

Numerische Modellierungen von Röntgenwellenleitern unter Berücksichtigung von Realstruktureffekten



Diplomarbeit

vorgelegt von

Markus Osterhoff

aus

Warstein

angefertigt am

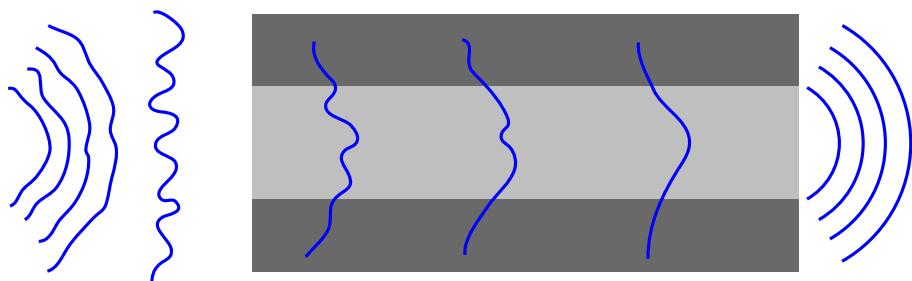
Institut für Röntgenphysik

der Georg-August-Universität zu Göttingen

Oktober 2008

Markus Osterhoff: Diplomarbeit

Numerische Modellierungen von Röntgenwellenleitern unter Berücksichtigung von Realstruktureffekten



$$\psi'' + (k_0^2 n^2 - \beta^2) \psi = 0 \quad I(q) = \left| \mathcal{F}[\psi(x)] \right|^2 \propto q^{-6}$$

Göttingen, im Oktober 2008

In Gedenken an meine Mutter

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Röntgenstrahlung	3
2.1 Erzeugung, Propagation, Detektion	3
2.2 Wechselwirkung mit Elektronen	8
2.3 Wechselwirkung mit Atomen	9
2.4 Quantenfeldtheoretische Beschreibung	11
3 Wellenleiter	13
3.1 Eindimensionale Wellenleiter	13
3.2 Lösungsmethoden	15
3.3 Analytische Berechnung des Fernfeldes	24
4 Realstruktureffekte	29
4.1 Motivation	29
4.2 Modell: Fehlerfunktion	30
5 Analysen	33
5.1 Fernfeld	33
5.2 Halbwertsbreite der Intensität	41
5.3 Verluste im Wellenleiter-Mantel	42
5.4 Propagation und Realstruktureffekte	47
6 Zusammenfassung und Ausblick	51
A Numerov-Verfahren	53
B Eigene Programme	55

Kapitel 1

Einleitung

Röntgen-Wellenleiter werden in der Röntgenstrukturanalyse als virtuelle Strahlquellen verwendet, um Quellgröße und Kohärenz der Röntgenquellen zu optimieren. Prinzipiell lassen sich Strahlgrößen im Bereich von zehn Nanometern erzeugen, die hohe Kohärenz kann zum Beispiel für Holographie (Gabor, 1948) von Proben im Nanometer- und unteren Mikrometerbereich genutzt werden [1] [2].

Bislang wurde die Propagation der Röntgenstrahlung durch Wellenleiter mit der parabolischen Wellengleichung simuliert [3]. Das im Experiment gefundene Fernfeld weicht jedoch vom theoretisch berechneten ab; das zugrundeliegende Modell ist anscheinend zu idealisiert und nicht vollständig [4].

In dieser Arbeit wird eine Möglichkeit gesucht, Realstruktureffekte im Wellenleiter zu modellieren und deren Auswirkungen aufzuzeigen. Dabei beschränken wir uns auf eindimensionale, in der idealen Näherung also planare, Wellenleiter.

Zum Aufbau dieser Arbeit: Zunächst (Kapitel 2) fassen wir die notwendige Theorie der Elektrodynamik, speziell der Propagation von Wellen, zusammen; in Kapitel 3 wenden wir die Gleichungen dann auf Wellenleiter an und geben eine – in einem Spezialfall mögliche – analytische sowie eine numerische Methode zur Lösung an, bevor wir eine analytische Lösung des Fernfeldes idealer Wellenleiter herleiten.

Das analytisch berechenbare Fernfeld $I(q)$ idealer monomodaler Wellenleiter mit einer Leitschicht-Breite b ist von der Form

$$I(q) \propto \frac{\left(k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) - q \sin\left(\frac{bq}{2}\right) \right)^2}{\left(k^2 + q^2 \right)^2 \left(\kappa^2 - q^2 \right)^2} \propto q^{-6};$$

die Größe q bezeichnet hier den Vektor des Impulsübertrages, k und κ sind Konstanten.

Das Kapitel 4 motiviert, warum und welche Realstruktureffekte bei der weiteren Analyse zu berücksichtigen sind; unsere Simulationen und deren Ergebnisse beschreiben wir in Kapitel 5. Kapitel 6 bietet eine Zusammenfassung und einen Ausblick auf weitere mögliche Arbeiten an diesem Thema.

Kapitel 2

Röntgenstrahlung

In diesem Kapitel wollen wir uns zunächst die theoretischen Grundlagen von Röntgenstrahlung und allgemein elektromagnetischer Strahlung ansehen. Ausgangspunkt sind die Maxwell-Gleichungen für das elektrische (\vec{E}) und magnetische (\vec{B}) Feld:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{j}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \quad (2.4)$$

Alternativ können wir auch ein Vektorpotenzial \vec{A} und ein skalares Potenzial Φ einführen, die über folgende Beziehungen (bis auf eine Eichtransformation) mit den physikalischen Feldern \vec{E} und \vec{B} zusammenhängen [5]:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad (2.5)$$

$$\vec{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (2.6)$$

Elektromagnetische Wellen sind nun Lösungen dieser Gleichungen. Eine spezielle Lösung im Vakuum sind die ebenen Wellen:

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}, \quad (2.7)$$

$$\vec{B}(t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}; \quad (2.8)$$

dabei gilt $\vec{k} \cdot \vec{E} = \vec{k} \cdot \vec{B} = \vec{E} \cdot \vec{B} = 0$, diese drei Vektoren stehen also paarweise senkrecht aufeinander [6].

2.1 Erzeugung, Propagation, Detektion

Erzeugung Röntgenstrahlung wird auf zwei Arten erzeugt: Durch beschleunigte Ladungsträger oder durch Emissionslinien bei hochenergetischen Übergängen in den inneren Atomschalen. Historisch als erstes wurde die Röntgenröhre eingesetzt, bei der die Elektronen auf eine Energie von einigen Kiloelektronenvolt beschleunigt werden und auf eine

Anode treffen, wo sie ihre kinetische Energie in Form von Wärme und Licht abgeben. Dabei entsteht ein kontinuierliches Bremspektrum mit zusätzlichen diskreten Linien, das charakteristische Spektrum. Letzteres wird durch das Moseleysche Gesetz erklärt und ist elementspezifisch [7].

Die Röntgenröhre ist klein und relativ lichtschwach; sie strahlt in einen großen Raumwinkel und die Ausbeute an Röntgenstrahlung ist sehr gering. Moderne Röntgenröhren erreichen eine Brillanz von einigen 10^8 Photonen pro ($\text{Sekunde} \cdot \text{mrad}^2 \cdot \text{mm}^2$) bei 0.1 Prozent Bandbreite [8].

An einem Synchrotron lassen sich erheblich höhere Brillanzen erreichen; die emittierte Röntgenstrahlung ist zudem kohärent. Dort werden Elektronen bei hohen Energien (heute bis zu acht Gigaelektronenvolt) beschleunigt und durch Magnete auf Kreisbahnen gelenkt; bei dieser beschleunigten Bewegung emittieren sie in einem kontinuierlichen breiten Frequenzband Licht. Aktuelle Synchtronen der dritten Generation erreichen Spitzen-Brillanzen pro Puls von weit über 10^{20} (siehe Abbildung 2.1). Durch die ultrarelativistische Geschwindigkeit der Elektronen hat der Lichtkegel einen sehr kleinen Öffnungswinkel.

In den Anfangsjahren wurde die bei den Beschleunigern der Hochenergiephysik als unerwünschter Energieverlust ausgesandte Synchrotronstrahlung für Röntgenexperimente verwendet; später wurden dann dedizierte Röntgen-Synchrotrons gebaut.

Seit einigen Jahren wird die Synchrotronstrahlung durch *insertion devices* weiter verbessert: Wiggler und Undulatoren erreichen Brillanzen in der Größenordnung von 10^{24} . Undulatoren bestehen aus abwechselnd polarisierten Magnetfeldern, welche die Elektronen auf eine Sinusbahn zwingen. Das emittierte Licht ist sehr kohärent und intensiv.

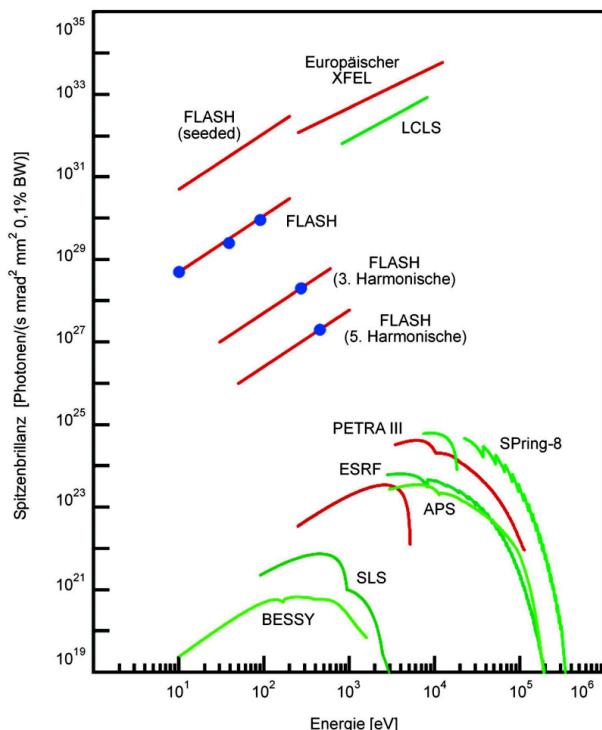


Abbildung 2.1: Die Spitzen-Brillanz heutiger Synchrotrons liegt in der Größenordnung 10^{24} Photonen pro ($\text{Sekunde} \cdot \text{mrad}^2 \cdot \text{mm}^2$); der freie Elektronenlaser XFEL soll Werte von über 10^{33} erreichen. Zum Vergleich: Röntgenröhren haben eine Brillanz von etwa 10^8 . Diese Werte gelten für einzelne Bunches; über eine Sekunde gemittelt ergeben sich geringere Werte. Quelle: [8]; DESY, Hamburg.

Das nächste Kapitel der Röntgenerzeugung gehört den Linearbeschleunigern: Derzeit wird mit dem Flash am DESY in Hamburg der Weg für den XFEL¹ vorbereitet; dieser soll bei seiner kürzesten Wellenlänge von 1 Ångström^2 eine Brillanz von $5.4 \cdot 10^{33}$ erreichen.

Eine Übersicht über die Brillanz aktueller und geplanter Synchrotron-Quellen zeigt die Abbildung 2.1 [8] [9].

Propagation Die Ausbreitung von Licht kann auf drei verschiedenen Ebenen der physikalischen Erkenntnis betrachtet werden. Alltagsphänomene beschreiben wir gut mit der geometrischen Optik und Lichtstrahlen: Diese breiten sich geradlinig aus und werden an Grenzflächen (etwa Linsen oder Wasseroberflächen) gebrochen. Für viele Probleme liefert die Strahlenoptik eine gute Näherung. Insbesondere bei kleinen Objekten sagt die Strahlenoptik aber falsche Ergebnisse voraus: Phänomene wie Beugung (oder allgemein Interferenz) können erst mit der Wellenoptik beschrieben werden. Diese baut auf den oben genannten Maxwellschen Gleichungen auf. Sie ist Gegenstand dieser Arbeit. Doch auch diese Beschreibung ist noch nicht vollständig: Die Theorie der Schwarzkörper-Strahlung (Max Planck, 1899) und Albert Einsteins Arbeit über den Photoelektrischen Effekt (1905) bereiteten den Weg für die Quantenoptik. Das Licht besteht aus einzelnen Teilchen, welche sich aber auch wie eine Welle verhalten [10].

Wie bereits erwähnt konzentrieren wir uns in dieser Arbeit auf die Wellenbeschreibung nach den Maxwell-Gleichungen. Auf Wellenebene wird die Propagation qualitativ durch das Huygenssche Prinzip beschrieben:

Jeder von einer Lichterregung getroffene Punkt kann als Quelle einer sekundären Kugelwelle angesehen werden [10].

Gustav Kirchhoff gelang 1882 eine quantitative Formulierung in Form seines Beugungsintegrals:

$$E(x', y', z) = \frac{1}{i\lambda} \int dx dy E(x, y, z = 0) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \frac{\sin \theta_1 + \sin \theta_2}{2} \quad (2.9)$$

Zur Benennung der Winkel und Vektoren siehe Abbildung 2.2. In Gleichung (2.9) wird über die streuende Apertur integriert und von jeder Huygensschen Sekundärquelle aus die Amplitude E/r mit einem Phasenfaktor $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ aufsummiert. Der Faktor $\frac{\sin \theta_1 + \sin \theta_2}{2}$ basiert auf physikalischen Annahmen, welche jedoch mathematisch gesehen fragwürdig sind [11] [12].

¹ *X-Ray Free Electron Laser*, deutsch: freier Elektronen-Röntgenlaser

² in SI-Einheiten: $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm}$

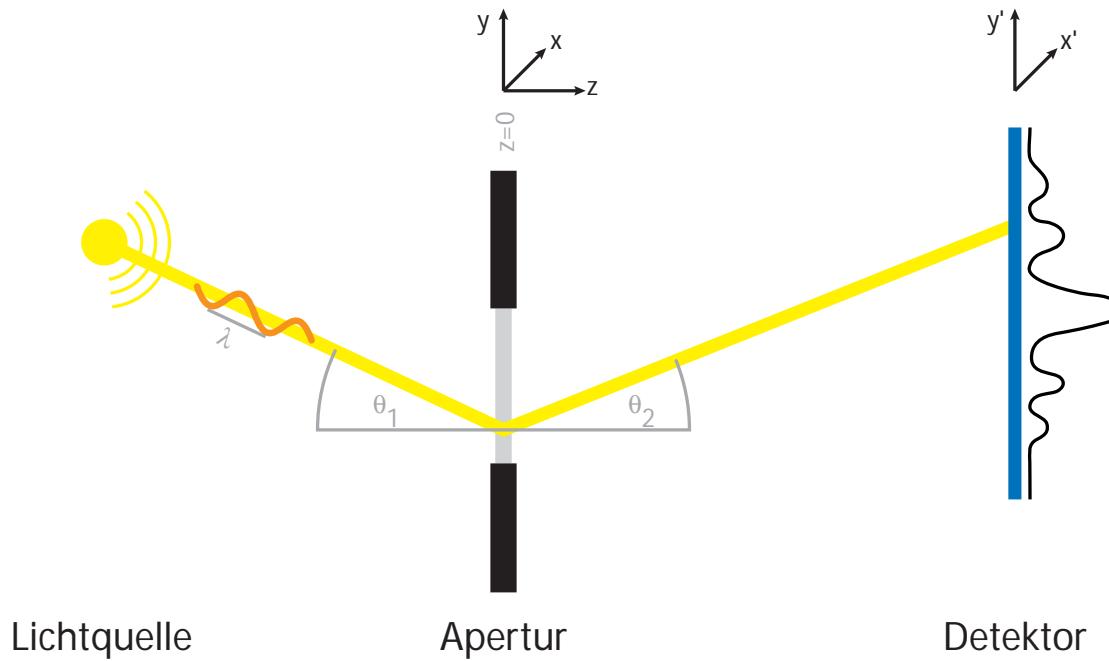


Abbildung 2.2: Zur Erläuterung der Größen in Formel (2.9).

Von besonderem Interesse ist häufig das Fernfeld, also der Grenzfall $z \rightarrow \infty$. Dann geht Kirchhoffs zweidimensionales Integral nach Fraunhofer über in eine zweidimensionale Fourier-Transformation:

$$E\left(\frac{u}{\lambda z}, \frac{v}{\lambda z}, z\right) = \frac{C}{\lambda z} \int dx dy E(x, y, z=0) e^{2\pi i \frac{ux+vy}{\lambda z}} \quad (2.10)$$

Im Fernfeld stehen die Größen $\frac{u}{\lambda z}$ und $\frac{v}{\lambda z}$ für die Winkel, unter denen beobachtet wird.

Bei dieser Näherung ist es erforderlich, alle höheren Ordnungen im Phasenfaktor zu vernachlässigen; es muss also

$$z \gg \frac{\pi}{\lambda} (x^2 + y^2) \quad (2.11)$$

sein. Die Wellenfronten sind im Fernfeld nicht mehr gekrümmt. Die Größen $\frac{u,v}{\lambda z}$ heißen auch Raum-Frequenzen und sind proportional zu den Beugungswinkeln (hier am Beispiel von y, v und θ_2):

$$\frac{v}{\lambda z} = \frac{\tan \theta_2}{\lambda} \approx \frac{\theta_2}{\lambda} \quad [10][13]. \quad (2.12)$$

Der rechnerische Vorteil des Fernfeldes: Die Fourier-Transformation kann durch eine geschickte Anordnung der Summationen sehr schnell mittels *fast fourier transformation*

(FFT, deutsch: Schnelle Fourier-Transformation) in einer Komplexität [14] von $\mathcal{O}(n \log n)$ (eindimensional) berechnet werden.

Während das Kirchhoff-Integral in zwei Dimensionen eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^4)$ aufweist, lässt sich das Fernfeld in Fraunhofer-Näherung in einer Zeit $\mathcal{O}(n^2 \log n)$ berechnen [15].

Um aus dem elektrischen Feld im Wellenleiter (oder an dessen Ende) auf das beobachtbare Fernfeld zu schließen, werden wir in Kapitel 5 die Schnelle Fourier-Transformation einsetzen.

Detektion Zum Nachweis von Röntgenstrahlung kommen verschiedene Methoden zum Einsatz. Historisch als erstes wurden Photoplatten eingesetzt; in der heutigen Wissenschaft kommen meist Szintillations- und Halbleiterdetektoren (CCD, englisch: *charged coupled devices*, deutsch etwa: ladungsgekoppelte Bauteile) zum Einsatz.

Szintillationszähler können hohe Zählraten von vielen hunderttausend Photonen pro Sekunde verarbeiten; allerdings sind sie nulldimensional. Messpunkte entlang einer Linie lassen sich abrastern, zweidimensionale Aufnahmen sind (in akzeptabler Zeit) praktisch nicht möglich.

Dieses geht aber mit zweidimensionalen Detektoren, typischerweise CCD-Kameras: Die Pixel haben eine typische Größe von etwa 20 Mikrometern Kantenlänge, moderne Röntgen-CCDs haben einige Millionen Pixel. Der Nachteil von CCDs: Sie können bis zur Sättigung nur begrenzt viele Photonen nachweisen, der dynamische Bereich ist meist auf etwa 16 Bit (also etwa vier bis maximal fünf Größenordnungen) beschränkt.

Phasenproblem Es ist entscheidend, dass die Detektoren keine Felder, sondern nur Intensitäten messen können. Aufgrund der sehr hohen Frequenz der Röntgenstrahlung von $f \approx 10^{18} \text{ Hz}$ ist die Phaseninformation nicht detektierbar; messbar ist nicht mehr $E(t)$, sondern nur noch $\langle I(t) \rangle = \langle E(t)E^*(t) \rangle$.

In der Phase ist die Tiefeninformation des abzubildenden Objektes gespeichert, diese geht bei der Photographie verloren. Dadurch ist es im Allgemeinen nicht möglich, aus dem gemessenen Betragsquadrat des Fernfeldes auf das Nahfeld zu schließen. Dennis Gabor entdeckte 1948 die Möglichkeit der Holographie³ (Nobelpreis 1971): Wird die gestreute Welle mit der ungestreuten Referenzwelle überlagert, lässt sich die Phasendifferenz der beiden Wellen als Hologramm aufzeichnen. Bestrahlt man die Aufnahme dieses Interferenzmusters mit der Referenzwelle, wird die ursprüngliche gestreute Welle rekonstruiert und es entsteht der Eindruck eines dreidimensionalen Bildes [2] [13].

³Holographie, von griechisch ὅλος = ganz, voll, völlig; γράφειν = schrappen, ritzen, malen, schreiben.

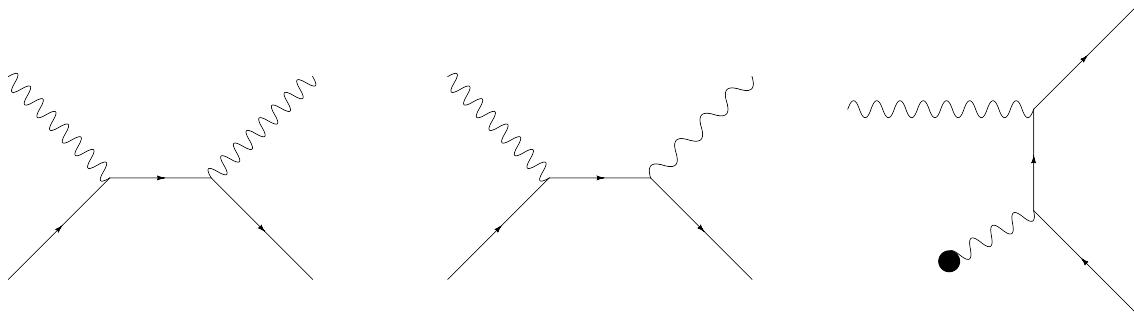


Abbildung 2.3: Drei Wechselwirkungen zwischen Photon und Elektron als Feynman-Graphen, von links: Thomson-Streuung, Compton-Streuung, Paarerzeugung. Der schwarze Kreis ist ein äußeres Feld (etwa ein Atomkern) und dient der Impulserhaltung.

Dazu ist eine kohärente Lichtquelle erforderlich, die eine definierte Phasenfront aussendet, wie sie Wellenleiter liefern.

2.2 Wechselwirkung mit Elektronen

Nach der Propagation elektromagnetischer Wellen im Vakuum betrachten wir nun die Wechselwirkung mit Materie. Dabei werden wir uns zunächst drei Arten von Streuung ansehen: Thomson- und Compton-Streuung sowie Paarerzeugung; diese sind in Abbildung 2.3 als Feynman-Graphen dargestellt.

Thomson-Streuung Die Thomson-Streuung ist ein elastischer Streuprozess, die Energie des Röntgen-Photons ändert sich dabei nicht. Das Verhältnis der an einem Elektron gestreuten Intensität I_{scat} zur einfallenden Intensität I_0 entspricht bis auf einen geometrischen Faktor dem differentiellen Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$; dieser ist nur vom Streuwinkel θ abhängig. Für unpolarisierte Quellen gilt weiter:

$$\frac{I_{\text{scat}}}{I_0} \cdot \frac{A_0}{\Delta\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \quad (2.13)$$

$$= \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) [8]. \quad (2.14)$$

Die Größe r_0 ist der Thompson-Streufaktor (häufig auch als klassischer Elektronenradius bezeichnet) und hat den Zahlenwert $r_0 = 2.818 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ [16].

Compton-Streuung Bei der Compton-Streuung wird Energie vom Photon auf das Elektron übertragen; die Energie des gestreuten Photons nimmt also ab, seine Wellenlänge zu.

Für Elektronen in Ruhe ergibt sich die Wellenlängen des gestreuten Photons zu

$$\lambda' = \lambda \left(1 + \lambda_C k (1 + \cos \theta) \right), \quad (2.15)$$

wobei $\lambda_C = 3.86 \cdot 10^{-13} \text{ m}$ die Compton-Wellenlänge des Elektrons ist [8] [16].

Die Compton-Streuung ist inkohärent, da sich durch die Änderung der Wellenlänge die Phasenbeziehung ändert. Sie ist im Bereich der Röntgenstrahlung nicht dominant, sondern wird erst im Gammaspektrum bei Energien größer als der Elektronen-Ruheenergie interessant.

Paarerzeugung Die Paarerzeugung dominiert erst ab Energien von über 10 MeV; unter einem Megaelektronenvolt ist sie nicht möglich: Bei der Paarerzeugung spaltet sich ein hochenergetisches Photon in ein Elektron-Positron-Paar auf; dazu ist mindestens die Ruheenergie der beiden Teilchen ($2 \times m_e = 1.022 \text{ MeV}/c^2$) erforderlich. Daher ist sie im Röntgenspektrum ebenfalls nicht von Bedeutung und wird hier nur der Vollständigkeit halber erwähnt.

2.3 Wechselwirkung mit Atomen

Röntgenstrahlen wechselwirken nicht mit dem Atomkern, sondern mit den Elektronen in der Atomhülle; diese sind mit typischen Energien von wenigen Elektronenvolt (optische Übergänge) bis zu einigen Kiloelektronenvolt an den Kern gebunden. Ist die Photonenergie von der gleichen Größenordnung wie die Bindungsenergie des wechselwirkenden Elektrons, kann der Vorgang gut mit dem Oszillator-Modell beschrieben werden [17].

Ist die Photonenergie aber deutlich höher, so sind die Elektronen als ungebunden zu betrachten. Materie erscheint für harte Röntgenstrahlung also als Ansammlung fast freier Elektronen und die Wechselwirkung wird durch eine Elektronendichtevertteilung $\rho(x)$ charakterisiert. Die Fouriertransformation der Elektronendichtevertteilung eines einzelnen Atoms wird auch Formfaktor genannt.

Betrachtet man Materie, also eine räumliche Mittelung über viele, isotrop und homogen verteilte Atome, kann man die Ausbreitung der Röntgenstrahlung durch den Brechungsindex n charakterisieren. Dieser ist aus der Optik sichtbaren Lichtes bekannt, wo meist $n \approx 1 \dots 2.5$ gilt. Für Röntgenstrahlung ist der Brechungsindex allerdings kleiner als 1; üblicherweise schreibt man

$$n = 1 - \delta - ib. \quad (2.16)$$

Im Spektrum harter Röntgenstrahlung hat δ meist die Größenordnung 10^{-6} (abhängig von Wellenlänge und Material), b ist häufig noch einmal zwei Größenordnungen geringer.

Mit dem oben erwähnten Oszillator-Modell kann erklärt werden, warum $n < 1$ gilt: Die Frequenz der Röntgenphotonen ist größer als die Frequenz des „Oszillators“: Die gebundenen Elektronen bilden im hochfrequenten elektromagnetischen Wechselfeld einen getriebenen gedämpften harmonischen Oszillator. Sie werden zu Oszillationen angeregt, wodurch sie wiederum elektromagnetische Strahlung emittieren; deren Phase aber läuft der ursprünglichen Phase des anregenden Feldes voraus.

Es gilt folgende Beziehung zwischen δ , der Wellenlänge λ und der Elektronendichte $\rho(x)$ im Material:

$$\delta(x) = \frac{\lambda^2}{2\pi} r_0 \rho(x) [8]. \quad (2.17)$$

Wegen $n < 1$ werden Röntgenstrahlen beim Übergang in ein optisch „dichteres“ Medium vom Lot weggebrochen; wegen $n \approx 1$ ist dieser Effekt jedoch sehr gering. Einzelne Röntgenlinsen haben eine typische Brennweite von rund hundert Metern und sind daher experimentell wenig hilfreich; seit einigen Jahren wird daher an *Compound Refractive Lenses* geforscht: Hunderte kleine Linsen werden hintereinander aufgereiht; in Simulationen mit über tausend optischen Elementen wurde so eine mögliche Brennweite von wenigen Mikrometern berechnet [18] [19].

Mit dem Brechungsindex können wir die Wellengleichung aufstellen. Sie lautet:

$$\left(\Delta - \frac{n^2}{c^2} \partial_t^2 \right) \vec{E} = 0. \quad (2.18)$$

Hier bezeichnet c die Vakuum-Lichtgeschwindigkeit, in SI-Einheiten ist $c = 299\,792\,458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Lösungen dieser Gleichung sind auch Lösungen der Maxwell-Gleichungen (2.4).

Als Lösungsansatz wählen wir $\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{n}\psi(\vec{x}) \cdot e^{i\omega t}$; dabei haben wir zwei Annahmen eingesetzt: Die Polarisation sei zeitlich und räumlich konstant, die Zeitabhängigkeit ein harmonischer Faktor. Dann hängt die Feldstärke $\psi(\vec{x})$ nur noch vom Ort ab.

Mit diesem Ansatz können wir aber zum Einen keine Drehungen der Polarisation berücksichtigen, wie sie etwa in Kristallen vorkommen; zum Anderen betrachten wir nur noch statische Probleme: Die Form der Welle hängt nicht von der Zeit ab. Insbesondere wird der Strahl nicht ein- oder ausgeschaltet, er existiert immer. Auch Veränderungen im Experiment (Verformungen des Wellenleiters oder ähnliches) werden dadurch vernachlässigt.

Jetzt können wir die Zeitableitung auf den zeitharmonischen Term $e^{i\omega t} = e^{ik_0 t/c}$ (die Größe $k_0 = |\vec{k}_0| = |k_0 \vec{e}_z|$ sei der Betrag des Wellenvektors) anwenden und erhalten die dreidimensionale, skalare Helmholtzgleichung:

$$(\Delta + k_0^2 n^2) \psi = 0 \quad [3][20]. \quad (2.19)$$

Diese Gleichung ist Ausgangspunkt des nächsten Kapitels und Grundlage dieser Arbeit.

2.4 Quantenfeldtheoretische Beschreibung

In diesem Abschnitt wollen wir sehr kurz skizzieren, wie elektromagnetische Felder in der Quantenfeldtheorie beschrieben werden. Dabei lassen sich aus zwei fundamentalen Prinzipien (Hamilton-Prinzip der kleinsten Wirkung und Eichsymmetrie) die Maxwell-Gleichungen ableiten.

Im Rahmen der QED (Quantenelektrodynamik) führt man eine Lagrangedichte \mathcal{L} ein. Diese hängt vom elektromagnetischen Feldstärketensor $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ mit dem Viererpotenzial $A_\mu = (\phi, \vec{A})$ und dem Spinor ψ ab; ψ stellt dabei das quantisierte Elektronenfeld dar. Die Größe $F^{\mu\nu}$ ist die kontravariante Version der Feldstärke. Der Differentialoperator $D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu$ ergibt sich aus der „minimalen Kopplung“ zwischen Photonen- und Materiefeld. Die γ^μ sind die Diracschen Gamma-Matrizen. Die Lagrangedichte lautet

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi. \quad (2.20)$$

Durch Einsetzen in die Euler-Lagrange-Gleichungen,

$$\partial_\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\nu A_\mu} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} = 0, \quad (2.21)$$

folgen die Maxwell-Gleichungen in Tensorschreibweise:

$$\partial_\nu F^{\mu\nu} = -e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi = -j^\mu; \quad (2.22)$$

$j_\mu = (\rho, \vec{j})$ bezeichnet dabei die Viererstromdichte. In die Herleitung dieser Formel fließen nur zwei Annahmen ein: das Prinzip der kleinsten Wirkung und die Eichinvarianz einer $U(1)$ -Symmetrie (man kann an jedem Raumzeitpunkt eine lokale Phase $e^{i\phi(x)}$ wählen, ohne die Physik zu ändern) [21].

Kapitel 3

Wellenleiter

3.1 Eindimensionale Wellenleiter

In der Röntgenoptik werden Wellenleiter eingesetzt, um monochromatische, kohärente Sekundär-Punktquellen zu erzeugen, mit denen dann unter anderem Holographie betrieben werden kann.

Das Prinzip der Wellenleiter besteht darin, dass elektromagnetische Feld in einer dünnen Leitschicht (englische Bezeichnung: *guiding layer*) mit einer typischen Dicke zwischen 10 und 100 nm, umgeben von einer Mantelschicht (englisch *cladding*) einzusperren; durch Interferenz in diesem Resonator kommt es zu einer Modenselektion und zu Feldüberhöhungen. Zur Illustration siehe Abbildung 3.1 [3] [20] [22].

3.1.1 Aufbau und Funktionsweise

Im Wesentlichen besteht ein eindimensionaler Wellenleiter für Röntgenstrahlung aus zwei Komponenten: Einer Leitschicht (absorptionsarmes Material wie Luft oder ein Polymer) und ein Mantel, welcher einen niedrigeren Realteil im Brechungsindex haben muss. Beispiele sind die „*high-Zs*“ wie Silizium und Germanium mit einem typischen $\delta \approx 10^{-6}$.

In der Abbildung 3.2 (a) ist eine Aufnahme mit dem Rasterelektronenmikroskop eines zweidimensionalen Röntgenwellenleiters zu sehen. Die Anordnung im Experiment zeigt Abbildung 3.2 (b) [3].

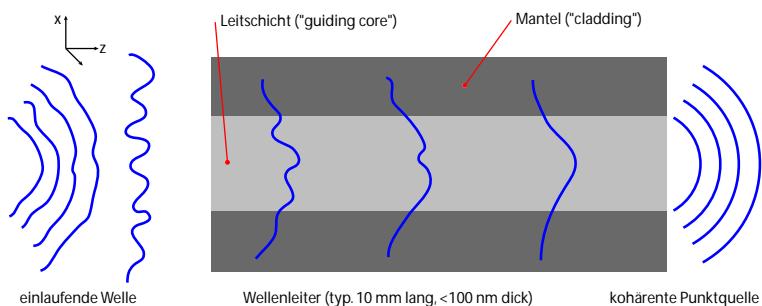


Abbildung 3.1: Ein Röntgenwellenleiter wirkt wie ein Filter, da nur wenige diskrete Wellenlängen erlaubt sind. Er dient als kohärente sekundäre Quasi-Punktquelle.

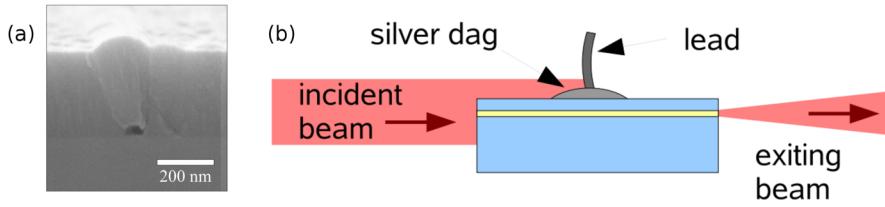


Abbildung 3.2: (a) Der Ausgang eines (zweidimensionalen) Röntgenwellenleiters, aufgenommen mit dem Rasterkraftmikroskop; (b) die Anordnung im Experiment. (Quelle: [3])

Die Wände des Wellenleiter-Mantels wirken wie ein Resonator: Im Strahlenbild wird das Röntgenlicht immer hin und her reflektiert. Wellenmechanisch betrachtet muss die Feldverteilung im Wellenleiter die Helmholtz-Gleichung erfüllen; die mathematische Beschreibung entspricht einem endlichen Potenzialtopf aus der Quantenmechanik [23].

Wie aus der Quantenmechanik bekannt, sind in einem solchen Potenzialtopf nur wenige diskrete Energieniveaus erlaubt [23]; im Falle von Wellenleitern führt dies zur Modenselektion: Aus dem einfallenden, oft „weißen“ breitbandigen Spektrum werden einzelne Wellenlängen herausgefiltert. Die Totalreflexion erklärt aber nicht alle Phänomene im Wellenleiter: Ein Teil der Welle dringt als evaneszente Welle in den Mantel ein; deren Intensität fällt senkrecht zur Grenzfläche exponentiell ab. Die evaneszente Welle propagiert im Mantel in der gleichen Richtung wie die Welle in der Leitschicht – doch ist hier (wegen $\delta \propto \beta$ fern der Kanten) die Absorption meist deutlich höher, sodass wir im Mantel Energie verlieren. Diese Verluste sollen möglichst gering bleiben; in Abschnitt 5.3 stellen wir eine Möglichkeit vor, einen Absorptionskoeffizienten auszurechnen.

Es gibt zwei Arten, elektromagnetische Felder in einem Wellenleiter anzuregen: Beim *front coupling* trifft der einfallende Röntgenstrahl auf die Stirnseite des Wellenleiters; hierbei geht ein Großteil der Energie durch die geometrische Akzeptanz verloren. Während der vorfokussierte Röntgenstrahl einen typischen Querschnitt von einigen Mikrometern aufweist, hat die Leitschicht eine Größe im Nanometerbereich. Die andere Möglichkeit ist das *resonant beam coupling*: Hier trifft das einfallende Röntgenlicht von der Seite auf den Wellenleiter; in diesem Bereich ist der Mantel dünn, sodass evaneszente Wellen in den Resonator einkoppeln. Aufgrund der Modenselektion ist dieser Vorgang nur für bestimmte Winkel möglich, die Winkelakzeptanz ist sehr gering [24].

3.1.2 Mathematische Beschreibung

Wir erinnern uns an die Helmholtz-Gleichung (2.19) und wollen sie auf den Fall eines eindimensionalen Wellenleiters beschränken (die Dimension in die Ausbreitungsrichtung z wird hierbei nicht mitgezählt). Zur Definition des Koordinatensystems siehe Abbildung

3.1. Im eindimensionalen Fall können wir einen lokalen Phasenfaktor $e^{i\beta z}$ abspalten; die zweifache Ortsableitung in z -Richtung ist also eine Multiplikation mit $-\beta^2$. Dieses β ist in der Literatur auch als Propagationsparameter bekannt [3] [24].

Übrig bleibt die eindimensionale Helmholtzgleichung

$$\psi(x)'' + (k_0^2 n(x)^2 - \beta^2) \psi(x) = 0. \quad (3.1)$$

Unter Vernachlässigung der Absorption¹ schreiben wir den Brechungsindex als $n = 1 - \delta$; im Bereich der Röntgenstrahlung gilt (fern der Absorptionskanten)

$$\delta = (\lambda^2 / 2\pi) r_0 \rho(x). \quad (3.2)$$

Die Größe ρ steht dabei für die Elektronendichte. Da $k_0^2 \propto \lambda^{-2}$, erhalten wir die wellenlängenunabhängige Form

$$\psi'' - 4\pi r_0 \rho \psi = (\beta^2 - k_0^2) \psi, \quad (3.3)$$

bei der wir den Term $\propto \delta^2$ vernachlässigt haben. Diese Gleichung ist unabhängig von der Wellenlänge λ beziehungsweise von der Wellenzahl k_0 , da nur die Differenz $M := \beta^2 - k_0^2$ eingeht; M wird auch als Mode bezeichnet.

Die Gleichung (3.3) ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung und gleichzeitig auch ein Eigenwertproblem in M .

Mathematisch gesehen ist (3.3) für alle $M \in \mathbb{R}$ eindeutig lösbar; von physikalischem Interesse sind aber – analog zum Potenzialtopf in der Quantenmechanik – nur quadratintegrale Funktionen $\psi(x)$. Diese gehen insbesondere für $x \rightarrow \infty$ gegen Null (wir nehmen den Mantel als unendlich dick an), sodass die Energiedichte nur auf einem endlichen Bereich nicht verschwindet. Wir werden im nächsten Abschnitt sehen, dass dies nur für diskrete Moden M möglich ist.

3.2 Lösungsmethoden

Die Helmholtz-Gleichung (3.3) lässt sich für sehr wenige Spezialfälle analytisch exakt lösen; in dieser Arbeit werden aber Elektronendichteprofile modelliert, bei denen (3.3) nur noch numerisch gelöst werden kann. Wir wollen nun zunächst die analytische und anschließend beide Schritte der gewählten numerischen Lösungsmethode vorstellen.

¹typischerweise ist $\beta \approx 10^{-2} \cdot \delta$

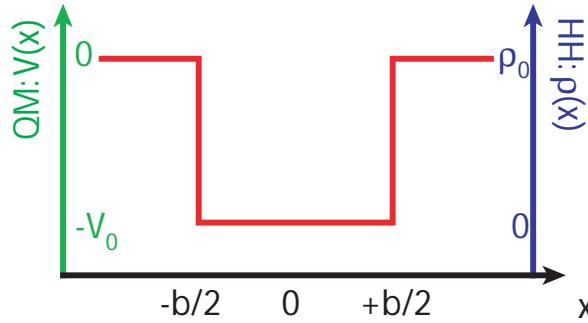


Abbildung 3.3: Zur Herleitung der analytischen Lösung.

3.2.1 Analytische Lösung

In diesem Abschnitt wollen wir die aus der Quantenmechanik bekannte analytische Lösung für ein Teilchen im endlichen Potenzialtopf auf unser Problem übertragen.

Wir vergleichen die Helmholtzgleichung (3.3) mit der zeitunabhängigen (stationären) Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung mit $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \partial_x^2$ für ein Teilchen im Potenzial $V(x)$ (siehe auch Abbildung 3.3):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.4)$$

Durch die Substitutionen $-\frac{\hbar^2}{2m} \rightarrow 1$, $V(x) \rightarrow -4\pi r_0 \rho(x)$ und $E \rightarrow M$ geht sie in Gleichung (3.3) über. Die bekannte Lösung $\psi(x)$ der Schrödingergleichung für das eindimensionale Kastenpotenzials $V(x)$ lautet:

x	$V(x)$	$\psi(x)$
$x < -\frac{b}{2}$	0	$Ae^{-k x }$
$-\frac{b}{2} \leq x \leq \frac{b}{2}$	$-V_0$	$B \cos(\kappa x)$
$x > \frac{b}{2}$	0	Ae^{-kx}

Analog erhalten wir für die Helmholtz-Gleichung (3.3) folgende Lösungen:

x	$4\pi r_0 \rho(x)$	$\psi(x)$
$x < -\frac{b}{2}$	ρ_0	$Ae^{-k x }$
$-\frac{b}{2} \leq x \leq \frac{b}{2}$	0	$\cos(\kappa x)$
$x > \frac{b}{2}$	ρ_0	Ae^{-kx}

Dabei haben wir $B = \max(\psi(x)) = 1$ gesetzt. Für Silizium ist beispielsweise $4\pi r_0 \rho \approx 2.48 \text{ (10 nm)}^{-2}$.

Die Koeffizienten k und κ sind über folgende Beziehung zu ρ_0 festgelegt und müssen die folgende transzendenten Gleichung erfüllen:

$$k = \sqrt{M} \quad (3.5)$$

$$\kappa = \sqrt{\rho_0 - M}; \quad (3.6)$$

$$k = \kappa \tan\left(\frac{\kappa b}{2}\right) \text{ (gerade Moden)}, \quad (3.7)$$

$$k = -\kappa \cot\left(\frac{\kappa b}{2}\right) \text{ (ungerade Moden)}. \quad (3.8)$$

Daher ist das Spektrum von M diskret und es gibt nur wenige physikalische Lösungen; die Anzahl der Lösungen lässt sich über den Waveguide-Parameter V bestimmen:

$$V := \sqrt{2\delta k_0 b} = \sqrt{4\pi r_0 \rho_0 b}, \quad (3.9)$$

$$|\{M\}| = \left\lceil \frac{V}{\pi} \right\rceil; \quad (3.10)$$

[...] bezeichnet hier die Gaußklammer, bedeutet also Aufrunden zur nächst-größeren ganzen Zahl. Für Silizium ist die kritische Breite $W_c = 19.96$ nm; schmalere Wellenleiter haben nur eine Mode, breitere mindestens zwei. Ein monomodaler Wellenleiter mit $b < W_c$ kann aber nicht dazu dienen, die Breite der Mode beliebig schmal zu halten, es gibt ein unteres Limit. Analog zur Unschärferelation in der Quantenmechanik erhält man, dass die Halbwertsbreite der Intensität mindestens $0.443 \cdot W_c$ breit sein muss [22] [25]. W_c ist nur von der Elektronendichte ρ_0 des Mantel-Materials abhängig, es gilt

$$W_c = \frac{1}{2} \frac{\lambda}{\sqrt{2\delta}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{r_0 \rho_0}} \quad [26]. \quad (3.11)$$

Durch die Stetigkeit der drei Teillösungen an den Punkten $x = \pm \frac{b}{2}$ ist A festgelegt:

$$A = \cos\left(\frac{\kappa b}{2}\right) e^{\frac{\kappa b}{2}}. \quad (3.12)$$

Das Spektrum der physikalischen Moden M ist diskret; die erlaubten Eigenwerte können über eine Intervallschachtelung der transzendenten Gleichungen (3.7, 3.8) beliebig genau bestimmt werden. Das Computerprogramm *Modensucher*, welches per Intervallschachtelung der transzendenten Gleichung die analytische Lösung bestimmt, befindet sich in Anhang B. Zu weiteren Informationen über die analytische Lösung möchten wir auf die Literatur verweisen, insbesondere [3], [20] und [22].

3.2.2 Numerische Methode, 1. Schritt: Numerov-Verfahren

Nur für wenige Spezialfälle des Potenzialverlaufs $V(x)$ existieren analytische Lösungen der Schrödinger-Gleichung (3.4). Wir möchten aber die Feldverteilung gemäß Gleichung (3.3) für beliebige Elektronendichtheprofile $\rho(x)$ lösen, um das physikalische Modell zu verbessern und Optimierungen vorzuschlagen. Wie wir in Kapitel 4 sehen werden, stimmen die Berechnungen mit der Annahme eines Kastenpotenzials, sprich scharfe Kanten, anscheinend nicht mit dem experimentellen Befund überein; wir haben daher eine Möglichkeit gesucht, ausgeschmierte Kanten zu modellieren. Das dazu verwendete numerische Verfahren stellen wir in diesem Abschnitt vor.

Die Differentialgleichung lösen wir mit dem Numerov-Verfahren, welches allgemein zur Lösung von Gleichungen der Form $f''(x) + q(x)f(x) = 0$ verwendet wird. Zunächst müssen wir die x -Koordinate diskretisieren. Wir verwenden ein regelmäßiges Gitter der Größe h und bezeichnen $f(x_i) = f_i$ und $q(x_i) = q_i$, wobei $|x_i - x_{i\pm 1}| = h$ gilt.

Das Numerov-Verfahren berechnet nun aus den Punkten f_{i-1} und f_i den Wert f_{i+1} nach folgendem Schema:

$$f_{i+1} = \frac{\left(2f_i \left(1 - \frac{5h^2 q_i}{12}\right) - f_{i-1} \left(1 + \frac{h^2 q_{i-1}}{12}\right)\right)}{1 + \frac{h^2 q_{i+1}}{12}}. \quad (3.13)$$

Zur Herleitung siehe Anhang A, [27] und [28].

Als Startwerte wählen wir

$$f_0 = 0, \quad (3.14)$$

$$f_1 = 10^{-6}. \quad (3.15)$$

Der erste Wert erklärt sich aus der Randbedingung $\psi(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$, der zweite aus der notwendigen Steigung der Kurve. Der Wert von f_1 ist aber ohne Belang: Da die Helmholtz-Gleichung (3.3) linear in der Lösung $\psi(x)$ ist, ist auch $\alpha\psi(x)$ mit beliebiger Konstante α ebenfalls eine Lösung; die Wahl von f_1 ergibt nur eine Multiplikation mit einem α . Nach der Integration wollen wir $\alpha'\psi(x)$ so wählen, dass $\max\{\alpha'\psi(x)\} = 1$ ist; dies dient dazu, die Zahlenwerte handlich zu halten. Die Physik wird dadurch aber nicht geändert.

Das Numerov-Verfahren wird häufig in der Theoretischen Chemie eingesetzt, um die statio-näre Schrödinger-Gleichung zu lösen [29]. Häufig liest man, dass das Numerov-Verfahren von höherer Ordnung (h^6 in den Rundungsfehlern) als das allgemeinere Runge-Kutta-Verfahren sei [30]; in [31] wird aber gezeigt, dass auch das Numerov-Verfahren einen kumulierten Fehler der Ordnung h^4 – genau wie Runge-Kutta – ergebe.

Ein Problem, auf welches wir beim Numerov-Verfahren gestoßen sind, ist die Stabilität:

Die Differentialgleichung 3.3 ist vom elliptischen Typ; diese reagieren empfindlich auf kleine Rechenfehler. Während der Integration über die etwa 10^6 Gitterpunkte sammeln sich aber unweigerlich numerische Fehler an, welche für „große“ Schwankungen in $\rho(x)$ divergierende Lösungen produzieren. Darauf muss während der Auswertung geachtet werden, wir werden an vielen Stellen noch einmal darauf hinweisen.

3.2.3 Numerische Methode, 2. Schritt: Schießverfahren

Nun müssen wir noch die Eigenwerte der Gleichung (3.3) finden; das Numerov-Verfahren findet für jedes M eine Funktion, aber nur für diskrete M sind diese von physikalischen Interesse. Dafür schlägt [30] das Variationsverfahren der Quantenmechanik vor; doch mit diesem erhalten wir nur eine Abschätzung für die Nullte Mode (äquivalent zum Grundzustand). Hier wollen wir das Schießverfahren verwenden, welches uns ähnlich wie eine iterativen Lösung der transzendenten Gleichung den einzelnen Moden nähert.

Wir raten zunächst ein M_{start} und integrieren über einen definierten Bereich; nun vergleichen wir das resultierende $\psi(x \in \text{Testintervall})$ mit einer vorgegebenen Schranke ψ_0 . Bleibt $|\psi| < \psi_0$, so akzeptieren wir M und haben eine approximative Lösung gefunden.

Wächst aber $|\psi|$ stark an, so divergiert unsere Lösung und wir variieren $M \rightarrow M \pm \Delta M$. Dabei hängt das Vorzeichen davon ab, ob ψ positiv oder negativ wird und davon, ob wir eine gerade oder ungerade Mode suchen. Der Knotensatz der Quantenmechanik garantiert uns dabei, dass die Anzahl der Knotenstellen von $\psi(x)$ die Ordnung der Mode angibt und wir das Vorzeichen für die Variation kennen [33]. Halbieren wir nach jedem Schritt ΔM , so konvergiert das Verfahren gegen eine erlaubte Mode M_0 , wenn $|M_0 - M_{\text{start}}| < 2\Delta M$ ist.

Die Intervallschachtelung brechen wir nach einer Iterationstiefe von 40 ab und entscheiden, ob das bis dahin bestimmte M eine akzeptierbare Mode ist oder in dem gewählten Intervall keine physikalische Lösung existiert. In diesem Fall müssten wir dann in einem neuen Intervall suchen.

3.2.4 Implementierung

Das oben beschriebene Verfahren wurde in zwei Programmen implementiert: Einmal in C++ mit der Qt-Bibliothek [34] [35] als grafische Oberfläche, um schnell einen Überblick über die möglichen Lösungen zu erhalten, und außerdem als C-Konsolen-Programm, welches die Ausgabe in eine Textdatei schreibt.

Der grundlegende Algorithmus ist in Anhang B.1 als C-Code abgedruckt.

Abbildung 3.4 zeigt das grafische Programm; eine Sitzung des Konsolen-Programms mit allen relevanten Ein- und Ausgaben ist in Abbildung 3.5 gezeigt. Ausgabe ist eine Text-Datei mit x -Koordinate, Elektronendichte sowie Feld- und Intensitätsverteilung. Diese Daten lassen sich dann weiter auswerten, um etwa das Fernfeld per FFT zu errechnen oder den Absorptionskoeffizienten zu bestimmen.

Bei der Diskretisierung der x -Achse haben wir 10 nm als Längeneinheit verwendet. Dies resultiert zum Einen aus den typischen Dicken der Wellenleiter von einigen zehn Nanometern, zum Anderen aus der Numerik: Die Integration der elliptischen Differentialgleichung (3.3) ist für zu große Parameter $4\pi r_0 \rho_0$ instabil; die Diskretisierungseinheit von 10 nm ist gerade so gewählt, dass $4\pi r_0 \rho_{\text{Si}} = 2.48 \cdot (10 \text{ nm})^{-2}$ ist, was ein stabiles Simulationsintervall von ungefähr $-12 \leq x \leq 12$, also $-120 \text{ nm} \leq x \leq 120 \text{ nm}$, gewährleistet. Der Gitterabstand für die Integration wurde auf $h = 10^{-5} = 10^{-4} \text{ nm}$ gesetzt.

3.2.5 Laufzeit, Fehlerabschätzung

Die Laufzeit des Numerov-Algorithmus ist linear in der Anzahl der Gitterpunkte; aufgrund der Intervallschachtelung wird meist bis zu 40 Mal integriert. Je nach Rechenaufwand des verwendeten Elektronendichteprofils (einfaches Rechteck oder komplizierte Fehlerfunktionen) benötigt eine komplette Rechnung auf einem typischen Heimcomputer-Prozessor zwischen zwei und zehn Sekunden. Tabellierte man die Exponentialfunktion, ließe sich die Geschwindigkeit noch steigern. Eine weitere Optimierung: Häufig haben wir das Numerov-Verfahren für kleine Parameteränderungen angewandt (etwa ein Abrastern über die Wellenleiterbreite b); hier ließe sich Zeit gewinnen, indem man den vorherigen Wert von M als neuen Startwert verwendet und in einem kleineren Intervall sucht. Dann lässt sich die Iteration schon nach 10 Schritten abbrechen.

Die numerische Lösung muss natürlich überprüft werden. Dazu haben wir die numerische mit der analytischen Lösung für einen Wellenleiter mit Silizium-Mantel (und einer Vakuum-Leitschicht) verglichen. Wir haben mit beiden Methoden die Halbwertsbreiten der Intensitätsverteilung bestimmt und anschließend durcheinander dividiert. Das Ergebnis zeigt Abbildung 3.7 für verschiedene Leitschicht-Dicken.

Wir erkennen im Bereich der Dicke, bei welcher die Intensitätsbreite minimal wird², eine sehr gute Übereinstimmung; der kleine Fehler von $\lesssim 10^{-4}$ resultiert aus der Tatsache, dass bei der analytischen Lösung nur vier Nachkommastellen berechnet wurden. Für sehr kleine Leitschichten, $1 \text{ nm} \leq b \leq 4 \text{ nm}$, finden wir eine Abweichung kleiner als ein Promille.

²dies ist für einen Silizium-Wellenleiter bei $b = 8.859 \text{ nm}$ der Fall

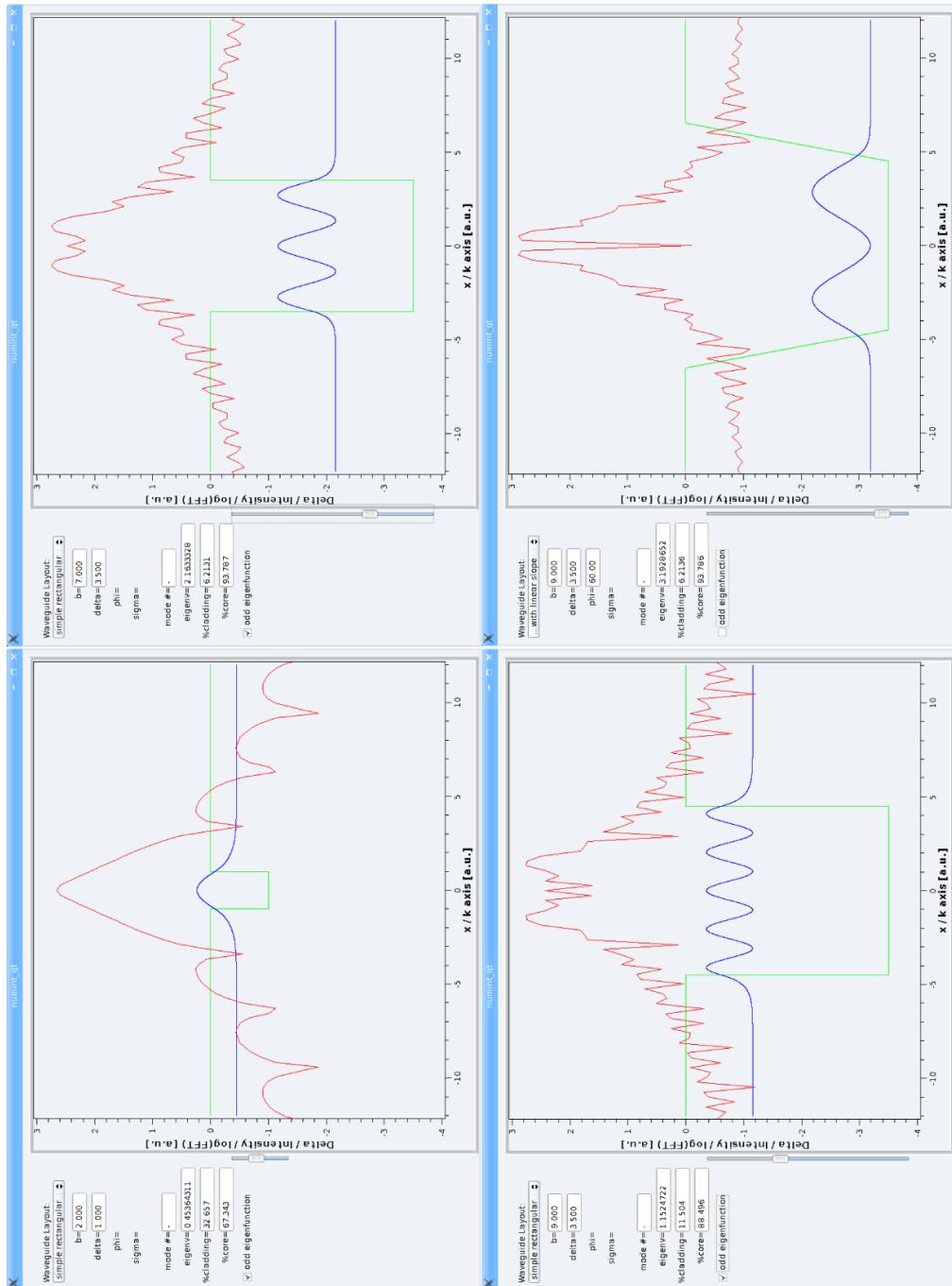
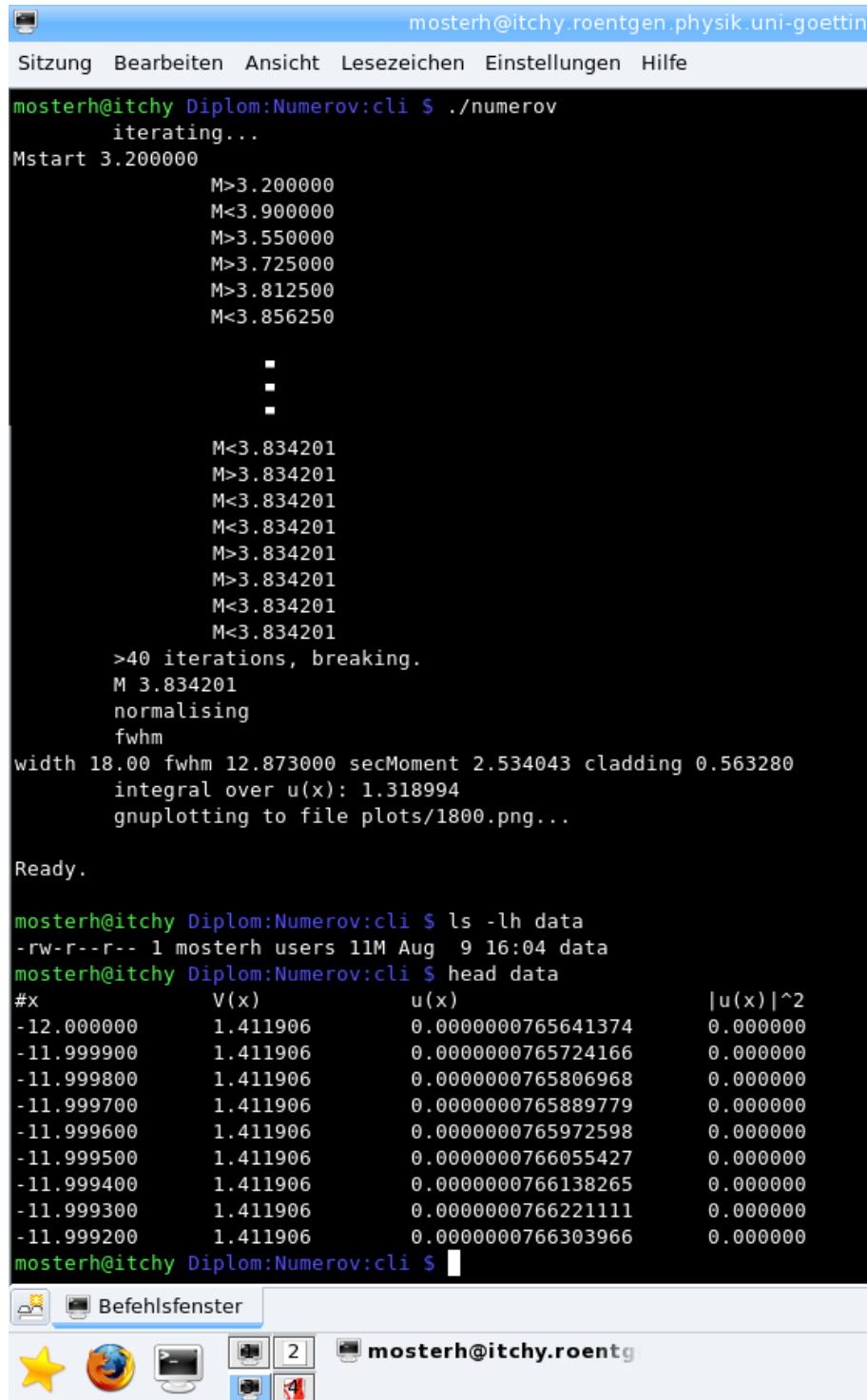


Abbildung 3.4: Einige Screenshots des grafischen Programms *numerov_gui*. Die grüne Kurve gibt das Profil des Wellenleiters, also die ElektronendichteVerteilung, an; in blau wird die Lösung geplottet, die rote Kurve ist $\log(\text{Betragssquadrat})$ von der Fourier-Transformation, also das Fernfeld. Mit dem Schieberegler auf der linken Seite lässt sich der Startwert M durchfahren, um den herum die Mode gesucht wird.



```
mosterh@itchy:~$ ./numerov
      iterating...
Mstart 3.200000
      M>3.200000
      M<3.900000
      M>3.550000
      M>3.725000
      M>3.812500
      M<3.856250
      :
      :
      M<3.834201
      M>3.834201
      M<3.834201
      M<3.834201
      M>3.834201
      M>3.834201
      M<3.834201
      M<3.834201
      >40 iterations, breaking.
      M 3.834201
      normalising
      fwhm
      width 18.00 fwhm 12.873000 secMoment 2.534043 cladding 0.563280
      integral over u(x): 1.318994
      gnuplotting to file plots/1800.png...

Ready.

mosterh@itchy:~$ ls -lh data
-rw-r--r-- 1 mosterh users 11M Aug  9 16:04 data
mosterh@itchy:~$ head data
#x          V(x)          u(x)          |u(x)|^2
-12.000000  1.411906  0.000000765641374  0.000000
-11.999900  1.411906  0.000000765724166  0.000000
-11.999800  1.411906  0.000000765806968  0.000000
-11.999700  1.411906  0.000000765889779  0.000000
-11.999600  1.411906  0.000000765972598  0.000000
-11.999500  1.411906  0.000000766055427  0.000000
-11.999400  1.411906  0.000000766138265  0.000000
-11.999300  1.411906  0.000000766221111  0.000000
-11.999200  1.411906  0.000000766303966  0.000000
mosterh@itchy:~$
```

Abbildung 3.5: Für die Auswertung wurde das konsolenbasierte Programm *numerov* verwendet. Es arbeitet mit höherer Präzision als die grafische Variante.

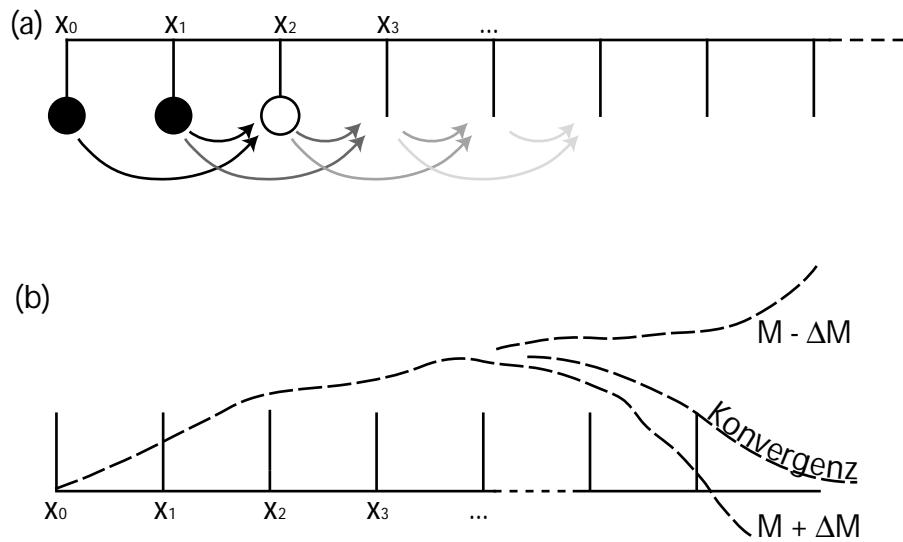


Abbildung 3.6: (a) Das Numerov-Verfahren berechnet nacheinander die Werte an den Stützstellen; (b) mit dem Schießverfahren werden die physikalischen Moden gesucht.

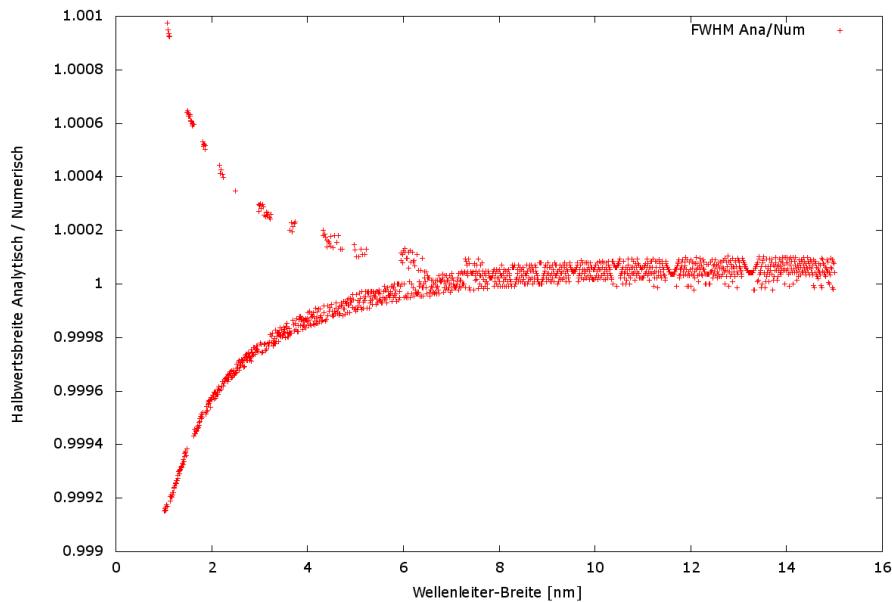


Abbildung 3.7: Als Fehlerabschätzung dient die Halbwertsbreite der Mode: Sie wurde für verschiedene Wellenleiter-Dicken analytisch und numerisch bestimmt, der Quotient ist ein Maß für die Genauigkeit. Der Fehler $\lesssim 10^{-4}$ resultiert daraus, dass die analytische Lösung nur mit vier Nachkommastellen berechnet wurde. Für extrem kleine Wellenleiter nimmt der Fehler deutlich zu.

3.3 Analytische Berechnung des Fernfeldes

3.3.1 Fourier-Transformation

Die Feldverteilung im idealen planaren monomodalen Wellenleiter mit scharfen Kanten können wir analytisch ausrechnen, ebenso lässt sich die Fourier-Transformation analytisch durchführen. Es ist

$$\psi(x) = \begin{cases} \cos(\kappa x), & |x| \leq b/2 \\ Ae^{-k|x|}, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.16)$$

Eine Berechnung des Fernfeldes als Fourier-Transformation³ des Feldes $\psi(x)$ mit Computer-Algebra-Programmen⁴ liefert folgenden Ausdruck:

$$\mathcal{F}(\psi(x)) = \frac{e^{-\frac{b(k+iq)}{2}}}{\sqrt{2\pi} \cdot (k^2 + q^2)(-\kappa^2 + q^2)} \left(\begin{array}{l} A \cdot \left[(1 + e^{ibq}) k + i(-1 + e^{ibq}) q \right] (-\kappa^2 + q^2) \\ -ie^{\frac{bk}{2}} (-1 + e^{ibq}) q(k^2 + q^2) \cos\left(\frac{b\kappa}{2}\right) \\ -e^{\frac{bk}{2}} (1 + e^{ibq}) \kappa (k^2 + q^2) \sin\left(\frac{bk}{2}\right) \end{array} \right). \quad (3.17)$$

Messbar ist nur die Intensität, also $|\mathcal{F}(\psi)|^2$; wir quadrieren nach elementaren Umformungen Real- und Imaginärteil getrennt⁵ und setzen $\kappa \tan(b\kappa/2) = k$ sowie $A = \cos(\kappa b/2) e^{kb/2}$ ein:

$$|\mathcal{F}(\psi)|^2 = \frac{\cos^2\left(\frac{\kappa b}{2}\right)}{2\pi(k^2 + q^2)^2(\kappa^2 - q^2)^2} \left[\begin{array}{l} \left((\kappa^2 - q^2) \left(k + k \cos(bq) - q \sin(bq) \right) + (k^2 + q^2) \left(k + k \cos(bq) - q \sin(bq) \right) \right)^2 \\ \left((\kappa^2 - q^2) \left(k \sin(bq) + q \cos(bq) - q \right) + (k^2 + q^2) \left(k \sin(bq) + q \cos(bq) - q \right) \right)^2 \end{array} \right] \quad (3.18)$$

³Wir definieren die Fourier-Transformation als $\mathcal{F}[f(x)] := 1/\sqrt{2\pi} \int dq f(x) e^{iqx}$.

⁴Wir haben das Programm *Mathematica* von *Wolfram Research Inc.* verwendet; in Anhang B.7 findet sich die Eingabe an das Programm; als Ausgabe ergibt sich der Ausdruck (3.17).

⁵Es gilt $|a + ib|^2 = a^2 + b^2$.

$$|\mathcal{F}(\psi)|^2 = \frac{\cos^2\left(\frac{\kappa b}{2}\right)}{2\pi} \frac{(\kappa^2 - q^2 + k^2 + q^2)^2}{(k^2 + q^2)^2 (\kappa^2 - q^2)^2} \cdot \left[(k + k \cos(bq) - q \sin(bq))^2 + (k \sin(bq) + q \cos(bq) - q)^2 \right] \quad (3.19)$$

$$= \frac{\cos^2\left(\frac{\kappa b}{2}\right)}{2\pi} \frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{(k^2 + q^2)^2 (\kappa^2 - q^2)^2} \cdot 4 \cdot \left(k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) - q \sin\left(\frac{bq}{2}\right) \right)^2 \quad (3.20)$$

(3.21)

$$|\mathcal{F}(\psi)|^2 = \frac{2 \cos^2\left(\frac{\kappa b}{2}\right)}{\pi} \cdot \frac{\left(k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) - q \sin\left(\frac{bq}{2}\right) \right)^2}{(k^2 + q^2)^2 (\kappa^2 - q^2)^2} \quad (3.22)$$

$$\propto \frac{q^2}{q^8} = q^{-6}. \quad (3.23)$$

Die Proportionalität ist nicht exakt. Abbildung 3.8 zeigt diese Funktion für $4\pi r_0 \rho_0 = 1$ und $b = \pi$ (kritische Breite, bei der gerade nur noch eine Mode angeregt werden kann). Es ist $M = 0.6464$, $k = 0.8040$ und $\kappa = 0.5946$. Eingezeichnet ist auch ein q^{-6} -Fit der Einhüllenden nach Gleichung (3.23).

3.3.2 Diskussion der Gleichung

Nun wollen wir uns Gleichung (3.22) genauer ansehen. Als erstes betrachten wir die Oszillationen. Dazu formen wir den Zähler um und suchen seine Nullstellen:

$$\left[k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) - q \sin\left(\frac{bq}{2}\right) \right]^2 = 0 \quad (3.24)$$

$$k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) = q \sin\left(\frac{bq}{2}\right) \quad (3.25)$$

$$k = q \tan\left(\frac{bq}{2}\right). \quad (3.26)$$

Diese Gleichung entspricht der Transzendenten Gleichung (3.7), welche k und κ verbindet; wir wissen also schon, dass die erste Nullstelle bei $q = \kappa$ auftreten sollte. Doch hier haben

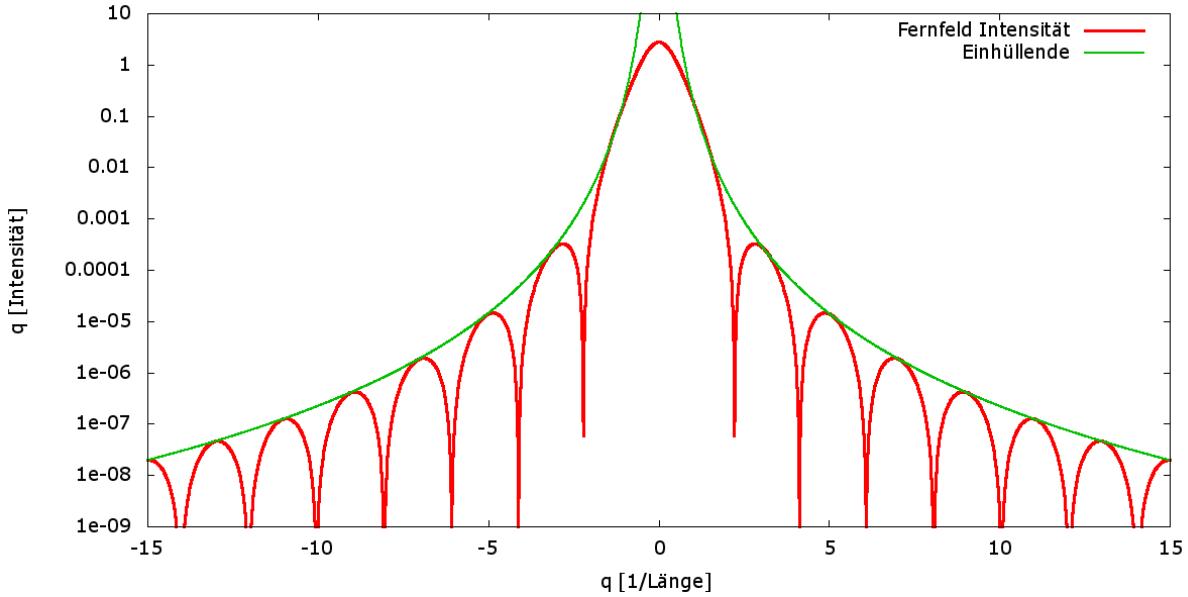


Abbildung 3.8: Die Fourier-Transformation der analytischen Lösung (3.16) in halblogarithmischer Auftragung gemäß Gleichung (3.22). Man erkennt den q^{-6} -Abfall (Gleichung (3.23)) sowie die Oszillationen gemäß (3.24). Als Parameter wurden folgende Werte eingesetzt: Die Leitschicht misst die dimensionslose Breite π , der Faktor $4\pi r_0 \rho_0 = 1$; die Mode liegt bei $M = 0.6464$, $k = 0.8040$, $\kappa = 0.5946$.

wir zudem ein $\kappa^2 - q^2 = 0$ im Nenner. Nach der Regel von L'Hôpital gilt

$$\lim_{q \rightarrow \kappa} \frac{k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) - q \sin\left(\frac{bq}{2}\right)}{\kappa^2 - q^2} = \lim_{q \rightarrow \kappa} \frac{\partial_q \left[k \cos\left(\frac{bq}{2}\right) - q \sin\left(\frac{bq}{2}\right) \right]}{\partial_q [\kappa^2 - q^2]} \quad (3.27)$$

$$= \lim_{q \rightarrow \kappa} \frac{-\frac{b}{2} \sin\left(\frac{bq}{2}\right) - \frac{bq}{2} \sin\left(\frac{bq}{2}\right) - \sin\left(\frac{bq}{2}\right)}{-2q} \quad (3.28)$$

$$= \left(\frac{bk}{4\kappa} + \frac{1}{2\kappa} \right) \sin\left(\frac{b\kappa}{2}\right) + \frac{b}{4} \cos\left(\frac{b\kappa}{2}\right). \quad (3.29)$$

Die Singularität und die erste Nullstelle heben sich also gerade auf. Die Nullstellen des Fernfeldes sind über die Bedingung

$$k = q \tan\left(\frac{bq}{2}\right) \quad (3.30)$$

mit der Breite b des Wellenleiters verbunden. Für große $q \gg k$ gilt also näherungsweise, dass die Nullstellen einen Abstand von

$$\Delta q_{\text{null}} \approx \frac{2\pi}{b} \quad (3.31)$$

haben. Die erste Nullstelle liegt ungefähr bei $4\pi/b$.

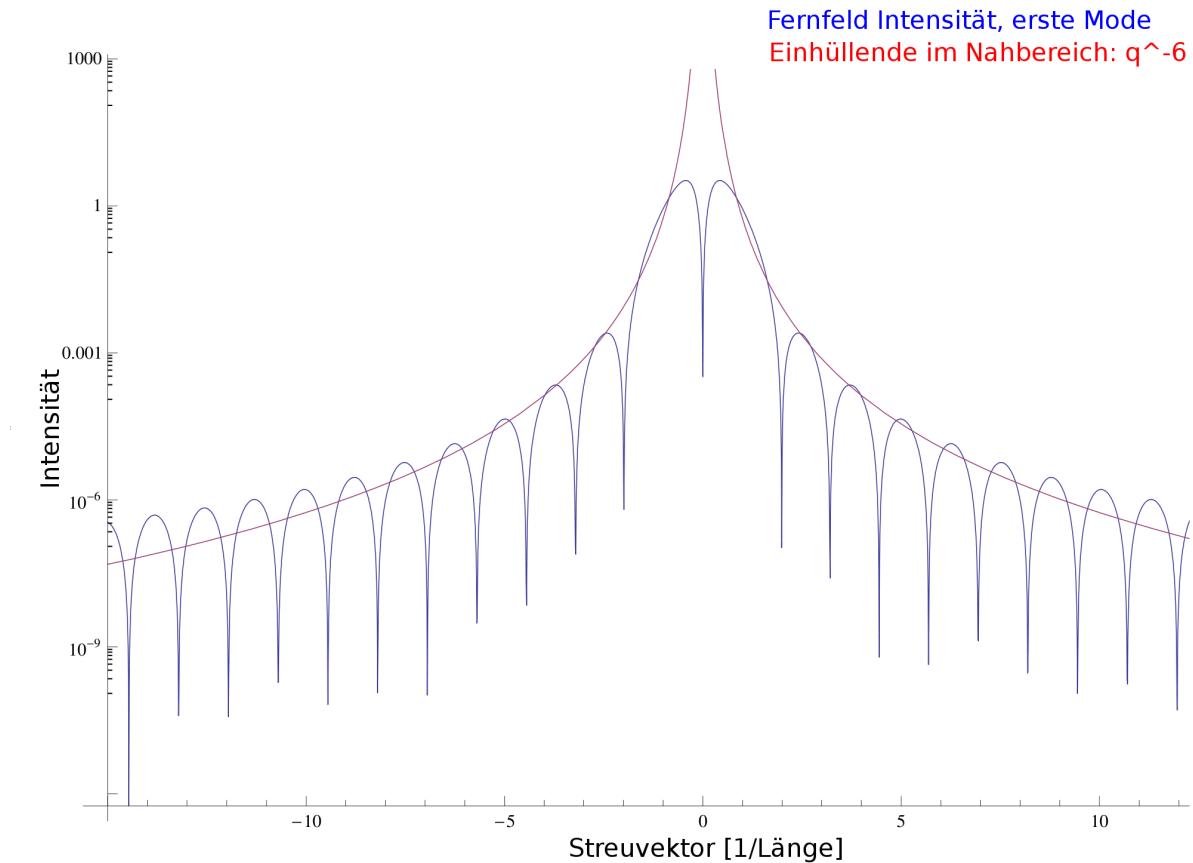


Abbildung 3.9: Das Fernfeld der ersten Mode, berechnet mit *Mathematica* in halblogarithmischer Auftragung: Die Einhüllende gehorcht keinem Potenzgesetz; man erkennt aber, dass der Abfall im Fernbereich (etwa ab der vierten Oszillation) langsamer als q^{-6} ist.

Das Fernfeld der nullten Mode fällt also wie q^{-6} ab; für höhere Moden konnte kein einfacher Ausdruck gefunden werden; das weiterhin analytisch bestimmbare Fernfeld lässt sich nicht auf ein Potenzgesetz zurückführen. Abbildung 3.9 zeigt das mit *Mathematica* berechnete Fernfeld der ersten Mode in halblogarithmischer Auftragung; die Einhüllende ist offensichtlich kein Potenzgesetz. Man erkennt, dass der Abfall langsamer als q^{-6} ist; im Nahbereich bis zur dritten Oszillation lässt sich noch eine Funktion der Form $\propto q^{-6}$ als lokale Einhüllende anfitten, ab der vierten Oszillation gelingt dies nicht mehr. Der dynamische Umfang der Röntgen-Detektoren erlaubt jedoch nur Intensitätsmessungen von meist vier bis fünf Größenordnungen, sodass der Fernbereich nicht detektierbar ist.

Kapitel 4

Realstruktureffekte

In diesem Kapitel wollen wir kurz typische Realstruktureffekte aufzeigen und die verwendeten Modellierungen vorstellen.

4.1 Motivation

Der Hintergrund: Die vorhergesagten Oszillationen im Fernfeld nach Formel (3.24) wurden experimentell nicht beobachtet, auch der q^{-6} -Abfall scheint falsch zu sein [4]. Abbildung 4.1 (a) zeigt das detektierte (schwarze Kreise) und simulierte (gestrichelte Kurve) Fernfeld eines eindimensionalen Mehrschicht-Wellenleiters. Zwischen dem Germanium-Mantel ist auf beiden Seiten eine 30 nm dicke Schicht Molybdän, als Leitschicht kam eine 18 nm dicke Kohlenstoff-Schicht zum Einsatz. Abbildung 4.1 (b) zeigt das Brechungsindexprofil des verwendeten Wellenleiters [4].

In Kapitel 3 haben wir die analytische Lösung der Propagation von (Röntgen-)Strahlung in Wellenleitern diskutiert und insbesondere das Fernfeld berechnet. In diesem Kapitel stellen wir nun vor, wie wir die Realstruktureffekte in der numerischen Simulation berücksichtigen wollen: Darunter verstehen wir alle Abweichungen von idealen scharfen, parallelen Kanten zwischen Mantel und Leitschicht.

Im idealen Fall ist das Elektronendichtheprofil längs des Querschnitts also eine Rechteckfunktion. Bei einem Silizium-Mantel mit Vakuum-Leitschicht hätte die Elektronendichte also folgende Form:

$$\rho_{\text{el}}^{\text{Si}} = \begin{cases} 0, & |x| \leq b/2 \\ \rho_0 \approx 700 \text{ nm}^{-3}, & |x| > b/2. \end{cases} \quad (4.1)$$

Dies beschreibt die grobe Form des Wellenleiters. Nun kommt es auf verschiedenen Skalen zu Abweichungen. Auf makroskopischer Größe etwa bemerkt man bei realen Oberflächen eine *waviness* (deutsch etwa: Welligkeit); diese wird etwa durch ungleichmäßige Bewegungen während der Herstellung hervorgerufen. Diesen Abweichungen von der idealen Form mit großer Wellenlänge überlagert sich die Rauigkeit auf mikroskopischer Skala. Diese entsteht etwa beim Ätzen des Wellenleiterkanals (zur genauen Herstellung mittels „Wafer-Bonding“ siehe etwa [36]) oder durch natürliche Oberflächenrauigkeiten des Silizium-Wafers. Bei einigen Materialkombinationen kann es zusätzlich noch zu Diffusion kommen; dabei vermi-

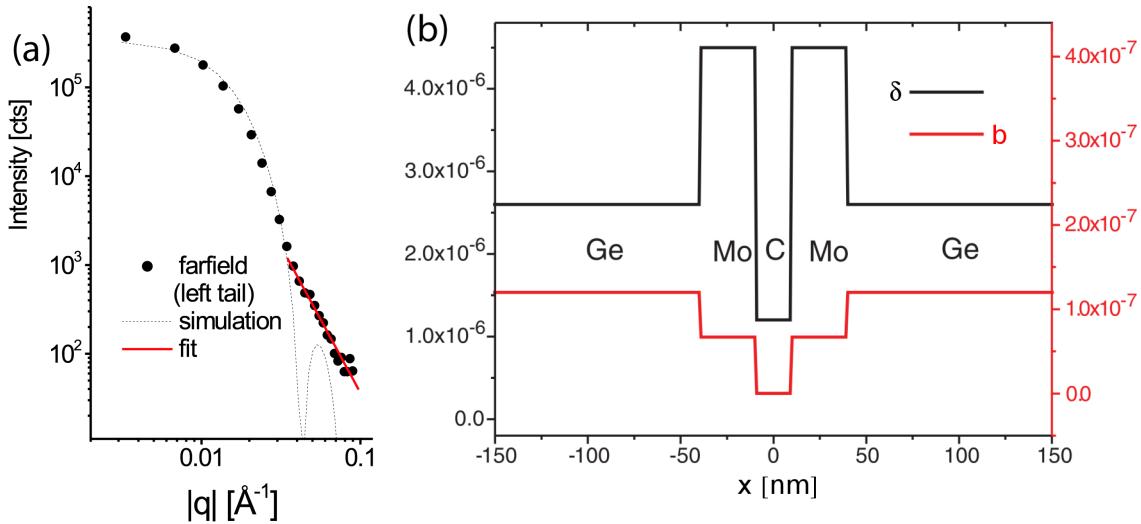


Abbildung 4.1: Im Experiment (schwarze Kreise) wurden die simulierten Oszillationen des Fernfeldes (gestrichelt) nicht beobachtet. Der verwendete Wellenleiter ist ein Mehrschicht-System mit einer Kohlenstoff-Leitschicht, einem Germanium-Mantel und einer Zwischenschicht aus Molybdän. Quelle: [4].

schen sich die Materialien im Bereich um die eigentlich scharfe Grenzfläche, wodurch der Brechungsindex nicht mehr scharf, sondern verschmiert abfällt.

4.2 Modell: Fehlerfunktion

All diese Effekte wollen wir dadurch modellieren, dass wir die scharfen Kanten aus (4.1) ausschmieren. Die typische Annahme soll dabei sein, dass die verschiedenen Fehler im Schnitt gaußverteilt sind; als Modell wählen wir daher eine Faltung der Rechteck-Funktion mit einer Gauß-Verteilung; dies liefert eine Summe aus zwei Fehlerfunktionen:

$$\rho_{\text{el}}^{\text{Si}} = \rho_0 \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\text{erf} \left(\frac{x + b/2}{\sigma} \right) - \text{erf} \left(\frac{x - b/2}{\sigma} \right) \right) \right]. \quad (4.2)$$

Der Parameter σ ist in diesem Zusammenhang auch als *rms*-Rauigkeit (*root mean square*, also Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung \cong Standardabweichung) bekannt und hat die Dimension einer Länge. $\text{erf}(x)$ ist die Fehlerfunktion

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy. \quad (4.3)$$

Im Folgenden wollen wir zur Vereinfachung auch (4.2) als Fehlerfunktion bezeichnen.

Neben der Modellierung mittels (4.2) haben wir noch weitere funktionale Verläufe der Elektronendichte angenommen, etwa einen Gauß-Trog, eine Parabel und eine halbe Kosinus-Periode. Siehe dazu auch die Skizzen in den Abbildungen 4.2 und 4.3.

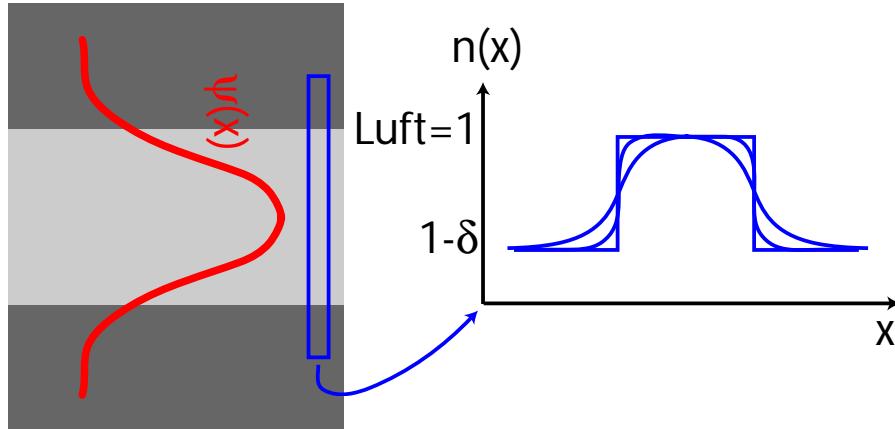


Abbildung 4.2: Der Brechungsindex zwischen Mantel und Leitschicht wird in unseren Berechnungen durch eine stetige Funktion modelliert.

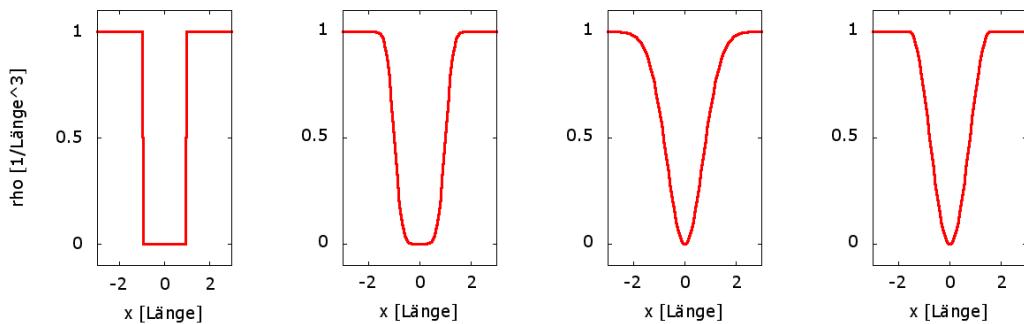


Abbildung 4.3: Einige Beispiele der verwendeten Elektronendichtheprofile, v.l.: Rechteck, Fehlerfunktion, Gauß-Trog, Kosinus-Tal.

Kapitel 5

Analysen

In diesem Kapitel wollen wir die Ergebnisse unserer Simulationen präsentieren und die physikalischen Konsequenzen von Realstruktureffekten in Röntgen-Wellenleitern diskutieren.

Sofern nicht anders angegeben, wurden die Berechnungen für Silizium als Mantel-Material und in der wellenlängenunabhängigen Form der Helmholtzgleichung (3.3) vorgenommen. Die hier verwendeten Programme *numerov*, *fft*, *modensucher*, *maxima.awk*, *nmal.sh* und *PWG::stochastisch* finden sich im Anhang B.

Als Breite des Wellenleiters definieren wir die Halbwertsbreite der ElektronendichteVerteilung. Im Falle eines Rechtecks und der Fehlerfunktion gemäß (4.2) ist dies klar; für eine Gaußverteilung mit der Standardabweichung σ gilt $b = 2\sqrt{2 \log 2}\sigma$.

5.1 Fernfeld

Nachdem wir in Abschnitt 3.3.1 eine analytische Form des Fernfeldes für ideale Wellenleiter als eine q^{-6} -Einhüllenden herleiten konnten, wollen wir nun die Auswirkung von verschmierten Kanten simulieren. Mit Fehlerfunktionen anstatt einem Sprung im Elektronendichtheprofil modellieren wir Herstellungsfehler und Diffusion zwischen den Schichten.

5.1.1 Doppellogarithmische Auftragung

Zunächst beschreiben wir, wie die q -Abhängigkeit der Intensität im Fernfeld aus Mess- und Simulationsdaten bestimmt werden kann. Eine Funktion $y = x^{-\alpha}$ verhält sich in doppellogarithmischer Auftragung wie eine Gerade:

$$\ln y = \ln(x^{-\alpha}) = -\alpha \ln(x); \quad (5.1)$$

aus der Steigung kann also direkt der Exponent gefunden werden. Abbildung 5.1 zeigt einen doppellogarithmischen Plot der analytischen Lösung aus Abbildung 3.8; die Steigung der Geraden ist $\alpha = -6$.

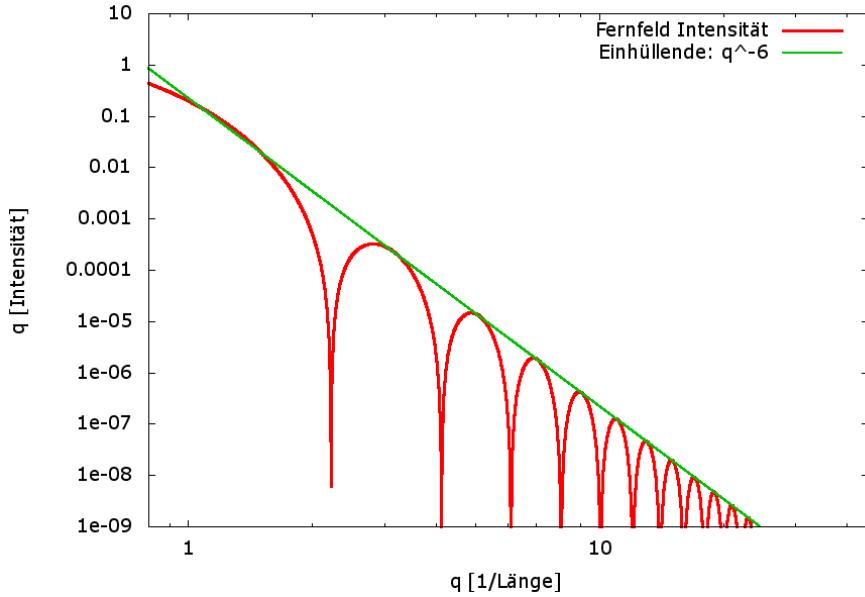


Abbildung 5.1: Für eine Einhüllende der Form $q^{-\alpha}$ lässt sich der Exponent α durch einen doppellogarithmischen Plot einfach bestimmen. Das Fernfeld des idealen Wellenleiters sollte wie q^{-6} abklingen. Zusätzlich sieht man noch die Oszillationen gemäß Formel (3.24).

5.1.2 Simulationsprogramme

Zur numerischen Integration der Helmholtz-Gleichung haben wir das Programm *numerov* verwendet; es liefert für ein vorgegebenes Wellenleiter-Profil die Feld- und Intensitätsverteilung gemäß der Helmholtz-Gleichung. Mit dem Programm *fft* haben wir aus der Ausgabe dann die Fourier-Transformation berechnen lassen, um das Fernfeld zu erhalten. Das AWK-Skript [37] *maxima.awk* sucht die Maxima der Oszillationen und übergibt die Daten an das freie Plot-Programm Gnuplot¹, welches eine lineare Regression durchführt und die Steigung der Geraden, also den q -Exponenten, ausgibt.

Zur Überprüfung der Numerik haben wir zunächst einen rechteckigen Silizium-Wellenleiter mit Breiten $8 \text{ nm} \leq b \leq 38 \text{ nm}$ simuliert und die q -Exponenten fitten lassen. Das Ergebnis zeigt Abbildung 5.2; die Fehlerbalken stammen aus der linearen Regression. Wir erkennen eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung: Über weite Teile des simulierten Bereichs wurde eine $q^{-5.993(15)}$ -Abhängigkeit berechnet.

¹<http://www.gnuplot.info>

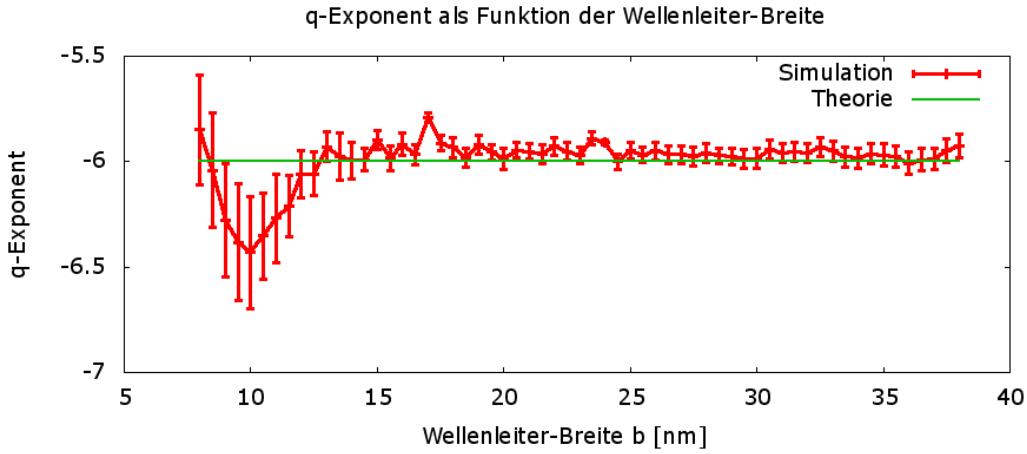


Abbildung 5.2: Der q -Exponent in Theorie und Simulation für einen Vakuum-Silizium-Wellenleiter mit variabler Breite b der Leitschicht: Das Fernfeld eines idealen Wellenleiters soll wie q^{-6} abfallen; die numerischen Werte ergeben einen gewichteten Mittelwert von $q^{-5.993(15)}$. Die Fehlerbalken stammen aus der linearen Regression.

5.1.3 Fehlerdiskussion

Gerade bei den breiteren Wellenleitern mit $b \gtrsim 20$ nm sind die Fehlerintervalle deutlich größer, die simulierten Daten weichen stärker von der analytisch berechneten q^{-6} -Abhängigkeit ab. Dies liegt an Instabilitäten im Integrationsverfahren: Bei einigen Breiten wurden divergierende Lösungen produziert; nachdem das Vertrauensintervall und damit der Integrationsbereich für die *fft*-Routine verkleinert wurde, konnten sinnvollere Werte berechnet werden. Dieses Verfahren werden wir weiter unten noch einmal aufgreifen.

Die numerisch bestimmte Einhüllende, $q^{-5.993(15)}$, stimmt innerhalb der Fehlergrenze (diese wurde durch die lineare Regression bestimmt) mit der analytischen Lösung q^{-6} überein. In der Abbildung 5.2 erkennen wir einige Ausreißer, welche auf numerische Effekte zurückzuführen sind. Hinzu kommt, dass die Proportionalität $\mathcal{F}(\psi) \propto q^{-6}$ nicht exakt ist und nur für $k, \kappa \ll q$ gilt.

5.1.4 Das Fernfeld

Die Abbildung 5.3 zeigt die simulierten Fernfelder für einige ausgewählte Elektronendichtheprofile: Rechteck, zwei Fehlerfunktionen und Gauß-Profil. In der Simulation des idealen Wellenleiters erkennen wir die analytische Lösung wieder. Modellieren wir Rauigkeiten und Produktionsfehler entlang der Grenzflächen zwischen Mantel und Leitschicht mit zwei Fehlerfunktionen, Parameter $\sigma = 0.5$ nm (bei einer Leitschicht-Dicke $b = 8.9$ nm, Silizium-

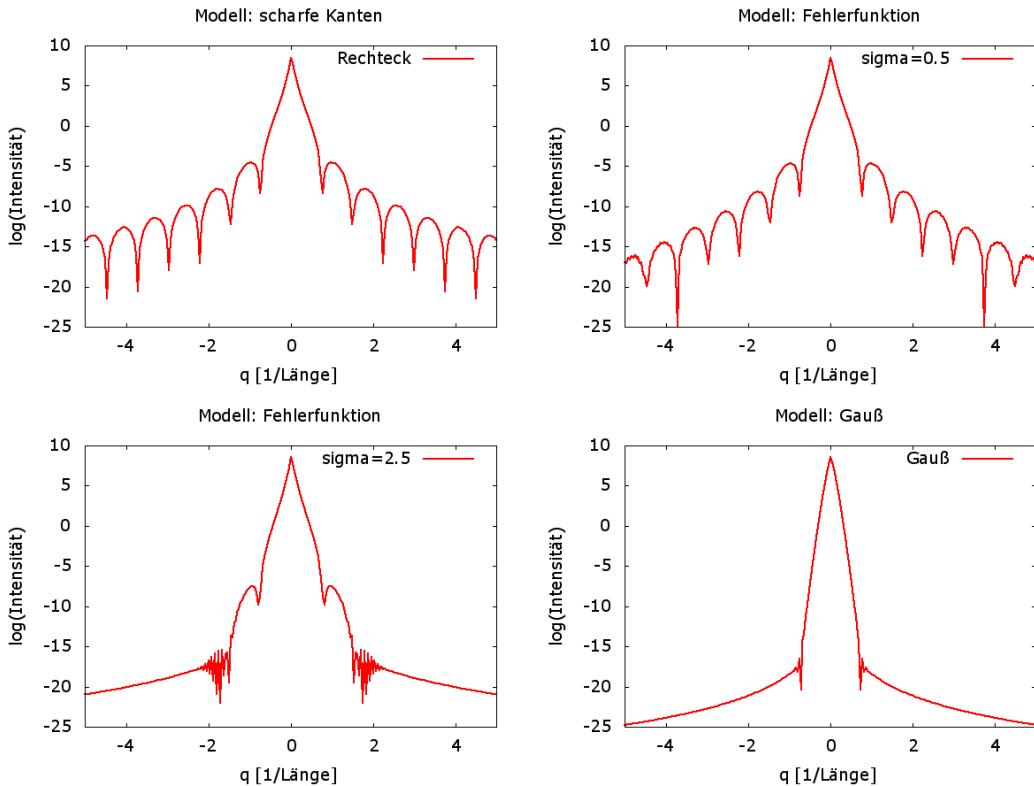


Abbildung 5.3: Numerisch berechnete Fernfelder für Wellenleiter mit funktionalem Elektronendichteprofil: idealer Wellenleiter mit scharfen Kanten („Rechteck“), Fehlerfunktion ($\sigma = 0.5 \text{ nm}$), Fehlerfunktion ($\sigma = 2.5 \text{ nm}$), Gauß-Profil.

Mantel), sehen wir zunächst nur schwache Änderungen im Fernfeld. Wir werden aber gleich den Einfluss des Parameters σ genauer untersuchen. Für ein $\sigma = 2.5 \text{ nm}$ (unten links) ändert das Fernfeld seine Form, die langen Ausläufer sind verschwunden. Nehmen wir als Übergangsfunktion zwischen Mantel und Leitschicht ein Gauß-Profil an, verschwinden die Oszillationen ganz und wir erhalten einen sehr schnellen Abfall des Fernfeldes.

5.1.5 Ergebnisse

Um zu untersuchen, welchen Einfluss die Realstruktur der Wellenleiter auf das Fernfeld haben könnte, haben wir die scharfen Kanten durch eine Fehlerfunktion ausgeschmiert, um Herstellungs- und Diffusionsfehler zu modellieren. Die Fehlerfunktion ist durch ihre Standardabweichung σ charakterisiert. Wir haben folgenden Parametersatz untersucht:

Breite b	Fehler σ
5 ... 45 nm	0.1 ... 0.5 nm

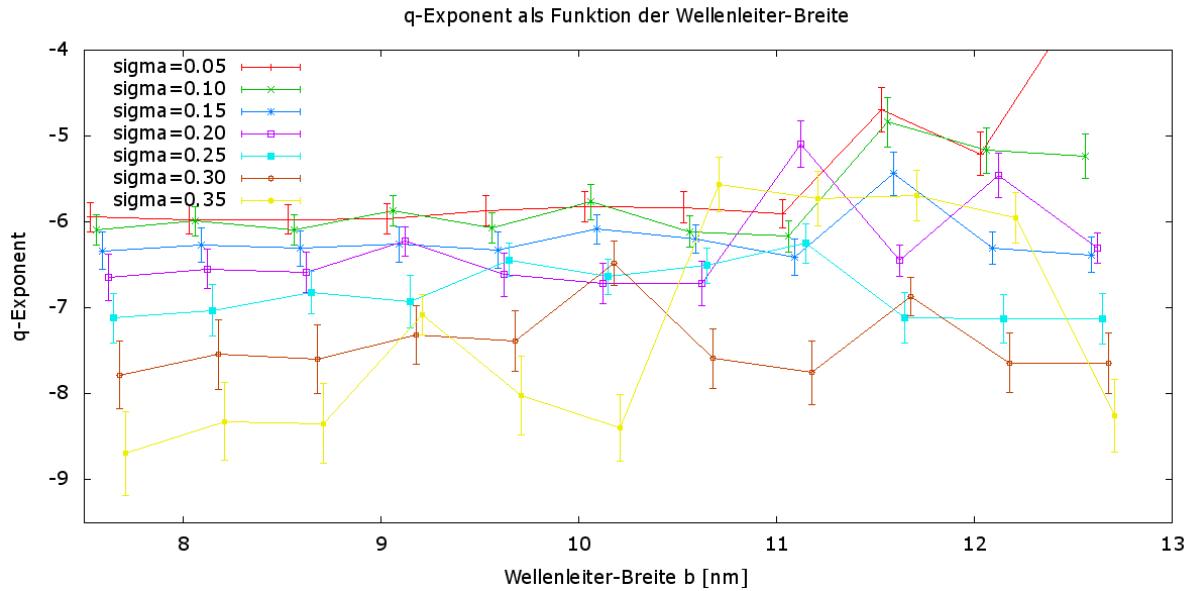


Abbildung 5.4: Der q -Exponent als Funktion der Wellenleiterbreite für verschiedene stark ausgeschmierte Profile. Wir bemerken deutliche Ausreißer unter den Fouriertransformierten Daten; daher haben wir das Vertrauensintervall der Integration verkleinert, also ein schmales Intervall transformiert. Dies brachte bessere Ergebnisse, siehe Abbildung 5.6. Die Werte sind entlang der b -Achse leicht verschoben.

Eine Auswahl der simulierten Daten ist in Abbildung 5.4 zusammengefasst. Die Abbildung 5.5 zeigt die σ -Abhängigkeit des q -Exponenten bei einer festen Wellenleiter-Breite von $b = 9.1$ nm.

Abbildung 5.5 zeigt schön, dass bei zunehmender Ausschmierung das Fernfeld des Wellenleiters schneller abfällt, als es die ideale q^{-6} -Theorie voraussagt. Schon bei kleinen Fehlern in der Größenordnung $\sigma \approx 0.2$ nm bei einer Wellenleiterbreite von $b = 9.1$ nm fällt der Exponent auf unter -6.5 . In Abbildung 5.4 sehen wir, dass die simulierten Daten stark schwanken: Dies sollte kein physikalisches Phänomen sein, sondern weist auf numerische Probleme hin. Wir haben das Vertrauensintervall der Numerov-Integration verkleinert, also das Intervall für die Fourier-Transformation eingeschränkt.

Das Ergebnis zeigt Abbildung 5.6: Die Ausreißer sind verschwunden, wir erhalten Konstanten. Die Aussage ist: Schon kleine Änderungen am Parameter σ haben einen großen Einfluss auf das Fernfeld; allerdings nicht in der gewünschten Weise: Wir sehen eine Verschlechterung durch den tendenziell sinkenden q -Exponenten.

In Abbildung 5.7 haben wir das Fernfeld für verschiedene $\sigma \in \{0.1 \text{ nm} \dots 3.0 \text{ nm}\}$ berechnet. Wir erkennen neben dem schnelleren Abfall auch, dass die Oszillationen „aufgefressen“

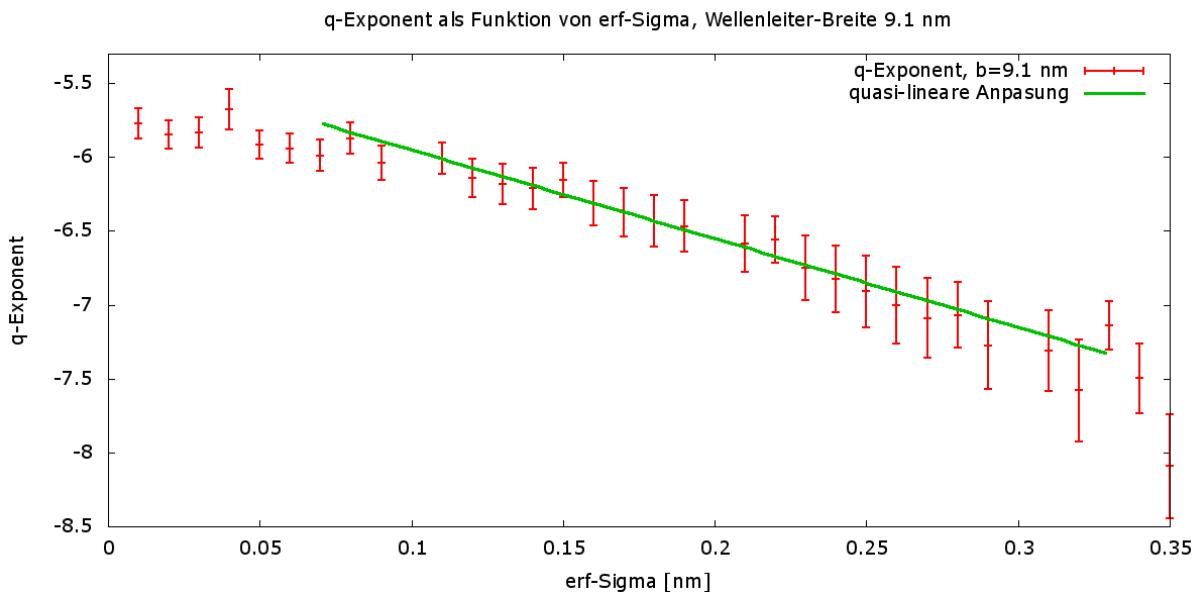


Abbildung 5.5: Der q -Exponent als Funktion des Parameters σ im mit Fehlerfunktionen ausgeschmierten Profil bei einer Wellenleiter-Dicke von $b = 9.1$ nm.

werden, übrig bleibt nur eine Art „Tannenbaum“-Struktur. Die (geschätzte) Anzahl der Oszillationen als Funktion von σ haben wir in Abbildung 5.8 aufgetragen.

5.1.6 Quintessenz

Unsere Programme *numerov* und *fft* erlauben es, aus der Elektronendichteverteilung im Wellenleiter das theoretische Fernfeld zu bestimmen. Leider haben wir noch kein Profil gefunden, welches das experimentell beobachtete Fernfeld erklären kann. Die Versuche mit ausgeschmierten Übergängen zwischen den Materialien ergeben einen noch schnelleren Abfall als q^{-6} (idealer Wellenleiter). Bei sehr großen $\sigma \gtrsim 2$ nm verschwinden langsam die Oszillationen.

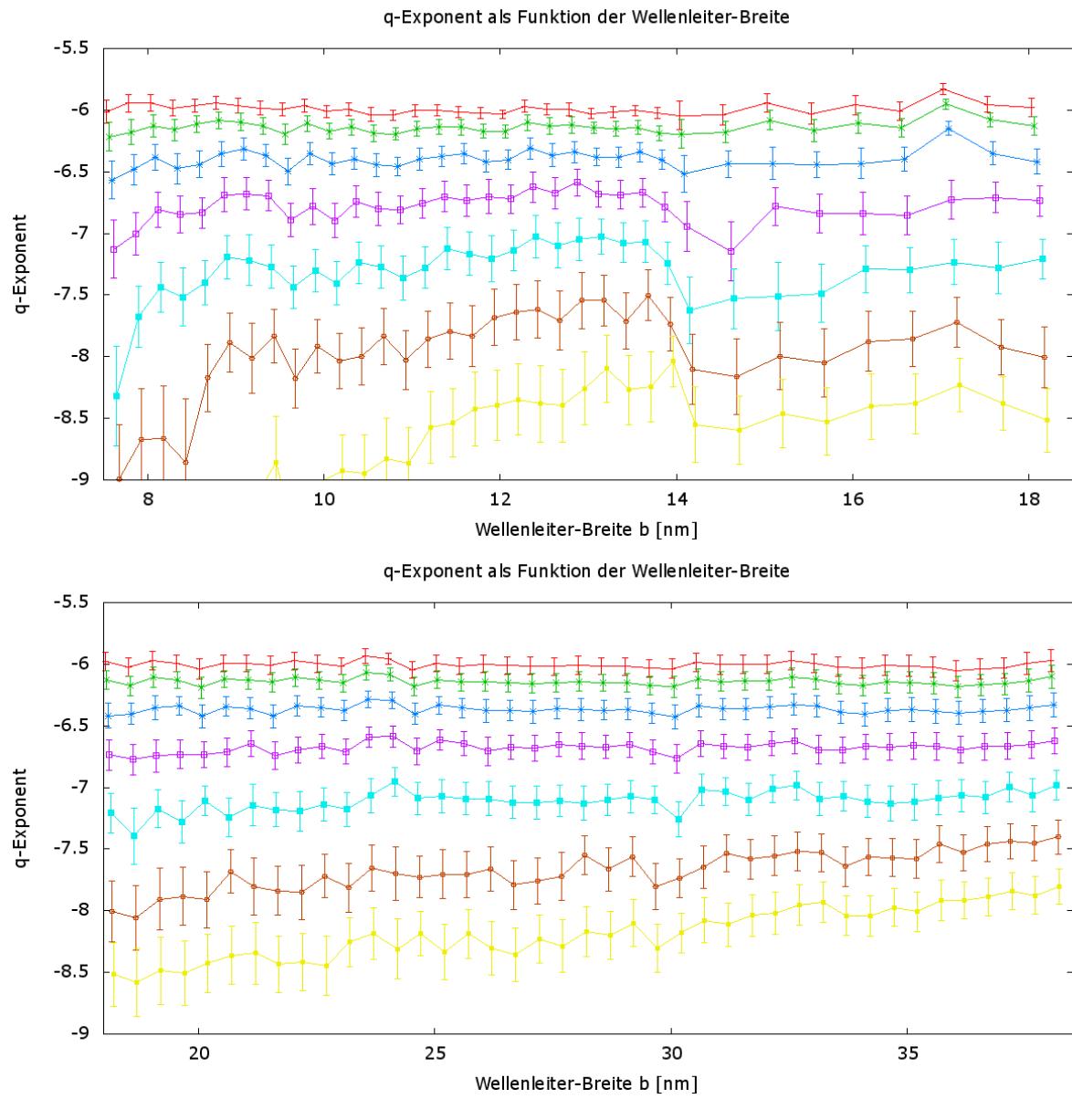


Abbildung 5.6: Wir haben Abbildung 5.4 noch einmal mit einem kleineren Vertrauensintervall für die Fourier-Transformation berechnet; die Ausreißer waren numerische Effekte und sind nun verschwunden, die Kurven über einen weiten Bereich von Wellenleitern-Größen fast konstant.

$\sigma = 0.05$	—
$\sigma = 0.10$	—
$\sigma = 0.15$	—
$\sigma = 0.20$	—
$\sigma = 0.25$	—
$\sigma = 0.30$	—
$\sigma = 0.35$	—

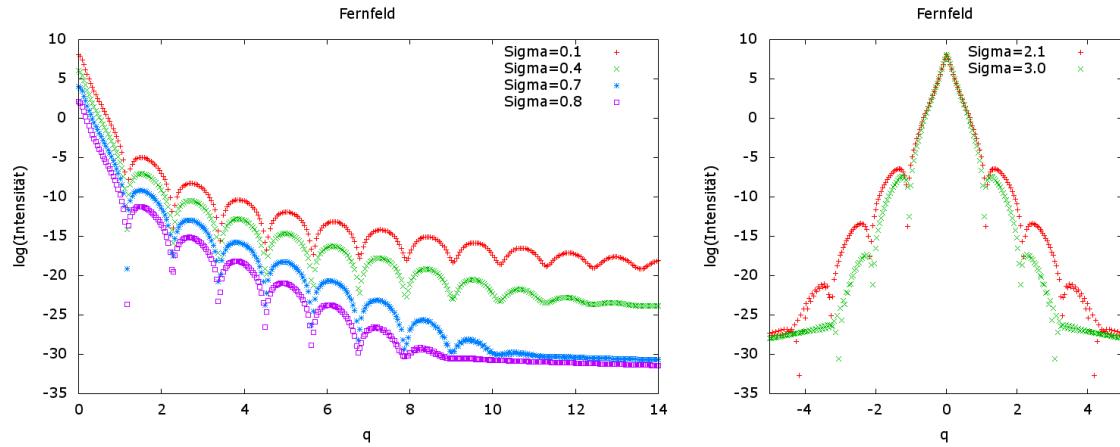


Abbildung 5.7: Die Fernfelder für Wellenleiter mit Fehlerfunktion-Profilen: Bei kleinen Parametern $\sigma \lesssim 1 \text{ nm}$ nimmt die Anzahl der Oszillationen ab; bei größeren Parametern $\sigma \gtrsim 2 \text{ nm}$ bleibt nur noch eine Art „Tannenbaum“ übrig. Die Kurven sind vertikal verschoben.

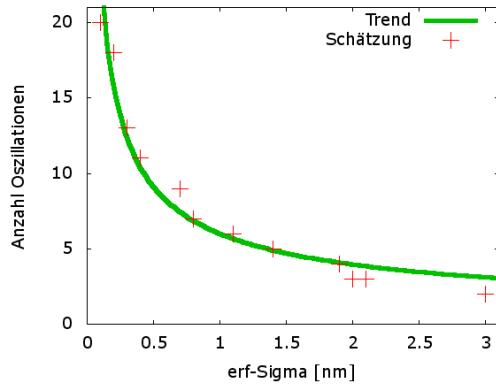


Abbildung 5.8: Die (geschätzte) Anzahl der Oszillationen im Fernfeld als Funktion des Ausschmierparameters σ zeigt, dass das experimentelle Fehlen der Oszillationen durch mit Fehlerfunktionen modellierte Realstruktureffekte erklärt werden könnte; nur fällt dabei die Intensität des Fernfeldes noch schneller ab als q^{-6} (siehe Abbildung 5.5), was experimentell nicht bestätigt wird.

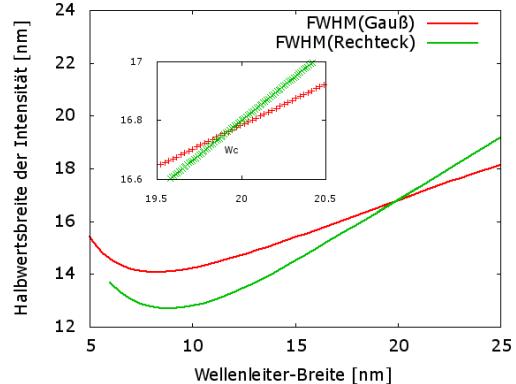


Abbildung 5.9: Die Halbwertsbreiten der Intensität in Silizium-Wellenleitern mit Rechteck- und Gauß-Profil als Funktion der Wellenleiter-Breite. Die schmalste Mode von 12.7 nm wird im idealen Wellenleiter mit einer Breite von 8.86 nm erreicht. Bei Wellenleitern größer als die kritische Breite ($W_c = 19.96 \text{ nm}$) ist der scharfe Übergang nicht mehr optimal.

5.2 Halbwertsbreite der Intensität

In Abschnitt 3.2.5 haben wir zum Testen des Numerov-Algorithmus bereits die Halbwertsbreiten² der berechneten Intensitäten mit den analytischen Lösungen verglichen. In diesem Abschnitt wollen wir nun wieder Realstruktureffekte durch ausgeschmierte Übergänge modellieren und den Einfluss auf die Halbwertsbreite betrachten.

5.2.1 Simulationsprogramme

Auch hier wurde wieder das Programm *numerov* zur numerischen Lösung der Helmholtz-Gleichung für verschiedene Elektronendichtheprofile verwendet. Zusätzlich wurde ein Modul implementiert, welches (nach der Normierung der Intensität auf $I(0) = 1$) von beiden Seiten aus $I(x_{\pm}) = 0.5$ sucht. Dabei wurde darauf geachtet, dass eventuelle divergierende Schwänze der Lösung nicht berücksichtigt werden.

5.2.2 Rechteck und Gauß im Vergleich

In Abbildung 5.9 haben wir die Halbwertsbreiten der Mode für ein Rechteck- und ein Gauß-Profil der Elektronendichtheverteilung für einen größeren Bereich gezeichnet. Dabei können wir zwar das Bergemann-Limit [25] bestätigen: Die minimale Mode wird mit dem Rechteck-Profil bei $b = 8.859$ nm (für einen Silizium-Wellenleiter) erreicht und hat eine Halbwertsbreite von 12.792 nm; für Wellenleiter größer als die kritische Breite $b \geq W_c = 19.96$ nm bemerken wir jedoch, dass das Gauß-Profil eine schmalere Mode erzeugt.

5.2.3 Fehler- und andere Funktionen

Die Halbwertsbreite der Intensität haben wir auch für zahlreiche andere Funktionen (Fehlerfunktionen mit variabler Standardabweichung σ , Parabel, Cosinus, Lorentz) berechnet. Abbildung 5.10 zeigt eine Übersicht. Gezeigt ist auf der Ordinaten die Halbwertsbreite der Mode als Funktion der Halbwertsbreite des Wellenleiters (Abszisse). Die roten Punkte geben jeweils das Minimum an. Man erkennt, wie sich die Fehlerfunktionen mit steigender Standardabweichung (hier von 0.1 nm $\leq \sigma \leq 4.5$ nm) an das Rechteck-Profil (ideale scharfe Kanten) anschmiegen; das Gauß-Profil hat ein relativ hohes Minimum bei kleiner Wellenleiterbreite. Als Ausreißer sei das Lorentz-Profil genannt: Dieses wird durch seine

²englisch: *FWHM = full width at half maximum*

Halbwertsbreite nur schlecht beschrieben, durch die großen Ausläufer bietet es insgesamt zu wenig Kontrast in der Elektronendichte.

Um die Auswirkung der Verschmierung, modelliert durch Fehlerfunktionen, zu analysieren, haben wir in Abbildung 5.11 einen Schnitt durch Abbildung 5.10 gezeichnet. Die roten Kreuze zeigen die Breite der Mode als Abhängigkeit des Parameters σ , jeweils für die Wellenleiterbreite ausgewertet, an der die Mode minimal breit wird. Eben diese Wellenleiterbreite ist in grün eingezzeichnet. Man erkennt, dass eine Standardabweichung von zwei Nanometern (dies entspricht bei den Wellenleiterbreiten von neun bis zehn Nanometern schon durchaus großen Rauigkeiten) nur einen schwachen Einfluss auf die Mode hat, sie wird im berechneten Intervall nur fünfzehn Prozent breiter.

5.2.4 Quintessenz

Die Halbwertsbreite der Mode im Wellenleiter lässt sich unmittelbar gewinnen; wir können das Bergemann-Limit bestätigen, stellen aber auch fest: Bei mehrmodalen Wellenleitern (größer als die kritische Breite, $b > W_c$) ist das Rechteck-Profil nicht mehr ideal.

5.3 Verluste im Wellenleiter-Mantel

Neben der Breite der Mode interessiert uns auch, wieviel Intensität im Mantel des Wellenleiters propagiert. Denn hier haben wir große Verluste aufgrund der Absorption b im komplexen Brechungsindex $n = 1 - \delta - ib$. Daher analysieren wir den Einfluss des Profils auf den Absorptionskoeffizienten

$$\int dx \psi(x) b(x) \propto \int dx \psi(x) \rho(x) =: A, \quad (5.2)$$

wobei wir (wieder fern der Absorptionskanten) $b \propto \rho$ annehmen. Solange wir nur ein Mantel-Material und Vakuum (bzw. Luft) für die Leitschicht verwenden, ist diese Proportionalität gerechtfertigt. Bei Mehrschicht-Wellenleitern muss man eventuell unterschiedliche Proportionalitäten zwischen δ und b berücksichtigen. Dies gilt natürlich vor allem dann, wenn die verwendete Photonenenergie gerade in der Nähe einer Kante eines Materials liegt. Den verwendeten Algorithmus entsprechend umzuprogrammieren ist nicht sehr aufwändig.

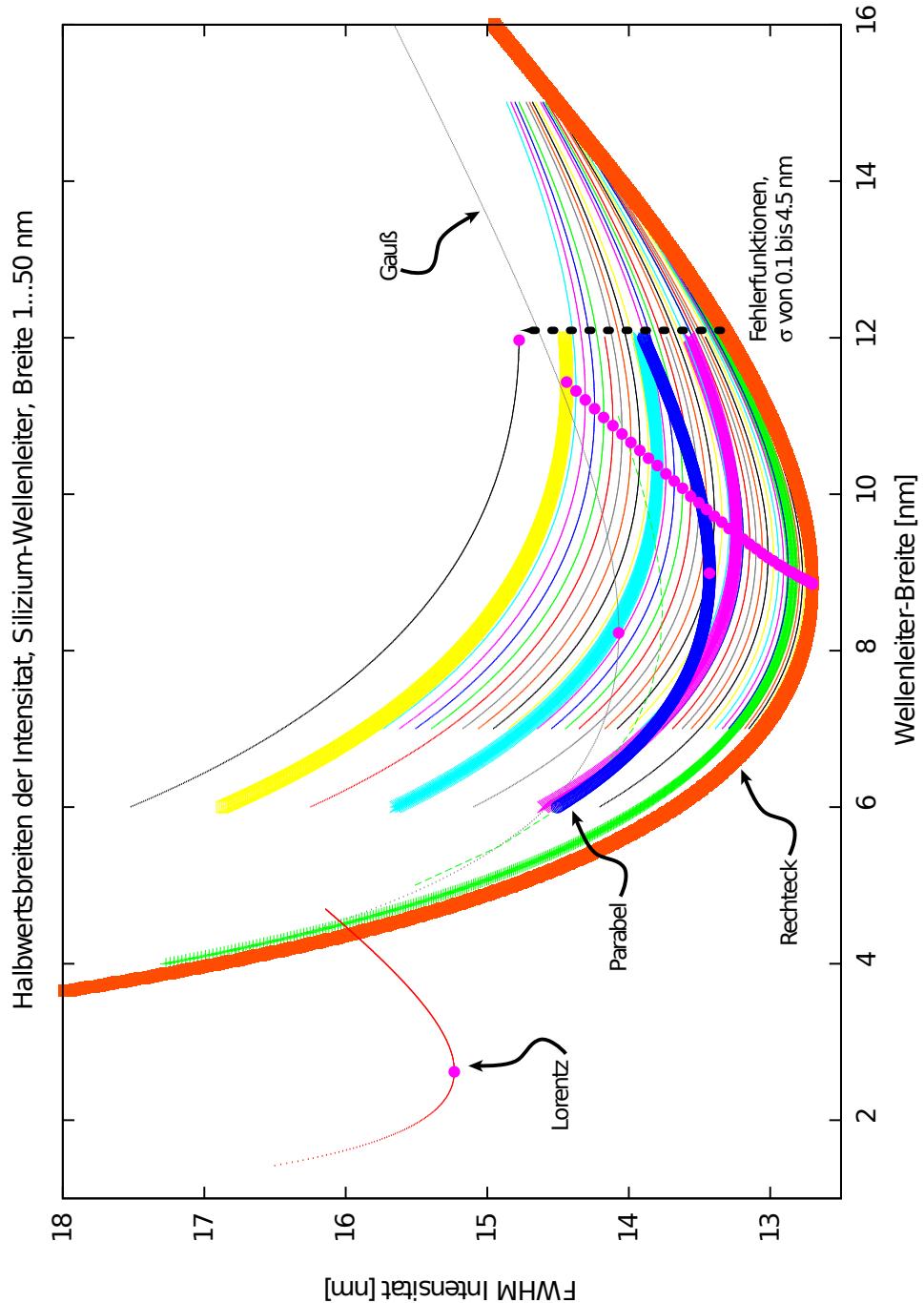


Abbildung 5.10: Aufgetragen sind die Halbwertsbreiten der Intensität in Vakuum-Silizium-Wellenleitern als Funktion der Leitschicht-Dicke. Die verschiedenen Kurven stehen für unterschiedliche Modelle der Elektronendichtheverteilung. Die rote Kurve ist mit einem Rechteck-Profil berechnet, daran schmiegen sich die mit Fehlerfunktionen ausgeschmierten Kurven in Pfeilrichtung an. Weitere Modelle sind Lorentz-, Gauß-, Kosinus- und Parabel-Profil. Die Kreise geben an, bei welcher Wellenleiterbreite die Mode schmal wird.

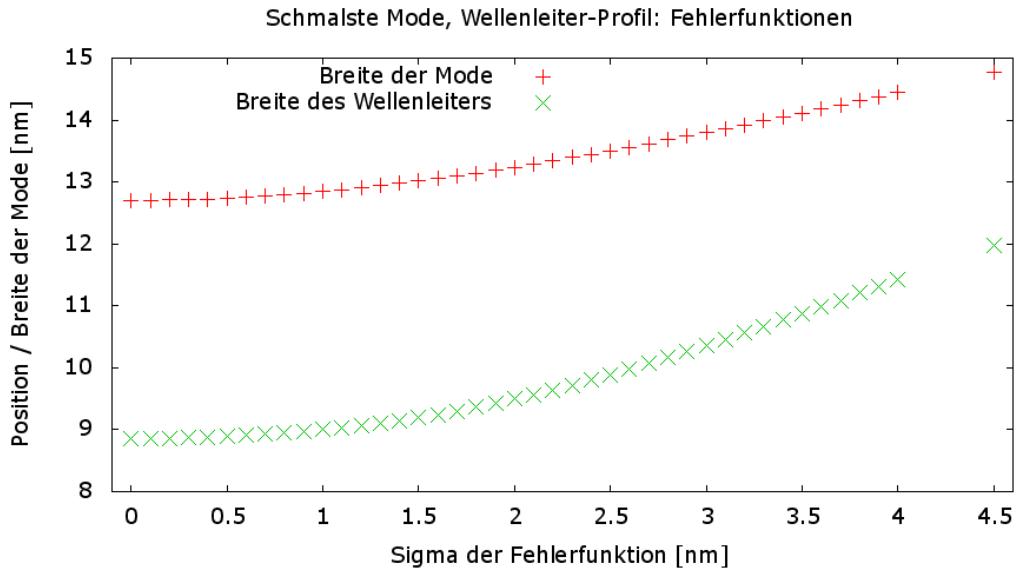


Abbildung 5.11: Die Breite der Mode (rote Kurve) als Funktion des Parameters σ mit dem Modell einer Fehlerfunktion als stetigem Übergang der Elektronendichte. Die grüne Kurve gibt an, wie breit der Wellenleiter (FWHM) sein muss, um die minimale Mode zu erreichen. Für die Simulation wurden die numerischen Werte eines Vakuum-Silizium-Wellenleiters eingesetzt.

5.3.1 Simulationsprogramme

Das Programm *numerov* berechnet nach der Integration den Absorptionskoeffizienten gemäß (5.2); das Programm *Modensucher* berechnet das Integral analytisch. Um *numerov* auf modernen Rechnern mit mehreren CPU-Kernen parallel zu starten, haben wir das Start-Skript *nmal.sh* verwendet. Dieses benötigt für N parallele Rechnungen N Unterordner mit dem jeweiligen Quellcode der angepassten *numerov*-Programme; diese werden einzeln kompiliert und im Hintergrund gestartet. Das Skript wartet, bis alle N Prozesse beendet sind und sendet eine E-Mail. Die Ausgaben werden in verschiedene Log-Dateien geschrieben, welche dann von Hand auf sinnvolle Werte überprüft und zusammengefügt werden.

Das hier vorgestellte Verfahren ist keine Parallelisierung im eigentlichen Sinn, sondern als sequenzielles „Job Farming“ nur das triviale Aufteilen von unabhängigen Berechnungen auf mehrere Prozesse.

5.3.2 Idealer Wellenleiter

Zunächst betrachten wir Rechteck-Profile mit variabler Leitschicht-Dicke. In Abbildung 5.12 ist der Absorptionskoeffizient $A[\text{Rechteck}(b)]$ (siehe (5.2)) als Funktion der Leitschicht-Dicke b gezeichnet. Wie man sieht, gibt es zwischen analytischer und numerischer Lösung nur geringe Abweichungen. Man erkennt, dass bei der kritischen Breite $b = W_c = 19.96 \text{ nm}$ (Silizium) gerade 15.6 % der Energie im Mantel stecken.

5.3.3 Modell: Fehlerfunktion

Nun schauen wir uns die Veränderung von A an, wenn wir das Rechteck-Profil durch eine Fehlerfunktion ausschmieren. Dazu haben wir in Abbildung 5.13 den Absorptionskoeffizienten nach Gleichung (5.2) berechnet und für $\rho(x)$ wieder zwei Fehlerfunktionen angesetzt; der Parameter σ wurde von 0.1 nm bis 4.5 nm variiert; die blaue Kurve ist mit einem Gauß-Profil berechnet worden. Die grünen Kreise geben die Wellenleiter-Breiten b an, für welche die Halbwertsbreite der resultierenden Mode minimal wird.

Der Abbildung 5.13 entnehmen wir, dass es nur eine schwache Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von der Rauigkeit σ gibt. Für $\sigma \lesssim 1 \text{ nm}$ steigt A ein wenig an und fällt anschließend wieder ab. Das Gauß-Profil (blaue Kurve) liefert eine deutlich (etwa 20 Prozent) höhere Absorption.

Diese Berechnung berücksichtigt allerdings nicht den Einfluss der Oberflächenrauigkeit auf diffuse Reflexe; diese stören die Totalreflexion an den Grenzflächen und führen wahrscheinlich zu einer geringeren Transmission. Eine genauere Rechnung ist mit den hier dargestellten Programmen leider nicht möglich.

5.3.4 Quintessenz

Der Parameter σ in der Fehlerfunktion hat nur einen geringen Einfluss auf den Absorptionskoeffizienten. Bei der kritischen Breite, $b = W_c$, sind 15.6 Prozent der Intensität im Mantel.

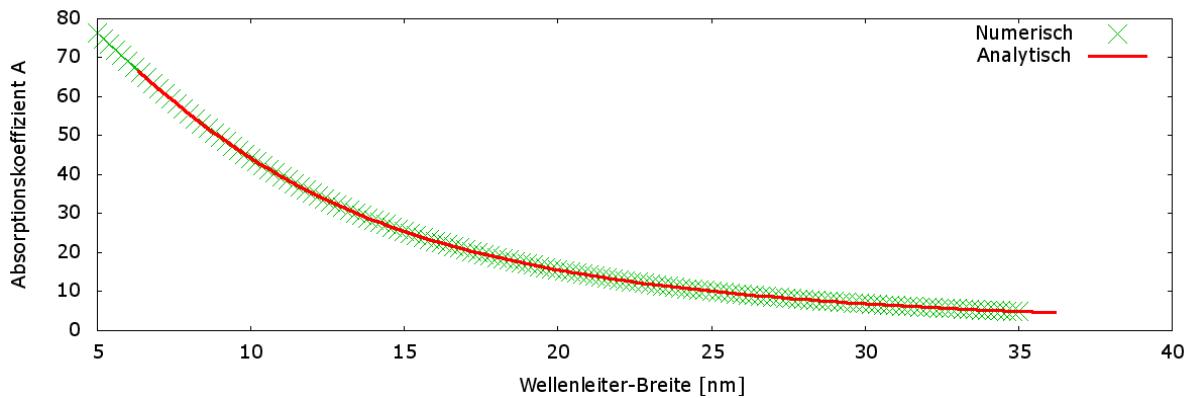


Abbildung 5.12: Der Absorptionskoeffizient des idealen Wellenleiters als Funktion der Wellenleiterbreite. Die rote Kurve ist die analytische Lösung, in grün sind numerische Ergebnisse eingezeichnet.

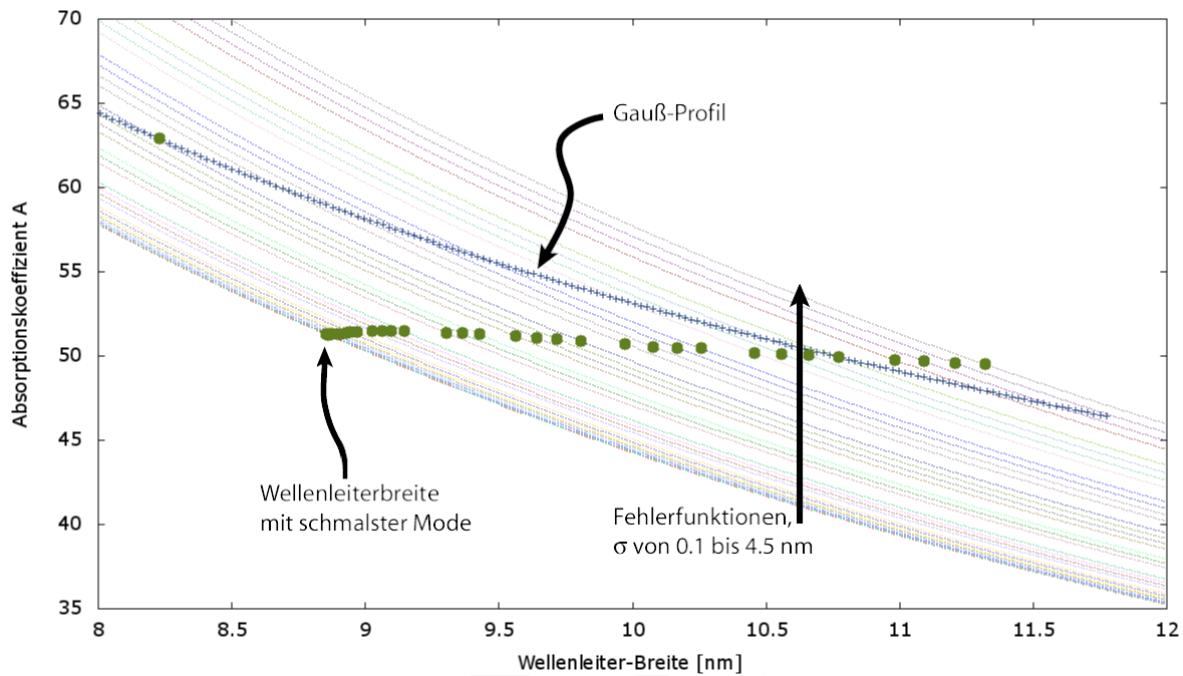


Abbildung 5.13: Der Absorptionskoeffizient als Funktion der Wellenleiterbreite (Vakuum-Silizium-Wellenleiter): Der Übergang der Elektronendichte zwischen Mantel und Leitschicht wurde durch Fehlerfunktionen modelliert; deren Parameter σ steigt in Pfeilrichtung von $\sigma = 0.1 \text{ nm}$ an auf $\sigma = 4.0 \text{ nm}$. Die Blaue Kurve ist mit einem gaußförmigen Modell simuliert worden. Die grünen Punkte geben die Wellenleiter-Breite (FWHM) an, bei welcher die Mode ihre minimale Breite (FWHM) annimmt. Man erkennt einen nur schwachen Einfluss des Parameters σ auf den in Gleichung (5.2) definierten Absorptionskoeffizienten A .

5.4 Propagation und Realstruktureffekte

Bislang haben wir das Feld in einem Querschnitt durch den Wellenleiter als Lösung der eindimensionalen Helmholtzgleichung (3.3) betrachtet; in diesem Abschnitt wollen wir die Propagation entlang des Wellenleiterkanals mitberücksichtigen. Dabei werden wir auch überprüfen können, wie gut Realstruktureffekte wie Welligkeiten und Rauigkeiten durch ein verschmiertes Profil modelliert werden können.

5.4.1 Simulationsprogramme

Um die Propagation des elektromagnetischen Feldes durch den Wellenleiter zu berechnen, muss die dreidimensionale Helmholtzgleichung (2.19) gelöst werden. Aufgrund der sehr kleinen Wellenlänge (Größenordnung: Ångström) wäre dazu ein extrem feines Gitter in Propagationsrichtung nötig; bei einem 1 mm langen Wellenleiter müssten allein in Ausbreitungsrichtung einige 10^9 Gitterpunkte berücksichtigt werden.

Damit dieses Problem überhaupt numerisch angegangen werden kann, entwickelte Christian Fuhse das Programm *PWG*, welches die parabolische Wellengleichung, eine Näherung der Helmholtz-Gleichung, löst. Diese Approximation ist gut, wenn Propagations- und Rechenrichtung parallel verlaufen und sich der Brechungsindex nur schwach ändert, was ja im Röntgen-Regime der Fall ist. Das Feld wird vom Wellenleiter-Eingang zum -Ausgang berechnet; aus der Feldverteilung am Ausgang lässt sich dann wieder mittels FFT das Fernfeld (genauer: dessen Intensität) bestimmen.

Das unter der Umgebung IDL³ entwickelte *PWG* ist für planare Wellenleiter mit scharfen Kanten programmiert worden; im Rahmen dieser Arbeit haben wir die Funktion, welche den Brechungsindex als Rechteckfunktion ausgibt, zunächst durch zwei Fehlerfunktionen und später durch eine stochastische Funktion ersetzt.

5.4.2 Stochastische Funktion

Die Stochastische Funktion ersetzt den geraden Wellenleiterkanal durch eine zufällige „Schlangenlinie“. Wir haben für den 1 mm langen und 15 nm breiten Vakuum-Silizium-Wellenleiter an 20 Stützstellen (also in einem Abstand von $50 \mu\text{m}$) den Kanal um einen zufälligen Wert im Intervall $\pm 2.5 \text{ nm}$ senkrecht zur Propagationsrichtung verschoben. Dies zeigt Abbildung 5.14; in 5.4.3 ist die von *PWG* berechnete Intensität in diesem Wellenleiter zu sehen.

³IDL ist eine registrierte Marke von *ITT Visual Information Solutions*.

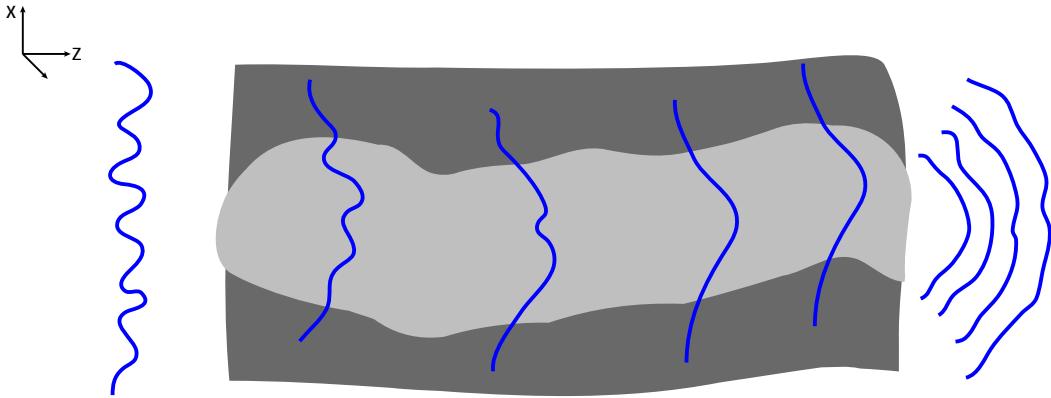


Abbildung 5.14: Der Verlauf des Wellenleiterkanals wurde stochastisch verformt (schematische Zeichnung).

5.4.3 Ergebnisse

Zunächst haben wir das Programm *PWG* um stetige Übergänge der Brechungsindexfunktion *à la* Fehlerfunktion erweitert; die Abbildung 5.16 zeigt die Fernfelder berechnet mit *PWG* und *numerov* für ein Fehlerfunktionsprofil mit der Parameterwahl $\sigma = 1.5 \text{ nm}$. Bei der Simulation mittels *PWG* fielen starke Oszillationen im Fernfeld auf; wir vermuten, dass diese aus numerischen Fehlern stammen. Wir haben das Fernfeld geglättet, indem wir für jeden Punkt eine Mittelung über sechs Nachbarpunkte eingesetzt haben.

In einem zweiten Schritt haben wir dann den stochastischen Verlauf des Wellenleiterkanals simuliert. Die stochastische Funktion, welche den Brechungsindex angibt, ist in Anhang B.6 zu finden. Das Ergebnis der Berechnung zeigt die Abbildung 5.17: Im Wesentlichen verläuft die Kurve ähnlich zum analytisch berechneten Fernfeld mit scharfen und geraden Kanten; die Oszillationen bleiben bestehen, aber die Einhüllende lässt sich gut mit einer q^{-4} -Kurve beschreiben. Für $q \lesssim 2 \text{ nm}^{-1}$ ist das Fernfeld des stochastisch verformten Wellenleiters schwächer, für $q \gtrsim 3 \text{ nm}^{-1}$ ist es intensiver als das der analytischen Lösung. Auch in diesem Fall haben wir das *PWG*-Fernfeld wieder geglättet.

Wir bemerken einen deutlichen Unterschied zwischen der Simulation in Abbildung 5.17 und der in Abbildung 5.16; die Näherung der Welligkeit unseres Wellenleiterkanals lässt sich anscheinend nicht gut mit ausgeschmierten Übergängen modellieren.

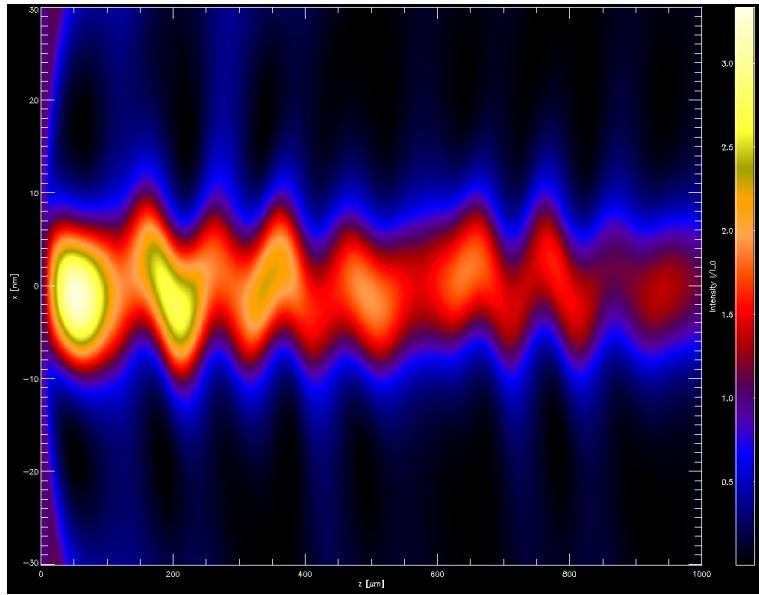


Abbildung 5.15: Das angepasste Programm *PWG* berechnet die Verteilung des propagierenden Feldes.

5.4.4 Quintessenz

Unsere Annahme, dass wir das Feld am Ende des (geraden) Wellenleiters ohne Propagation bestimmen können, ist gerechtfertigt: *numerov* und *PWG* berechnen für den verschmierten Brechungsin- dex identische Fernfelder. Welligkeiten auf einer großen Skala (die Wellenlänge der stochastischen Funktion beträgt hier $50 \mu\text{m}$) lässt sich jedoch nicht hinreichend gut durch Fehlerfunktionen modellieren. Die propagierte Lösung und die eindimensionale Betrachtung ergeben signifikant unterschiedliche Fernfelder.

Daher empfehlen wir diese Methode für zukünftige Analysen.

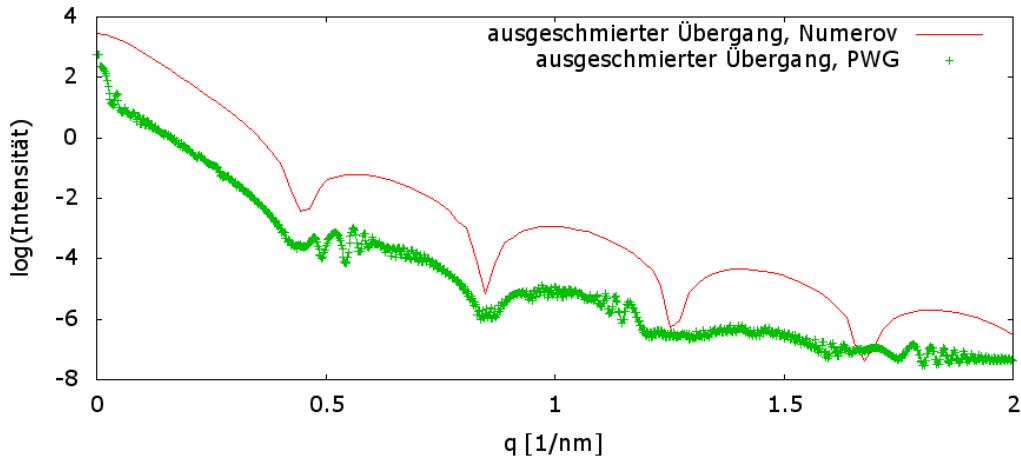


Abbildung 5.16: Die Fernfelder eines mit Fehlerfunktionen ausgeschmierten Brechungsindex, berechnet mit *numerov* (rote Kurve) und mit *PWG* unter Berücksichtigung der Propagation (grüne Kurve) stimmen in ihrem Verlauf ungefähr überein. Zur Übersichtlichkeit wurden die Kurven vertikal verschoben.

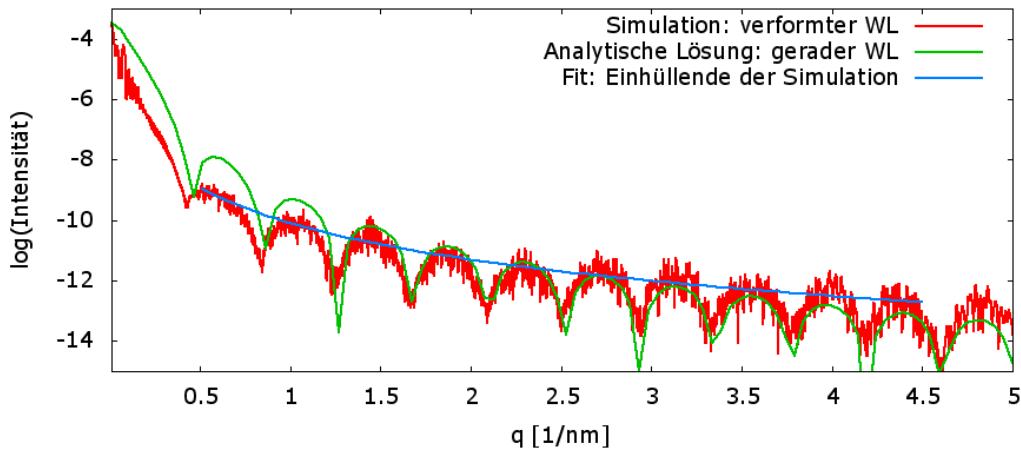


Abbildung 5.17: Das simulierte Fernfeld eines stochastisch verformten Wellenleiters (rote Kurve) verglichen mit der analytischen Lösung eines geraden Wellenleiters (grüne Kurve). Der Vakuum-Silizium-Wellenleiter hat eine Breite von 15 nm, eine Länge von 1 mm und sein Verlauf schwankt um ± 2.5 nm. Man erkennt eine grobe Übereinstimmung der beiden Kurven; jedoch beobachten wir beim stochastisch verformten Wellenleiter eine Einhüllende der Gestalt q^{-4} , während sich der gerade Wellenleiter wie q^{-6} verhält.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war es, Realstruktureffekte in Röntgen-Wellenleitern numerisch zu modellieren und ihre Auswirkungen zu beschreiben. Mit dem Programm *numerov* wurde dabei ein Algorithmus entwickelt, welcher zu einem gegebenen Elektronendichteprofil die Feldverteilung in Wellenleitern berechnet; mit einer anschließenden Fourier-Transformation lässt sich dann das Fernfeld gewinnen.

Die numerischen Methoden bestätigen die analytischen Voraussagen für das Nah- und Fernfeld; in diesem Zusammenhang haben wir die Ungenauigkeiten der numerischen Methodik abgeschätzt und bei der weiteren Analyse das Datenintervall entsprechend eingeschränkt. Die Auswirkungen durch Realstruktureffekte haben wir mit Fehlerfunktionen und weiteren funktionalen Verläufen wie Gauß, Cosinus, Lorentz und Parabel modelliert, welche die scharfen Grenzflächen ausschmieren. Dabei haben wir folgende Einflüsse festgestellt:

Die ausgeschmierten und stetigen Elektronendichteprofile bewirken eine Verbreiterung der Intensität im Nahfeld und eine Verjüngung im Fernfeld, welches schneller als q^{-6} (scharfes Profil) abfällt; die Oszillationen im Fernfeld verschwinden für größere Ausschmierparameter; auf die Absorption hat die Ausschmierung einen geringen Einfluss.

Wir können mit den verwendeten Elektronendichteprofilen keine Erklärung des experimentell gefundenen Fernfeldes (siehe Kapitel 4) geben; in Abschnitt 5.4 haben wir das Modell der Elektronendichteprofile mit der Propagation durch einen stochastisch verformten Wellenleiter verglichen. Dabei kommen wir zu dem Schluss, dass sich die Realstruktureffekte nur unzureichend über stetige Übergänge der Brechungsindizes modellieren lassen. Statt dessen muss die Propagation entlang der rauen und welligen Grenzflächen studiert werden. Dies sollte der Ausgangspunkt für künftige Arbeiten an diesem Thema sein.

In Anhang A ist eine alternative Methode zur numerischen Berechnung der Feldverteilung skizziert: Diese ähnelt dem Parratt-Algorithmus der Röntgenreflektometrie und löst die Anschlussbedingungen der analytischen Lösungen auf stückweise konstanten Elektronendichten. Hinsichtlich der Stabilität konnten wir jedoch keine Verbesserung bemerken.

Anhang A

Numerov-Verfahren

A.1 Numerische Lösung der Differentialgleichung

Wir möchten Differential-Gleichungen vom Typ

$$f''(x) + q(x)f(x) = 0 \quad (\text{A.1})$$

auf einem äquidistanten Gitter $|x_i - x_{i\pm 1}| = h$ lösen; abkürzend schreiben wir $f(x_i) = f$ und $f(x_{i\pm 1}) = f_{\pm}$.

Im ersten Schritt schreiben wir die Taylor-Entwicklungen von $f(x \pm h)$:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2/2f''(x) + h^3/6f^{(3)}(x) + h^4/24f^{(4)}(x) + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{A.2})$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + h^2/2f''(x) - h^3/6f^{(3)}(x) + h^4/24f^{(4)}(x) + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{A.3})$$

Addieren wir beide Gleichungen, heben sich die ungeraden Potenzen in h gerade heraus:

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2f''(x) + h^4/12f^{(4)}(x) + \mathcal{O}(h^6), \quad (\text{A.4})$$

$$f'' = \frac{f_+ + f_- - 2f}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^{(4)} + \mathcal{O}(h^6). \quad (\text{A.5})$$

Nun wenden wir den Operator $\left(1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dx^2}\right)$ auf (A.1) an:

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dx^2}\right) (f''(x) + q(x)f(x)) = f'' + \frac{h^2}{12}f^{(4)} + qf + \frac{h^2}{12}(qf)'' \quad (\text{A.6})$$

$$= 0 \quad (\text{A.7})$$

Setzen wir dies nun in (A.5) ein, eliminieren wir den Term $\propto f^{(4)}(x)$:

$$\frac{f_+ + f_- - 2f}{h^2} + qf + \frac{h^2}{12}(qf)'' + \mathcal{O}(h^6) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Die zweite Ableitung einer Funktion $g(x)$ nähern wir folgendermaßen als finite Differenz:

$$\frac{d^2}{dx^2}g(x) \approx \frac{g(x+h) + g(x-h) - 2g(x)}{h^2}; \quad (\text{A.9})$$

dies liefert uns schließlich:

$$(q(x)f(x))'' \approx \frac{q_+f_+ + q_-f_- - 2qf}{h^2} \quad (A.10)$$

$$\Rightarrow \frac{f_+ + f_- - 2f}{h^2} + qf + \frac{q_+f_+ + q_-f_- - 2qf}{h^2} \approx 0 \quad (A.11)$$

$$\Rightarrow f_+ = \frac{\left(2f\left(1 - \frac{5h^2q}{12}\right) - f_-\left(1 + \frac{h^2q_-}{12}\right)\right)}{1 + \frac{h^2q_+}{12}}. \quad (A.12)$$

Für unsere Gleichung $\left(\frac{d^2}{dx^2} - 4\pi r_0 \rho_{\text{el}}\right)\psi(x) = M\psi(x)$ ist

$$q(x) = -4\pi r_0 \rho_{\text{el}}(x) - M. \quad (A.13)$$

A.2 Anmerkungen

Das Numerov-Verfahren liefert eine sehr genaue Abschätzung der Mode, respektive des Energieniveaus in der Quantenmechanik. Es wird häufig in der Theoretischen Chemie eingesetzt, um die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung zu lösen. Bei unseren Problemen ist aufgefallen, dass zwar die Mode sehr gut getroffen wird und auch die Feldverteilung in einem schmalen Bereich recht genau berechnet werden kann; bei größeren x -Werten (typischerweise etwa $x \gg 10$ in den hier gewählten Einheiten) liefert die numerische Berechnung aber divergierende Lösungen. Eine Verkleinerung der Schrittweite (hier: $h = 10^{-5}$) bringt keine Verbesserung.

A.3 Alternativen

In den letzten Jahren gab es in der Theoretischen Chemie einige Verbesserungsansätze zur Numerov-Integration. Eine Alternative, die wir hier vorschlagen möchten, ist ähnlich zum Parratt-Verfahren [38] in der Röntgenreflektometrie:

Wir betrachten eine stückweise konstante Funktion $q(x)$. Auf jedem konstanten Gebiet j ist $A_j e^{ik_j x}$ eine Lösung mit geeigneten k_j . Wir können für jeden Sprungpunkt x_j eine transzendente Gleichung aufstellen, um die Anschlussbedingungen zu erfüllen.

Der Koeffizient $A_{j=j_{\max}}$ bestimmt die Normierung (und wird zunächst beliebig gesetzt). Per Iteration über alle Sprungpunkte x_j mit $j = j_{\max} \dots 0$ werden die Anschlussbedingungen gewährleistet und man erhält so eine approximative Lösung. Wir konnten aber hinsichtlich der Stabilität keine Verbesserung gegenüber der Numerov-Methode feststellen.

Anhang B

Eigene Programme

Nun folgt eine Aufstellung der wichtigsten für diese Diplomarbeit erstellten Programme.

B.1 numerov

Das Programm *numerov* dient zur numerischen Integration der Helmholtzgleichung mittels Numerov-Verfahren.

Standardmäßig arbeitet *numerov* mit einer Wellenleiter-Breite von 20 nm; dies kann den Zeilen 61 und 62 (als Schleife für mehrere Simulationen) überschrieben werden. Die Integrationsroutine à la Numerov findet sich ab Zeile 148: Zunächst wird über das PLOT-Intervall (dieses wird später ausgegeben) integriert, anschließend dann über das Test-Intervalls. Auf den letzten 10 Prozent des Test-Intervalls wird auf Konvergenz getestet.

Der Wellenleiter wird durch die Funktion `double q(double x)` ab Zeile 290 beschrieben: Standardmäßig wird (in Zeile 299) ein ideal rechteckiger Vakuum-Silizium-Wellenleiter simuliert; die Elektronendichte des Mantels wird über Materialdichte, Atomgewicht, Ordnungszahl und Avogadro-Konstante bestimmt und kann für die gewünschten Materialien angepasst werden. In den Zeilen 300 bis 303 sind vier Übergangsfunktionen auskommentiert. Diese sind in einzelnen Funktionen implementiert und berechnen funktionale Verläufe des Brechungsindexes.

Eine Standard-Sitzung von *numerov* zeigt Abbildung 3.5; ein Großteil der Ausgabe wird an die Standardfehlerausgabe geleitet, da er physikalisch uninteressant ist und nur zur Überprüfung der Integration dient. Beim Aufruf mittels

```
./numerov 2>/dev/null
```

wird die Standardfehlerausgabe unter Unix-Betriebssystemen in ein spezielles „Gerät“ umgeleitet, welches alle Eingaben ignoriert.

In der Zeile 136 wird ein Shell-Skript aufgerufen, welches typischerweise Gnuplot-Befehle enthält. In Zeile 121 wird definiert, welcher Befehl mit welchen Parametern gestartet werden soll; hier lassen sich beliebige weitere Analyse-Programme einbinden. Dies ist vor allem dann sinnvoll, wenn in der Schleife in Zeile 62 viele verschiedenen dicke Wellenleiter simuliert werden und automatisch weiter ausgewertet werden sollen.

Als Ausgabe wird eine Datei `data` erstellt, welche zeilenweise die x -Koordinate, die dortige Elektronendichte, das Feld und die Intensität enthält. Diese Daten lassen sich dann mittels `fft` in den Fourier-Raum (Fernfeld) transformieren.

■ Quellcode: `numerov.c`

```

001: /* libraries */
002: #include <stdlib.h>
003: #include <stdio.h>
004: #include <string.h>
005: #include <math.h>
006:
007: /* named constants */
008: #define PI 3.14159265359
009: #ifndef h
010: /* step width */
011: #define h 0.0001
012: #endif
013: #ifndef SIGMA
014: /* sigma for erf */
015: #define SIGMA 0.5
016: #endif
017: #define PLOT 72
018: #define TEST 40
019: #define SAVE 12
020: #define MAX 0.8
021: #define ITERATIONS 40
022:
023: /* function prototypes */
024: int doit();
025: double integral(double*);
026: void fourier(double*, double*);
027: void dft(double*, double*);
028: void fft(double*, double*);
029: int integrate(double, double*);
030: void norm(double, double*);
031: double cladding(double* u);
032: double fwhm(double* u);
033: double zweitesMoment(double* u);
034: double numerov(double,double, double,double,double);
035: double q(double);
036: double q_prl2008(double);
037: double q_erf(double);
038: double q_gauss(double);
039: double q_lorentz(double);
040:
041: /* global variables */
042: double M=2.2;
043: double deltaM=0.7;
044: double width=80;
045:
046: /* classical electron radius */
047: const double re = 2.82e-15 * 1e8;
048: const double fourpiRE = 4*PI*2.82e-15*1e8;
049:
050: int main(int argc, char** argv)
051: {
052:     doit();

```

```

054:
055:     fprintf(stderr, "Ready.\n\n");
056:     return 0;
057: }
058:
059: int doit()
060: {
061:     int i=20*100;
062:     /*for (i=500; i<= 3500; i+=20)*/
063:     {
064:         FILE* file;
065:         double* u, *f;
066:         int N, m, n;
067:         int j;
068:         char* GNUPLOT;
069:         int result = 0;
070:         double myM=M;
071:         double mydeltaM=deltaM;
072:
073:         width = i/100.0;
074:
075:         N = ceil(PLOT/h);
076:         u = (double*) malloc(N*sizeof(double));
077:         f = (double*) malloc(N*sizeof(double));
078:         GNUPLOT = (char*) malloc(800*sizeof(char));
079:
080:
081:         fprintf(stdout, "width %2.2f ", width);
082:         fprintf(stderr, "\titerating...\n");
083:         fprintf(stderr, "Mstart %f\n", myM);
084:         j = 0;
085:
086:         /* Iteration mit Intervallschachtelung */
087:         while ( (result=integrate(myM, u)) != 0) /* Integriere die Gleichung
088:             * und teste auf Konvergenz u->0 für x>>0 */
089:         {
090:             if (result == +1) /* Ungerade Mode: M ist zu groß, verkleinern. */
091:             {
092:                 fprintf(stderr, "\t\tM<%f\n", myM);
093:                 myM = myM - mydeltaM;
094:             }
095:             else /* Gerade Mode: M ist zu klein, vergrößern. */
096:             {
097:                 fprintf(stderr, "\t\tM>%f\n", myM);
098:                 myM = myM + mydeltaM;
099:             }
100:             mydeltaM = 1*mydeltaM/2; /* nested intervals */
101:             if (j++ > ITERATIONS) /* Iteration bricht nach 40 Schritten ab! */
102:             {
103:                 fprintf(stderr, "\t>%d iterations, breaking.\n", ITERATIONS);
104:                 break;
105:             }
106:         }
107:         fprintf(stderr, "\tM %f\n", myM);
108:
109:         fprintf(stderr, "\tnormalising\n");
110:         norm (myM, u); /* normalize: u(0) = 1 */
111:
112:         /* Ausgabe diverser Informationen */
113:         fprintf(stderr, "\t\tfwhm\n");
114:         fprintf(stderr, "fwhm %f ", 10*fwhm(u));
115:         fprintf(stderr, "secMoment %f ", 10*zweitesMoment(u));
116:         fprintf(stderr, "cladding %f\n", cladding(u));
117:         fflush(stdout);
118:         fprintf(stderr, "\tintegral over u(x): %f\n", integral(u));

```

```

119:
120:     /* externer Programmaufruf mit Parameterübergabe */
121:     sprintf(GNUPLOT, "./plot.sh ' fwhm=%2.3f\nm' '%04i' %f", 10*fwhm(u), i, 1.0);
122:
123:     /* Ausgabe von x, rho, u, u^2 in Text-Datei */
124:     file = fopen("data", "w");
125:     fprintf(file, "#x\tV(x)\tu(x)\tu(x)|^2\n");
126:     for (n=-1.0*SAVE/h+N/2; n<1.0*SAVE/h+N/2; n+=1)
127:     {
128:         m = n-N/2;
129:         fprintf(file, "%f\t%f\t%.16f\t%f\n", m*h, q(m*h)/fourpi*1e6, u[n], u[n]*u[n]);
130:     }
131:
132:     fclose(file);
133:
134:     /* Aufruf des Skriptes 'plot.sh', um Gnuplot zu starten */
135:     fprintf(stderr, "\tgnuplotting to file plots/%03i.png...\n", i);
136:     system(GNUPLOT);
137:
138:     /* Aufräumen und beenden */
139:     free(f);
140:     free(u);
141:     fprintf(stderr, "\n");
142: }
143: return 0;
144: }

145:
146: /* Integration der Differentialgleichung
147:  * nach dem Numerov-Verfahren */
148: int integrate(double M, double* u)
149: {
150:     double U, u0, u1, u2;
151:     int m, n, N, N2;
152:
153:     N = ceil(PLOT/h);
154:     N2 = ceil(TEST/h);
155:     U = 0;
156:
157:     u[0] = 0.0;
158:     u[1] = 0.0000001;
159:
160:     /* Integration über das PLOT-Intervall */
161:     for (n=2; n<N; n++)
162:     {
163:         m = n-N/2;
164:         u[n] = numerov( u[n-1], u[n-2], M-q(m*h), M-q((m-1)*h), M-q((m-2)*h) );
165:         if (fabs(u[n]) > U)
166:             U = fabs(u[n]);
167:     }
168:
169:     u1 = u[N];
170:     u2 = u[N-1];
171:
172:     /* ein wenig weiterintegrieren um Stabilität zu untersuchen... */
173:     for (n=0; n<0.9*N2; n++)
174:     {
175:         m = n-N/2+N2;
176:         u0 = numerov( u1, u2, M-q(m*h), M-q((m-1)*h), M-q((m-2)*h) );
177:         u2 = u1;
178:         u1 = u0;
179:     }
180:     /* ab hier zählt's: konvergiert die Lösung, oder explodiert sie? */
181:     for (n=0.9*N2; n<N2; n++)
182:     {
183:         m = n-N/2+N2;

```

```

184:         u0 = numerov( u1,u2, M-q(m*h),M-q((m-1)*h),M-q((m-2)*h) );
185:         u2 = u1;
186:         u1 = u0;
187:
188:         if (u0 > MAX)
189:             return +1;
190:         if (u0 < -MAX)
191:             return -1;
192:     }
193:
194:     return 0;
195: }
196:
197: /* Normierung: Maximum(u) == 1
198:  * Beachte: Nicht über ganzes Intervall suchen,
199:  * da Lösung explodieren könnte */
200: void norm(double M, double* u)
201: {
202:     double U;
203:     int n, N;
204:
205:     N = ceil(PLOT/h);
206:     U = 0;
207:
208:     for (n=0.4*N; n<0.6*N; n++)
209:         if (fabs(u[n]) > U)
210:             U = fabs(u[n]);
211:
212:     U = u[N/2];
213:
214:     for (n=0; n<N; n++)
215:         u[n] = u[n]/U;
216:         /*u[n] = M + u[n]/U;*/
217: }
218:
219: /* Integral über die Intensität */
220: double integral(double* u)
221: {
222:     double U=0;
223:     int N = ceil(PLOT/h);
224:     int i;
225:     for (i=0.4*N; i<0.6*N; i++)
226:         U += h*u[i]*u[i];
227:     return U;
228: }
229:
230: /* Berechnet Anteil der Intensität im Mantel
231:  * (bei weichen Übergängen gewichtetet */
232: double cladding(double* u)
233: {
234:     double U=0;
235:     int N = ceil(PLOT/h);
236:     int i, j;
237:     double x;
238:     const double q0 = q(0.2*N*h);
239:     for (i=0.4*N; i<0.6*N; i++)
240:     {
241:         j = i-N/2;
242:         x = h*j;
243:         U += h*u[i]*u[i]*q(x)/q0;
244:     }
245:     return U/integral(u);
246: }
247:
248: /* Berechnet Halbwertsbreite der Intensität

```

```

249: /* beachte: nicht über ganzes Intervall suchen,
250: * da bei großen n Lösung explodieren könnte */
251: double fwhm(double* u)
252: {
253:     int n, m, N;
254:     N = ceil(PLOT/h);
255:
256:     for (n=0.4*N; n<N; n++)
257:         if (u[n]*u[n] >= 0.5)
258:             break;
259:     for (m=0.6*N; m>n; m--)
260:         if (u[n]*u[m] >= 0.5)
261:             break;
262:
263:     return (m-n)*h;
264: }
265:
266: /* berechnet zweites Moment der Feldverteilung */
267: double zweitesMoment(double* u)
268: {
269:     double U=0;
270:     int N = ceil(PLOT/h);
271:     int i, j;
272:     double x;
273:     for (i=0.4*N; i<0.6*N; i++)
274:     {
275:         j = i-N/2;
276:         x = h*j;
277:         U += h*u[i]*u[i]*x*x;
278:     }
279:     return U/integral(u);
280: }
281:
282:
283: /* Numerov-Integration */
284: double numerov(double u1, double u2, double q0, double q1, double q2)
285: {
286:     return 1/(1+q0/12*h*h) * ( 2*(1-q1*5/12*h*h)*u1 - (1+q2/12*h*h)*u2 );
287: }
288:
289: /* q(x), verschiedene Profile zur Auswahl */
290: double q(double x)
291: {
292:     const double d = width/10;
293:     const double rho = /* density in g/cm^3 */ 2.33
294:             /* atom weight in u */ 28.086
295:             /* atom number */ 14
296:             /* avogadro */ 6.022e23
297:             /* cm->10nm */ 1e-18;
298:
299:     return ( x > -d/2 && x < d/2 ? 0 : fourpi*rho);
300:     /*return q_erf(x); */
301:     /*return q_prl2008(x); */
302:     //return q_gauss(x);
303:     //return q_lorentz(x);
304: }
305:
306: /* Multilayer-WG wie in PRL08 */
307: double q_prl2008(double x)
308: {
309:     const double d = width/2/10; /* C guiding */
310:     const double rho = /* density in g/cm^3 */ 2.20
311:             /* atom weight in u */ 12.011
312:             /* atom number */ 6
313:             /* avogadro */ 6.022e23

```

```

314:           * /* cm->10nm           */ 1e-18;
315:   const double d2    = 30/10;                                /* Mo interlayer */
316:   const double rho2  = /* density in g/cm^3 */ 10.2
317:           / /* atom weight in u */ 95.940
318:           * /* atom number      */ 42
319:           * /* avogadro          */ 6.022e23
320:           * /* cm->10nm           */ 1e-18;
321:   const double rho3  = /* density in g/cm^3 */ 5.32        /* Ge cladding */
322:           / /* atom weight in u */ 72.610
323:           * /* atom number      */ 32
324:           * /* avogadro          */ 6.022e23
325:           * /* cm->10nm           */ 1e-18;
326:
327:   if (x < -d-d2)
328:       return fourpi*rho3;
329:   if (x < -d)
330:       return fourpi*rho2;
331:   if (x < d)
332:       return fourpi*rho;
333:   if (x < d+d2)
334:       return fourpi*rho2;
335:   return fourpi*rho3;
336: }
337:
338: /* zwei Fehlerfunktionen statt harter Kante */
339: double q_erf(double x)
340: {
341:   const double d      = width/10;
342:   const double sigma = SIGMA/10;
343:   const double rho   = /* density in g/cm^3 */ 2.33
344:           / /* atom weight in u */ 28.086
345:           * /* atom number      */ 14
346:           * /* avogadro          */ 6.022e23
347:           * /* cm->10nm           */ 1e-18;
348:
349:   return fourpi*rho*(1-0.5*(erf((x+d/2)/sigma) - erf((x-d/2)/sigma)));
350: }
351:
352: /* Gauß-Trog */
353: double q_gauss(double x)
354: {
355:   const double d      = width/10;
356:   const double sigma = d;
357:   const double twosigmasquared = 2*sigma*sigma;
358:   const double rho   = /* density in g/cm^3 */ 2.33
359:           / /* atom weight in u */ 28.086
360:           * /* atom number      */ 14
361:           * /* avogadro          */ 6.022e23
362:           * /* cm->10nm           */ 1e-18;
363:
364:   return fourpi*rho*(1-exp(-x*x/twosigmasquared));
365: }
366:
367: /* Lorentz-Trog */
368: double q_lorentz(double x)
369: {
370:   const double d      = width/10;
371:   const double A      = d;
372:   const double rho   = /* density in g/cm^3 */ 2.33
373:           / /* atom weight in u */ 28.086
374:           * /* atom number      */ 14
375:           * /* avogadro          */ 6.022e23
376:           * /* cm->10nm           */ 1e-18;
377:
378:   return fourpi*rho*(1-A/(A+x*x));

```

```
379: }
380:
```

B.2 fft

fft berechnet die Fourier-Transformation einer Eingabedatei und gibt sie halblogarithmisch aus.

Unser FFT-Modul ruft im Wesentlichen die freie Bibliothek fftw3 [39] auf. In Zeile 16 wird die benannte Konstante $DELTA = 24$ definiert; sie gibt das zu transformierende Intervall ($-\Delta/2 \leq x \leq \Delta/2$) an. *numerov* liefert für große x explodierende Lösungen, diese müssen von der Fourier-Transformation ausgenommen werden.

Ab Zeile 34 wird die Eingabedatei das erste Mal eingelesen, um die Anzahl der Zeilen im oben genannten Intervall zu zählen; in einem zweiten Durchlauf ab Zeile 52 werden dann die N Datensätze eingelesen. Dabei muss die Kommentarzeile am Anfang der Datei übersprungen werden (Zeilen 37 und 42). Die Funktion *fft* ruft im Wesentlichen die *fftw3*-Routine auf und berechnet aus der Transformation die Intensität im Fernfeld. In den Zeilen 79 und 80 werden die Daten halblogarithmisch ausgegeben.

■ Quellcode: *fft.c*

```
001: /* Bibliotheken */
002: #include <stdlib.h>
003: #include <stdio.h>
004: #include <string.h>
005: #include <math.h>
006: /* Wir verwenden die
007:  * "schnellste FFT im Westen":
008:  * http://www.fftw.org */
009: #include <fftw3.h>
010:
011: /* benannte Konstanten */
012: #define PI 3.14159265359
013: /* Vertrauensintervall: welcher Bereich
014:  * soll transformiert werden?
015:  * -DELTA/2 <= x <= DELTA/2 */
016: #define DELTA 24
017:
018: /* Funktionsprototypen */
019: void fft(double*, double*, int);
020:
021: int main(int argc, char** argv)
022: {
023:     /* lokale Variablen */
024:     double x, rho, field, intensity;
```

```

025:     double* feld, *fourier;
026:     int N=0, i;
027:     FILE* f;
028:     char wegmit[256];
029:
030:     /* Anleitung */
031:     if (argc != 2)
032:         return printf("usage: %s <filename>\n", argv[0]), -1;
033:
034:     /* erstes Mal die Eingabedatei anschauen und Zeilen im Intervall zählen */
035:     f = fopen(argv[1], "r");
036:     /* erste Zeile sind Plot-Befehle, überspringen! */
037:     fscanf(f, "%s %s %s %s\n", wegmit, wegmit, wegmit, wegmit);
038:     while (!feof(f))
039:     {
040:         fscanf(f, "%lf %lf %lf %lf\n", &x, &rho, &field, &intensity);
041:         if (x >= -DELTA/2 && x <= DELTA/2)
042:             N++;
043:     }
044:     fclose(f);
045:
046:     /* Speicher anfordern... */
047:     feld = (double*) malloc(N*sizeof(double));
048:     fourier = (double*) malloc(N*sizeof(double));
049:
050:     /* Jetzt lesen wir die Daten ein */
051:     N=0;
052:     f = fopen(argv[1], "r");
053:     /* erste Zeile sind Plot-Befehle, überspringen! */
054:     fscanf(f, "%s %s %s %s\n", wegmit, wegmit, wegmit, wegmit);
055:     while (!feof(f))
056:     {
057:         fscanf(f, "%lf %lf %lf %lf\n", &x, &rho, &field, &intensity);
058:         if (x >= -DELTA/2 && x <= DELTA/2)
059:         {
060:             /* wenn x im Intervall: field im Feld speichern */
061:             feld[N] = field;
062:             N++;
063:         }
064:     }
065:     fclose(f);
066:
067:     /* Funktionsaufruf: fft */
068:     fft(feld, fourier, N);
069:
070:     /* evtl.: Plot-Befehle für Gnuplot */
071:     //printf("plot [-10:10] '-' title 'log(fft(intensity))\n");
072:
073:     /* Schreiben der Fouriertransformation auf die Standardausgabe
074:      * mit ./fft <input> > <output> können Werte
075:      * in Datei <output> geschrieben werden */
076:     /* Werte sind halblogarithmisch! (ln) */
077:     /* hier: nur positive k; negative liegen am Ende des Feldes */
078:     /* k ist INDEX / (Delta *2pi) */
079:     for (i=0; i<N/2; i++)
080:         printf("%f %f\n", 1.0*i/DELTA/2/PI, log(fourier[i]));
081:
082:     //printf("# Ready.\n");
083:     return 0;
084: }
085:
086: void fft(double* u, double* f, int N)
087: {
088:     /* lokale Variablen */
089:     int i;

```

```

090:     fftw_complex *in, *out;
091:     fftw_plan p;
092:
093:     /* Initialisierung der fftw */
094:     in = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex) * N);
095:     out = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex) * N);
096:     p = fftw_plan_dft_1d(N, in, out, FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE);
097:
098:     /* Kopiere Werte als Realteil in das Eingabefeld in[][] */
099:     for (i=0; i<N; i++)
100:     {
101:         in[i][0] = u[i];
102:         in[i][1] = 0; /* imag-Teil = 0 */
103:     }
104:
105:     /* fft! */
106:     fftw_execute(p);
107:
108:     /* berechne die Intensität; 1/N ist Normierung */
109:     for (i=0; i<N; i++)
110:         f[i] = (out[i][0]*out[i][0]+out[i][1]*out[i][1])/N;
111:
112:     /* aufräumen */
113:     fftw_destroy_plan(p);
114:     fftw_free(in);
115:     fftw_free(out);
116: }
117:

```

B.3 Modensucher

Das Programm Modensucher hilft bei der Lösung der analytischen Gleichung, indem die transzendenten Gleichung mittels Intervallschachtelung approximativ gelöst wird.

Das Programm lässt sich auf zwei Arten starten: Mit drei Parametern der Form

```
./modensucher <b> <rho> <mode>
```

oder ohne Parameter, so dass die drei Parameter einzeln abgefragt werden. Der Parameter b steht für die Breite des Wellenleiters, ρ für die Tiefe des Potenzialtopfs beziehungsweise für die Differenz der Elektronendichte und $mode$ für die Ordnung der gewünschten Mode.

Bevor die Iteration startet, muss ein geeignetes Intervall für die Intervallschachtelung gefunden werden. Für typische Eingaben ($b \leq 10, \rho \approx 1$) wurden die Startintervalle heuristisch einprogrammiert; sollte die Mode nicht gefunden werden, ist hier intuitives Feintuning nötig. Dazu kann man in Zeile 67 den Startwert überschreiben.

B.4 maxima.awk

Das folgende AWK-Skript durchsucht eine Text-Datei der Form <1. Spalte> <2. Spalte> nach den Maxima der zweiten Spalte.

In unserem Fall besteht die Eingabedatei aus der Fourier-Transformation des Nah-Feldes, also aus dem Fernfeld. Wir wollen dessen Einhüllende als $q^{-\alpha}$ bestimmen. Im ersten Durchlauf durch die Eingabe werden die Maxima der Oszillationen (siehe Formel 3.3.2) an Gnuplot übergeben und linear gefittet. Dazu wird die q -Koordinate logarithmiert. Nachdem Gnuplot (Fit-Befehle: Zeile 3 bis 8) den algebraischen Abfall bestimmt hat, wird in den Zeilen 20 bis 32 die Eingabe an Gnuplot beendet, die Plot-Befehle gesendet und die Eingabedatei neu eingelesen. Nach dem zweiten Durchlauf wird mit den Zeilen 36 bis 44 Gnuplot angewiesen, den Fit-Parameter $b = -\alpha$ und den durch die lineare Regression gefundenen Fehler b_{err} auszugeben. Außerdem werden die Daten und der Fit der Envelope-Funktion doppellogarithmisch geplottet.

Der eigentliche Algorithmus, um die Maxima zu finden, befindet sich in den Zeilen 49 bis 58: Alle Zeilen mit $q \neq 0$ werden angesehen. Der zweite Eintrag der Zeile (also $\log(\text{Intensität})$) wird mit dem Vorgänger und Nachfolger verglichen; ist der Wert größer, wurde ein Maximum gefunden und $\log(q)$ sowie $\log(\text{Intensität})$ an Gnuplot übergeben.

■ Quellcode: maxima.awk

```

01: # Fit-Befehle für Gnuplot: Linearer Fit (a+b*x)
02: # Daten kommen von der Standardeingabe '-',
03: BEGIN {
04:     print "f(x) = a + b*x"
05:     print "a=10; b=-8"
06:     print "set fit errorvariables"
07:     print "fit f(x) '-' using 1:2 via a,b"
08: }
09:
10: # die ersten zu speichernden Werte
11: NR == 4 { x2 = $1 ; y2 = $2 }
12: NR == 5 { x1 = $1 ; y1 = $2 }
13:
14: /#/ {
15:     if (PLOTRUN != 1)
16:         # Ende des ersten Durchlaufs:
17:         # Eingabe an Gnuplot mit 'e' beenden,
18:         # Plot-Befehle senden und
19:         # Datei mit Fernfeld neu laden
20:     {
21:         print "e"
22:         ARGC+=2
23:         ARGV[ARGIND+1] = FILENAME
24:         print "set term postscript color eps"
25:         print "set out 'data.fft.eps'"
26:         print "title = sprintf(\"fit: b=%1.2f(%1.2f)\", b, b_err)"
27:         print "plot [-0.2:1.2] '-' title 'log-log-plot', f(x) title title"

```

```

28:         PLOTRUN = 1
29:         x0 = x1 ; y0 = y1
30:         NR=0
31:         nextfile
32:     }
33: else
34: # Ende des zweiten Durchlaufs:
35: # Ausgabe der Fit-Parameter  $f(x) = a+b*x$ :
36: # b und b_err (Fehler durch linearen Fit)
37: {
38:     print "e"
39:     print "pause 2"
40:     print "set out '/dev/null'"
41:     print "set print '-'"
42:     print "ausgabe = sprintf(\"%1.4f %1.4f\", b, b_err)"
43:     print "print ausgabe"
44:     exit
45: }
46: }
47:
48: # Alle Daten, die nicht q=0 haben, ansehen
49: !/^0.000/ && NR >= 6 {
50:     x0 = $1 ; y0 = $2
51:     # vorheriger Wert ist größer als Vorgänger und Nachfolger
52:     # -> Maximum gefunden, doppellogarithmisch ausgeben!
53:     if (y0 < y1 && y1 > y2 && x1 >= 0.4 && x1 <= 2)
54:         print log10(abs(x1)), y1/log(10)
55:     # gespeicherte Werte rotieren
56:     x2 = x1 ; x1 = x0
57:     y2 = y1 ; y1 = y0
58: }
59: # q=0 ignorieren, da log(0) nicht existiert
60: /^0.000/ { print "" }
61:
62: # Zehnerlogarithmus
63: function log10(x)      { return log(x)/log(10) }
64: # Betrag einer Zahl
65: function abs(x)        { if(x>=0){ return x } else { return -x } }
66:

```

B.5 nmal.sh

Das Bash-Skript (Bourne Again SHell) nmal.sh dient dazu, das numerov-Programm N mal parallel – natürlich mit jeweils eigenen Parameter-Sätzen, mit denen integriert wird – auf einem Rechner zu starten.

In den durchnumerierten Unterordnern $1 \dots N$ befindet sich dazu der jeweilige Quellcode der einzelnen *numerov*-Instanzen; diese werden kompiliert und im Hintergrund gestartet, die Standardausgabe einzeln gespeichert.

Am Ende (Zeile 22) wartet das Skript darauf, dass alle N Prozesse beendet sind und versendet auf Wunsch eine E-Mail.

■ Quellcode: nmal.sh

```

01:#!/bin/sh
02:
03:ANZ=4
04:
05:# kurzes Skript, um numint_analyse auf
06:# $ANZ Kernen parallel zu starten
07:
08:for I in `seq 1 $ANZ`
09:do
10:cd $I ;
11:# kompilieren
12:gcc -o numint_analyse_$I -O -lm numint_analyse.c
13:# starten; Ausgabe (nur relevante Informationen) in log-Datei
14:( nice ./numint_analyse_$I 2>/dev/null ) >> log_$I &
15:# merken, welche Prozess-ID vergeben wurde (& startet im Hintergrund)
16:diepids="$! $diepids"
17:cd ..
18:done
19:
20:echo "warte auf $diepids..."
21:# hiermit wartet das Skript, bis alle 4 Prozesse fertig sind
22:wait $diepids
23:echo "fertig."
24:
25:# Benachrichtigung per E-Mail
26:echo "Alle $ANZ Simulationen sind beendet." | mail mo@mo-online.org -s "Simulation auf 'hostname'"
```

B.6 PWG::stochastisch

Das Programm *PWG* von Christian Fuhse haben wir um einen stochastisch verformten Wellenleiterkanal erweitert.

Dafür haben wir entlang der Propagationsrichtung 20 äquidistante Stützpunkte ausgewählt, an welchen die Position des Wellenleiterkanals über zuvor gewählte (Pseudo-)Zufallszahlen schwankt. Die Amplitude dieser Schwankungen kann in Zeile 47 gewählt werden.

■ Quellcode: PWG::stochastisch

```

01:; Brechungsindex als Funktion von x und z
02:; (z == Ausbreitungsrichtung)
03:FUNCTION RefIndexz,x,z
04:    COMMON THICKNESS_SHARE, t, di
05:    COMMON REF_INDICES, n_cladding, n_guiding, n_zwischen
06:    ; für große x: normaler Brechungsindex
```

```

07:  IF ( ABS(x) GT t) THEN return, RefIndex(x)
08:  ; wir haben 20 Stützstellen
09:  ANZ = 20
10:  ; mit diesen zufälligen Werten:
11:  xi = FINDGEN(ANZ+2)
12:  xi[0] = 0.500000
13:  xi[1] = 0.237788
14:  xi[2] = 0.291066
15:  xi[3] = 0.845814
16:  xi[4] = 0.152208
17:  xi[5] = 0.585537
18:  xi[6] = 0.193475
19:  xi[7] = 0.810623
20:  xi[8] = 0.173531
21:  xi[9] = 0.484983
22:  xi[10] = 0.151863
23:  xi[11] = 0.366957
24:  xi[12] = 0.491736
25:  xi[13] = 0.910094
26:  xi[14] = 0.265257
27:  xi[15] = 0.893188
28:  xi[16] = 0.220351
29:  xi[17] = 0.631798
30:  xi[18] = 0.332158
31:  xi[19] = 0.500000
32:  xi[ANZ] = 0.500000
33:  xi[ANZ+1] = 0.500000
34:  ; Stützstelle vor und nach aktueller Position
35:  prev = xi[FLOOR(z*ANZ/1000000D) ]-0.5
36:  next = xi[FLOOR(z*ANZ/1000000D)+1]-0.5
37:  ; Position zwischen prev und next als Wert zwischen 0 und 1
38:  zz = ( z - 1000000D/ANZ*FLOOR(z*ANZ/1000000D) ) / (1000000D/ANZ)
39:  ft = zz * 3.1415927
40:  f = (1 - cos(ft)) * .5
41:  ; Interpolation mittels Cosinus(zz)
42:  ipol = 5*(prev*(1-f) + next*f)
43:
44:  ; Brechungsindex
45:  IF ( (x LT t/2+ipol) AND (x GT -t/2+ipol) ) THEN result=n_guiding $
46:  ELSE result=n_cladding
47:  RETURN, result
48: END

```

B.7 Fernfeld: Mathematica-Notebook

Die Fourier-Transformation (3.17) wurde mit dem Computer-Algebra-System *Mathematica* von *Wolfram Research Inc.* in der Version 6.0 berechnet. Die Eingabe lautet:

$$\psi1[x_] = \text{Cos}[\kappa * x]; \quad \psi2[x_] = A \text{ Exp}[-k * \text{Abs}[x]];$$

$$\psi[x_] = \text{Piecewise}[\psi2[x], x < -b/2, \psi1[x], x \leq b/2, \psi2[x], x > b/2]$$

$$\text{FT}[q_] = \text{FourierTransform}[\psi[x], x, q, \text{Assumptions} \rightarrow b > 0, \kappa > 0, k > 0, A > 0]$$

Literaturverzeichnis

- [1] F. Pfeiffer *et al.*, *Two-Dimenisional X-ray Waveguides and Point Sources*. Science **297**, 230 (2002).
- [2] D. Gabor *Holography – Nobel Lecture*. London. (1971).
- [3] C. Fuhse *Dissertation: X-ray waveguides and waveguide-based lensless imaging*. Göttingen. (2006).
- [4] T. Salditt, S. P. Krüger, C. Fuhse, C. Bähitz, *High-Transmission Planar X-Ray Waveguides*. Phys. Rev. Lett. **100**, 184801 (2008).
- [5] R. Loudon *The Quantum Theory of Light*. 2nd edition, Oxford. (1988) 121f.
- [6] M. Born, E. Wolf *Principles of Optics*. 7th edition, Cambridge. (2002) 24.
- [7] H. G. J. Mosley, *The High Frequency Spectra of the Elements*. Phil. Mag. **26**, 1024 (1913).
- [8] J. Als-Nielsen, D. McMorrow *Elements of Modern X-Ray Physics*., Wiley. (2001) Kapitel 2.
- [9] R. Brinkmann *et al.* *TESLA XFEL: First Stage of the X-Ray Laser Laboratory (Technical Design Report, Supplement)*. Hamburg. (2002).
- [10] M. Born *Optik*. 3. Auflage, Springer, Berlin. (1985) §44.
- [11] W. E. Marchand, E. Wolf, *Consistent Formulation of Kirchhoff's Diffraction Theory*. J. Opt. Soc. Am. **12**, 1712 (1966).
- [12] A. Sommerfeld, *Mathematische Theorie der Diffraction*. Mathematische Annalen, Göttingen **XLVII**, 21 (1895).
- [13] W. Lauterborn, T. Kurz *Coherent Optics*. Springer, Berlin. (2003).
- [14] G. Saake, K. U. Sattler *Algorithmen und Datenstrukturen*. 3. Auflage, Dpunkt Verlag. (2006).
- [15] Press, Teukolsky, Vetterling, Flannery *Numerical Recipes*. 3rd edition, Cambridge. (2007) 610.
- [16] Internet: <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/> *Fundamental Physical Constants from NIST*. Abgerufen im September 2008.
- [17] E. Hecht *Optik*. 4. Auflage, München. (2005).
- [18] C. G. Schroer, B. Lengeler, *Focusing Hard X-Rays to Nanometer Dimensions by Adiabatically Focusing Lenses*. Phys. Rev. Lett. **94**, 054802 (2005).
- [19] J. Tümmler *Dissertation: Development of Compound Refractive Lenses for Hard X-Rays*. Aachen. (2000).
- [20] F. Pfeiffer *Dissertation: X-ray and Neutron Waveguides*. Saarbrücken. (2002).

- [21] K. Betghe, U. E. Schröder *Elementarteilchen und ihre Wechselwirkung*. 3. Auflage, Wiley-VCH, Weinheim. (2006).
- [22] S. Panknin *Diplomarbeit: Numerisches Optimieren von Röntgenoptiken*. Göttingen. (2006).
- [23] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe *Quantenmechanik*. 2. Auflage, Gruyter. (1999).
- [24] C. Fuhse, A. Jarre, C. Ollinger, J. Seeger, T. Salditt, R. Tucoulou, *Front-coupling of a pre-focused x-ray beam into a mono-modal planar waveguide*. Appl. Phys. Lett., (2004).
- [25] C. Bergemann, H. Keymeulen, J. F. van der Veen, *Focusing X-Ray Beams to Nanometer Dimensions*. Phys. Rev. Lett. **91**, 204801-1 (2003).
- [26] A. Jarre *et al.*, *Two-Dimensional Hard X-Ray Beam Compression by Combined Focusing and Waveguide Optics*. Phys. Rev. Lett. **94**, 074801 (2005).
- [27] B. Numerov, *Publ. Obs. Central Astrophys. Russ.* **2**, 188 (1933).
- [28] R. W. Hamming *Numerical Methods for Scientists and Engineers*., Dover. (1986) 417.
- [29] B. R. Johnson, *New numerical methods applied to solving the one-dimensional eigenvalue problem*. Journal of Physical Chemistry **67**, 4086 (1977).
- [30] J. M. Blatt, *Practical points concerning the solution of the Schrödinger equation*. Journal of Computational Physics **1**, 382 (1967).
- [31] I. H. Sloan, *Error in the Numerov and Runge-Kutta Methods*. Journal of Computational Physics **2**, 414 (1968).
- [32] Stoer, Bulirsch *Einführung in die Numerische Mathematik II*. 1. Auflage, Springer, Berlin. (1973).
- [33] L. D. Landau, E. M. Lifshitz *Theoretische Physik, Band III: Quantenmechanik*. deutsche Ausgabe, Akademie-Verlag, Ost-Berlin. (1986).
- [34] J. Blanchette, M. Summerfield *C++ GUI programming with Qt4*. 3rd printing, Prentice Hall. (2006).
- [35] Internet: <http://www.trolltech.com/> *Code Less, Create More, Deploy Everywhere*. Abgerufen im Dezember 2007.
- [36] A. Kohlstedt *et al.*, *Two-dimensional x-ray waveguides: Fabrication by wafer bonding process and characterization*. Applied Physics A **91**, 7 (2008).
- [37] A. Robbins *sed und awk. Kurz und gut*. 1. Ausgabe, O Reilly. (2002).
- [38] L. G. Parratt, *Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays*. Phys. Rev. **95**, 359 (1954).
- [39] Internet: <http://www.fftw3.org/> *FFTW Home Page*. Abgerufen im September 2008.

Danksagung

Diese Seite ist all denen gewidmet, die zum Gelingen dieser Diplomarbeit beitragen haben.

An erster Stelle ist dabei mein Betreuer, Prof. Tim Salditt, zu nennen: Er hat mir diese interessante Arbeit am Institut für Röntgenphysik ermöglicht, mich unterstützt und gefördert. Weiter danke ich Herrn Prof. Rainer G. Ulbrich, der spontan zugesagt hat, Koreferent dieser Arbeit zu werden.

Mein weiterer Dank gilt allen Mitgliedern des Institutes für Röntgenphysik: Die Arbeit mit Euch hat mir sehr viel Spaß gemacht, es herrschte eine angenehme und kreative Atmosphäre. Besonders hervorheben möchte ich das wöchentliche „D-Café“.

Für die vielen fruchtbaren Diskussionen und das Korrekturlesen dieser Arbeit möchte ich mich bei folgenden Röntgenphysikern bedanken (in nicht ganz alphabetischer Reihenfolge):

Sebastian Kalbfleisch; meine Bürokollegen Björn Enders, Jörg Grimsel, Max Hantke und Sarah Schwarz Henriques; Klaus Giewekemeyer, Sven Philip Krüger, Gudrun Lotze, Sebastian Panknin, Marius Priebe, Felix Schenk, Dr. Jürgen Thieme, Dr. Martin Tolkiehn.

Für die Unterstützung, Zusammenarbeit und Diskussion während meines Studiums danke ich Andrea Knue, Eike Schellong und Omar Bobes. Allen Mitgliedern und Helfern des Fachschaftsrates Physik danke ich für die vielen Aktionen an unserer Fakultät.

Auch danke ich meiner Mutter († 13. Januar 2008) und meinem Vater, die mich in meinem Leben immer ermutigt und unterstützt haben.

Ein besonderer Dank gilt Elisabeth und ihrer Familie.