

Experimentelle Realisierung der Beziehung $I \sim \sin^2 x/x^2$ auf röntgenographischem Wege

W. Fischer and P. Wissmann

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg

Z. Naturforsch. **34 a**, 1369–1370 (1979); eingegangen

Experimental Verification of $I \sim \sin^2 x/x^2$ by X-Ray Diffraction Measurements

It is shown that the equation $I \sim \sin^2 x/x^2$ well-known from light optics can be proved experimentally even by x-ray diffraction measurements on thin films. All side maxima appear with the right order of magnitude if an optimal film thickness of about 90 Å is chosen.

Bekanntlich läßt sich bei der Röntgen-Beugung an Kristallen die Intensität der gebeugten Strahlung nach dem Gesetz [1]

$$I \sim \sin^2 x/x^2 \quad (1)$$

berechnen, wobei x eine der Abweichung vom Braggschen Winkel proportionale Größe darstellt. Die Beziehung (1) spielt auch in der Lichtoptik, z.B. bei der Beugung am Spalt, eine große Rolle. Üblicherweise werden bei der Röntgenbeugung die durch (1) gegebenen Nebenmaxima nicht beobachtet, man wertet lediglich den Hauptpeak aus. Aus der Breite des Hauptpeaks erhält man Informationen über die mittlere Kristallitgröße [1–3].

Eine Abschätzung zeigt aber, daß auch die in (1) enthaltenen Nebenmaxima einer experimentellen Überprüfung zugänglich sein sollten, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Die Beugung muß an dünnen Schichten (Dicke kleiner als 200 Å) durchgeführt werden, um den störenden Einfluß der instrumentellen Verbreiterung der Röntgenstrahlen zu eliminieren [2].
- Die dünne Schicht muß eine nahezu ideale Planparallelität aufweisen, da Nebenmaxima, die von verschiedenen dicken Kristallbereichen herühren, miteinander interferieren.
- Die röntgenographische Meßanordnung muß eine extrem hohe Empfindlichkeit aufweisen, um an derart dünnen Schichten noch Neben-

maxima ausreichender Intensität zu erhalten. Außerdem sollten zur Steigerung der Intensität nur Filme mit einer ausgeprägten Vorzugsorientierung Verwendung finden.

In der Vergangenheit haben verschiedene Autoren versucht, die Nebenmaxima bei Röntgenbeugungsexperimenten experimentell nachzuweisen. Unserer Kenntnis nach wurden jedoch bestenfalls kleinere Spitzen oder Inhomogenitäten in den Reflexflanken erhalten [4, 5]. Offensichtlich ist die Herstellung extrem dünner Schichten mit glatten Begrenzungsflächen besonders schwierig.

Wir haben nun eine Methode entwickelt, durch Aufdampfen von Gold auf geeignet vorbehandelte Si(111)-Träger (111)-orientierte, äußerst plan-

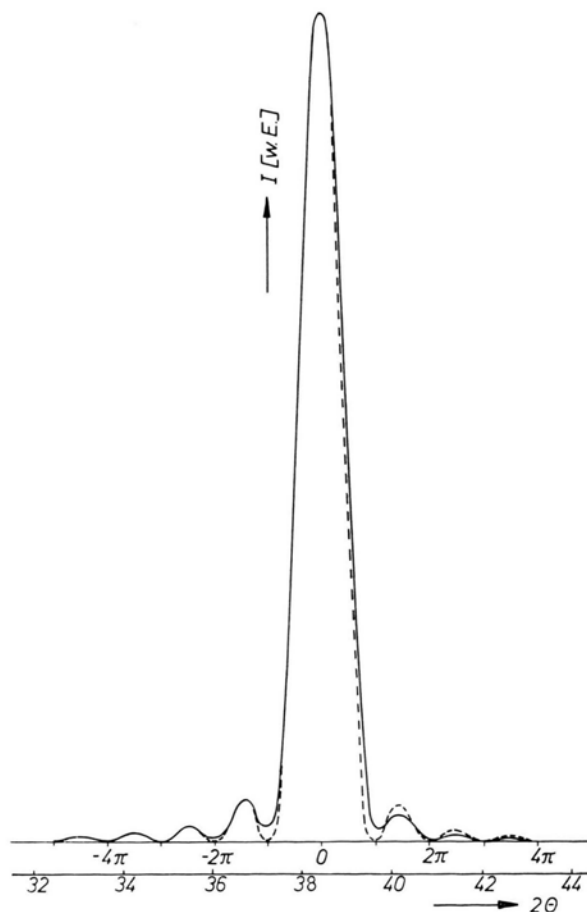


Abb. 1. Winkelabhängigkeit der gebeugten Intensität für $d = 90$ Å. — Meßkurve, ---- berechnet nach Gleichung (1).

Reprint requests to Prof. Dr. P. Wissmann, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Erlangen, Egerlandstr. 3, D-8520 Erlangen.

parallele Goldfilme herzustellen. Einzelheiten der Filmpräparation finden sich an anderer Stelle [6]. Die für die Röntgenbeugung verwendete Goniometeranordnung war zur Erhöhung der Empfindlichkeit mit einem doppelt fokussierenden Monochromator, einem Impulshöhendiscriminator und einem Schrittschaltwerk ausgerüstet [6]. Mit dieser Anordnung konnte die geforderte hohe Empfindlichkeit erreicht werden.

Abbildung 1 zeigt die für einen 90 Å dicken Goldfilm gemessene Winkelabhängigkeit der Intensität (durchgezogene Kurve). Zusätzlich enthält die Abbildung gestrichelt den nach (1) berechneten Zusammenhang, wobei lediglich Maximalamplitude und Periode in geeigneter Weise angepaßt wurden. Es ist deutlich zu sehen, wie hervorragend sich auch auf röntgenographischem Wege Gl. (1) bestätigen läßt, wenn man die experimentellen Bedingungen entsprechend wählt.

Geringförmige Abweichungen zwischen beiden Kurven, besonders deutlich im Bereich des ersten

Nebenmaximums, lassen sich auf den Einfluß der instrumentellen Verbreiterung und auf die Winkelabhängigkeit des von den Röntgenstrahlen ausgeleuchteten Volumens im Fall der Filme zurückführen. Bei Berücksichtigung dieser Fehlerquellen sollte es sogar möglich sein, aus den in Abb. 1 gezeigten Kurven quantitativ auf das Ausmaß der Planparallelität des Films rückzuschließen.

Die Schichtdicke von 90 Å stellt in gewisser Weise einen optimalen Wert dar. Für dünnere Schichten reicht die Empfindlichkeit der Meßanordnung nicht mehr aus, um die Nebenmaxima höherer Ordnung neben dem Untergrund nachzuweisen. Für dickere Filme ist der störende Einfluß der instrumentellen Verbreiterung bereits so stark ausgeprägt, daß man ähnlich wie in den zitierten Arbeiten [4, 5] nur mehr Inhomogenitäten in den Reflexflanken beobachtet.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie danken wir für die Förderung dieser Arbeit durch Sachmittel.

- [1] H. Neff, Grundlagen und Anwendungen der Röntgenfeinstrukturanalyse, R. Oldenbourg, München 1962, S. 301.
- [2] E. R. Wölfel, Theorie und Praxis der Röntgenstrukturanalyse, Vieweg-Verlag, Braunschweig 1975, S. 73.
- [3] W. Fischer u. P. Wißmann, Z. Naturforsch. **31a**, 183 (1976).

- [4] P. Croce, G. Devant, M. Gandais, und A. Marrud, Acta Cryst. **15**, 424 (1962).
- [5] R. W. Vook: in J. W. Matthews (ed.), Epitaxial Growth, Part A, Academic Press, New York 1975, p. 348.
- [6] W. Fischer, H. Geiger, P. Rudolf, and P. Wißmann, Appl. Phys. **13**, 245 (1977).