 6b zu einer unscharfen Größe wird. Die scheinbar auftretenden tiefer liegenden Schichten können aber nicht durch Autokorrelationsterme der verschiedenen Schichten untereinander erklärt werden. Diese erscheinen bei scheinbaren Tiefen z , die den relativen Abständen $z_{S_n} - z_{S_m}$ zwischen den Schichten entsprechen. Die hier beobachteten zusätzlichen Schichten erscheinen jedoch in einer Tiefe z , die größer ist als alle auftretenden z_{S_n} .

5.1.2 Lanthan-Silizium

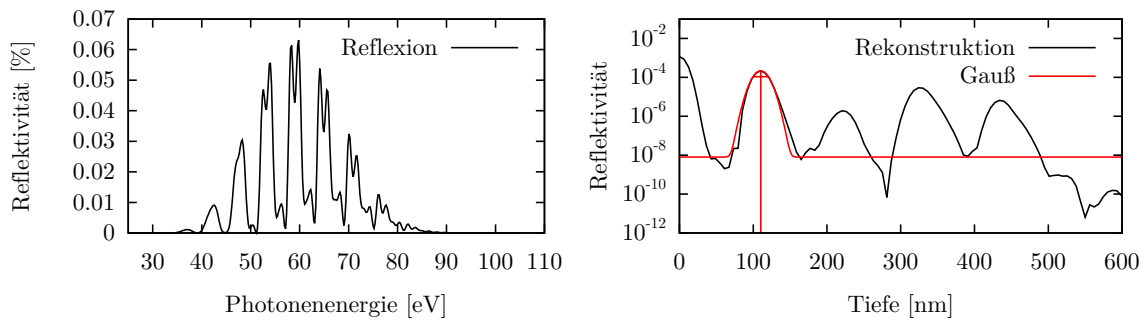
Lanthan hat im Siliziumfenster Absorptionslängen zwischen 10 und 50% derer von Silizium, ist also ausreichend transparent um auch mehrschichtige Systeme mit dickeren Schichten zu betrachten. An diesem Beispiel sieht man deutlich, dass man nicht auf die Verwendung von Fensterfunktionen verzichten kann.



(a) Berechnete spektrale Reflektivität ohne Multiplikation mit einer Fensterfunktion (b) Tomographische Rekonstruktion mit angepasster Gaußkurve (Zentrum bei 109,3 nm, FWHM 32,9 nm)

Abbildung 7: Zwei 100 nm dicke Schichten Lanthan vergraben und separiert durch 100 nm Silizium unter einem Rechteckfenster

Der erste Peak im Reflektivitätsspektrum 7a ist sehr groß im Vergleich zu den weiteren. Erst diese sind deutlich moduliert, worin die eigentliche Information enthalten ist. Die in den kleinen Modulationen enthaltene Information wird durch den starken ersten Peak in der tomographischen Rekonstruktion unterdrückt. Dies hat zur Folge, dass die zweite reflektive Grenzschicht in 200 nm Tiefe in der tomographischen Rekonstruktion in 7b nicht mehr als solche zu erkennen ist. Die Auflösung ist reduziert, wie an der Halbwertsbreite der angepassten Gaußkurve abzulesen ist. Bei der Anpassung wurde nun die Form $r(z) = r_0 e^{-kz} + h e^{-4 \ln(2) \left(\frac{z-z_0}{w}\right)^2}$ angenommen, um eine im logarithmischen Plot linear erscheinende Basislinie zu beschreiben. Verwendet man ein relativ schmal eingestelltes Kaiserfenster, lässt sich das Reflektivitätsprofil wie in Abbildung 8 wieder zurückgewinnen.



(a) Berechnete spektrale Reflektivität unter Kaiserfenster (b) Tomographische Rekonstruktion mit angepasster Gaußkurve (Zentrum bei 110,2 nm, FWHM 20,8 nm)

Abbildung 8: Zwei 100 nm dicke Schichten Lanthan vergraben und separiert durch 100 nm Silizium

Die Modulationen sind viel deutlicher zu sehen, wodurch die tomographische Rekonstruktion besser gelingt. Alle vier Grenzflächen sind gut zu erkennen und die Auflösung liegt nun wieder in der Nähe der zuvor beschriebenen Auflösungen.

5.2 Wasserfenster und Borcarbid

Weiterhin vielversprechend ist die Untersuchung des so genannten Wasserfensters zwischen 290 und 530 eV. In diesem Bereich ist die Absorption wässriger Proben nicht allzu hoch, so dass sich hier auch Anwendungen in den Biowissenschaften offenbaren. Der Kontrast zwischen Kohlenstoff und Sauerstoff ist hier ebenfalls sehr groß, so dass sich optische Kohärenztomographie bei kurzen Wellenlängen hier als bildgebendes Verfahren anbietet.

5.2.1 Borcarbid und Lanthan

Die Vorhersagen über die erreichbare Auflösung lassen sich an einer 1 nm dünne Schicht Lanthan vergraben unter 100 nm Borcarbid (B_4C) überprüfen.

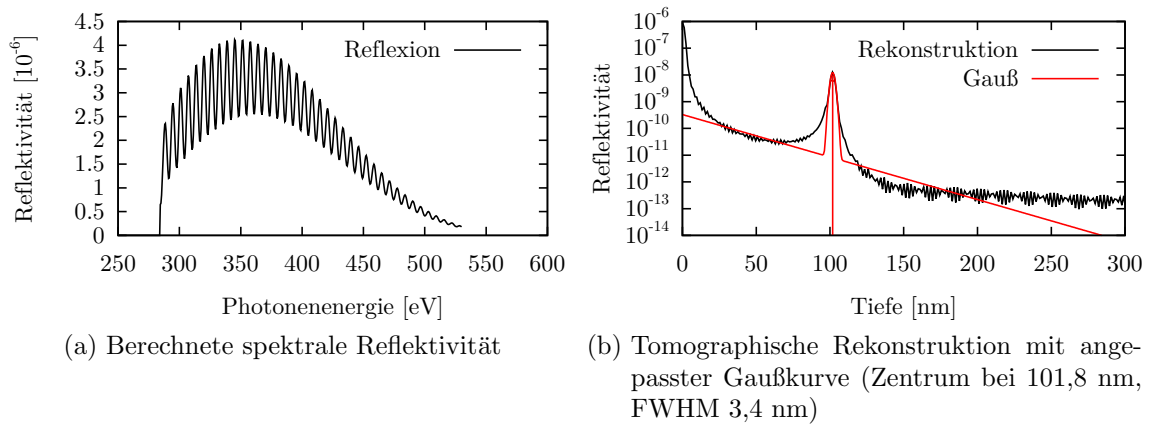


Abbildung 9: Eine 1 nm dünne Schichten Lanthan vergraben unter 100 nm B_4C

Es ist deutlich zu sehen, dass sich die Schicht gut sehen lässt. Die Auflösung liegt im erwarteten Rahmen. Der Eindruck, die Gaußkurve sei schlecht angepasst, ist auf die logarithmische Skalierung zurückzuführen.

Der Nutzen einer Fensterfunktion wird auch im Wasserfenster beispielhaft an einem Schichtstapel aus insgesamt 4 je 100 nm dicken Schichten von abwechselnd Lanthan und B_4C auf einem Siliziumsubstrat demonstriert (Abbildung 10).

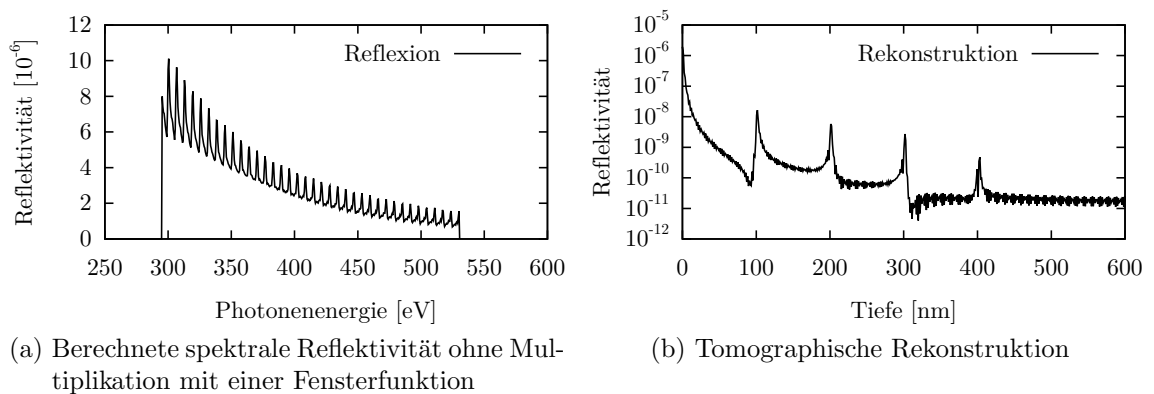


Abbildung 10: Schichtstapel aus Lanthan und B_4C unter einem Rechteckfenster

Die vier Grenzflächen sind in 10b deutlich zu erkennen, allerdings entstehen an den Kanten der Reflektivitätspeaks zum Teil Überschwinger nach unten, die sich aus dem unsanften Abschneiden des Spektrums ergeben.

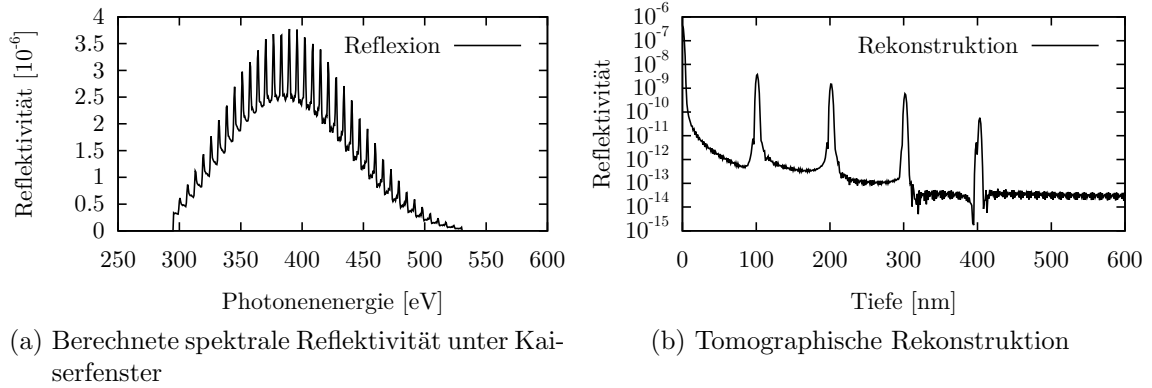


Abbildung 11: Schichtstapel aus Lanthan und B_4C

Wenn man eine Fensterfunktion verwendet, sind die Überschwinger in der Rekonstruktion (Abbildung 11b) etwas gedämpft und der Kontrast ist deutlich erhöht. Insbesondere ist nun auch die am tiefsten liegende Grenzfläche ähnlich gut zu erkennen wie die vorherigen. Die Auflösung ist allerdings etwas gesunken, wie sich an angepassten Gaußkurven (Abbildung 12) erkennen lässt.

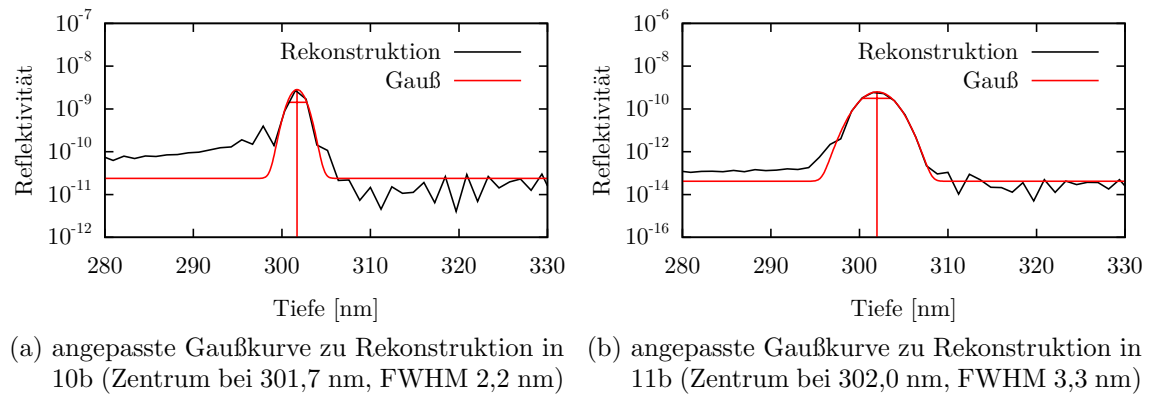


Abbildung 12: Vergleich der Auflösungen ohne und mit Fensterfunktion

5.2.2 Borcarbid und Quarz

Betrachtet man eine dünne Schicht Quarz, die unter 100 nm B_4C vergraben ist, zeigt sich in der Modulation, wie in Abbildung 13a zu sehen, eine Schwebung, die durch die knapp unterschiedlichen Modulationsfrequenzen der beiden Grenzflächen des Quarzes hervorgerufen wird. Diese lösen sich in der Rekonstruktion (13b) auch deutlich zu einer Doppellinie auf.

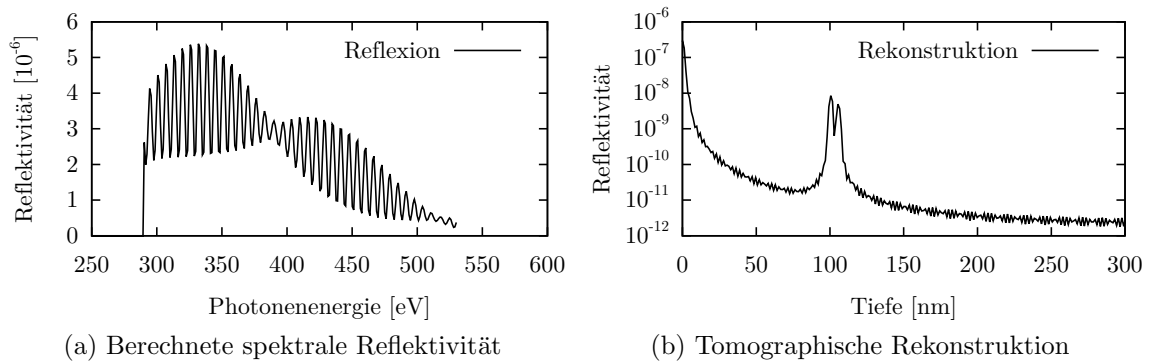


Abbildung 13: Dünne Schicht (5 nm) Quarz unter 100 nm B_4C

Auch hier bestätigt sich die Annahme über die erreichbare Auflösung. Die Trennung der Doppellinie ist in einer nichtlogarithmischen Darstellung (Abbildung 14b) noch besser zu sehen.

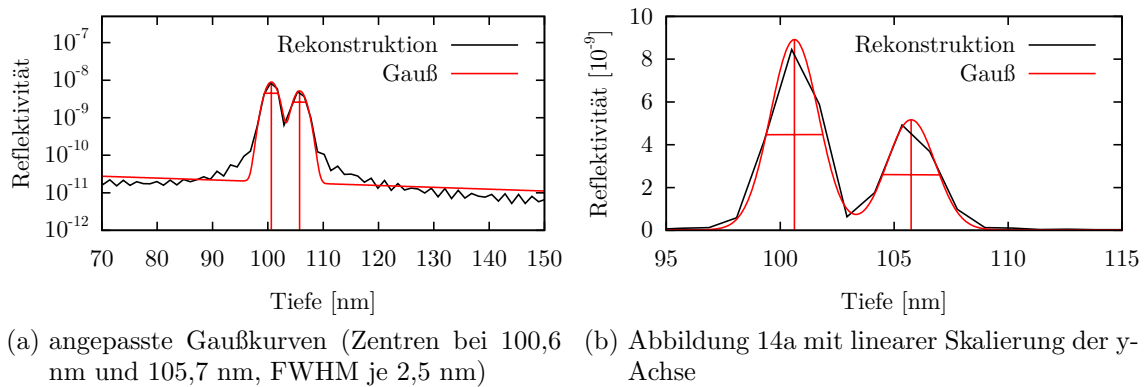


Abbildung 14: Anpassung von zwei Gaußkurven an die Doppellinie der dünnen Quarzschicht

An einem Beispiel eines Vielschichtsystems aus je 10 nm dicken Schichten von Borcarbid und Quarz soll noch die Bedeutung der Spektrometerauflösung untersucht werden. Zunächst betrachtet man das berechnete Spektrum und geht von einer scharfen Messung des Spektrums aus.

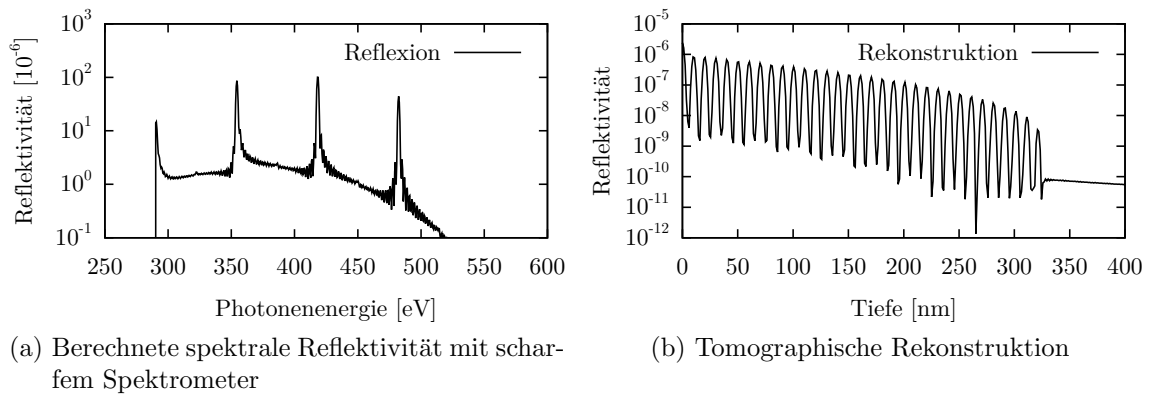


Abbildung 15: Vielschichtsystem von 16 Paaren je 10 nm dicker Schichten Borcarbid und Quarz

Das hier logarithmisch in Abbildung 15a dargestellte Reflexionsspektrum enthält sehr feine Strukturen, welche zu den Schichten in großer Tiefe gehören. Die tomographische Rekonstruktion (Abbildung 15b) gelingt bei diesem Beispiel sehr gut, weshalb es sich eignet um den Einfluss eines unscharfen Spektrometers zu demonstrieren.

Nimmt man an, dass ein mit dem Spektrometer gemessenes Spektrum einer monochromatischen Welle eine Halbwertsbreite von 5 eV besitzt, kann man das soeben berechnete Spektrum aus Abbildung 15a mit einer GAUSSschen Glockenkurve ebener dieser Breite falten, um danach erneut eine tomographische Rekonstruktion durchzuführen.

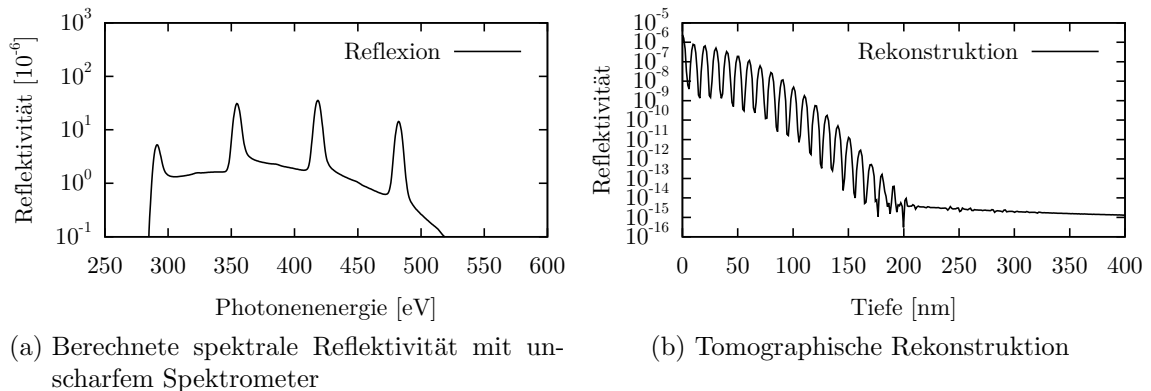


Abbildung 16: Vielschichtsystem von 16 Paaren je 10 nm dicker Schichten Borcarbid und Quarz, Spektrometer-Halbwertsbreite 5 eV

Wie man sieht, entspricht die Faltung mit einem Gauß für die Rekonstruktion der Multiplikation mit einem Gauß. Die feinen Strukturen sind in 16a verschwunden. Eine Spektrometerunschärfe von 5 eV führt, wie in Abbildung 16b gezeigt, zu einer maximalen Tiefe von 200 nm bis zu der Strukturen aufgelöst werden können. Spektrometerunschärfe und Maximaltiefe sind für ein gegebenes Wellenlängenfenster zueinander reziprok.

5.3 Grenzen der XUV-Kohärenztomographie

Da kurzwelliges Licht von allen Materialien relativ stark absorbiert wird, wird die Kohärenztomographie mit kurzen Wellenlängen immer oberflächennah arbeiten. Erreichbare Auflösungen sind durch die Breiten der zur Betrachtung der Proben zur Verfügung stehenden Transmissionsfenster begrenzt. Es werden breitbandige oder durchstimmbare Röntgenquellen benötigt, was aufwändige Technik erfordert.

6 Ausblick der XCT

Als nächster Schritt ist die Durchführung des hier beschriebenen Experiments geplant. Es werden Proben hergestellt, die den hier simulierten Schichtsystemen entsprechen, an denen dann Kohärenztomographie bei kurzen Wellenlängen durchgeführt werden soll. Dabei soll Synchrotronstrahlung zum Beispiel von Beamlines am Berliner Synchrotron BESSY oder am Hamburger DORIS, einem Speicherring des DESY, verwendet werden. Entsprechende Proposals wurden eingereicht. Dort kann monochromatische Strahlung in den für dieses Experiment benötigten Wellenlängenbereich erzeugt und durchgeföhren werden. Man könnte also prinzipiell die Reflektivität mit einem einfachen Detektor ohne ein Spektrometer messen. Trotzdem hat die Verwendung eines Gitterspektrometers den Vorteil, dass man keine Rücksicht auf eventuelle höhere Ordnungen in der vom Monochromator des Synchrotrons gelieferte Strahlung nehmen muss. Das Spektrometer ordnet sie automatisch der richtigen Wellenlänge zu. Lediglich die höheren Ordnungen des Spektrometers selbst müssen noch berücksichtigt werden. Hinter dem Spektrometer findet sich ein CCD aus dem sich nach dem Durchfahren des Spektrums sofort das Spektrum auslesen lässt. Diese Anordnung wurde bereits am Synchrotron ELETTRA in Italien kalibriert und ist für dieses Experiment gut geeignet. Wenn sich zeigt, dass diese Technologie funktioniert, könnte die XCT eine tomographische Methode mit weitreichenden Anwendungsfeldern in der Materialforschung und Biologie sein.

Literatur

- [1] Attwood, D. T.: *Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation*. Cambridge University Press, 2007.
- [2] Henke, B. L., E. M. Gullikson und J. C. Davis: *X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission and reflection at $E=50-30000$ eV, $Z=1-92$* . Atomic Data and Nuclear Data Tables, 54(2):181–342, Juli 1993.
- [3] Izatt, J. A. und M. A. Choma: *Theory of Optical Coherence Tomography*. In: Drexler, W. und J. G. Fujimoto (Hrsg.): *Optical Coherence Tomography*, Kap. 2, S. 47–72. Springer, 2008.
- [4] Kaiser, J. F. und R. W. Schafer: *On the Use of the $I_0 - \sinh$ Window for Spectrum Analysis*. IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing, 28(1):105–107, Feb. 1980.
- [5] Lederer, F.: *Grundkonzepte der Optik*, 2008. Vorlesungsskript.
- [6] Stony Brook University, X-ray Optics & Microscopy: *IDL routines for dealing with the Henke-Gullikson data*, 2003. <http://xray1.physics.sunysb.edu/data/documentation/henke.pdf>.